

Designoptimierung chemischer Prozesse mit memetischen Algorithmen am Beispiel einer reaktiven Rektifikationskolonne mit optionalem Außenreaktor

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
Dr.-Ing.
der Fakultät Bio- und Chemieingenieurwesen
der Technischen Universität Dortmund
genehmigte Dissertation

vorgelegt von
Dipl.-Inform. Maren Urselmann
aus
Bielefeld

Tag der mündlichen Prüfung: 10. Dezember 2013
1. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell
2. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Michael Emmerich

Dortmund 2013

Schriftenreihe des Lehrstuhls für
Systemdynamik und Prozessführung
herausgegeben von Prof. Dr.-Ing. Sebastian Engell

Band 3/2014

Maren Urselmann

**Designoptimierung chemischer Prozesse mit
memetischen Algorithmen am Beispiel einer reaktiven
Rektifikationskolonne mit optionalem Außenreaktor**

D 290 (Diss. Technische Universität Dortmund)

Shaker Verlag
Aachen 2014

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Dortmund, Technische Univ., Diss., 2013

Copyright Shaker Verlag 2014

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-3152-2

ISSN 1867-9498

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Persönliches Vorwort

Die vorliegende Doktorarbeit entstand während meiner Arbeit als wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehrstuhl für Systemdynamik und Prozessführung der Fakultät Bio- und Chemieingenieurwesen der Technischen Universität Dortmund.

Dem Leiter des Lehrstuhls, Herrn Professor Dr.-Ing. Sebastian Engell, danke ich für die Betreuung dieser Arbeit, die Übertragung vielfältiger Aufgaben in Forschung, Lehre und Administration und die Möglichkeit, eigenständig arbeiten zu dürfen mit der Sicherheit, in schwierigen Situationen auf fachliche und persönliche Unterstützung bauen zu können.

Herrn Prof. Dr. Michael Emmerich von der Faculty for Science der Universität Leiden danke ich für das mit großem Interesse übernommene Koreferat. Bereits während der Bearbeitung meiner Diplomarbeit haben mich die Gespräche über evolutionäre Algorithmen mit Professor Emmerich inhaltlich geprägt, wovon ich bei der Erarbeitung dieser Arbeit profitierte.

Bei den Professoren Dr. Andrzej Górak und Dr. Norbert Kockmann bedanke ich mich für ihre bereitwillige Mitwirkung in der Prüfungskommission.

Für die finanzielle Förderung dieser Arbeit, in der Zeit von Januar 2006 bis Dezember 2008, als Projekt B11 des Sonderforschungsbereichs (SFB) 531 „Design und Management komplexer technischer Prozesse und Systeme mit Methoden der Computational Intelligence“ an der TU Dortmund danke ich der DFG. Ab 2009 wurde das Projekt aus Haushaltsmitteln des Lehrstuhls finanziert.

Für mich als Diplom-Informatikerin stellte das anwendungsbezogene Thema aus dem Chemieingenieurwesen eine besondere Herausforderung dar, das viele spannende und abwechslungsreiche Probleme aus unterschiedlichsten Fachbereichen beinhaltete. Die Komplexität und Vielfalt dieses Themas ließ mich oft an meine Grenzen stoßen. In vielen Fällen konnten diese Grenzen erweitert werden, in den anderen Fällen führte es zu einer persönlichen Weiterentwicklung, die ich heute nicht mehr missen möchte. Beides verdanke ich vor allem der Unterstützung meines beruflichen und persönlichen Umfeldes.

Meine Kollegen am Lehrstuhl hatten immer Zeit für verfahrenstechnische „Nachhilfestunden“ und fachliche Diskussionen. Die Offenheit, die Hilfsbereitschaft und der Spaß, Lösungen zu finden, zeichnet das Kollegium inklusive der Mitarbeiterinnen des Sekretariats aus und lässt mich immer gerne zur Arbeit kommen. Euch allen gilt mein herzlichster Dank.

Insbesondere möchte ich mich bei meinem Ehemann Markus für seine unermüdliche Unterstützung in allen Bereichen bedanken, die mich alle Krisen bewältigen ließ und ohne die ich diese Arbeit nicht hätte schreiben können. Ebenso bei meiner Familie, die keine Zweifel hatte, dass ich diese Arbeit beenden würde und mich nie unter Druck setzte. Und nicht zuletzt gilt mein Dank meinem Sohn Flynn, der mich daran erinnert, was im Leben wirklich zählt, sodass ich meine Arbeit mit gesundem emotionalen Abstand besser machen kann.

