

Päätösmetodit hydrometallurgisen yksiköprosessin valinnassa

Lotta Rintala, Kristian Lillkung

Päätösmetodit hydrometallurgisen yksikköprosessin valinnassa

Lotta Rintala, Kristian Lillkung

Aalto-yliopiston julkaisusarja
TIEDE + TEKNOLOGIA 15/2011

© Tekijät

ISBN 978-952-60-4215-2 (pdf)
ISBN 978-952-60-4214-5 (printed)
ISSN-L 1799-487X
ISSN 1799-4888 (pdf)
ISSN 1799-487X (printed)

Aalto Print
Helsinki 2011

Author

Lotta Rintala, Kristian Lillkung

Name of the publication

Decision methods in choosing a hydrometallurgical unit process

Publisher School of Chemical Technology**Unit** Department of Materials Science**Series** Aalto-yliopiston julkaisusarja TIEDE + TEKNOLOGIA 15/2011**Field of research** Hydrometallurgy**Abstract**

In this research the usability of different artificial intelligence methods in selecting hydrometallurgical unit processes was studied. The goal of the research was to find out if artificial intelligence might be used to support decision making in choosing hydrometallurgical processes for refractory minerals. The decision methods and the optimization methods reviewed in this work were the decision tree, the ant colony optimization, the neural network, the genetic algorithm, the case based reasoning and the multi-criteria decision making.

Some of the optimization methods might be used in selecting hydrometallurgical unit processes. The challenge is mainly associated with representing the process as a function. Some of the optimization methods are not interactive enough, which means that the user can only in little extent affect the result of the optimization. Taking this into account, using the optimization methods might sometimes lead to impossible or poorly working solutions. The user should limit the options and the magnitude of the solution to avoid the unpleasant outcome.

From the assessment of the decision methods the decision tree was the least suitable for desired purposes. One of the reasons is that different unit processes are not exclusive. Adding new unit processes in the decision model afterwards might also become a problem, causing the whole decision tree to be reconstructed from the beginning. The case based reasoning and the multi-criteria decision making methods seemed more suitable for the purpose than the decision tree. One of the advantages of the multi-criteria decision method is the elimination, which reduces the amount of calculation normally needed. Moreover, if the feasibility limits are set correctly, also the ranking of the processes with this method seems reasonable. Other methods of artificial intelligence remain under consideration, as they might as well use the elimination option to rank the processes.

The major challenge is the implementation of the elimination mechanism. In other words, taking missing information into account, setting the limitations and understanding how close are the feasibility areas of different unit processes to each other. The impact of other factors must also be understood properly and represented as a function in order to achieve the final organized structure.

Given the sufficient information for building the database required by the method, the multi-criteria decision method seems to be the most suitable for the purpose of the research. In the case-based reasoning the decision making is based on the real data, so that there is no need to explain the correlations between the process parameters. This means that though the model itself is an approximation, the information in the database remains accurate and no information is lost.

Keywords hydrometallurgy, unit processes, artificial intelligence, decision making methods, choice

ISBN (printed) 978-952-60-4214-5**ISBN (pdf)** 978-952-60-4215-2**ISSN-L** 1799-487X**ISSN (printed)** 1799-487X**ISSN (pdf)** 1799-4888**Location of publisher** Espoo**Location of printing** Helsinki**Year** 2011**Pages** 26

Tekijä

Lotta Rintala, Kristian Lillkung

Julkaisun nimi

Päätösmetodit hydrometallurgisen yksikköprosessin valinnassa

Julkaisija Kemian tekniikan korkeakoulu**Yksikkö** Materiaalitekniikan laitos**Sarja** Aalto-yliopiston julkaisusarja TIEDE + TEKNOLOGIA 15/2011**Tutkimusala** Hydrometallurgia**Tiivistelmä**

Tässä tutkimuksessa tarkasteltiin erilaisten keinoölymenetelmien käytettävyyttä hydrometallurgisen yksikköprosessin valinnassa. Tutkimuksen tavoitteena oli selvittää, sopia jokin keinoölymenetelmä käytettäväksi päätöksenteon tukena valittaessa matalapitoiselle tai muuten vaikeasti hyödynnettävissä olevalle mineraalille hydrometallurgista valmistusprosessia. Keinoölymenetelmistä tarkasteltiin seuraavia optimointi- ja päätös menetelmiä: muurahaisoptimointi, geneettinen algoritmi, neuroverkko, päätöspuu, monitavoiteoptimointi ja tapauspäätely.

Osaa optimointimenetelmistä voitaisiin käyttää apuna hydrometallurgisen yksikköprosessin valinnassa. Haasteena on kuitenkin se, että prosessi pitäisi pystyä kuvaamaan funktion muodossa. Lisäksi useimmat optimointimenetelmät eivät ole erityisen interaktiivisia, eli käyttäjä voi vaikuttaa vain vähän siihen, mitä optimointi antaa tulokseksi. Tästä syystä optimointimenetelmien käyttö voisi johtaa mahdottomiin tai huonosti toimiviin vaihtoehtoihin. Optimointimenetelmiä käytettäessä käyttäjän tulisi itse rajata vaihtoehdot ja ratkaisun suuruusluokka, joka huonosti tehtynä voi vaikuttaa lopputulokseen ratkaisevasti.

Päätös menetelmistä päätöspuu vaikutti epäsovinnalliselta haluttuun tarkoitukseen, sillä eri yksikköprosessit eivät ole toisiaan poissulkevia. Ongelmaksi saattaisi myös muodostua uusien yksikköprosessien lisääminen päätösmalliin jälkikäteen. Mahdollisesti koko puu pitäisi rakentaa uudelleen uuden yksikköprosessin lisäämisen yhteydessä.

Päätös menetelmistä sekä monitavoiteoptimointi että tapauspäätely vaikuttavat käyttökelpoisilta keinoölymenetelmiltä haluttuun tarkoitukseen. Monitavoiteoptimoinnin hyvä puoli on karsinta, jonka käyttäminen vähentää vaadittavaa laskennan määrää huomattavasti. Myös eri prosessien pisteytys sen avulla vaikuttaa järkevältä, jos soveltuvuusrajat saadaan järkevästi määritettyä. Samankaltaisen karsinnan käyttäminen olisi toki mahdollista minkä tahansa muunkin päätös- tai optimointimenetelmän kanssa, mikä voisi olla harkinnan arvoista. Menetelmässä haasteellisinta on karsinnan toteutus, eli miten ohjelma ottaa huomioon puuttuvan informaation, miten hyvin rajat saadaan määritettyä, ja kuinka lähellä toisiaan eri yksikköprosessien soveltuvuusalueet ovat. Erilaisten attribuuttien vaikutus pitäisi myös tuntea melko tarkasti, ja ne täytyisi kyetä ilmaisemaan jonkinlaisina funktioina, jotta lopullinen järjestys saadaan määritettyä.

Mikäli työkalun kehittämistä varten on saatavissa tarpeeksi tietoa tapauspäätelyn edellyttämän tietokannan rakentamiseksi, vaikuttaa tapauspäätelyn käyttäminen sopivimmalta keinoölymenetelmältä haluttuun tarkoitukseen. Tapauspäätelyssä päätöksentekoa varten ei tarvitse mallintaa prosessin parametrien välisiä riippuvuuksia, vaan tieto ja päätökset perustuvat todelliseen dataan. Mallin luomisesta aiheutuva yksinkertaistus ei siten hukkaa tietoa, vaan kaikki tieto on käytettävissä siinä tarkkuudessa kuin se on tietokantaan syötetty.

Avainsanat hydrometallurgia, yksikköprosessit, keinoöly, päätösmetodit, valinta**ISBN (painettu)** 978-952-60-4214-5**ISBN (pdf)** 978-952-60-4215-2**ISSN-L** 1799-487X**ISSN (painettu)** 1799-487X**ISSN (pdf)** 1799-4888**Julkaisupaikka** Espoo**Painopaikka** Helsinki**Vuosi** 2011**Sivumäärä** 26

Sisällysluettelo

1. Johdanto.....	1
2. Hydrometallurgisen yksikköprosessin valinta	3
3. Päätöksenteossa avustavat menetelmät	6
3.1 Optimointimenetelmät	7
3.1.1 Muurahaisoptimointi	7
3.1.2 Neuroverkko.....	9
3.1.3 Geneettinen algoritmi	11
3.2 Päätös menetelmät.....	12
3.2.1 Päätöspuu	12
3.2.2 Monitavoiteoptimointi	14
3.2.3 Tapauspäättely	16
4. Johtopäätökset	20
5. Yhteenveto.....	22
Kirjallisuusviitteet	24

1. Johdanto

Tämä tutkimus on osa FIMECC Oy:n ELEMET-tutkimushankkeen LowGrade-projektia, jossa tavoitteena on luoda teknologisen ja taloudellisen tiedon perusteella yksikköprosessien valintatyökalu köyhille ja vaikeasti hyödynnettäville malmeille. Tutkimus toteutettiin Aalto-yliopiston Kemian tekniikan korkeakoulun korroosion ja hydrometallurgian tutkimusryhmässä.

