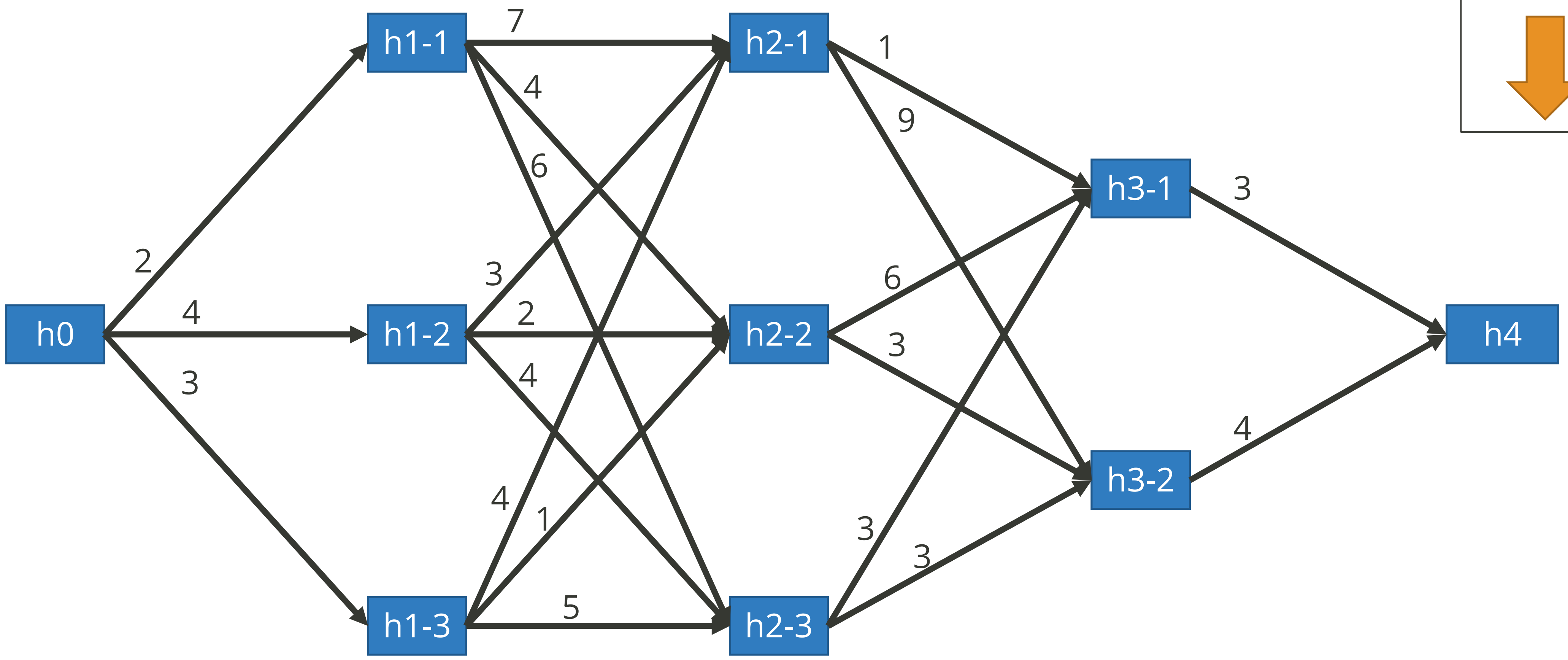
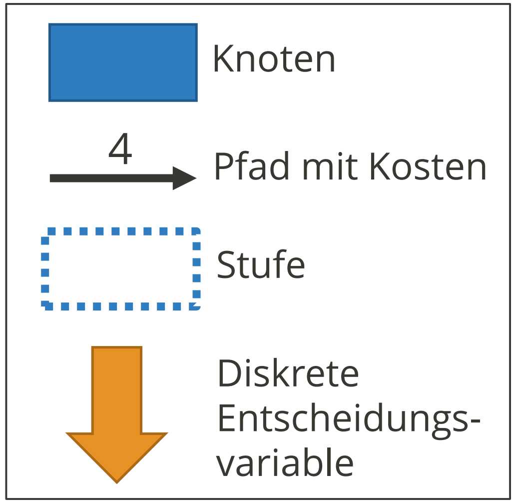
Dr.rer.nat. Valentin Khaydarov
Professur für Prozessleittechnik & Arbeitsgruppe Systemverfahrenstechnik

Mehrdimensionale Optimierung
Dynamische Optimierung

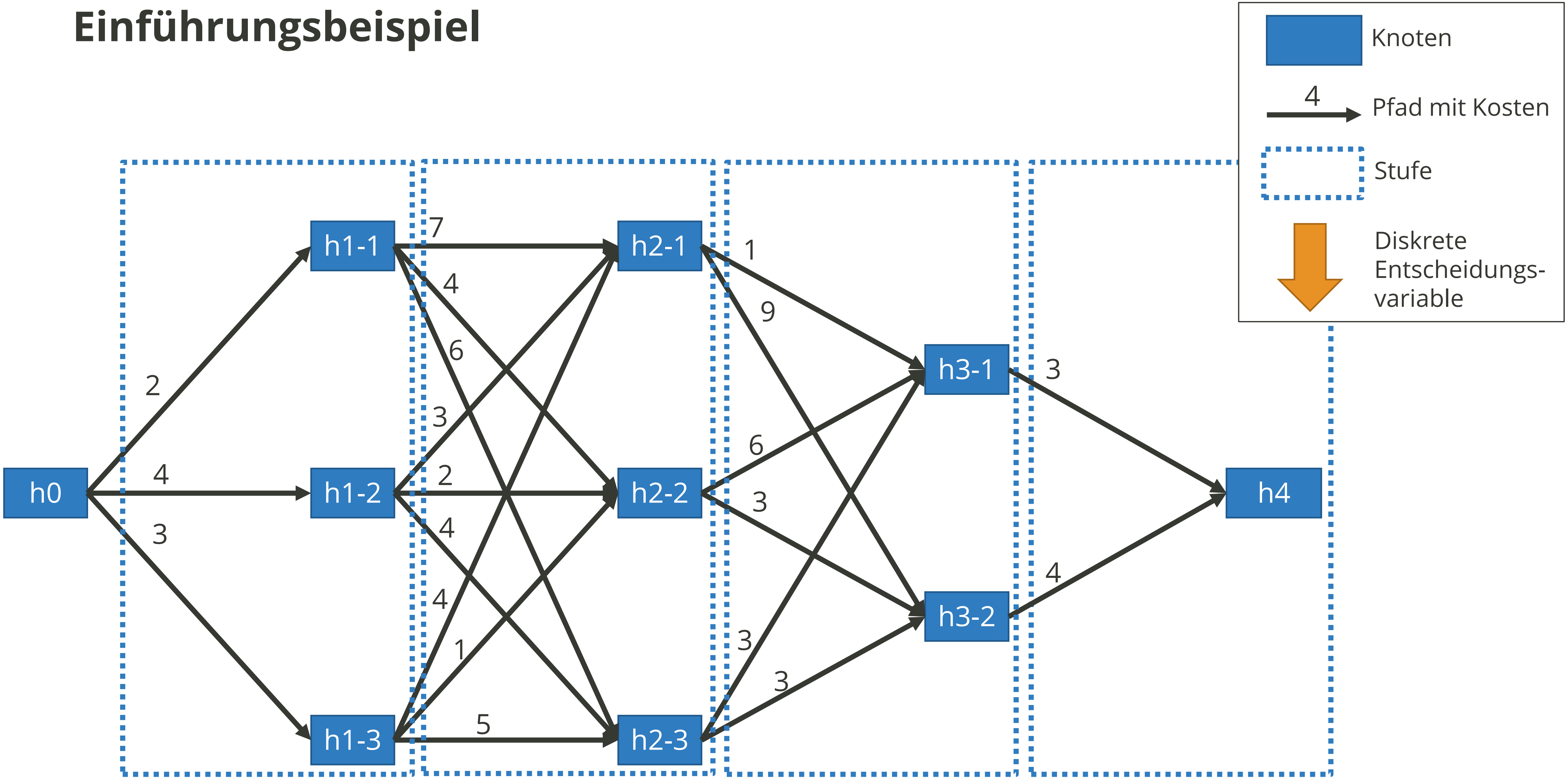
Vorlesung 6, Lehrveranstaltung Systemverfahrenstechnik, 2020