Veröffentlichungen

Im Rahmen dieser Arbeit werden die Grundidee, die Realisierung und die Bewertung eines memetischen Algorithmus zur globalen Designoptimierung chemischer Prozesse erstmals im Zusammenhang beschrieben und alle dabei erzielten Ergebnisse betrachtet, um das Konzept bewerten zu können. Wesentliche Teilergebnisse dieser Arbeit wurden vorab veröffentlicht. Im Folgenden wird kapitelweise aufgeführt, in welcher Weise Inhalte der jeweiligen Kapitel veröffentlicht wurden. Zum Verständnis benötigte Inhalte der Grundlagenkapitel (Kapitel 2 und 3), der Beschreibung der Referenzalgorithmen (Kapitel 5), des Fallbeispiels (Kapitel 6) und der Beschreibung des Konzeptes des memetischen Algorithmus (Kapitel 4) sind in allen Veröffentlichungen zu finden und werden deshalb nicht extra aufgelistet.

Die wesentlichen Inhalte des Kapitels 7 wurden im Konferenzband *IEEE Congress on Evolutionary Computation (CEC 2009)* (Urselmann et al., 2009) und auf der *CD 2009 AIChE Annual Meeting (AIChE 2009)* (Urselmann und Engell, 2009) veröffentlicht.

Kapitel 8 wurde auf dem Symposium *20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE-20)* vorgestellt und veröffentlicht (Urselmann und Engell, 2010a).

Unterschiedliche Teilergebnisse des Kapitels 9 wurden im Konferenzband *Distillation & Absorption 2010 (DA 2010)* und auf der CD der Konferenz *2nd Conference on Engineering Optimization (EngOpt 2010)* (Urselmann und Engell, 2010b,c), sowie in der Zeitschrift *Computers & Chemical Engineering* (Urselmann et al., 2011a) und der Sonderausgabe *Special Issue on Advances in Memetic Computation* der Zeitschrift *IEEE Transactions on Evolutionary Computation* (Urselmann et al., 2011b) veröffentlicht.

Teilergebnisse des Kapitels 10 wurden in den Konferenzbänden des *21st European Symposium on Computer-Aided Process Engineering (ESCAPE-21)* (Urselmann und Engell, 2013a) und des *22. Workshop Computational Intelligence* des GMA-FA 5.14 *Computational Intelligence* (Urselmann und Engell, 2013b) und auf der CD *8th Jordanian International Electrical & Electronics Engineering Conference (JIEEEEC 2013)* (Urselmann und Engell, 2013a) veröffentlicht, sowie in der Sonderausgabe *Special Issue: Mixed Integer Nonlinear Optimization - A Tribute to Ignacio E. Grossmann's Contributions to the Field of Process Systems Engineering* der Zeitschrift *Computers & Chemical Engineering* (Urselmann und Engell, 2014).

Teilergebnisse des Kapitels 11 wurden in den oben erwähnten Zeitschriften (Urselmann et al., 2011a,b), sowie auf der Konferenz *JIEEEEC 2013* (Urselmann und Engell, 2013a) und dem *22. Workshop Computational Intelligence* (Urselmann und Engell, 2013b) veröffentlicht.

Zusammenfassung

Designoptimierungsprobleme der chemischen Industrie zeichnen sich durch eine große Anzahl diskreter und kontinuierlicher Entscheidungsvariablen, komplexe nichtlineare, den Suchraum beschränkende Modelle, nichtlineare Kostenfunktionen und die Existenz vieler lokaler Optima aus. Der Standardansatz zur Lösung dieser Probleme besteht darin mathematische Methoden zur gemischt-ganzzahligen Optimierung (MINLP) einzusetzen, die auf einer Repräsentation aller sinnvollen Designalternativen, der sogenannten Superstruktur arbeiten. Zur Darstellung struktureller Entscheidungen ist die Einführung einer großen Anzahl binärer Variablen erforderlich, die zu einem exponentiellen Anstieg der zur Lösung benötigten Rechenzeit führt. Die durch Fixierung der diskreten Variablen entstehenden kontinuierlichen Unterprobleme werden mit Methoden der mathematischen Programmierung (MP) effizient, jedoch nur lokal gelöst, sodass die Lösungsqualität stark von der Initialisierung abhängt. Aufgrund der hohen Rechenzeiten und der fehlenden Globalität der Suche sind Standardmethoden noch weit davon entfernt in der Praxis Anwendung zu finden.