Kun korkeapitoiset malmiesiintymät alkavat ehtyä, metallien tuotanto perustuu yhä enenevästi marginaalisten malmiesiintymien ja sekundääristen raaka-aineiden käsittelyyn. Haasteita suunnitteluun luo yhä korkeampi malmien kompleksisuus ja esiintymien pieni koko ja arvoainepitoisuus. Nämä haasteet asettavat suunnitteluun sekä fysikaalis-kemiallisia että taloudellisia rajoitteita. Esimerkiksi pyrometallurgiset käsittelyt voivat olla poissuljettuja joko malmin kompleksisuuden vuoksi tai siksi, että käsiteltävä raaka-aine määrä on liian pieni, jotta prosessi toimisi. Hydrometallurginen prosessointi voi sopia näille raaka-aineille, mutta ensin tulee löytää sopiva liuoskemia ja yksikköprosessien ketju. Hydrometallurgisen prosessiketjun suunnittelu uudelle raaka-aineelle ei kuitenkaan ole täysin mutkatonta. Vaihtoehtoisia raaka-aineen käsittelytapoja on lukuisia ja niiden vertaaminen keskenään ei ole suoraviivaista. Etenkin, kun monet valmiille prosessille asetetut tavoitteet ovat keskenään ristiriitaisia. Haasteeksi ei siten muodostu tiedon puute, vaan se, että sitä on saatavilla erittäin paljon. Kokonaisuuden hahmottaminen ja hallitseminen on ihmismielelle tietotulvassa haastavaa.

Tässä raportissa tarkastellaan keinoälymenetelmiä, joiden avulla valintatyökalu voitaisiin rakentaa. Tutkimuksen tavoitteena oli selvittää, millaista metodia olisi mahdollista käyttää päätöksenteon tukena valittaessa valmistusprosessia matalapitoiselle tai muuten vaikeasti hyödynnettävissä olevalle mineraalille. Päätöstyökalun tulisi säästää prosessiketjun suunnitteluun kuluva aikaa ja vähentää kokeellisen työn kustannuksia uusien prosessien kehittäessä.

Prosessioptimointiin soveltuvia ohjelmistoja on olemassa lukuisia, mutta suoraan yksikköprosessien valintaan suuntautuvia ei kirjallisuuden

perusteella ilmeisesti ainuttakaan. Joissain prosessisimulaattoreissa, kuten HSC Sim 7.0 [Outotec Oyj 2010], voidaan mallintaa rinnakkain useita prosesseja samalle syötteelle. Näin saadaan arvioitua parametrien muuttamisen vaikutukset kaikilla vaihtoehtoisilla prosesseilla samanaikaisesti. Esimerkiksi kemikaalien tai lämmön tarve vaihtoehtoisilla yksikköprosesseilla voidaan arvioida haluttaessa samanaikaisesti ja tulokset ovat saatavissa taulukoituna. Kaikkien teoriassa mahdollisten prosessiketjujen kuvaaminen suoraan prosessisimulaattorissa valinnan tekoa varten ei ole kuitenkaan realistista, koska se vaatisi liikaa manuaalista työtä.

Prosessin valintatyökalua on kehitetty aiemmin puunjalostusteollisuudessa erotusprosessin valintaan [Seuranen 2006], [Pajula 2006]. Perusajatus on hyvin lähellä hydrometallurgisille prosesseille kehitettävää työkalua, mutta vaihtoehtoiset prosessit eroavat toisistaan huomattavasti enemmän hydrometallurgiassa. Lisäksi erotusprosessin valinnassa on riittänyt yhden prosessin valinta prosessiketjun muodostamisen sijaan. Kyseisissä väitöskirjoissa on keskitytty pääasiassa geneettisen algoritmin ja tapauspäättelyn (case based reasoning) soveltamiseen prosessi-valinnassa. Geneettinen algoritmi on tässä tapauksessa jossain määrin toimiva, koska tutkitut kemialliset prosessit ovat jatkuvatoimisia ja prosessia kuvaavat funktiot voidaan kuvata melko yksinkertaisesti. Seurasen väitöskirjan mukaan kemian teollisuudessa uusien prosessien kehittäminen voi perustua kolmeen eri lähestymistapaan [Seuranen 2006]. Nämä ovat:

- Heuristinen ja suunnittelukokemukseen perustuva (hierarkkiset valintamenetelmät)
- Optimointiin perustuva
- Tapauspäättelyyn perustuva

Heurististen menetelmien ongelmana on se, että niitä on vaikea automatisoida, joten ne perustuvat hyvin pitkälle suunnittelijan kokemukseen. Optimointiin perustuva lähestymistapa puolestaan perustuu lähes täysin koneelliseen laskentaan, jolloin laskelmissa käytettävien mallien toimivuus on hyvin tärkeä. Viimeisessä, tapauspäättelyyn perustuvassa lähestymistavassa, käytetään jo tunnettuja tapauksia, joiden perusteella ennustetaan parhaimmat vaihtoehdot. [Seuranen 2006]

2. Hydrometallurgisen yksikköprosessin valinta

Mahdollisia yksikköprosesseja on suuri määrä, joten toimivan luokittelumetodin merkitys korostuu. Suurin yksikköprosessien valinnan haaste on toimivan ketjun luomisessa. Yksikköprosessiketjussa edellisen yksikköprosessin tuotos on seuraavan yksikköprosessin syöte. Kullekin yksikköprosessille on kyettävä määrittelemään rajat, joiden sisällä kyseinen yksikköprosessi on käyttökelpoinen. Osa rajoista on yksinkertaista määritellä, esim. tietyn prosessin soveltuvuus ainoastaan tietyn metallin talteenottoon. Sen lisäksi on parametreja, joille ei voida antaa yhtä yksikäsitteisiä rajoja. Esimerkiksi liuoksen pH:ta tai lämpötilaa on mahdollista säätää, joten näiden osalta yksikköprosessien karsinnan ei tulisi olla yhtä karkeaa. Käytännössä osan luokittelukriteereistä, joiden perusteella soveltumattomat prosessit karsitaan, tulisi olla ehdottomia.

Joidenkin parametrien vaikutus on todennäköisesti kuvattavissa lineaarisena, mutta joidenkin vaikutus on todennäköisesti hyvin epälineaarista. Esimerkki lineaarisesta riippuvuudesta voisi olla lämmön tarve, koska lämmityskustannukset kasvavat melko lineaarisesti suhteessa siihen kuinka paljon liuokseen täytyy syöttää lämpöä optimiolosuhteiden saavuttamiseksi. Riippuvuus voi olla epälineaarista esimerkiksi jonkin liuottimen kulutuksen suhteen. Tietyn pisteen jälkeen liuottimen määrän lisääminen tai vahvemman pitoisuuden käyttäminen ei enää paranna liukenemistä, ja toisaalta taas liukenemisen käynnistyminen voi edellyttää tietyn minimipitoisuuden ylittämistä.

Hydrometallurgisten yksikköprosessien valinta ja prosessioptimointi liittyvät hyvin läheisesti toisiinsa. Ne eroavat kuitenkin siinä, että optimoinnilla tarkoitetaan tässä yhteydessä tiettyjen prosessiparametrien optimointia, jolla saavutetaan mahdollisimman hyvä prosessin tulos. Toisin sanoen prosessioptimoinnissa haetaan jo valitulle prosessille optimiparametreja muuttamalla tietyn mitattavan ominaisuuden maksimi- tai minimikohta. Tässä tutkimuksessa keskitytään valinnan optimointiin.

Tarkoituksena on, että valintatyökalun avulla voitaisiin selvittää millaisten prosessien ketjut olisivat ylipäättään mahdollisia tai kannattavia kyseiseen käyttökohteeseen, jo toteutettuihin tai toimiviksi osoitettuihin prosesseihin perustuen. Tässä valintavaiheessa ei voida saada suoraan selville optimaalisia prosessin parametreja, vaan niitä varten on valittuja prosesseja tarkasteltava tarkemmin ja optimoitava niiden toiminta esimerkiksi prosessisimulaattorissa tai pilot-kokein.

Prosessioptimoinnissa pyritään eri muuttujia hallitusti muuttamalla löytämään optimoitavan parametrin maksimikohta. Tällainen optimoitava parametri voisi olla esimerkiksi prosessin saanto tai konversio. Varsinainen rahallinen tuotto on hyvin suhteellista metallien ja kemikaalien hintojen vaihdellessa, joten esim. konversio on huomattavasti järkevämpi vertailutekijä.

Prosessioptimointiin ei ole kuitenkaan järkevä keskittyä heti aluksi, sillä teoriassa mahdollisia yksikköprosessiketjuja on hyvin paljon, jolloin optimoitavien parametrien määrä olisi erittäin suuri. Tämä edellyttäisi malleilta suurta yksinkertaistamista, joka johtaisi siihen, että saatu optimitalanne ei todennäköisesti vastaisi todellisuutta. Vaihtoehtoisesti vertailu edellyttäisi paljon työtä prosessien mallintamisessa ja suurta laskentakapasiteettia. Työkalun kehittämisen tavoitteena tulisi kuitenkin pitää mahdollisimman alhaista manuaalisen työn osuutta, sekä alhaisia laskentatehovaatimuksia. Rakentamalla malli kaikista mahdollisista prosesseista ja niiden variaatioista, saataisiin varmasti myös selville optimaalisin prosessi, mutta saavutetun hyödyn määrä suhteessa työhön olisi todennäköisesti hyvin pieni. Työkalu ei siten toisi haluttua lisäarvoa nykyiseen tilanteeseen verrattuna. Viisaampaa olisi karsia ensin optimoitavien prosessien määrää tiettyjen kriteerien avulla.

Eri parametrit käyttäytyvät eri tavoin eri malmeilla, eli on tuskin mahdollista luoda valintatyökalua, joka antaisi vastaukseksi vain yhden varmasti parhaan prosessiketjun kyseiseen tarkoitukseen. Sen sijaan olisi järkevää verrata muutamaa mallin perusteella lupaavimmalta vaikuttavaa prosessia (tai kokonaista prosessiketjua) prosessisimulaattorissa. Vertailusta saataisiin määritettyä prosesseille riittävän todenmukainen kuvaus ja realistinen paremmuusjärjestys. Esimerkiksi eri prosessiketjujen saanto riippuu hyvin paljon siitä, kuinka optimaaliset olosuhteet prosessin toiminnalle saavutetaan. Vaihtoehtoisten yksikköprosessien karsinta tulisi siis suorittaa melko karkealla tasolla, ehkä jopa kategoriatasolla. Samankaltaisten prosessien kesken tiettyjen prosessivariaatioiden nostaminen muiden edelle voi olla hankalaa ja epäluotettavaa.