Einführungsbeispiel

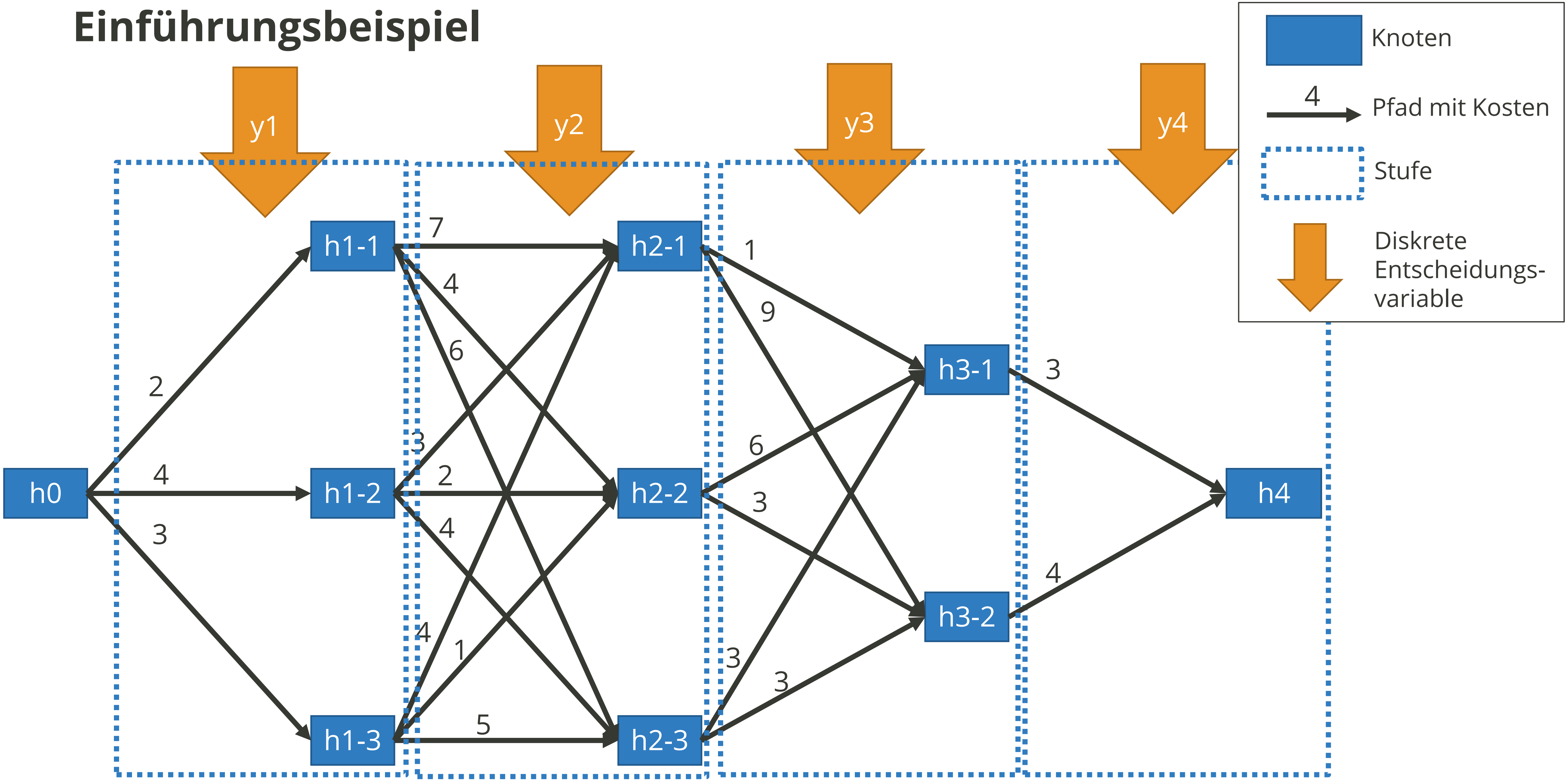




Einführungsbeispiel

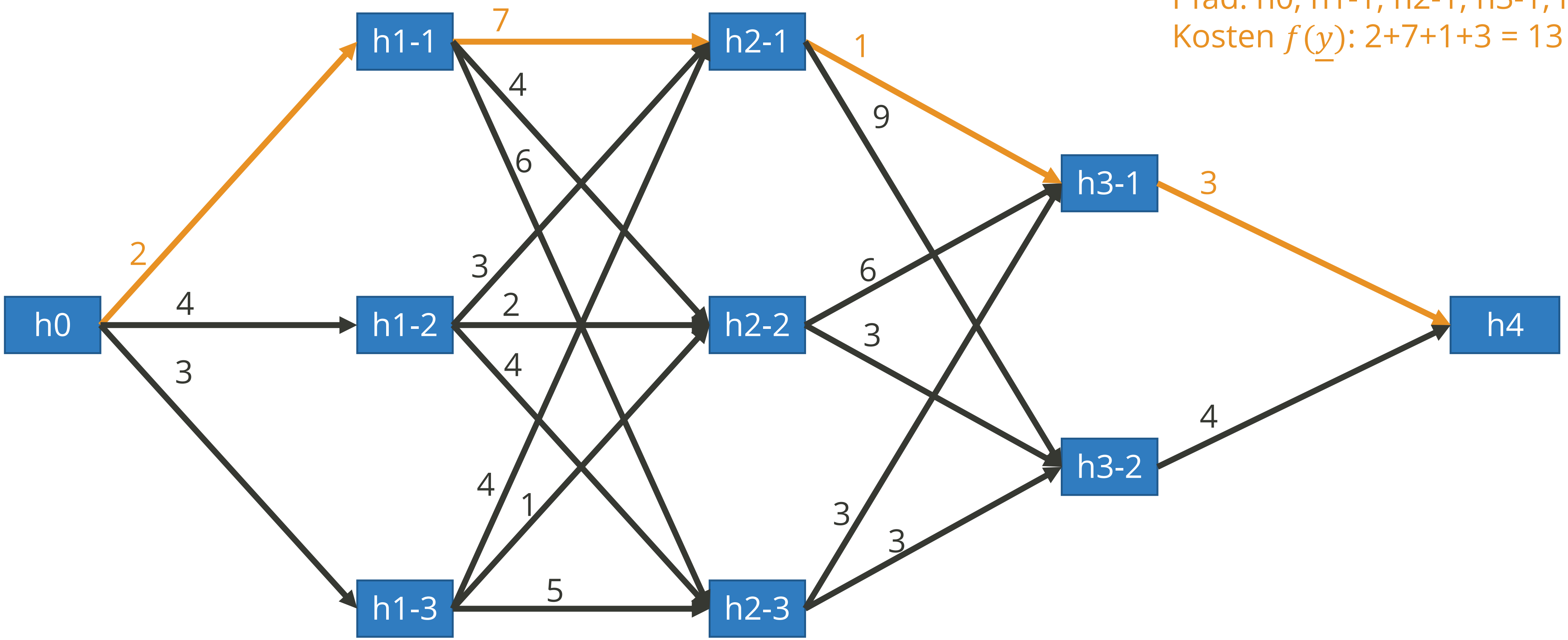


Einführungsbeispiel



Einführungsbeispiel

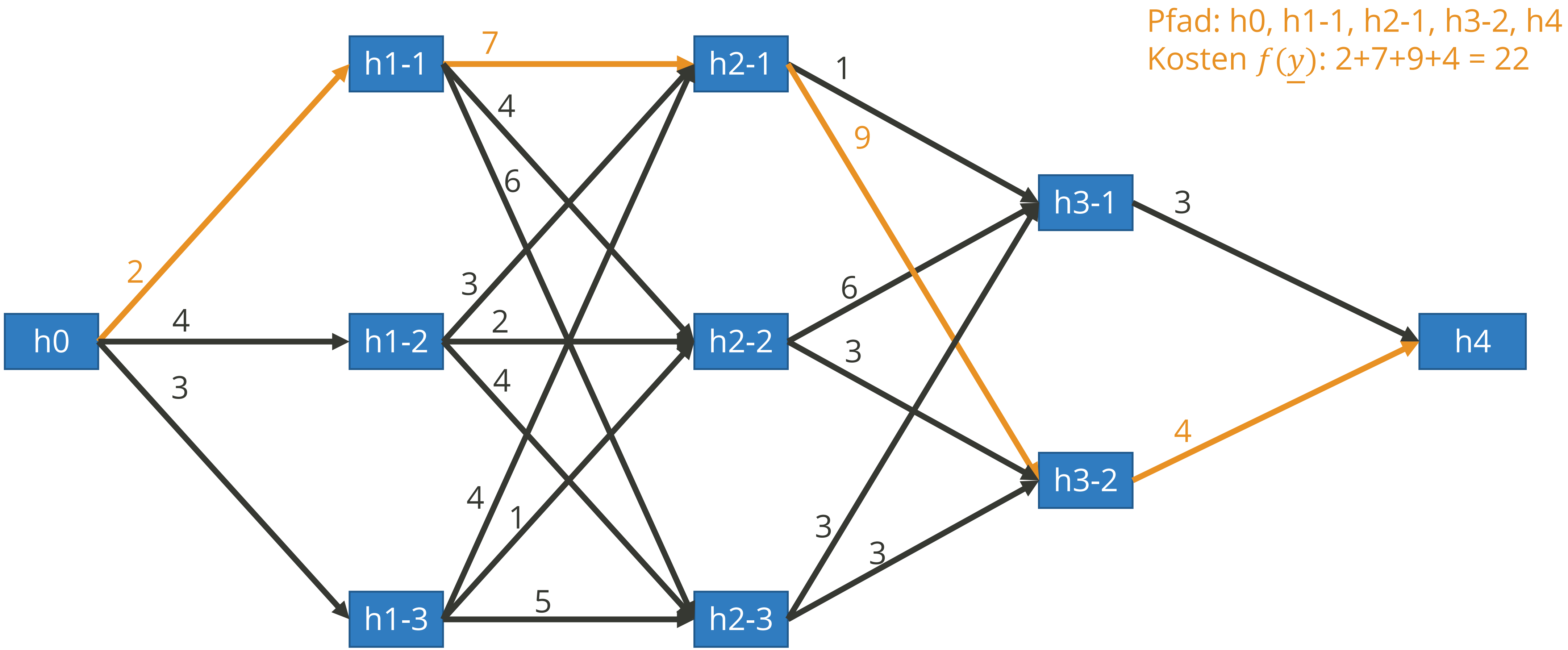
Brute-Force-Ansatz: Berechnung aller möglichen Pfade