In dieser Arbeit wird ein memetischer Algorithmus (MA) zur globalen Designoptimierung chemischer Prozesse am Beispiel einer reaktiven Rektifikationskolonne mit optionalem Außenreaktor entwickelt. Der MA kombiniert eine Evolutionsstrategie (ES) mit einem robusten MP-Löser. Während die Standardmethoden gleichzeitig Designentscheidungen und Betriebsparameter optimieren und die zum Design gehörenden Zustandsvariablen der Modelle bestimmen, wird hier eine polylythische Modellierung eingesetzt, die eine Trennung der Operationen und den Einsatz unterschiedlicher Optimierungsmethoden ermöglicht. Da evolutionäre Algorithmen (EA) die Fähigkeit besitzen, lokalen Optima zu entkommen übernimmt die ES die globale Optimierung der Designentscheidungen, die nur etwa 3% des ursprünglichen Suchraums darstellen. Ein robuster MP-Löser, der nicht-lineare und hochgradig beschränkte kontinuierliche Probleme effizient lokal löst wird zur Simulation der von der ES vorgeschlagenen Designalternativen und zur Verbesserung der Individuen der ES durch eine lokale Suche in den kontinuierlichen, stark beschränkten Unterräumen eingesetzt. Eine Repräsentation variabler Länge der ES erlaubt die Darstellung struktureller Entscheidungen mit einer geringen Anzahl diskreter Variablen, wodurch der Suchraum des MA im Vergleich zu denen der Standardmethoden weiter reduziert wird.

Ein Vergleich des MA mit kommerziell erhältlichen und dem Stand der Technik entsprechenden MINLP-Lösern zeigt, dass das neue Konzept den benötigten Rechenaufwand um mehr als eine Größenordnung reduziert. Die Einführung struktureller Beschränkungen, optionaler Operationseinheiten und diskontinuierlicher Strafterme führt zu einem moderaten Rechenzeitanstieg. Steigende Komplexität des Fallbeispiels führt bei den MINLP-Techniken zu großen Schwankungen des Rechenaufwandes und der Lösungsgüte, während der MA ein durchgehend robustes Verhalten bei sehr guter Lösungsqualität aufweist. Diese Ergebnisse weisen auf großes Potential dieser Klasse memetischer Algorithmen zur Designoptimierung echter Praxisprobleme der chemischen Industrie hin.

Abstract

Design optimization problems in chemical engineering are characterized by the presence of a large number of discrete and continuous decision variables, complex nonlinear models that restrict the search space, nonlinear cost functions, and the presence of many local optima. The classical approach to such problems are mixed integer nonlinear programming (MINLP) solvers that work on a superstructure formulation which explicitly represents all design alternatives. The structural decisions lead to a large number of discrete variables and an exponential increase in the computational effort. The mathematical programming (MP) methods which are usually employed to solve the continuous subproblems that arise by fixing the discrete variables provide only one local optimum which depends strongly on the initialization. Thus standard methods may not find the global optimum despite long computation times.

In this contribution a memetic algorithm (MA) for the global optimization of chemical process synthesis is developed and tested using the example of a reactive distillation column with an optional external reactor. The MA combines an evolution strategy (ES) and a robust MP-solver. While standard methods optimize the design decisions and the operational conditions and determine the state variables that correspond to a certain design in an integrated fashion, the MA uses a polyolithic model formulation, such that these tasks can be separated and different optimization techniques can be used. The ES globally optimizes the design variables, because evolutionary algorithms (EA) have the ability to escape from local optima. The design decisions are the real degrees of freedom of the problem and comprise only 3% of the variables of the original search space. A robust MP-solver that can efficiently handle non-linear and highly constrained continuous problems simulates the design alternatives proposed by the ES and improves the individuals of the MA by the performance of a local search in the space of all continuous variables. By the use of a representation of variable length the structural decisions can be represented by a small number of integer variables such that the search space of the MA is further reduced.