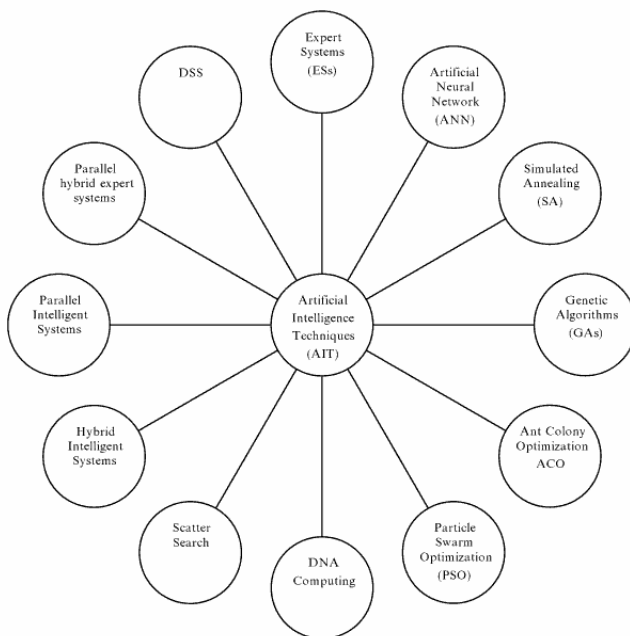
Käytännössä kaikki päätöksissä tarvittava informaatio on saatavissa numeerisessa muodossa, joten sitä voidaan helposti käsitellä erilaisten

päätösmetodien avulla. Hyvä puoli on, että käytännössä kaikki käsiteltävä informaatio on mitattavaa dataa, eikä subjektiivisia mielipiteitä tarvitse ottaa huomioon, poikkeuksena kuitenkin mahdollisesti jotkin muutettavat painotuskertoimet. Lisäksi vaihtoehtoja vertailtaessa tai pisteytettäessä on otettava huomioon eri muuttujien suuruusluokat ja yksiköt. Eri yksikköprosessien arvioinnissa täytyy ottaa huomioon myös prosessin koko. Toiset yksikköprosessit ovat käyttökelpoisempia pienessä mittakaavassa ja toiset ovat parhaimmillaan suurilla materiaalivirroilla. Myös prosessien investointi- ja käyttökulut tulisi voida huomioida.

Yksikköprosessiketjun tavoitteena on muuttaa lähtöaine halutuksi lopputuotteeksi. Käytännössä lähtöaine on jonkinlainen malmi tai rikaste, riippuen siitä kuinka pitkälle ketjun alkupäässä tarkastelu ulotetaan. Ketjun alkupiste täytyy rajata johonkin järkevään pisteeseen, jota aiemmat vaiheet voidaan olettaa toteuttamiskelpoisiksi. Haluttu lopputuote on todennäköisesti puhdas metalli. Puhtaan metallin olomuoto voi olla kiinteän metallin lisäksi esim. jauhe.

3. Päätöksenteossa avustavat menetelmät

Kattava yhteenveto erilaisten päätöksentekomenetelmien toiminnasta löytyy kirjasta [Kahraman 2008]. Karkea jako erilaisiin keinoälytekniikoihin on esitetty kuvassa 1. Kyseiset tekniikat voidaan jakaa optimointi- ja päätösmenetelmiin. Näistä tärkeimmät ja soveltuvimmat on esitelty kappaleissa 4.1.-4.2. Kappaleessa 4.1. käsitellään optimointimenetelmiä ja 4.2. päätösmenetelmiä.



Kuva 1 Erilaiset keinoälytekniikat [Kahraman 2008] mukaan.

3.1 Optimointimenetelmät

Osaa optimointimenetelmistä voitaisiin perustellusti käyttää apuna hydrometallurgisen yksikköprosessin valinnassa. Esimerkiksi neuroverkon käyttäminen yksikköprosessiin vaikuttavien parametrien selvittämisessä voisi olla hyödyllistä. Pääasiassa kyseeseen tulevat optimointimenetelmät kuuluvat ns. moderneihin optimointimenetelmiin.

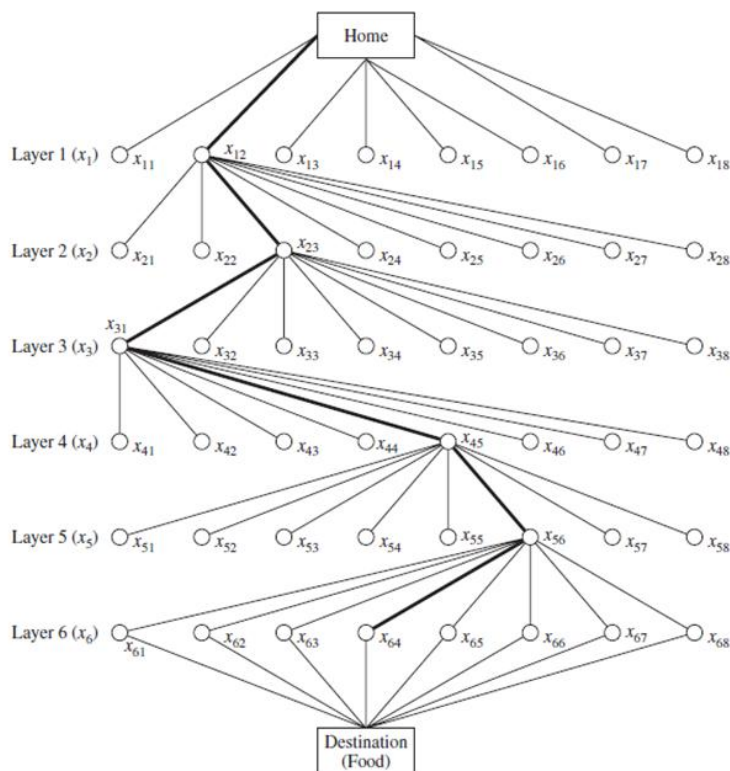
Joidenkin optimointimenetelmien huonona puolena epälineaarisia ongelmia optimoitaessa on se, että ne tyytyvät tiettyyn paikalliseen minimiin, jolloin käyttäjän täytyy tietää missä suuruusluokassa optimaalinen tulos on. [Rao 2009] Tämä on haastavaa etenkin, kun optimoitavaan muuttujaan vaikuttavia parametreja on runsas määrä. Joillekin optimointimenetelmille täytyy syöttää alkuarvaus, josta optimointia lähdetään tekemään. Jos alkuarvaus on hyvin kaukana todellisesta optimitilanteesta, on riskinä optimoinnin tyytyminen paikalliseen minimiin/maksimiin. [Rao 2009] Turvallisinta olisi valita optimointimenetelmä, joka tavoittaa minimi/maksimiarvon tietyllä välillä.

Artikkelin [Pajula 2001] perusteella optimointimenetelmien käyttö tämän tyyppisessä valinnassa on kuitenkin hankalaa. Prosessi pitäisi pystyä kuvaamaan funktion muodossa, jonka avulla on kuitenkin haastavaa saada kuvattua realistisesti esimerkiksi prosessin luotettavuuden tai turvallisuuden tyyppiset tekijät. Lisäksi optimointimenetelmät eivät ole erityisen interaktiivisia, eli käyttäjä ei juuri pysty vaikuttamaan siihen, mitä optimointi antaa tulokseksi. Näiden syiden takia optimointimenetelmien käyttö johtaa monesti mahdottomiin tai huonosti toimiviin vaihtoehtoihin. Optimointimenetelmiä käytettäessä käyttäjän tulisi itse rajata vaihtoehdot ja ratkaisun suuruusluokka, joka huonosti tehtynä voi vaikuttaa lopputulokseen ratkaisevasti. Tällöin käyttäjän omat mielitymykset näkyvät myös selvästi lopputuloksissa.

3.1.1 Muurahaisoptimointi

Muurahaisoptimointi (Ant colony optimization) perustuu nimensä mukaisesti muurahaisten luontaiseen käyttäytymiseen. Muurahaiset etsivät vaihtoehtoisia reittejä päästäkseen ruoan luokse mahdollisimman lyhyttä reittiä. Kulkiessaan muurahaiset erittävät feromoniamia, joka haihtuu polulta pikkuhiljaa. Feromonijäljen pitoisuus kertoo, kuinka paljon polkua on käytetty lähimenneisyydessä. Mitä suurempi feromonipitoisuus reitillä on, sitä voimakkaammin muurahaiset haluavat kulkea sitä kautta. Lisäksi reiteiltään pesään palaavat muurahaiset kasvattavat lyhyimmän polun feromonipitoisuutta nopeimmin, sillä lyhyimmän reitin valitsevat muurahaiset palaavat nopeimmin takaisin. Näin kasvaa todennäköisyys

sille, että lyhyin polku valitaan myös seuraavaksi. Edellä kuvattua periaatetta voidaan hyödyntää myös matemaattisesti, kuva 2. Kuvaan ei ole piirretty selvyuden vuoksi kaikkia mahdollisia polkuja. Solmuja yhdistävien polkujen geometrinen pituus ei kuvaa niiden pituutta optimaalisen polun määrityksessä, vaan kuva on ainoastaan havainnollistava. [Dorigo 2004]



Kuva 2 Muurahaisoptimoinnin graafinen esitys [Rao 2009].