Pfad: h0, h1-1, h2-1, h3-1, h4
Kosten $f(\underline{y})$: 2+7+1+3 = 13

Einführungsbeispiel

Brute-Force-Ansatz: Berechnung aller möglichen Pfade



Einführungsbeispiel

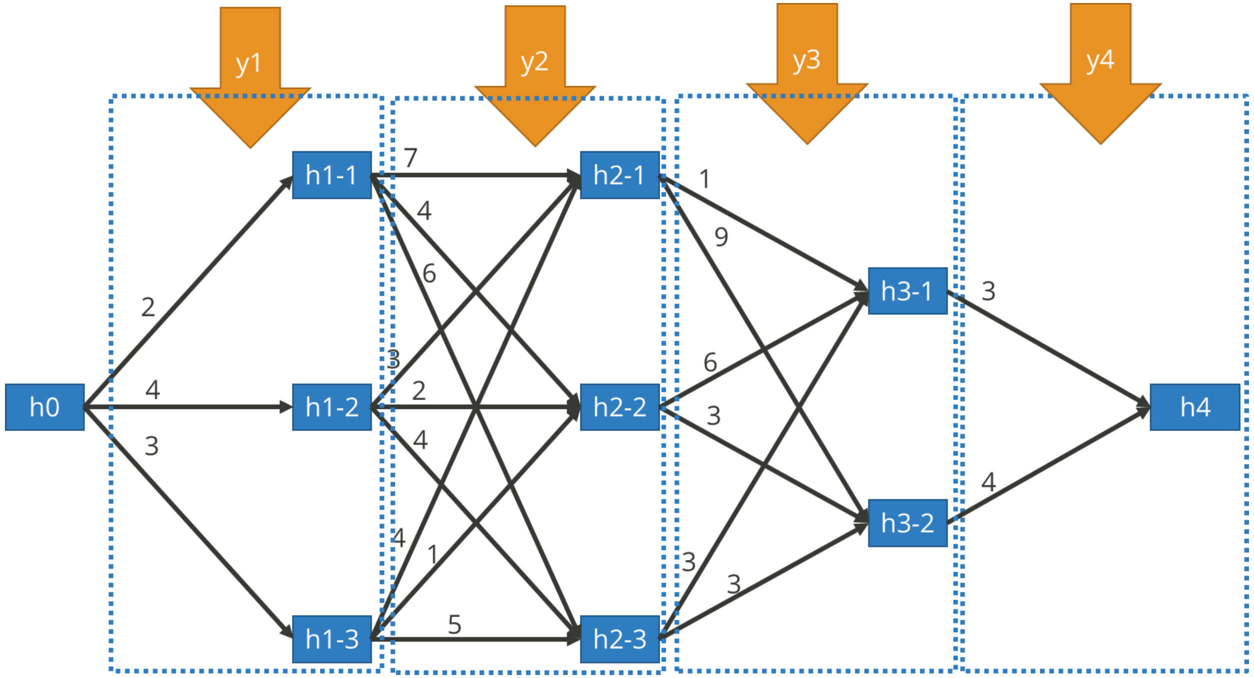
Brute-Force-Ansatz: Berechnung aller möglichen Pfade