A comparison of the MA to commercially available state-of-the-art MINLP techniques shows, that the new concept reduces the computational effort by more than one order of magnitude. The introduction of structural decisions, additional constraints, optional operation units and discontinuous penalty terms lead only to a moderate increase in the computational effort. If the complexity of the case study is increased, the computational effort and the quality of the solution differs strongly in different test runs of the MINLP-techniques, while the MA shows a robust behavior with high solution qualities. This demonstrates the potential of this class of memetic algorithms in real-world design optimization problems.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Problemstellung	1
1.2	Zielsetzung	2
1.3	Gliederung	4
2	Grundlagen: Optimierung	7
2.1	Allgemeine Problemstellung	8
2.2	Optimalitätskriterien	9
2.3	Optimierungsmethoden	11
2.3.1	Mathematische Programmierung	11
2.3.2	Heuristische Methoden	16
2.3.3	Hybride Methoden	26
3	Grundlagen: Designoptimierung chemischer Prozesse	29
3.1	Aufbau chemischer Prozesse	30
3.2	Entwicklung chemischer Prozesse	30
3.3	Designoptimierung	31
3.3.1	Systematische Lösungsansätze	32
3.3.2	Superstrukturoptimierung	33
4	Ein memetischer Algorithmus zur Designoptimierung	37
4.1	Das memetische Konzept	38
4.1.1	Struktur des memetischen Algorithmus	38
4.1.2	Polyolithische Modellierung	39
4.1.3	Restriktionsbehandlung	40
4.2	Stand der Forschung und Einordnung der vorliegenden Arbeit	41
4.3	Vorgehensweise	44
4.4	Varianten des MA	46

5 Referenzalgorithmen	47
5.1 CONOPT	47
5.2 OQNLP/CONOPT	47
5.3 SBB/CONOPT	48
5.4 SBB/OQNLP/CONOPT	49
6 Fallbeispiel	51
6.1 Designoptimierung reaktiver Rektifikationskolonnen	51
6.1.1 Reaktive Rektifikationskolonnen	51
6.1.2 Problemstellung	53
6.1.3 Modellierung	54
6.2 Fallbeispiel: MTBE-Kolonne mit optionalem Außenreaktor	61
6.2.1 Modellierung	61
6.2.2 Varianten der MTBE-Modelle	63
6.2.3 Größe der Modelle	64
7 Kontinuierliche Designoptimierung	65
7.1 Komponenten des MA	66
7.1.1 Repräsentation	66
7.1.2 Initialisierung	67
7.1.3 Mutation	67
7.1.4 Reparatur	68
7.1.5 Selektion	68
7.1.6 Tabuzonen	70
7.2 Evaluation	70
7.2.1 Testumgebung und Implementierung	71
7.2.2 Einstellung des MA	72
7.2.3 Vergleich mit dem Referenzalgorithmus	74
7.2.4 Analyse des MTBE-Problems	77
7.3 Zusammenfassung	78
8 Designoptimierung mit strukturellen Beschränkungen	81
8.1 Varianten des MA	81
8.1.1 MA_{NLP1}	81
8.1.2 $MA_{NLP-CF1}$	82
8.1.3 $MA_{NLP-CF2}$	82

8.2	Erweiterung des MA	83
8.2.1	Repräsentation	83
8.2.2	Initialisierung	84
8.2.3	Mutation	85
8.2.4	Selektion	85
8.2.5	Fitnessfunktion	86
8.2.6	Reparatur	86
8.3	Evaluation	87
8.3.1	Suchraumanalyse	87
8.3.2	Testumgebung	88
8.3.3	Numerische Ergebnisse	89
8.4	Zusammenfassung	90
9	Designoptimierung einer Operationseinheit	93
9.1	Erweiterung des MA	94
9.1.1	Repräsentation	94
9.1.2	Initialisierung	95
9.1.3	Rekombination	95
9.1.4	Mutation	99
9.1.5	Reparatur	101
9.2	Evaluation	102
9.2.1	Suchraumanalyse	102
9.2.2	Einstellung des MA	103
9.2.3	Vergleich mit den Referenzalgorithmen	107
9.3	Zusammenfassung	116
10	Designoptimierung mit optionalen Operationseinheiten	117
10.1	Erweiterung des MA	118
10.1.1	Repräsentation	118
10.1.2	Initialisierung	119
10.1.3	Rekombination	121
10.1.4	Behandlung optionaler Operationseinheiten bei der Mutation	123
10.1.5	Mutation	125
10.1.6	Reparatur	128
10.2	Initialisierung der Modellvariablen im Simulationsmodell	130
10.3	Evaluation	131