Aluksi satunnaisesti kaikkien vaihtoehtoisten solmujen kautta kulkeva liikenne keskittyy usean kierroksen aikana parhaimmille reiteille ja lopulta yhdelle ainoalle parhaalle polulle. Iteraatiokierrosten määrä riippuu monesta tekijästä, esim. kuinka suuri ero parhaan ja seuraavaksi parhaan polun välillä on. Kyseisestä optimointimenetelmästä on myös olemassa erilaisia matemaattisia muunnoksia, jotka käsittelevät tämäntyyppisiä ongelmia eri tavoin. [Dorigo 2004]

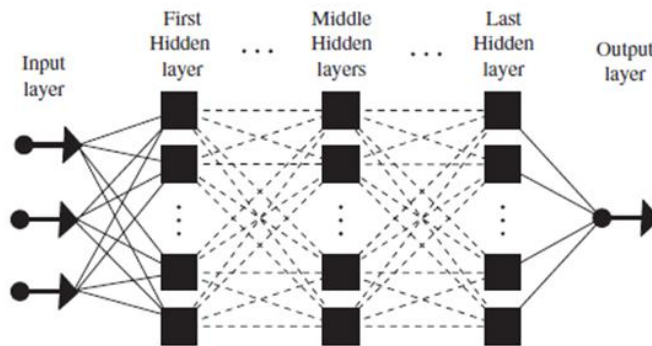
Jos ajatellaan kuvan 2 solmukohdat yksikköprosesseiksi, voitaisiin samaa periaatetta todennäköisesti soveltaa optimaalisen prosessiketjun valintaan. Monissa muissa menetelmissä ongelmaksi muodostuu juuri yksikköprosessien ketjutus, joka on hyvin helposti toteutettavissa

muurahaisoptimoinnin avulla. Prosessien kuvaukset olisi todennäköisesti helppo saada haettua tietokannasta, jolloin optimaalisen reitin laskeminen onnistuisi hyvin alhaisella manuaalisen työn määrällä.

Prosessiketjuja muodostettaessa ongelmaksi tosin muodostuu, mitä parametria optimoidaan, ts. mitä muuttujaa (tai muuttujia) polun pituus kuvaa. Optimointi suoritetaan jollekin funktiolle, jonka tulisi kuvata mahdollisimman hyvin haluttua muutosta raaka-aineesta lopputuotteeksi. Mahdollista olisi myös muurahaisoptimoinnin kautta pyrkiä käsittelemään erikseen eri parametrien optimointia. Tällöin vastaukseksi saataisiin ne prosessiketjut, jotka kutakin parametria optimoitaessa olisivat optimaaliset. Olisi kuitenkin mahdollista, että tällöin nousisi esiin myös vaihtoehtoja, jotka jonkin toisen parametrin takia ovat heikkotehoisia tai toimimattomia. Yhden parhaan ketjun poimiminen voi olla ylipäätään riskialtista, mutta näin voitaisiin poimia muutamia erityyppisiä prosessiketjuja, joiden keskinäistä paremmuutta tulisi myöhemmin arvioida prosessisimulaattorin avulla.

3.1.2 Neuroverkko

Neuroverkon (Artificial Neural Network) toiminta muistuttaa ihmisaivojen toimintaperiaatetta. Siinä on monta toisiinsa kytkettyä solmua eli neuronia, jotka muodostavat yhdessä verkon. Neuronit linkittyvät kaikkiin seuraavalla tasolla oleviin neuroneihin. Neuroverkko koostuu syöte- ja tulostetasoista (input/output layer), sekä näiden välissä sijaitsevista ns. näkymättömistä kerroksista (hidden layer). Neuroverkon periaate on esitetty kuvassa 3.



Kuva 3 Periaatekuva neuroverkosta [Mjalli 2007]

Neuroverkon luomiseen on kehitetty erilaisia menetelmiä, joiden pohjalta on tehty lukuisia erilaisia sovelluksia. Optimaalisen menetelmän ja

sovelluksen valinta ei kuitenkaan monesti ole itsestään selvää. Optimaalisen neuroverkon rakentaminen ja verkon ns. kouluttaminen ovat matemaattisesti ajatellen optimointiongelmia, joissa yleistyksen erot on minimoitava. Optimoinnissa oleellista on:

- löytää oikean muotoinen optimoitava aktivointifunktio syötedatalle ja tulosdatalle (riippuu siitä onko parametrien riippuvuus lineaarista, epälineaarista, yms.)
- sopiva määrä neuroneita näkymättömässä kerroksessa
- kuinka suuri askel kullakin iteraatiokierroksella siirrytään (learning rate)

Monimutkaisen funktion kuvaaminen tarkasti saattaa edellyttää jopa tuhansia iteraatiokierroksia, joten varsinkin pientä askelta käytettäessä lopullisen tuloksen saaminen on hidasta. Joillakin algoritmeilla ongelmaksi voi muodostua juuttuminen paikallisiin minimeihin, varsinkin pienillä askeleilla. [Lahiri 2009]

Neuroverkon avulla on siis mahdollista arvioida esimerkiksi prosessin saantia tiettyä parametria varioimalla, kun tunnetaan tarpeeksi laaja määrä tapauksia, joissa parametrilla on tietty arvo ja tunnetaan tätä arvoa vastaava prosessin saanti. Menetelmää on käytetty kirjallisuudessa mm. optimaalisten prosessiparametrien löytämiseen nikkelin liuotusprosessissa [Rademan & L. 1996]. Etuna moneen muuhun optimointimenetelmään verrattuna on siis se, ettei optimoitavien parametrien keskinäisiä suhteita tarvitse tuntea. Tosin tästä syystä menetelmä edellyttää melko kattavaa tietokantaa, jotta menetelmän antamat ennusteet olisivat luotettavia. Tältä osin menetelmän toiminta perustuu samaan perusajatukseen kuin ns. tapauspäättely.

Neuroverkkojen toimintaperiaatetta voisi olla mahdollista soveltaa myös prosessien karkeaan valintaan, siten että määritettäisiin, mitkä prosessit voisivat olla soveltuvia kyseiseen tapaukseen. Tällöin ongelmaksi saattaa muodostua eri parametrien/attribuuttien vertailu, esim. saadaanko eri ominaisuuksia verrattua keskenään vaikkapa kustannusten/konversion kautta vai tarvitaanko useampia verkkoja eri vertailtaville muuttujille. Tämä aiheuttaisi sen, että verkko olisi raskas ja sen käyttäminen vaatisi hyvin paljon manuaalista työtä. Neuroverkkojen käyttö myös edellyttää pääsääntöisesti kaikkien parametrien tuntemista.

Neuroverkon käyttö ei kuitenkaan mahdollistaisi esimerkiksi yksikköprosessiketjujen muodostamista, kuten muurahaisoptimointi. Jotta menetelmä antaisi tässä tarkoituksessa luotettavia tuloksia, sen toteutustapa tulisi olla hyvin samankaltainen kappaleessa 4.2.3 käsiteltävän tapauspäättelyn kanssa.

3.1.3 Geneettinen algoritmi

Geneettistä algoritmia (Genetic Algorithm) käytettäessä ratkaisuavaruuden alkioit muutetaan geneettiseksi koodiksi, eli esim. jonoksi bittejä, siten että jokaista mahdollista ratkaisua vastaa tietty merkkijono. Merkkijonoja kutsutaan kromosomeiksi ja kromosomien alkioita geeneiksi, geenien mahdollisia arvoja kutsutaan alleeleiksi. Tämän jälkeen luodaan halutun kokoinen alkupopulaatio, jonka kromosomit valitaan sattumanvaraisesti. Monesti alkupopulaatio on satunnainen joukko hyvin erilaisia ratkaisuja. Jokainen populaation kromosomi arvioidaan hyvyysfunktion avulla, jonka jälkeen muodostetaan uusi populaatio geneettisillä operaattoreilla. Tämä prosessi imitoi luonnonvalintaa, jossa hyödylliset ominaisuudet siirtyvät seuraaviin sukupolviin ja huonot ominaisuudet katoavat. Mutaatiot muuttavat ratkaisuja, joista tulee joko "hyviä" tai "huonoja". Ennalta määritellyillä ehdoilla karsitaan näistä "huonot" ratkaisut pois. Geneettisen algoritmin iteraatioita kutsutaan sukupolviksi. Uusia sukupolvia muodostetaan, kunnes ratkaisu suppenee. Geneettisissä algoritmeissa populaation koko säilyy vakiona koko iteraation ajan. Geneettisille operaattoreille määritellään toteutumistodennäköisyydet, joten jokaista mahdollista operaattoria ei käytetä jokaisella kierroksella. [Reeves 2002]

Geneettiset algoritmit soveltuvat tilanteisiin, joissa halutaan löytää approksimatiivinen optimi suurelle optimointitehtävälle. Erityisen hyvin se soveltuu tehtäviin, joissa mahdollisia ratkaisuja on hyvin suuri, mutta äärellinen määrä. Geneettistä algoritmia kannattaa käyttää erityisesti epälineaaristen optimointiongelmiin ratkaisuun. Geneettinen algoritmi ei pääsääntöisesti tyydy paikalliseen minimiarvoon, vaan se voi tehdä iteraatiokierroksia loputtomasti. Tästä syystä sille on määritettävä jonkinlainen lopetuskriteeri. Lopetuskriteerinä käytetään yleisesti joko iteraatiokierrosten lukumäärää tai tiettyä ratkaisun hyvyttä.

Geneettinen algoritmi on hyvä ja tehokas menetelmä käytettäväksi varsinaiseen (prosessi)optimointiin, mutta se ei sellaisenaan tuo lisäarvoa päätöksentekoon. Geneettistä algoritmia voidaan hyödyntää myös muiden menetelmien yhteydessä, kuten esimerkiksi neuroverkkojen kehittämisessä. Menetelmän huonona puolena on jälleen myös se, että tulisi luoda funktio, joka kuvaisi päätöksen hyvyttä.