Mögliche Pfade im Einführungsbeispiel:

$$3 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 18$$

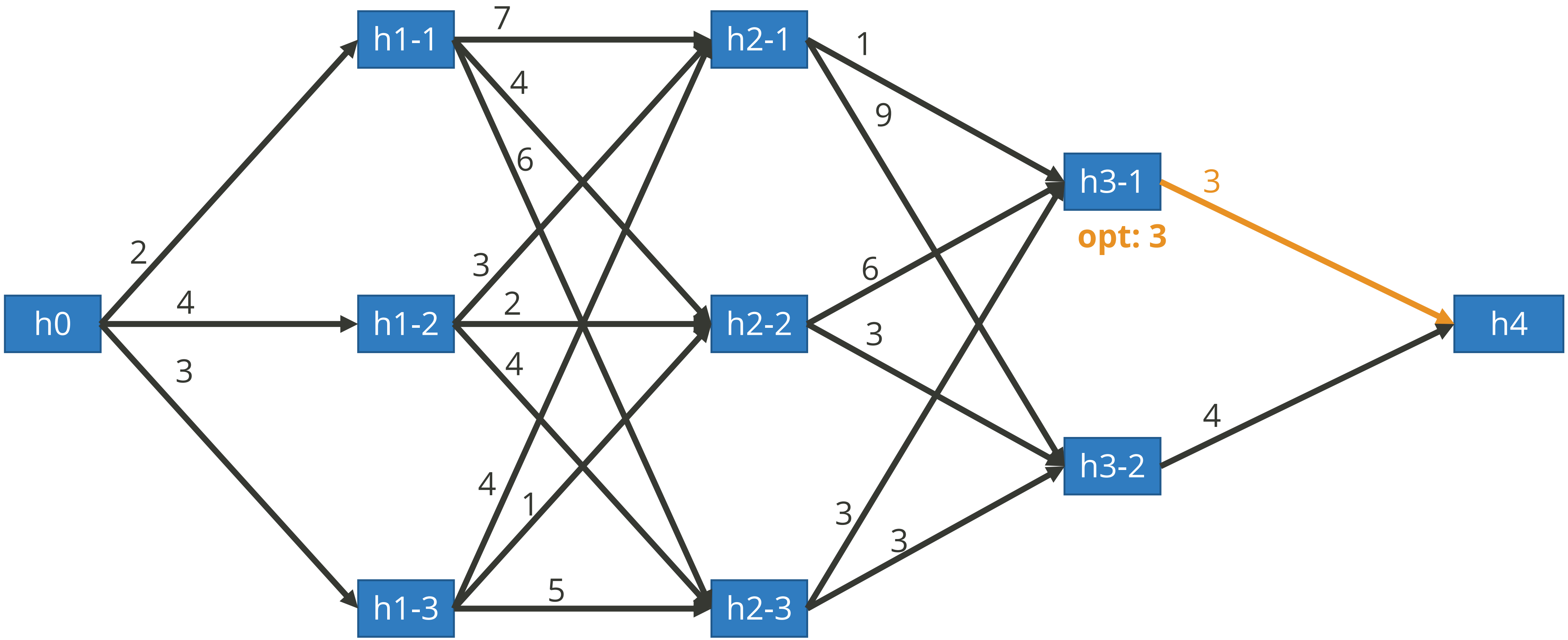
→ Mit wachsender Anzahl der Zustände wächst die Anzahl der Pfade sehr schnell, damit wird eine Brute-Force sehr schnell ineffizient.

→ Optimierungsverfahren verwenden!