10.3.1	Suchraumanalyse	131
10.3.2	Einstellung des MA	133
10.3.3	Vergleich mit den Referenzalgorithmen	135
10.4	Zusammenfassung	147
11	Analyse und Bewertung	149
11.1	Analyse und Vergleich der Suchräume	150
11.1.1	Betrachtung der MTBE-Kolonne ohne Außenreaktor	150
11.1.2	Betrachtung des gesamten Fallbeispiels	152
11.2	Analyse des MA	155
11.2.1	Einfluss der Dimensionen des Suchraums und der Existenz diskreter Variablen	155
11.2.2	Einfluss der lokalen Suche	157
11.2.3	Einfluss der polyolithischen Modellierung	160
11.3	Bewertung des Konzeptes	162
11.3.1	Analyse der Ergebnisse von SBB/CONOPT	163
11.3.2	Analyse der Ergebnisse von SBB/OQNLP/CONOPT	164
11.3.3	Analyse der Ergebnisse des MA	166
11.3.4	Vergleich und Bewertung der Algorithmen	167
11.4	Zusammenfassung	167
12	Schlussfolgerungen	169
12.1	Zusammenfassung	169
12.2	Ausblick	172
A	Detaillierte Ergebnisse	175
A.1	Kontinuierliche Designoptimierung	175
A.2	Designoptimierung einer Operationseinheit	184
A.2.1	MTBE-Problem ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE_{MINLP}$)	184
A.2.2	MTBE-Problem mit strukturellen Beschränkungen ($MTBE_{MINLP-CF1}$)	185
A.3	Designoptimierung optionaler Operationseinheiten	187
A.3.1	MTBE-Problem ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE_{CSTR_{MINLP}}$)	187
A.3.2	MTBE-Problem mit strukturellen Beschränkungen ($MTBE_{CSTR_{MINLP-CF1}}$)	188

B Beschleunigung der Simulation	193
B.1 Lockerung der Zulässigkeitstoleranz	193
B.2 Initialisierung der Modellvariablen im Simulationsmodell	194
B.3 Zusammenfassung	196
C Modellierung der Stoffdaten und der kinetischen Parameter	197
D Varianten des memetischen Algorithmus	199
E Nomenklatur	201
Literaturverzeichnis	207

Abbildungsverzeichnis

1.1	Lokale Optima eines Designproblems einer reaktiven Rektifikationskolonne mit $N = 10, \dots, 60$ Stufen mit einem optionalen Außenreaktor im Raum der Kosten und Erlöse (Sand et al. (2005b) - Neu erstellt mit zusätzlicher Darstellung der vom MA gefundenen lokalen Optima des Fallbeispiels mit optionalem Außenreaktor.)	3
2.1	Schematischer Ablauf eines Evolutionären Algorithmus	19
3.1	Grundaufbau eines verfahrenstechnischen Prozesses (Blass, 1997)	30
3.2	Superstruktur eines Trennprozesses	34
4.1	Grundstruktur des memetischen Algorithmus zur Lösung von Designoptimierungsproblemen	39
6.1	Typische industrielle Rektifikationskolonnen (a) (<i>Quelle: http://commons.wikimedia.org/wiki/File%3AColonne_distillazione.jpg, 22.10.2012</i>), Schematische Struktur einer Rektifikationskolonne (b) (<i>Quelle: http://commons.wikimedia.org/wiki/File%3ADestillationsturm_DE.svg, 22.10.2012</i>) (b)	52
6.2	Superstruktur einer reaktiven Rektifikationskolonne mit zwei Eduktströmen und optionalem Außenreaktor (Barkmann et al., 2008)	53
7.1	Schematische Darstellung der entwickelten Tabuzonen	71
7.2	Median Fortschrittskurven der Testläufe mit unterschiedlichen Tabuzonen bei besten Skalierungsfaktoren ($N=20$)	74
7.3	Beste, Median und schlechteste Fortschrittskurven von MA_{NLP} und $OQNLP/CONOPT$	76
7.4	Beste, im Median und schlechteste Anzahl der von MA_{NLP} und von $OQNLP/CONOPT$ gefundenen lokalen Optima	77
7.5	Vom MA gefundene lokale Optima des Modells $MTBE_{NLP}$ bei 2 Testläufen pro Instanz mit $N = 10, \dots, 60$ Stufen	78

