

David Schoebel

# **Multikriterielle Gestaltung von pharmazeutischen Wirkstoffanlagen**

Der Einsatz von Computational Intelligence  
im strategischen Anlagencontrolling

Mit einem Geleitwort von Prof. Dr. Marion Steven

GABLER EDITION WISSENSCHAFT

# Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis .....	IX
Abbildungsverzeichnis .....	XIII
Tabellenverzeichnis .....	XVII
1 Einleitung.....	1
1.1 Problemstellung.....	1
1.2 Lösungsansatz .....	2
1.3 Aufbau der Arbeit .....	3
2 Multikriterielle Gestaltung pharmazeutischer Wirkstoffanlagen.....	5
2.1 Pharmazeutische Industrie .....	5
2.1.1 Entwicklung und Wandel in der pharmazeutischen Industrie.....	5
2.1.2 Pharmazeutische Produktentwicklung .....	12
2.1.3 Chemisch-pharmazeutische Produktion .....	13
2.2 Gestaltung pharmazeutischer Wirkstoffanlagen im Rahmen der Anlagenwirtschaft .....	20
2.2.1 Grundlagen und Abgrenzung der Anlagenwirtschaft .....	20
2.2.2 Pharmazeutische Wirkstoffanlagen .....	26
2.2.3 Pharmaspezifische Gestaltungsaspekte im Rahmen des Anlagenlebenszyklus .....	28
2.2.3.1 Anlagenlebenszyklus Wirkstoffanlagen .....	28
2.2.3.2 Wirkstoffanlagencontrolling .....	34
2.2.4 Problemstellungen und Anforderungen aus der Praxis.....	39
2.3 Entscheidungsunterstützungssysteme zur Gestaltung pharmazeutischer Wirkstoffanlagen.....	41
2.3.1 Grundlagen Entscheidungsunterstützungssysteme .....	42
2.3.2 Anforderungen an spezielles Entscheidungsunterstützungssystem.....	45
3 Modell für die multikriterielle Gestaltung pharmazeutischer Wirkstoffanlagen .....	47
3.1 Grundlagen und Anforderungen an die Modellierung.....	47
3.1.1 Grundlegende Begriffe System, Modell und Simulation .....	47
3.1.2 Zielorientierte Simulation .....	56
3.1.3 Modellanforderungen.....	59

3.2 Mengenmäßige Erfassung der Wirkstoffproduktion .....	60
3.2.1 Verfahrenstechnische Ansätze.....	61
3.2.1.1 Verfahrenstechnische Grundlagen und Entwicklungen .....	61
3.2.1.2 Verfahrenstechnische Modellelemente.....	62
3.2.1.3 Verfahrenstechnische Strukturmodelle.....	66
3.2.1.4 Simulation verfahrenstechnischer Systeme .....	69
3.2.2 Produktionstheoretische Ansätze.....	69
3.2.2.1 Entwicklungen in der Produktionstheorie .....	69
3.2.2.2 Aktivitätsanalyse .....	71
3.2.2.3 Betriebswirtschaftliche Produktionsfunktionen .....	78
3.2.2.4 Gestaltungswahl in produktionstheoretischen Ansätzen.....	86
3.2.3 Ansatz für eine interdisziplinäre Modellintegration .....	86
3.3 Zielsetzungen im Rahmen der Wirkstoffproduktion .....	95
3.3.1 Ökonomische Zielsetzungen.....	96
3.3.2 Ökologische Zielsetzungen.....	100
3.3.3 Gesamtdarstellung der Zielsituation.....	108
3.4 Zusammenfassung.....	111
4 Meta-Heuristik für die multikriterielle Gestaltung pharmazeutischer Wirkstoffanlagen.....	113
4.1 Grundlagen zur Optimierung.....	113
4.1.1 Verfahren zur Lösung komplexer Problemstellungen .....	113
4.1.2 Evolutionäre Algorithmen .....	119
4.2 Standardform der Evolutionsstrategie .....	123
4.2.1 Zweigliedrige Evolutionsstrategie .....	124
4.2.2 Mehrgliedrige Evolutionsstrategie .....	125
4.3 Problemspezifische Erweiterungen .....	129
4.3.1 Problemspezifische Repräsentation und Fitness .....	129
4.3.2 Erweiterungen zur Behandlung gemischt-ganzzahliger Problemstellungen.....	132
4.3.2.1 Simultane Evolutionsstrategie.....	132
4.3.2.2 Hierarchische Evolutionsstrategie.....	138
4.3.3 Erweiterung zur Behandlung multikriterieller Problemstellungen.....	150
4.3.3.1 Pareto-Konzept.....	150
4.3.3.2 Populationsbasierte, nicht-pareto-basierte Ansätze .....	152

4.3.3.3 Pareto-basierte Ansätze .....	154
4.3.4 Behandlung von Nebenbedingungen.....	161
4.4 Zusammenfassung.....	161
5 Konzept des speziellen Entscheidungsunterstützungssystems SEMCAIP .....	163
5.1 Bestandteile und Aufbau von SEMCAIP.....	163
5.2 Einsatz von SEMCAIP .....	165
5.3 Erweiterungsmöglichkeiten von SEMCAIP .....	171
5.4 Fallbeispiel zur Gestaltung einer pharmazeutischen Wirkstoffanlage.....	172
5.4.1 Rahmenbedingungen.....	172
5.4.2 Modellierung .....	175
5.4.3 Darstellung und Interpretation der Ergebnisse.....	198
6 Zusammenfassung und Ausblick.....	217
7 Literatur .....	219
Anhang: Symbolverzeichnis .....	231