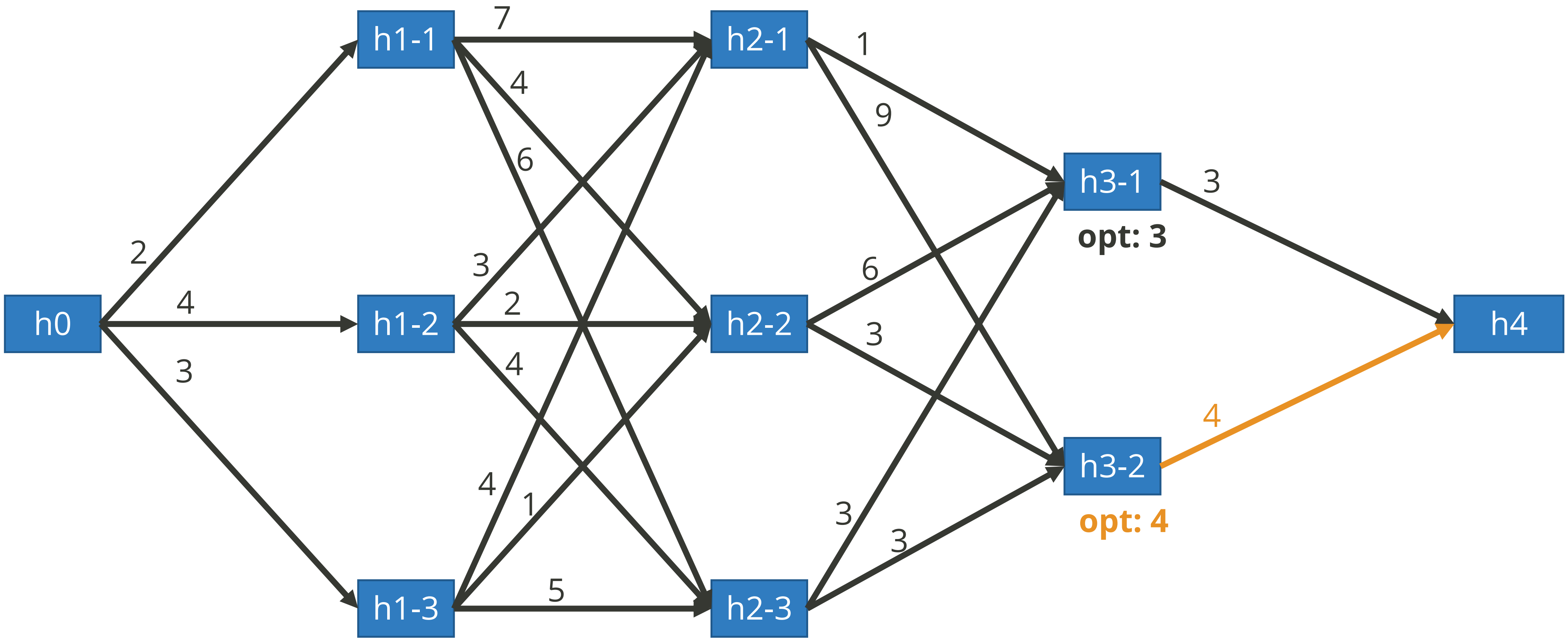
Einführungsbeispiel

Dynamische Optimierung: Rekursive Berechnung optimaler Lösung



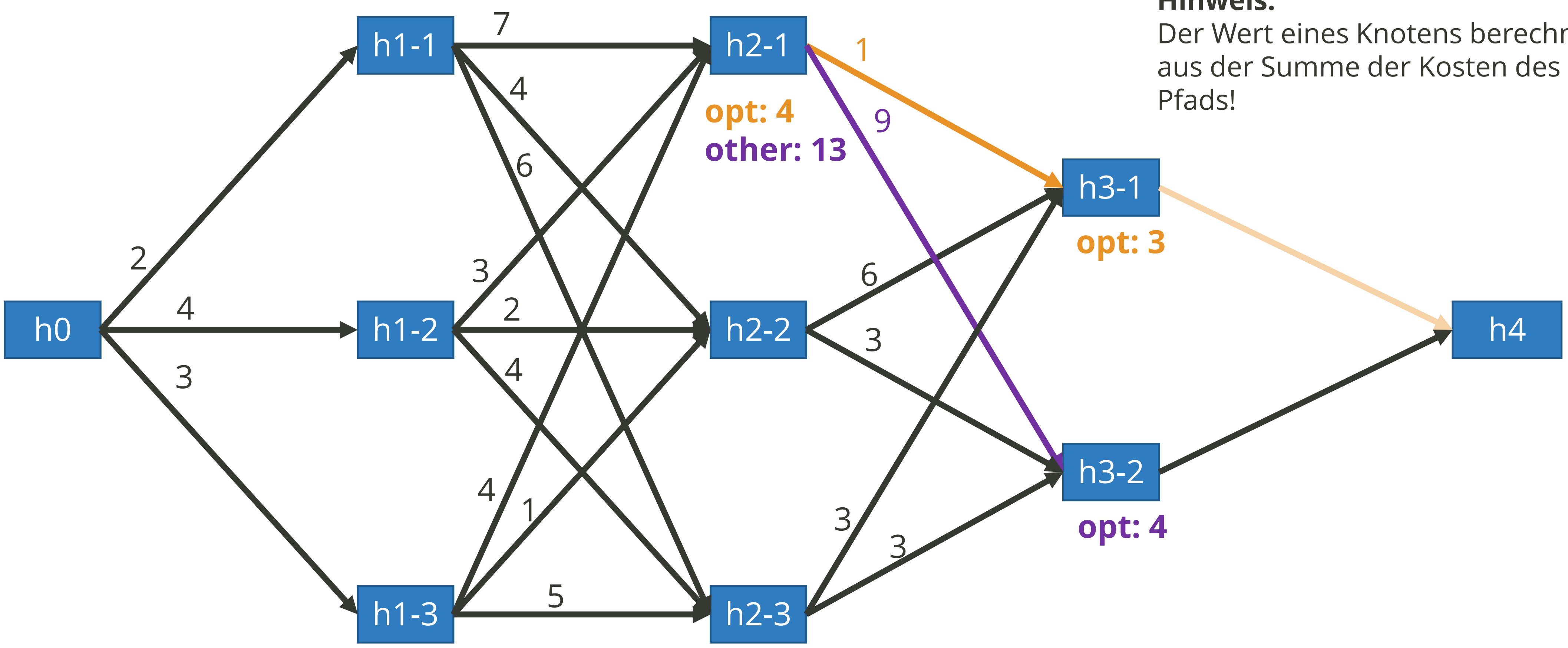
Einführungsbeispiel

Dynamische Optimierung: Rekursive Berechnung optimaler Lösung



Einführungsbeispiel

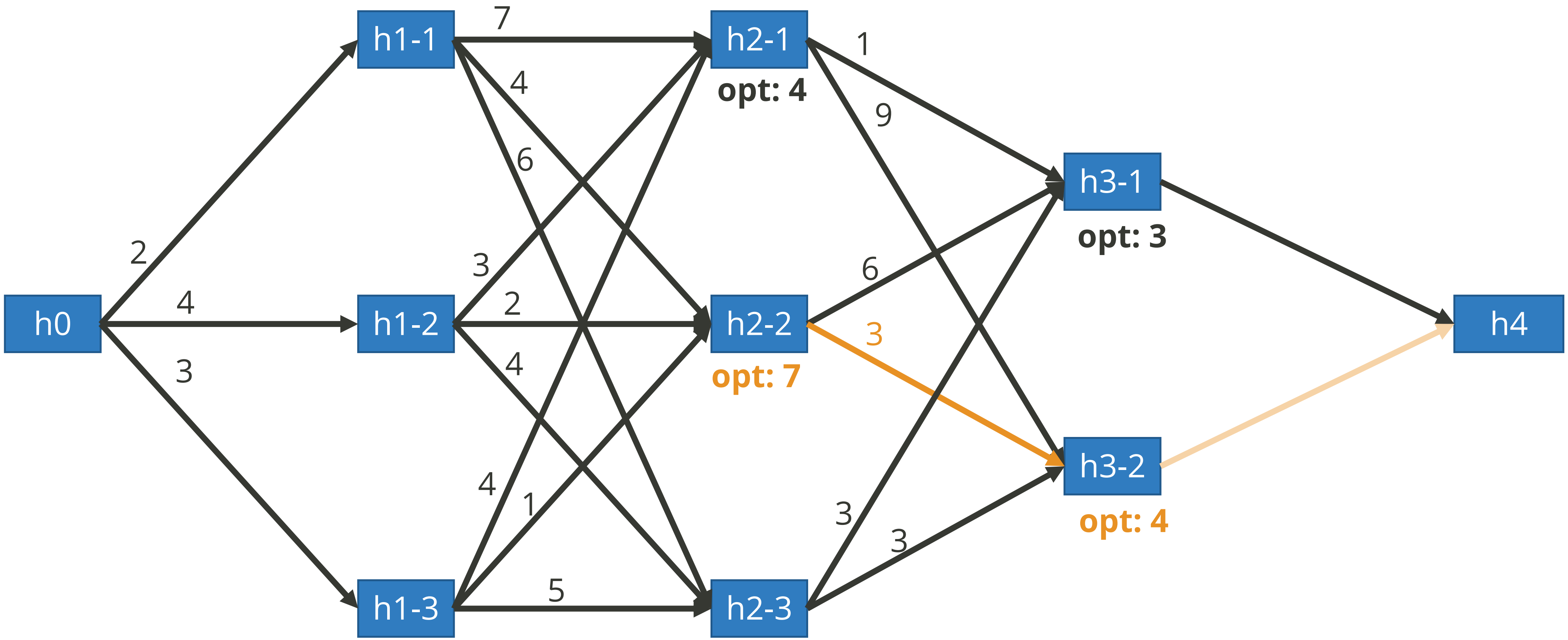
Dynamische Optimierung: Rekursive Berechnung optimaler Lösung



Hinweis:
Der Wert eines Knotens berechnet sich aus der Summe der Kosten des optimalen Pfads!