7.6	Von MA_{NLP} bestes gefundenes Kolonnendesign	79
8.1	Vergleich der Qualität der jeweils besten gefundenen Lösungen der Algorithmen	89
8.2	Vergleich der zum Auffinden der jeweils besten Lösungen benötigten Rechenzeiten	90
8.3	Beste von den Varianten des MA gefundene Lösungen aller Instanzen ($N=10, \dots, 60$)	91
9.1	Gruppierung der Objektvariablen für die Variante MA_{MINLP} (Beispiel mit zwei Eduktströmen)	96
9.2	Gruppierung der Objektvariablen in den Varianten $MA_{MINLP-CF}$ (Beispiel mit zwei Eduktströmen)	97
9.3	Abbildung der Stufen	98
9.4	Beste bekannte Lösungen des MTBE-Problems mit beliebiger Zulaufzahl	108
9.5	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit beliebiger Zulaufzahl ($MTBE^P$)	110
9.6	Beste bekannte Lösungen des MTBE-Problems mit Beschränkung der Zulaufzahl	111
9.7	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit Beschränkung der Zulaufzahl ($MTBE^P$)	113
9.8	Beste bekannte Lösungen des MTBE-Problems mit Beschränkung und Minimierung der Zulaufzahl	114
10.1	Beste bekannte Lösungen des MTBE-Problems mit externem Außenreaktor und beliebiger Zulauf- und Koppelstromanzahl	137
10.2	Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit externem Reaktor und beliebiger Zulauf- und Koppelstromanzahl ($MTBE_CSTR^f$)	139
10.3	Beste bekannte Lösungen des MTBE-Problems mit optionalem externen Reaktor und expliziter Beschränkung der Zulauf- und Koppelstromanzahl	141
10.4	Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit externem Reaktor und beschränkter Zulauf- und Koppelstromanzahl ($MTBE_CSTR^{fix}$)	142
10.5	Vergleich der von den getesteten Algorithmen besten gefundenen Lösungen der Modellformulierung $MTBE_CSTR^{fix}$	143

10.6	Beste bekannte Lösungen des MTBE-Problems mit externem Reaktor und Beschränkung und Minimierung der Zulauf- und Koppelstromanzahl	145
11.1	Relative Optimalitätslücke über der Zeit der Varianten des MA bei der Optimierung des MTBE-Problems mit vermindertem Komplexitätsgrad mit $N=15, 30$ bzw. 45	156
11.2	Bereiche der Fitnesswerte der Individuen unterschiedlicher Kategorien	158
11.3	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven von $MA_{\text{MINLP}}^{\text{LS}}$ bei Optimierung des MTBE-Problems mit vermindertem Komplexitätsgrad mit $N = 15$ Stufen	159
11.4	Vergleich der Median und schlechtesten (Min) Fortschrittskurven des MA und OQNLP/CONOPT mit 255 CONOPT-Aufrufen bei Optimierung des MTBE-Problem mit vermindertem Komplexitätsgrad ohne Beschränkung der Anzahl der Zuläufe mit $N=15, 30$ bzw. 45 Stufen	161
A.1	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE^{\text{fix}}$)	184
A.2	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE^{\text{pf}}$)	184
A.3	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE^{\text{f}}$)	185
A.4	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit strukturellen Beschränkungen ($MTBE^{\text{fix}}$)	185
A.5	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit strukturellen Beschränkungen ($MTBE^{\text{pf}}$)	186
A.6	Beste (Max), Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit strukturellen Beschränkungen ($MTBE^{\text{f}}$)	186
A.7	Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem Außenreaktor ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE_CSTR^{\text{fix}}$)	187
A.8	Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem Außenreaktor ohne strukturelle Beschränkungen ($MTBE_CSTR^{\text{pf}}$)	187