3.2 Päätösmenetelmät

Optimointimenetelmien sijaan erilaisten päätösmenetelmien käyttö voisi olla toimivampi ratkaisu. Yhteenveto näistä esitettiin kuvassa 1. Eri päätösmenetelmät toimivat eri tavoin ja niitä voidaan käyttää varsin erilaisissa sovelluskohteissa. Menetelmät voidaan jakaa kahteen osaan, päätöksentekotyökaluihin (Decision Making Software) ja päätöksenteossa avustaviin työkaluihin (Decision Support System). Ensin mainittujen tarkoituksena on nimenomaan päätösten tekeminen mahdollisimman automatisoidusti ja jälkimmäisten käyttäjän päätöksenteon tukeminen. Tässä yhteydessä pääpaino on jälkimmäisellä. [Sage 2000]

Monille päätösmenetelmille löytyy käyttötarkoituksesta riippuen useita eri nimiä kirjallisuudesta. Seuraavassa on listattuna muutama hyvin erityyppinen päätösmenetelmä, joita on kirjallisuudessa käytetty jossain määrin vastaavissa sovelluskohteissa.

3.2.1 Päätöspuu

Päätöspuu (Decision Tree) on yksinkertainen ja havainnollinen menetelmä tiedon luokitteluun ja päätöksentekoon. Menetelmä helpottaa päätöksentekoa havainnollistamalla syy- ja seuraussuhteet. Puu kasvaa juurisolmusta alaspäin (Kuva 4). Kussakin solmussa on päätöskriteeri, jonka perusteella valitaan oikea polku ja päädytään lehteen, joka parhaiten kuvaa kyseistä informaatiota. Lehti arvo voi olla esimerkiksi tapaukseen soveltuva prosessi tai vaihtoehtoisesti antaa kyllä/ei-vastauksen.

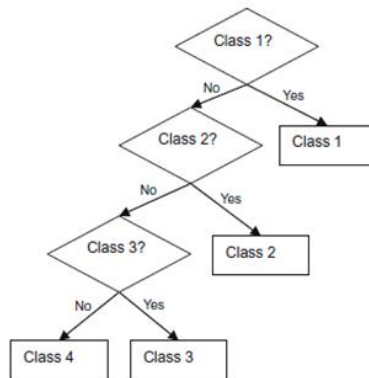
Päätöspuun käyttäminen päätöksentekoon edellyttää, että päätöksenteon yhteydessä on saatavissa kaikkiin kriteereihin liittyvät tiedot. Mikäli jonkin solmun tietoja ei ole käytettävissä, ei puusta voida saada yksikäsitteistä vastausta. Puun rakenne on myös kriittinen päätöksenteon onnistumiselle. Päätöskriteerin järjestys ratkaisee puun antaman tuloksen, sillä kahden kriteerin paikan vaihtamisella puu saattaa antaa täysin eri tuloksen.

Eri yksikköprosessit eivät ole toisiaan poissulkevia, joten yhden kaikki yksikköprosessit kattavan päätöspuun rakentaminen olisi hyvin työlästä ja hankalaa. Ongelmaksi saattaisi myös muodostua uusien yksikköprosessien lisääminen päätösmalliin jälkikäteen. Pahimmassa tapauksessa koko puu jouduttaisiin rakentamaan uudestaan yksikköprosessin lisäämisen yhteydessä. Käytännössä järkevää olisi, että kukin yksikköprosessi tulisi käsitellä omana puunaan, joka ratkaisisi yksikköprosessin soveltuvuuden kyseiseen käyttökohteeseen. Päätöspuiden joukko, eli päätösmetsä, antaisi tuloksena kyseiseen kohteeseen mahdollisesti soveltuvat prosessit.

Yksikköprosessin soveltuvuus kuitenkin riippuu pitkälti edellisestä yksikköprosessista, joten puumainen valinta sopisi enemmänkin ketjutasolle.

Päätöspuun käyttö on jossain määrin samankaltaista kuin väitöskirjassa [Seuranen 2006] mietitty hierarkkinen päätöksentekomalli. Käytännössä päätösmalli kategorisoisi yksikköprosessit joko todennäköisesti toimiviin tai todennäköisesti toimimattomiin, sen perusteella täyttävätkö prosessit tietyt ehdot. Yksikköprosessien keskinäistä paremmuusjärjestystä ei päätöspuun avulla ole käytännössä mahdollista ratkaista, joten kyseisten prosessien keskinäinen paremmuus olisi ratkaistava prosessisimulaattorin avulla. Ongelmaksi saattaa kuitenkin muodostua se, että teoreettisesti mahdollisiksi yksikköprosesseiksi saattaa eri tapauksissa nousta hyvin eri määrä prosesseja.

Kuvassa 4 on esitetty päätöspuun rakenne yleisellä tasolla. Kuvassa voidaan ajatella, että luokat 1-3 kuvaavat yksikköprosessin soveltumattomuutta ja luokka 4 soveltuvuutta kyseiselle mineraalille. Puun solmujen määrä saattaa todellisuudessa olla suurempikin, lisäksi puun rakenne ei välttämättä ole yhtä suoraviivainen kuin kuvattu, vaan se voi olla myös monihaarainen.



Kuva 4 Päätöspuun rakenne [Ghiassi 2010].

Yksikköprosessien ketjuttaminen olisi päätöspuun avulla myös hyvin haastavaa, joten yksikköprosessiketjujen muodostamiseen jouduttaisiin todennäköisesti käyttämään jotakin muuta menetelmää, mikäli valintaa ei tehtäisi suoraan prosessiketjujen välillä. Näin ollen päätöspuumallin käyttö päätöksentekoon vaikuttaa erittäin työläältä ratkaisulta. Huomioon otettavien muuttujien määrä on hyvin suuri, joten puumaisen rakenteen käyttö prosessivalinnassa on hyvin hankalaa [Pajula 2001].

Väitöskirjassa [Seuranen 2006] on kuvattu tapauspäättelyn avulla tehtävää päätöksentekoa usealla eri tasolla. Menetelmällä on määritetty ensin prosessi yleisellä tasolla, ja tämän perusteella prosessin osia (subprocess level). Lopuksi on määritetty tämän perusteella suuntaa antavat reaktorikoot, ym. Väitöskirjassa on pohdittu myös mahdollisuutta lisätä tietokantaan toimimattomia tai onnettomuuksia aiheuttaneita prosesseja ja komponenttien mitoituksia, jotta vastaavilta ongelmilta vältyttäisiin jatkossa.

Artikkelin [Pajula 2001] perusteella tapauspäättelyinkin avulla tehtävässä prosessien valinnassa syytä ottaa pisteytyksen avulla huomioon tekniikan kypsyyssaste (maturity factor) ja tekniikan toimivuus (performance factor). Kypsyyssaste on artikkelissa jaoteltu viiteen osaan konseptiasteesta laajasti käytetyksi prosessiksi. Prosessin tehokkuus puolestaan on jaoteltu kuuteen asteeseen toimimattomasta/vaarallisesta ns. BAT-tekniikkaan (Best Available Technology). Kyseisiä tekijöitä ei voida yhdistää, koska pitkään käytetyn ja parhaana pidetyn prosessin tilalle voidaan kehittää tehokkaampia prosesseja. Pisteytys tulisi siis tehdä eri yksikköprosesseille, jotka on lisätty tietokantaan. Pisteytystä tulisi päivittää säännöllisesti, vähintään aina uusien yksikköprosessien lisäämisen yhteydessä. Pisteytyksen avulla voitaisiin näiden tekijöiden avulla karsia tarkastelusta pois ei-toivotut prosessit.

3.2.2 Monitavoiteoptimointi

Monitavoiteoptimointi (Multi-Criteria Decision Making) menetelmä viittaa päätöksentekoon useiden osittain ristiriitaistenkin attribuuttien tai tavoitteiden vallitessa. Monitavoiteoptimointi voi olla tarpeen, kun ainakin jokin seuraavista kriteereistä täyttyy [Agrawal 1991]:

- Useita huomioon otettavia kriteereitä/tavoitteita
- Kriteerit ovat ristiriidassa; toisen kriteerin parantaminen heikentää toista
- Vertailukelvottomat yksiköt; kriteerien mittaamiseen käytetään eri yksiköitä, eikä niitä näin ollen voi laskea suoraan yhteen
- Tarkoituksena on valita paras olemassa olevista vaihtoehdoista

Monitavoiteoptimointi -menetelmät jaetaan kahteen osaan riippuen siitä, onko kyseessä valinta- vai suunnitteluongelma. Tässä tapauksessa vaihtoehtojen määrä on rajattu ja ennalta määritetty, joten kyseen tulee jokin MADM-menetelmä (Multi-Attribute) [Agrawal 1991]. Erilaisia

MCDM-menetelmiä on suuri määrä, joita on käyty läpi mm. teoksessa [Kahraman 2008].

Artikkelissa [Agrawal 1991] kuvatussa MADM-menetelmässä karsitaan ensin ehdottomasti toimimattomat vaihtoehdot tiettyjen attribuuttien perusteella, jonka jälkeen muodostetaan lista soveltuvista jäljelle jäävistä vaihtoehdoista (short list). Tämän jälkeen jäljelle jääneet vaihtoehdot asetetaan järjestykseen. Järjestyksen määrittelyyn on lukuisia menetelmiä, jotka ratkaisevat paremmuuden hieman eri tavoin. Lupaavimpia on samassa artikkelissa kuvattu TOPSIS-menetelmä (Technique for Order Preference by Similarity to Optimal Solution), joka perustuu siihen että määritetään mahdollisimman lyhyt etäisyys parhaaseen tapaukseen ja mahdollisimman suuri etäisyys huonoimpaan mahdolliseen tapaukseen.