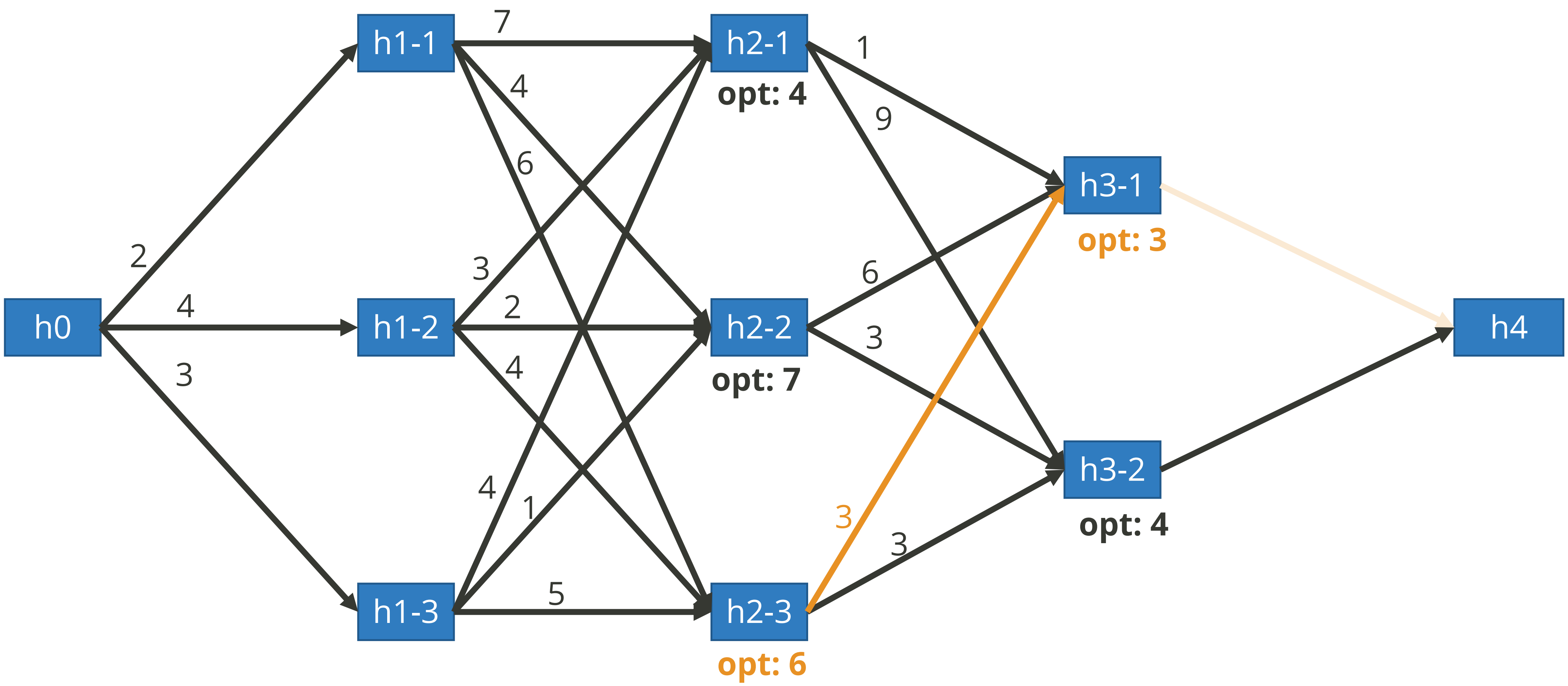
Einführungsbeispiel

Dynamische Optimierung: Rekursive Berechnung optimaler Lösung



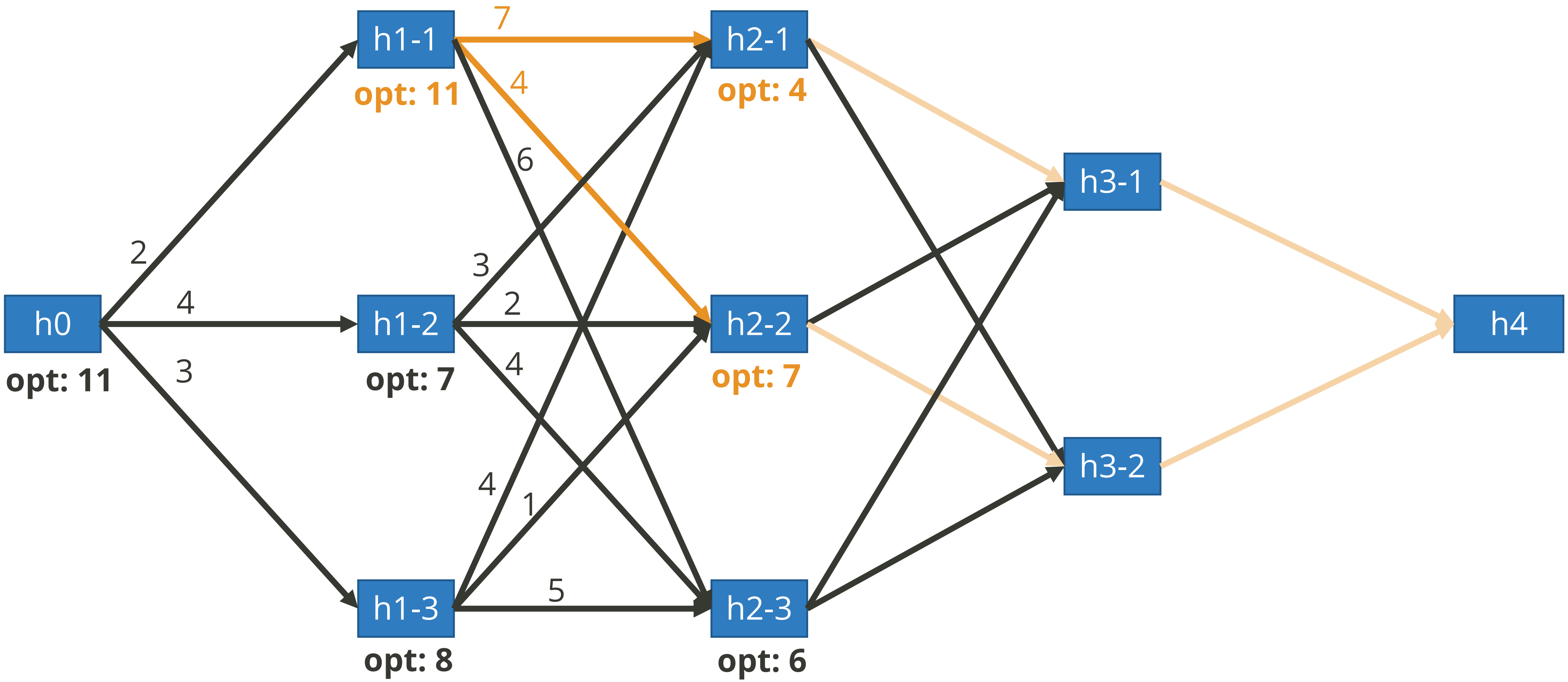
Einführungsbeispiel

Dynamische Optimierung: Rekursive Berechnung optimaler Lösung

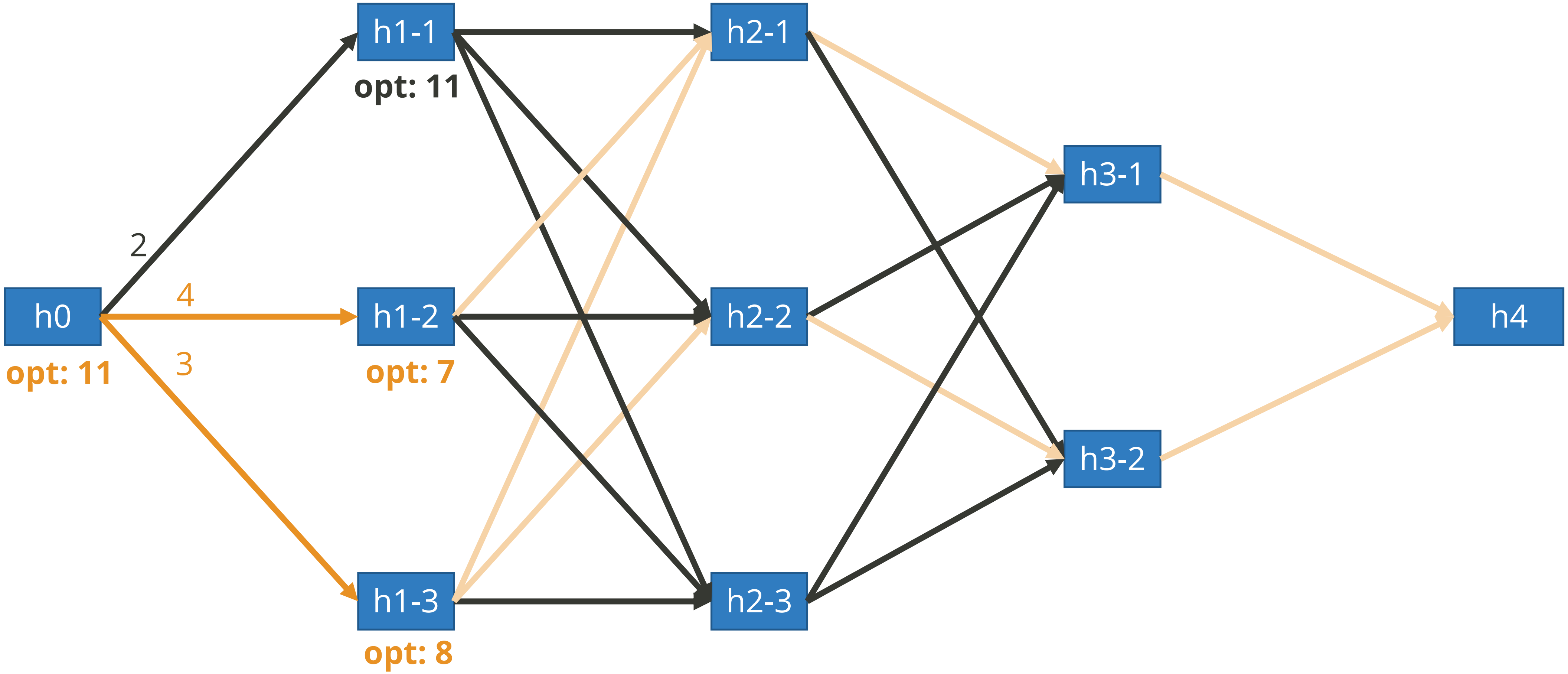


Einführungsbeispiel

Dynamische Optimierung: Rekursive Berechnung optimaler Lösung



Einführungsbeispiel
Dynamische Optimierung: Rekursive Berechnung optimaler Lösung