A.9	Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem Außenreaktor ohne strukturelle Beschränkungen (MTBE_CSTR ^p)	188
A.10	Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem Außenreaktor und strukturellen Beschränkungen (MTBE_CSTR ^{pf})	188
A.11	Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem Außenreaktor und strukturellen Beschränkungen (MTBE_CSTR ^f)	189
A.12	Median und schlechteste (Min) Fortschrittskurven der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem Außenreaktor und strukturellen Beschränkungen (MTBE_CSTR ^p)	189
A.13	Vergleich der von den getesteten Algorithmen besten gefundenen Lösungen der Modellformulierung MTBE_CSTR ^{pf}	190
A.14	Vergleich der von den getesteten Algorithmen besten gefundenen Lösungen der Modellformulierung MTBE_CSTR ^p	191
A.15	Vergleich der von den getesteten Algorithmen besten gefundenen Lösungen der Modellformulierung MTBE_CSTR ^f	192

Tabellenverzeichnis

6.1	Varianten der Modellformulierungen des MTBE-Modells	64
6.2	Größe der MTBE-Modelle mit und ohne Außenreaktor ($N =$ Stufenzahl) .	64
7.1	Beste Skalierungsfaktoren der Tabuzonen	72
7.2	Vergleich der Ergebnisse der Testläufe mit unterschiedlichen Tabuzonen in jeweils bester Skalierung	73
7.3	Rechenzeiten des lokalen Löasers CONOPT und Anteil der unzulässigen Abbrüche ($MTBE_{NLP}$ mit N Stufen)	75
8.1	Zusammenfassung: Varianten des MA mit Berücksichtigung struktureller Beschränkungen	83
8.2	Ergebnisse der Suchraumanalyse der Varianten des MA mit Berücksichti- gung struktureller Beschränkungen	88
9.1	Ergebnisse der Suchraumanalyse der Varianten MA_{MINLP} und $MA_{MINLP-CF}$	103
9.2	Ergebnisse der Parametereinstellungstests (MA_{MINLP})	105
9.3	Ergebnisse der Parametereinstellungstests ($MA_{MINLP-CF1}$)	106
9.4	Vergleich der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit be- liebiger Zulaufzahl	109
9.5	Vergleich der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit ma- ximal drei Zuläufen pro Edukt	112
9.6	Ergebnisse des MA bei Optimierung des MTBE-Problems mit Be- schränkung und Minimierung der Zulaufzahl	115
10.1	Ergebnisse der Suchraumanalyse der Varianten MA_{MINLP}^{var} und $MA_{MINLP-CF}^{var}$	133
10.2	Ergebnisse der Parametereinstellungstests (MA_{MINLP}^{var})	134
10.3	Ergebnisse der Parametereinstellungstests ($MA_{MINLP-CF}^{var}$)	135
10.4	Vergleich der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit op- tionalem externen Reaktor und beliebiger Anzahl an Zuläufen und Kop- pelströmen	138