Prosessivalinnassa voitaisiin siis ensin karsia suuresta määrästä yksikköprosesseja tai prosessiketjuja pois ne, jotka eivät tiettyjen numeeristen kriteerien perusteella missään tapauksessa sovellu kyseiseen käyttöön. Tämän tyyppisiä kriteereitä voisivat olla esimerkiksi soveltumattomuus kyseiselle mineraalityypille tai kyseiselle pitoisuudelle. Tämän jälkeen jäljelle jääneet vaihtoehdot voitaisiin pisteyttää tiettyjen kriteerien mukaisesti, jolloin pisteytyksessä parhaiksi nousseet vaihtoehdot voitaisiin mallintaa erikseen prosessisimulaattorissa.

Menetelmän hyvänä puolena voidaan pitää karsintaa, jonka käyttäminen vähentää vaadittavaa laskennan määrää huomattavasti. Myös eri prosessien pisteytyksellä tällä tavoin vaikuttaa järkevältä, kunhan soveltuvuusrajat saadaan järkevästi määritettyä. Samankaltaisen karsinnan käyttäminen olisi toki mahdollista minkä tahansa muunkin päätös- tai optimointimenetelmän kanssa, mikä voisi olla harkinnan arvoista.

Menetelmässä saattaa muodostua kriittiseksi karsinnan toteutus, eli miten ohjelma ottaa huomioon puuttuvan informaation, miten hyvin rajat saadaan määritettyä, ja kuinka lähellä toisiaan eri yksikköprosessien soveltuvuusalueet ovat. Erilaisten attribuuttien vaikutus pitäisi myös tuntea melko tarkasti, ja ne täytyisi kyetä ilmaisemaan jonkinlaisina funktioina, jotta lopullinen järjestys saadaan määritettyä. Kuten päätöspuun tapauksessa, yksikköprosessiketjujen muodostaminen saattaa osoittautua haastavaksi. Tästä toki päästäisiin eroon sillä, että käsiteltäisiin prosessiketjuja, mutta tällöin uusien yksikköprosessien lisääminen olisi työlästä. Mahdollista olisi myös karsia liuotusvaiheen yksikköprosesseja ja määrittää näiden paremmuus, sillä liuotusvaiheen prosessivalinta rajaa huomattavasti seuraavien yksikköprosessien vaihtoehtojen määrää.

Pisteytysmallin luomisessa on haasteellista saada aikaiseksi malli, jossa eri parametreilla on todellisuutta vastaavat painoarvot. Painoarvojen suuruuksilla on suuri vaikutus lopputulokseen, joten niiden tulisi olla

mahdollisimman todenmukaiset. Painoarvot saatetaan joutua määrittämään erikseen kullekin metallille/malmityypille, sillä eri prosesseissa korostuvat eri tekijät. Joissain tapauksissa voisi olla tarpeen, että työkalun käyttäjä pystyisi itse määrittämään painokertoimet. Kaikki parametrit eivät kuitenkaan voi olla muutettavissa, muuten kaksi eri käyttäjää eivät koskaan saisi samoilla lähtöarvoilla samaa tulosta. Pisteytysmallin käyttämisessä on lisäksi huomioitava, että malli tulisi luoda siten, että eri pisteytettävät parametrit eivät kumoa toisiaan. Eli kaikkien termien tulisi olla positiivisia, sekä samassa suuruusluokassa, esim. 0-1.

Jonkinlaisen herkkyyksianalyysin (sensitivity analysis) käyttö voisi olla järkevää, jotta saataisiin selville, nouseeko jokin tai nousevatko jotkin prosessit huomattavasti muita paremmiksi. Lisäksi saataisiin selville nouseeko jokin tekijä dominoivaksi, eli jonkin tietyn kriteerin paremmuus vaikuttaa ratkaisevasti lopputulokseen, mikä ei ole toivottavaa.

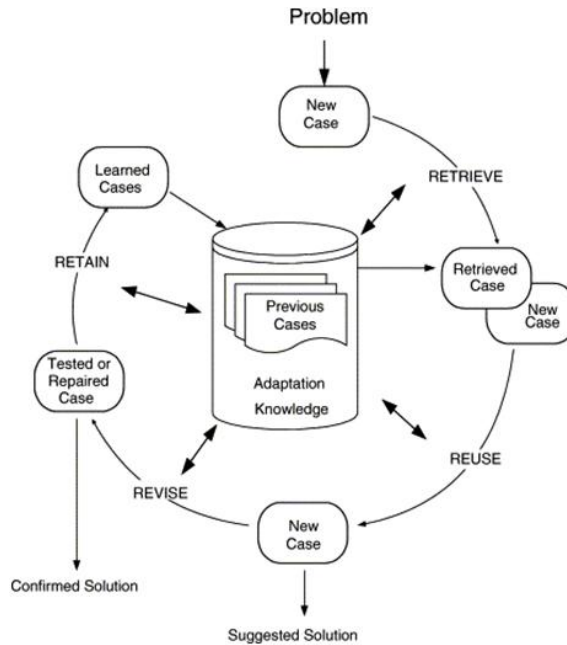
3.2.3 Tapauspäättely

Tapauspäättelyn (Case Based Reasoning) toiminta eroaa huomattavasti edellä kuvatuista päätösmenetelmistä. Menetelmän ajatus on verrata tutkittavaa tietoa tietokannassa olevaan samankaltaiseen tietoon. Tällöin erilaisten muuttujien vaikutusta ei tarvitse arvioida funktioilla. Tällainen päätöksenteko vastaa jossain määrin myös ihmisen luontaista päätöksentekoa. [Pal 2004]

Tapauspäättelyn toimintavaiheita on esitetty kuvassa 5. Jako eri vaiheisiin on eri lähteissä hieman erilainen, mutta tässä esitystavassa huomionarvoista on se, että uusien tapausten ”oppiminen” on yksi kiintä osa menetelmän toimintaa. Menetelmän neljä vaihetta ovat lähimmän vastaavan tapauksen haku tietokannasta, tietokannasta löytyneen lähimmän tapauksen datan vertaaminen, ehdotetun ratkaisun täydentäminen ja hyödyllisen tiedon tallennus tulevia tietokantavertailuja varten.

Kun tunnetaan historiallinen data jostakin asiasta, voidaan muutaman tunnetun muuttujan perusteella ennustaa muiden muuttujien arvot olettamalla, että muuttujien väliset riippuvuussuhteet ovat jossain määrin samankaltaiset kuin jo tunnetuilla riittävän suurella määrällä tapauksia. Toisin kuin tietokantahauissa, joissa on tietty parametrin arvo kriteerinä, tapauspäättelyssä on oltava osittaiset vastaavuudet huomioiva haku, koska täysin vastaavaa tapausta ei todennäköisesti löydy tietokannasta. Saatavan vastauksen laatu riippuu paljon haussa käytetystä vastaavuuksimäärittelystä. Samankaltaisuuden suuruus on myös tärkeä tieto, sillä jos lähinkin samankaltainen on hyvin erilainen, on myös tämä arvokasta tietoa.

Samankaltaisuutta voidaan arvioida joko laskennallisella samankaltaisuudella tai esittäväällä samankaltaisuudella.



Kuva 5 Tapauspäättelyn toimintaperiaate [Vonga 2002].

Laskennallisella samankaltaisuudella tarkoitetaan samankaltaisuuden ratkaisemista tietyn vastaavuusfunktion arvon perusteella. Funktion muodolla on siis suuri merkitys. Sen pitäisi kohdella tasavertaisesti kaikkia tapauksia. Yksi mahdollinen keino on verrata eri parametrien samankaltaisuutta ja määrittää kuinka suuri osa tekijöistä on samankaltaisia [Pal 2004]:

$$Samankaltaisuus = \frac{vastaavat}{vastaavat + eroavat} \quad (1)$$

Esittäväällä samankaltaisuudella tarkoitetaan puolestaan sitä, että eri tapaukset (case) indeksoidaan ja viereisiä tapauksia pidetään aina lähimmäksi vastaavina. Käytännössä suurin painoarvo on siis tapausten järjestyksellä, joka ratkaisee tässä tapauksessa samankaltaisuuden. [Roshchin 2009] Tämän tyyppisen samankaltaisuusmäärittelyn käyttö ei tässä yhteydessä vaikuta perustellulta.

Tapauspäättelyn toiminnan kannalta tietokannan toimivuus on tärkeää. Tärkeimmät tekijät tietokannan toimivuuden kannalta ovat tietokannan rakenne ja tapauksen esitystapa, organisointiin käytetty tallennusmuoto, sekä tapauksen yksilöinnin mahdollistava indeksoinnin valinta. [Pal 2004] Tietokantaan lisättävät tapaukset pääsääntöisesti tarkentavat menetelmän toimintaa. Tapauksista voidaan lisätä joko ratkaistava ongelma, sen ratkaisu tai lopputulos. [Pal 2004]

Huomattavaa tapauspäättelyn käytössä on se, että sen avulla tehtävät päätökset perustuvat aina jo olemassa oleviin tietoihin. Eli valintoja voidaan tehdä ainoastaan niistä yksikköprosesseista, jotka tietokantaan on lisätty. Jos tietokannassa on jollakin malmilla ainoastaan yksi käytössä oleva prosessi, ei malli kykene muita tarjoamaan prosessivaihtoehtoja (riippuen toki myös käytetystä samankaltaisuusmäärittelystä). Malliin tulisi olla mahdollista helposti lisätä myöhemmin uusia yksikköprosessivaihtoehtoja, jotta mallin käytettävyys olisi hyvä jatkossakin. Eräs keskeinen asia työkalun toiminnassa tulisi olla se, että sen avulla käyttäjä saisi ehdotuksia myös muista prosesseista, kuin mitä itse tulee suoralta kädeltä ajatelleeksi. Tämä edellyttää kuitenkin sitä, että tietokannassa tulisi olla myös muita toimivaksi havaittuja prosesseja, vaikka näitä ei ikinä täydessä mittakaavassa olisi vielä käytettykään. Muussa tapauksessa saattaa käydä niin, että työkalu ehdottaa ainoastaan tiettyä prosessia, jota kyseisen kaltaisella malmilla on aina ennen käytetty, huolimatta siitä että huomattavasti tehokkaampikin toimivaksi havaittu vaihtoehto olisi saatavilla.