Dynamische Optimierung (engl.: Dynamic Programming)

- **Dynamische Optimierung** eignet sich für die Lösung von **mehrstufigen Entscheidungsprozessen**, bei denen Entscheidungen aufeinander aufbauen.
- **Dekomposition** eines **hochdimensionalen** in mehrere **niedrigdimensionale** (häufig: eindimensionale) Optimierungsprobleme
  - z.B.: NC-Variablen-Problem wird transformiert in NC 1-Variablen-Probleme (NC=Anzahl der Stufen)
  - 1-Variablen-Probleme sind in der Regel einfacher lösbar
    → Die 1-Variablen-Probleme können nichtlineare Optimierungsprobleme o.ä. sein
- Lösung von **sequentiellen Entscheidungsprozessen…**
  → Zeitlich
  → Räumlich
  → Über verschiedene Ebenen eines Systems
  → …
  …durch Zerlegung komplexer Probleme in einfachere Unterprobleme, wenn sich eine optimale Lösung aus optimalen Lösungen von Teilproblemen zusammensetzen lässt. **(Optimalitätsprinzip von Bellmann)**

Klassische Optimierung <-> Dynamische Optimierung

Mehrdimensionale Optimierung

→ 1 mehrdimensionales Optimierungsproblem

$$Z_{opt} = \min_{\underline{y}} Z(h_0, \underline{y})$$

Dynamische Optimierung

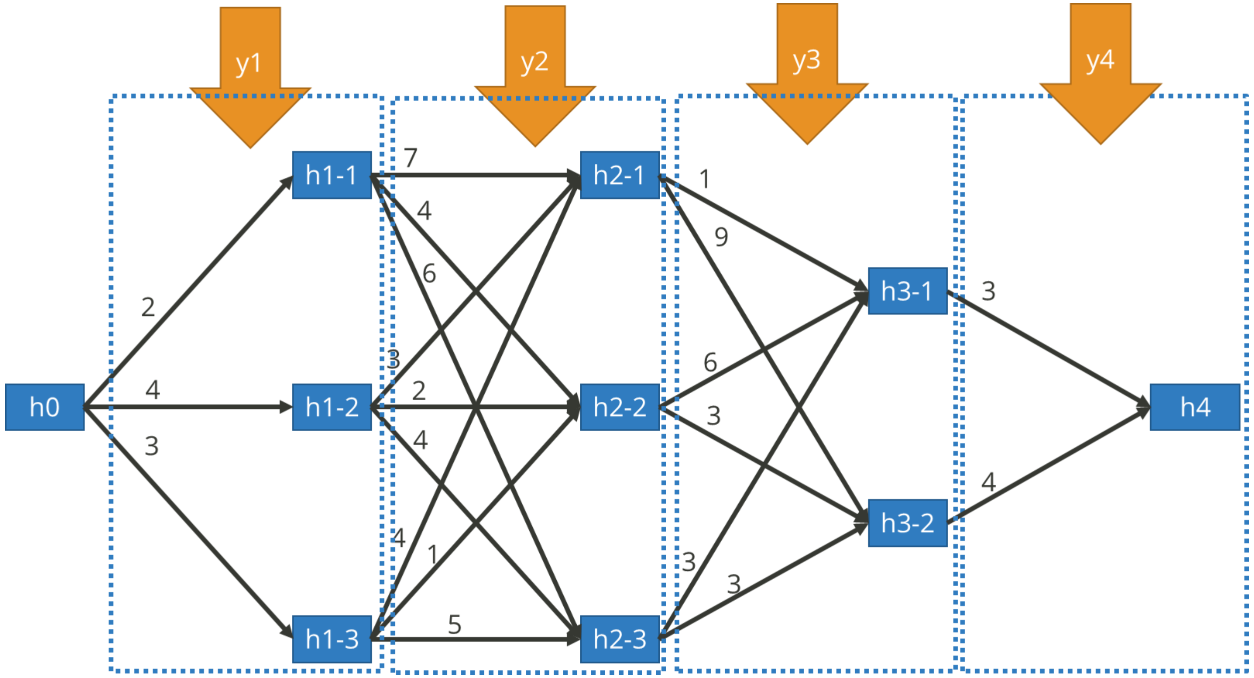
→ Sequenz von eindimensionalen Optimierungsproblemen

$$Z_{opt}^{(1)} = \min_{y_4} Z(h_3\ , y_4)$$

$$Z_{opt}^{(2)} = \min_{y_3} \left[Z(h_2, y_3) + Z_{opt}^{(1)} \right]$$

$$Z_{opt}^{(3)} = \min_{y_2} \left[Z(h_1, y_2) + Z_{opt}^{(2)} \right]$$

$$Z_{opt}^{(4)} = \min_{y_1} \left[Z(h_0, y_1) + Z_{opt}^{(3)} \right]$$



Klassische Optimierung <-> Dynamische Optimierung

(Klassische) Optimierung

- Kleinere Anzahl an Variablen
- Zielfunktionen sollten…
  - Kontinuierlich sein
  - Kontinuierlich differenzierbar sein
  - das Optimum nicht auf dem Rand haben
- Variablen sollten kontinuierlich sein
- Bei nichtlinearen Prozessen sollte die Region, in der das globale Minimum liegt, für die Initialisierung bekannt sein
- Berücksichtigung stochastischer Prozesse macht den Ansatz sehr kompliziert

Dynamische Optimierung

- Erlaubte Variablen
  - Diskrete
  - Nicht-kontinuierliche
  - Nicht-differenzierbare
  - Nicht-konvexe
- Stochastische Prozesse leichter abbildbar
- Nachteil: „Curse of Dimensionality“

Dynamische Optimierung in der Systemverfahrenstechnik

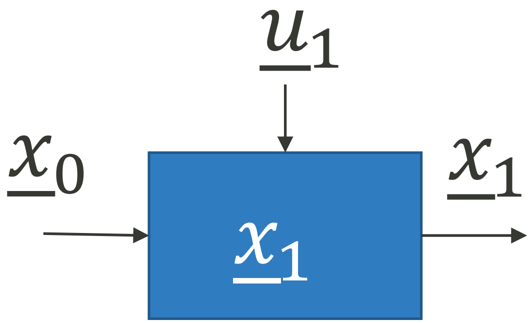
- Suche nach einer **optimalen** Lösung…
  - minimale Kosten
  - maximale Ausbeute
  - maximale Ausdauer
  - …
- Anwendung
  - Optimierung von Reihenschaltungen
  - Optimierung von phasenorientierten Regelgesetzen
  - …

ACHTUNG – Übergang zur Zustandsschreibweise

Steuervektor $\underline{\boldsymbol{u}}$ setzt sich aus kontinuierlichen und diskreten Entscheidungsvariablen ($\underline{x}$ und $\underline{y}$) zusammen.