10.5	Vergleich der Algorithmen bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem externen Reaktor und maximal drei Zuläufen pro Edukt und drei Koppelströmen pro Richtung	140
10.6	Ergebnisse von $MA_{\text{MINLP-CF2}}^{\text{var}}$ bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem externen Reaktor und mit Beschränkung und Minimierung der Zulauf- und Koppelstromanzahl (nach 4 Stunden Rechenzeit)	146
10.7	Ergebnisse von $MA_{\text{MINLP-CF2}}^{\text{var}}$ bei Optimierung des MTBE-Problems mit optionalem externen Reaktor und mit Beschränkung und Minimierung der Zulauf- und Koppelstromanzahl (nach 8 Stunden Rechenzeit)	146
11.1	Dimensionen der von den Referenzalgorithmen verwendeten Modellformulierungen	150
11.2	Anzahl der von den Referenzalgorithmen zu durchsuchenden disjunkten kontinuierlichen Unterprobleme	151
11.3	Dimensionen des Suchraums des MA	151
11.4	Dimensionen der vom MA verwendeten Modellformulierungen	151
11.5	Anzahl disjunkter kontinuierlicher Unterräume des Suchraums des MA	152
11.6	Größe der Superstrukturmodelle	152
11.7	Anzahl disjunkter kontinuierlicher Unterräume der von den Superstrukturmodellen gebildeten Suchräume	153
11.8	Größe des Suchraums der MA-Varianten	154
11.9	Anzahl disjunkter kontinuierlicher Unterräume der Suchräume der MA-Varianten	154
11.10	Zum Auffinden der besten bekannten Lösung des MTBE-Problems mit vermindertem Komplexitätsgrad benötigte Iterationen der Varianten des MA	157
11.11	Fitness und Reinheit der besten von $MA^{-\text{LS}}$ gefundenen Individuen	160
11.12	Vergleich der zum Auffinden der besten bekannten Lösung benötigten Iterationen	162
11.13	Vergleich der zur lokalen Suche benötigten Rechenzeiten	162
11.14	Optimierungsergebnisse von SBB/CONOPT aller Modellvarianten mit und ohne optionalen Reaktor und mit und ohne Beschränkung von Strukturen	163
11.15	Optimierungsergebnisse von SBB/OQNLP/CONOPT aller Modellvarianten mit und ohne optionalen Reaktor und mit und ohne Beschränkung von Strukturen	165
11.16	Optimierungsergebnisse des MA	166

A.1	Ergebnisse der Strategieparameter tests: Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei Anwendung unterschiedlicher Strategieparameter	175
A.2	Ergebnisse der Selektionsoperator tests: Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei Anwendung unterschiedlicher Selektionsoperatoren	176
A.3	Ergebnisse der Testläufe mit symmetrisch rechtwinkligen Tabuzonen ($N = 13$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichem Skalierungsfaktor β	178
A.4	Ergebnisse der Testläufe mit symmetrisch rechtwinkligen Tabuzonen ($N = 20$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichem Skalierungsfaktor β	178
A.5	Ergebnisse der Testläufe mit symmetrisch kugelförmigen Tabuzonen ($N = 13$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichem Skalierungsfaktor β	179
A.6	Ergebnisse der Testläufe mit symmetrisch kugelförmigen Tabuzonen ($N = 20$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichem Skalierungsfaktor β	179
A.7	Ergebnisse der Testläufe mit asymmetrisch rechtwinkligen Tabuzonen ($N = 13$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichem Skalierungsfaktor β	180
A.8	Ergebnisse der Testläufe mit asymmetrisch rechtwinkligen Tabuzonen ($N = 20$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichem Skalierungsfaktor β	180
A.9	Ergebnisse der Testläufe mit asymmetrisch kugelförmigen Tabuzonen ($N = 13$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichem Skalierungsfaktor β	181
A.10	Ergebnisse der Testläufe mit asymmetrisch kugelförmigen Tabuzonen ($N = 20$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichem Skalierungsfaktor β	181
A.11	Ergebnisse der Testläufe mit asymmetrisch ellipsoiden Tabuzonen ($N = 13$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichen Skalierungsfaktoren α und β	182
A.12	Ergebnisse der Testläufe mit asymmetrisch ellipsoiden Tabuzonen ($N = 20$): Anzahl der gefundenen lokalen Optima bei unterschiedlichen Skalierungsfaktoren α und β	183
B.1	Vom MA benötigte Zeiten zur Simulation und Optimierung des Modells $MTBE_{NLP}$ mit $N=13$ Stufen mit unterschiedlicher Zulässigkeitstoleranz . .	194

B.2	Anzahl verletzter Nebenbedingungen und Summe der Verletzungen bei Simulation des Modells $MTBE_{NLP}$ mit $N=13$ Stufen mit unterschiedlichen Initialisierungsstrategien	195
B.3	Vom MA zur Simulation und Optimierung des Modells $MTBE_{NLP}$ mit $N=13$ Stufen benötigte Rechenzeiten mit unterschiedlichen Initialisierungsstrategien	196
D.1	Namensgebung und Eigenschaften der Varianten des MA	199

Algorithmenverzeichnis

1	Basisalgorithmus evolutionärer Algorithmen	21
2	$(\mu/\rho, \kappa, \lambda)$ - Evolutionsstrategie	24
3	Basisalgorithmus memetischer Algorithmen	27