Menetelmän toiminta edellyttää, että muuttujien vaikutus on jossain määrin lineaarista ja johdonmukaista. Muussa tapauksessa on riskinä, että ennuste antaa tunnettujen arvojen välisen arvon, millä ei ole mitään tekemistä todellisuuden kannalta. Lisäksi menetelmän käyttö edellyttää, että käytettävissä on dataa laajasti esim. kyseistä mineraalia vastaavista, samankaltaisista mineraaleista, jotta ennusteessa on järkeä. Toisaalta tapauspäättelyn etu on myös se, että se ei luo tietojen perusteella yksinkertaistavia malleja, vaan tiedot säilyvät siinä laajuudessa kuin ne on määritelty. Yksi etu tämänkaltaisessa lähestymistavassa on se, että vastaavuushakuja voidaan tehdä tietokannasta ilman, että kaikki tutkittavat parametrit ovat malmista selvillä. Tällöin menetelmä samalla auttaa valitsemaan tehtäväksi kriittisimmät laboratoriotutkimukset.

Tapauspäättelyllä saattaisi olla järkevintä suorittaa suoraan hakuja toteutetuille yksikköprosessiketjuille, sillä vaihtoehtoisia rinnakkaisia yksikköprosesseja on todennäköisesti tietokannasta löytyvissä vain hyvin rajallinen määrä. On toki myös mahdollista tutkia yksikköprosessien soveltuvuutta vaihe kerrallaan, siten että liuotusvaiheen yksikköprosessin

valinnan jälkeen tutkitaan tapauspäätelyn perusteella mitä yksikköprosesseja vastaaventyypisillä liuoksilla on aiemmin käytetty.

Valintatyökalan tulisi olla oppiva, joten tehtyjen hakujen tuoma lisäinformaatio olisi järkevä tallentua tietokantaan. Malmille laboratoriossa saadut mittaustulokset ja muu informaatio tukisi näin seuraavia vastaavankaltaisia tutkimuksia, edellyttäen että kokeet on tehty standardoidusti. Eri parametrien riippuvuuksista saadaan myös lisätietoa suuremman datajoukon perusteella. Kokeiden tulokset ja muu niihin liittyvä informaatio tulisi tallentaa mahdollisimman standardimuotoisesti, jotta niiden koneellinen tulkinta olisi mahdollista. Tämä luonnollisesti edellyttää mm. yhdenmukaisten mittayksiköiden, merkintätapojen ja koemenetelmien käyttämistä. Mikäli tiedot tehdyistä uusista tutkimuksista saadaan tallennettua tietokantaan, on pidettävä huoli siitä, että tehtyjen tutkimusten onnistuminen ja tarpeellisuus saadaan jollain tavalla arvioitua. Muuten on riskinä, että toistetaan kerrasta toiseen samat virheet.

Lisättäessä tietokantaan tutkimustuloksia, on aina riskinä, että tietokantaan tallentuu ristiriitaista informaatiota, joten tietokanta tulisi olla helposti muokattavissa myös tältä osin. On myös mahdollista, että tietokantaan tallennetaan tapauksia, jotka ovat joiltain osin identtisiä olemassa olevien tapausten kanssa, mutta esimerkiksi käsittävät laajempia mittaustuloksia. Päällekkäisen informaation määrä on järkevä pitää mahdollisimman pienenä, joten ns. turhien tietojen poistamiseen tulisi olla mahdollisuus. Tarpeettomien tapausten poistaminen on mahdollista toteuttaa myös esimerkiksi sumean logiikan avulla automaattisesti. [Agrawal 1991; Pal 2004]

Väitöskirjassa [Seuranen 2006] arvioidaan, että tapauspäätelyn etu on siinä, ettei sitä käytettäessä tarvitse tuntea kaikkien muuttujien vaikutusta prosessiin. Tutkittavan ongelman ei myöskään tarvitse olla täysin yksikäsitteisesti ennalta määritelty, jotta menetelmää voidaan käyttää. Lisäksi etuna on se, että tapauspäätely ei luo tietojen pohjalta yleistäviä malleja, jolloin riskiä tietojen häviämiseen ei ole. Menetelmän antamiin tuloksiin ei kuitenkaan tulisi luottaa sokeasti, sillä vastauksena saadaan ainoastaan annettujen kriteerien perusteella paras vaihtoehto. Samankaltaisuuden määrittelyyn tulisikin olla mahdollista vaikuttaa.

4. Johtopäätökset

Kaikki keinoälytekniikat soveltuvat johonkin tarkoitukseen ja niillä kaikilla on myös joitain rajoitteita. Ennen metodin valintaa onkin syytä kuvata ja rajata päätösongelma riittävän tarkasti, sillä joitain menetelmien rajoitteita ei voida jälkikäteen enää kiertää. Mikään metodi ei voi kerralla ratkaista kaikkea hydrometallurgisen prosessin suunnittelussa eteen tulevia kysymyksiä. Kun valintaongelma ja työkalun käyttökohde on rajattu tarkasti, voidaan rakentaa työkalu, joka auttaa kyseisessä rajatussa päätöstilanteessa optimaalisen hyvin.

Käytännössä kaikki hydrometallurgisen prosessin valinnassa ja prosessiketjun muodostamisessa tarvittava informaatio on saatavissa numeerisessa muodossa, joten sitä voidaan helposti käsitellä erilaisten päätösmetodien avulla. Tarvittavaa informaatiota ovat erilaiset prosessiparametrit sekä prosessien investointi- ja käyttökulut.

Valinnan tekemiseen parhaiten soveltuvan matemaattisen menetelmän valintaan vaikuttaa hyvin monta erityyppistä tekijää. Eri ominaisuuksia painottamalla ja eri lähestymistapaa käyttäen menetelmien keskinäinen paremmuusjärjestys muuttuu. Kukin menetelmä sopii hyvin tarkoitukseensa, mutta voi antaa sille sopimatonta päätösongelmaa ratkottaessa täysin irrelevantin tuloksen. Tärkeintä onkin määritellä valintaongelma sekä toivottu tulos mahdollisimman tarkasti ennen työkalun rakentamisen aloittamista.

Yksi näkökulma menetelmän valintaan on se, että olisi järkevintä valita menetelmä, joka tekee ainoastaan sen, mitä nykyisin olemassa olevilla prosessisimulaattoreilla ei voida tehdä. Käytännössä tämä pitää sisällään karkean prosessien karsinnan, joka vähentäisi työn määrää seuraavassa vaiheessa, jossa mahdolliset prosessiketjut simuloidaan ja ajetaan mahdollisia laboratoriomittakaavan kokeita. Lisäksi työkalun kehittämisen tavoitteena tulisi olla mahdollisimman alhainen manuaalisen työn osuus sekä alhaiset laskentatehovaatimukset.

Menetelmän valintaan vaikuttavat mm. käytettävissä olevat tiedot eri malmeista/mineraaleista ja yksikköprosesseista. Tietokannan rakentamisessa on järkevää pyrkiä käyttämään mahdollisimman pitkälle valmiita

tietokantarakenteita, jotta varsinaisen tietokannan kehittämiseen ei jouduttaisi käyttämään liikaa aikaa ja vaivaa. Järkevintä olisi käyttää mahdollisimman yhteensopivia merkintätapoja ja rakenteita prosessisimulaattorin, eli esimerkiksi HSC Sim -ohjelmiston tietokannan kanssa, jotta tietoja voitaisiin tarvittaessa käyttää hyväksi myös prosessioptimoinnin kannalta.

Päätöksentekoa varten tullaan todennäköisesti tarvitsemaan tietokannat tutkittavista mineraaleista, sekä käytössä olevista yksikköprosesseista rajoitteineen. Mineraali- ja yksikköprosessitietokantojen olisi hyvä olla hyvin samankaltaisia rakenteiltaan, jotta tietokantahakuja pystyttäisiin käyttämään samalla tavoin molemmilla tietokannoilla, sekä mahdollisesti viittamaan suoraan toiseen tietokantaan. Suuren tietomäärän takia tietokantojen pitäminen erillisinä olisi kuitenkin luultavasti järkevää. Tietoja kerätessä olisi syytä merkitä muistiin tarkasti myös lähteet kullekin numeroarvolle, jotta myöhemmässä vaiheessa mahdollisesti virheelliseltä vaikuttavia arvoja olisi helpompi tarkistaa.

Edellä käsitelyjen menetelmien resurssivaatimukset vaihtelevat huomattavasti. Tarkkaa laskentakapasiteetin tarvetta on vaikea määrittellä, sillä menetelmiä on kirjallisuudessa käsitelty hyvin erilaisissa ympäristöissä. Todennäköisesti vähiten laskentakapasiteettia vaatii ehtolausekkeiden käsittely (päättöspuu ja MCDM) ja eniten muurahaisoptimointi ja neuroverkko, joiden laskentatehon tarve kasvaa suoraan suhteessa mallin monimutkaisuuteen. Tapauspäättelyn laskentatehon tarve on todennäköisesti myös melko alhainen, tosin se riippuu paljon käytetystä samankaltaisuuden määrittelystä. Tutkituista menetelmistä monivalintaoptimointi ja tapauspäättely vaikuttavat sopivimmilta sovellettavaksi haluttuun käyttötarkoitukseen.

Mikäli työkalun kehittämistä varten on saatavissa tarpeeksi tietoa tapauspäättelyn edellyttämän tietokannan rakentamiseksi, vaikuttaa sen käyttäminen kaikista perustelluimmalta vaihtoehdolta. Tällöin päätöksentekoa varten ei tarvitse mallintaa prosessin parametrien välisiä riippuvuuksia, vaan tieto ja päätökset perustuvat todelliseen dataan. Mallin luomisesta aiheutuva yksinkertaistus ei siten hukkaa tietoa, vaan kaikki tieto on käytettävissä siinä tarkkuudessa kuin se on tietokantaan syötetty.

Tutkimuksessa havaittiin, että prosessioptimointiin soveltuvia ohjelmistoja on olemassa lukuisia, mutta hydrometallurgisen prosessiketjun suunnitteluun ja yksittäisen yksikköprosessin valintaan suuntautuvia ei lainkaan.

5. Yhteenveto

Tässä tutkimuksessa tarkasteltiin erilaisten keinoälymenetelmien käytettävyyttä hydrometallurgisen yksikköprosessin valinnassa. Tutkimuksen tavoitteena oli selvittää, sopisiko jokin keinoälymenetelmä käytettäväksi päätöksenteon tukena valittaessa matalapitoiselle tai muuten vaikeasti hyödynnettävissä olevalle mineraalille hydrometallurgista valmistusprosessia. Keinoälymenetelmistä tarkasteltiin optimointi- ja päätös menetelmiä. Ensimmäisistä tarkasteltiin muurahaisoptimointia, geneettistä algoritmia ja neuroverkkoa. Jälkimmäisistä tarkasteltiin päätöspuuta, monitavoiteoptimointia ja tapauspäättelyä.

Osaa optimointimenetelmistä voitaisiin käyttää apuna hydrometallurgisen yksikköprosessin valinnassa. Haasteena on kuitenkin se, että prosessi pitäisi pystyä kuvaamaan funktion muodossa. Tällöin haasteellista on kuvata realistisesti esimerkiksi prosessin luotettavuus tai turvallisuus. Lisäksi useimmat optimointimenetelmät eivät ole erityisen interaktiivisia, eli käyttäjä voi vaikuttaa vain vähän siihen, mitä optimointi antaa tulokseksi. Tästä syystä optimointimenetelmien käyttö voi johtaa mahdottomiin tai huonosti toimiviin vaihtoehtoihin. Optimointimenetelmiä käytettäessä käyttäjän tulisi itse rajata vaihtoehdot ja ratkaisun suuruusluokka, joka huonosti tehtynä voi vaikuttaa lopputulokseen ratkaisevasti. Tällöin käyttäjän omat mieltymykset näkyvät myös selvästi lopputuloksissa.

Päätös menetelmistä päätöspuu vaikutti epäsovimmalta haluttuun tarkoitukseen, sillä eri yksikköprosessit eivät ole toisiaan poissulkevia. Ongelmaksi saattaisi myös muodostua uusien yksikköprosessien lisääminen päätösmalliin jälkikäteen. Mahdollisesti koko puu pitäisi rakentaa uudelleen uuden yksikköprosessin lisäämisen yhteydessä.

Sekä monitavoiteoptimointi että tapauspäättely vaikuttavat käyttökelpoisilta päätös menetelmiltä haluttuun tarkoitukseen. Monitavoiteoptimoinnin hyvä puoli on karsinta, jonka käyttäminen vähentää vaadittavaa laskennan määrää huomattavasti. Myös eri prosessien pisteytys sen avulla vaikuttaa järkevältä, jos soveltuvuusrajat saadaan järkevästi määritettyä. Samankaltaisen karsinnan käyttäminen olisi toki mahdollista

minkä tahansa muunkin päätös- tai optimointimenetelmän kanssa, mikä voisi olla harkinnan arvoista. Menetelmässä haasteellisinta on karsinnan toteutus, eli miten ohjelma ottaa huomioon puuttuvan informaation, miten hyvin rajat saadaan määriteltyä, ja kuinka lähellä toisiaan eri yksikköprosessien soveltuvuusalueet ovat. Erilaisten attribuuttien vaikutus pitäisi myös tuntea melko tarkasti, ja ne täytyisi kyetä ilmaisemaan jonkinlaisina funktioina, jotta lopullinen järjestys saadaan määritettyä.

Mikäli työkalun kehittämistä varten on saatavissa tarpeeksi tietoa tapauspäättelyn edellyttämän tietokannan rakentamiseksi, vaikuttaa tapauspäättelyn käyttäminen sopivimmalta keinoälymenetelmältä haluttuun tarkoitukseen. Tapauspäättelyssä päätöksentekoa varten ei tarvitse mallintaa prosessin parametrien välisiä riippuvuuksia, vaan tieto ja päätökset perustuvat todelliseen dataan. Mallin luomisesta aiheutuva yksinkertaistus ei siten hukkaa tietoa, vaan kaikki tieto on käytettävissä siinä tarkkuudessa kuin se on tietokantaan syötetty.

Kirjallisuusviitteet

Agrawal, V. P., Kohli, V., Gupta, S. (1991). Computer aided robot selection: The multiple attribute decision making approach. *International Journal of Production Research* 29(8): s. 1629-1644.

Dorigo, M., Stützle, T. (2004). *Ant Colony Optimization*, MIT Press 320 s.

Ghiassi, M., Burnley, C. (2010). Measuring effectiveness of a dynamic artificial network algorithm for classification problems. *Expert Systems with Applications* 37: s. 3118-3128.

Kahraman, C. (2008). *Fuzzy multi-criteria decision making: theory and applications with recent developments*, Springer. 591 s.

Lahiri, S. K., Ghanta, K.C., (2009). Genetic algorithm tuning improves artificial neural network models. *Hydrocarbon Processing* 88(1): s. 73-82.

Mjalli, F. S., l-Asheh, S., Alfadala, H.E. (2007). Use of artificial neural network black-box modeling for the prediction of wastewater treatment plants performance. *Journal of Environmental Management* 83: s. 329-338.

Outotec Oyj. (2010). *Sim – Process Simulation*. Viitattu 29.04.2010, saatavilla <http://www.outotec.com/pages/Page.aspx?id=35374&epslanguage=EN>.

Pajula, E. (2006). *Tehdassuunnittelun raporttisarja No. 94: Studies on computer-aided process and equipment design in process industry*. Kemiaan laitetekniikan ja tehdassuunnittelun laboratorio. Espoo, Teknillinen korkeakoulu s.

Pajula, E., Seuranen, T., Koiranen, T., Hurme, M. (2001). Synthesis of separation process by using case-based reasoning. *Computers and Chemical Engineering* 25: s. 775-782.

Pal, S., Shiu, S. (2004). *Foundations of Soft Case-Based Reasoning*, John Wiley & Sons. 298 s.

Rademan, J. A. M., Moolman, D.W., Lorenzen, & L., v. D., J.S.J., Aldrich, C. (1996). Neural net based knowledge extraction from the historical data of an industrial leaching process. *Hydrometallurgy* 43: s. 95-116.

Rao, S. S. (2009). *Engineering Optimization - Theory and Practice*, John Wiley & Sons. s.

Reeves, C. R., Rowe, J.E. (2002). *Genetic Algorithms - Principles and Perspectives : A Guide to GA Theory*, Kluwer Academic Publishers 345 s.

Roshchin, G. (2009). Similarity analysis – A tool for designing flotation tests in greenfield flowsheet development, Lappeenranta University of Technology s.

Sage, A. P., Armstrong, J. E. Jr. (2000). *Introduction: Types of Decisions*. Teoksessa: *Introduction to Systems Engineering*. John Wiley & Sons, s. 547.

Seuranen, T. (2006). *Tehdassuunnittelun raporttisarja No. 90: Studies on computer-aided conceptual process design*. Kemiaan laitetekniikan ja tehdassuunnittelun laboratorio. Espoo, Teknillinen korkeakoulu s.

Vonga, C. M., Leungb, T.P., Wong, P.K: (2002). Case-based reasoning and adaptation in hydraulic production machine design. *Engineering Applications of Artificial Intelligence* 15: s. s. 567-585.

Raportissa pohditaan erilaisten keinoölymenetelmien käytettävyyttä hydrometallurgisen yksikköprosessin valinnassa. Tutkimuksessa selvitettiin, sopisiko jokin keinoölymenetelmistä käytettäväksi päätöksenteon tukena valittaessa matalapitoiselle tai muuten vaikeasti hyödynnettävissä olevalle mineraalille hydrometallurgista valmistusprosessia. Optimointi- ja päätösmenetelmistä tarkasteltiin seuraavia: muurahaisoptimointia, geneettistä algoritmia, neuroverkkoa, päätöspuuta, monitavoiteoptimointia ja tapauspäättelyä.



ISBN 978-952-60-4215-2 (pdf)
ISBN 978-952-60-4214-5
ISSN-L 1799-487X
ISSN 1799-4888 (pdf)
ISSN 1799-487X

Aalto-yliopisto
Kemian tekniikan korkeakoulu
Materiaalitekniikan laitos
www.aalto.fi

**KAUPPA +
TALOUS**

**TAIDE +
MUOTOILU +
ARKKITEHTUURI**

**TIEDE +
TEKNOLOGIA**

CROSSOVER

VÄITÖSKIRJAT