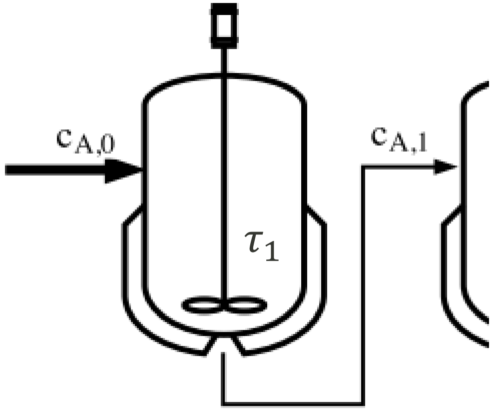
Zustand eines Systems $\underline{\boldsymbol{x}}^*$ resultiert aus den Modellgleichungen in den Gleichungsbedingungen $0 = \underline{h}(\underline{x}, \underline{y})$ ist jedoch NICHT gleichbedeutend mit den kontinuierlichen Entscheidungsvariablen $\underline{x}$!

- Das „ * “ wird im folgenden weggelassen!



Annahme der **„Aufwind-Approximation“** für Stoffströme

- Der austretende Zustand entspricht dem Zustand im System.



Reihenschaltung von Prozesseinheiten

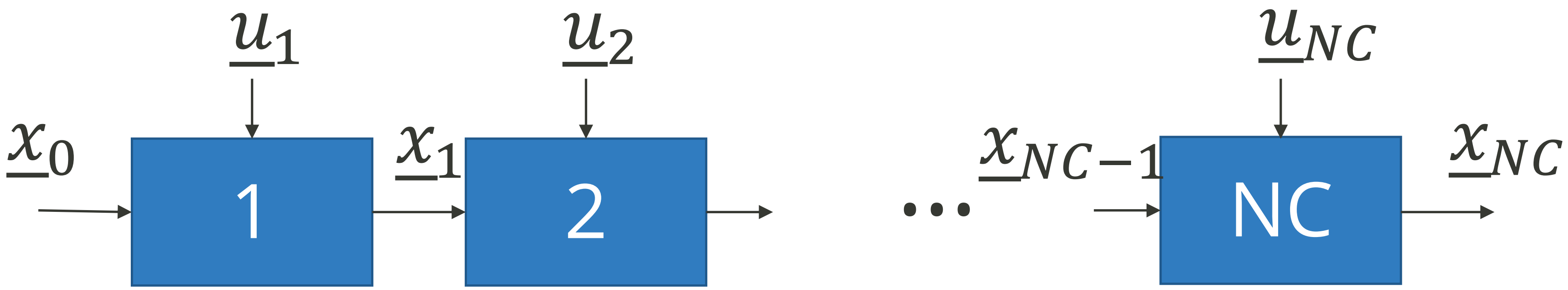
Modellgleichung einer Prozesseinheit:

$$\underline{x}_j = f_j(\underline{x}_{j-1}, \underline{u}_j)$$

Zielfunktion = Summe der Zielfunktionen der Stufen:

$$Z = \sum_{j=1}^{NC} Z_j(\underline{x}_{j-1}, \underline{u}_j)$$

$\underline{x}_j$ … Zustandsvektor der Stufe j
$\underline{u}_j$ … Steuervektor der Stufe j
j … Index der Stufe (z.B. Prozesseinheit in der Kaskade)
NC … Anzahl der Stufen (z.B. Anzahl Prozesseinheiten in der Kaskade)



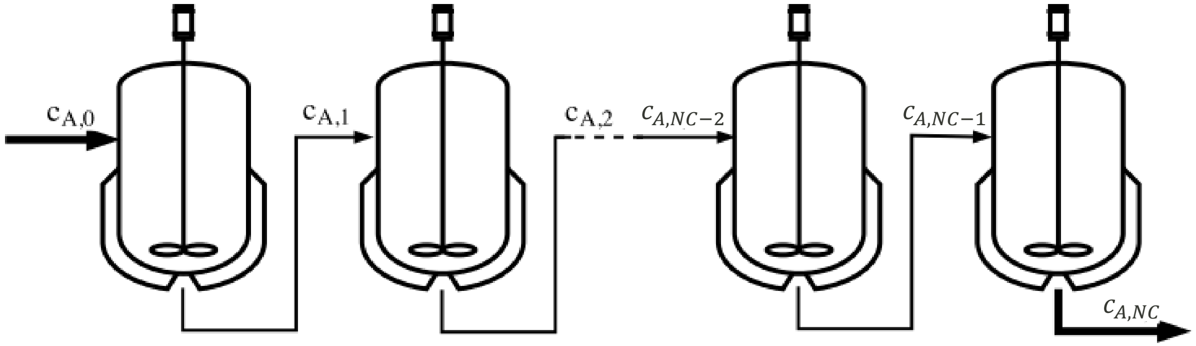
Beispiel: Reaktorkaskade

Modellgleichung im stationären Zustand:

$$c_{A,j} = \frac{c_{A,j-1}}{1 + k\,\tau_j}$$

→ Zustandsvektor $\underline{x}_j$ der Stufe j: $c_{A,j}$

→ Steuervektor $\underline{u}_j$ der Stufe j: τ_j



Minimierung der mittleren Gesamtverweilzeit bei bekannter Eintritts- ($c_{A,0}$) und Austrittskonzentration ($c_{A,NC}$) :

$$Z = \sum_{j=1}^{NC} \tau_j \rightarrow \min$$

$c_{A,j}$ ... Stoffmengenkonzentration der Komponente A in Reaktor j

τ_j ... Verweilzeit in Reaktor j

k ... Reaktionskonstante

Hinweis:
Im Gegensatz zum Einführungsbeispiel sind hier die Entscheidungsvariablen (Verweilzeiten τ) und Zustände (Stoffmengenkonzentrationen c_A) bei der Reaktorkaskade kontinuierliche Größen.

Systematische Substitution der Modellgleichung

Ansatz: Ineinander Einsetzen vom hinteren Ende der sequentiellen Reihe

- (NC)-te Stufe (letzte Stufe):

$$\underline{x}_{NC} = \underline{f}_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC}\right)$$

- (NC-1)-te Stufe:

$$\underline{x}_{NC-1} = \underline{f}_{NC-1}\left(\underline{x}_{NC-2}, \underline{u}_{NC-1}\right)$$

  durch Einsetzen:

$$\underline{x}_{NC} = \underline{f}_{NC}\left(\underline{f}_{NC-1}\left(\underline{x}_{NC-2}, \underline{u}_{NC-1}\right), \underline{u}_{NC}\right)$$

- (1)-te Stufe:

$$\underline{x}_{NC} = \underline{f}_{NC}\left(\underline{f}_{NC-1}\left(\dots \underline{f}_{2}\left(\underline{f}_{1}\left(\underline{x}_{0}, \underline{u}_{1}\right), \underline{u}_{2}\right) \dots\right), \underline{u}_{NC}\right)$$

  Damit ist der Ausgangszustand $\underline{x}_{NC}$ nur vom Eingangszustand $\underline{x}_0$ und den Steuerungen der Stufen $\underline{u}_1 \dots \underline{u}_{NC}$ abhängig, wobei jede Stufe sequentiell von der jeweils vorherigen abhängig ist.

- Bei optimaler Steuerung gilt dann:

$$\underline{x}_{NC} = \underline{f}_{opt}\left(\underline{x}_{0}, \underline{u}_{1,opt}, \dots, \underline{u}_{NC,opt}\right)$$

Beispiel: Reaktorkaskade

(NC)-te Stufe:

$$c_{A,NC} = f\left(c_{A,NC-1}, \tau_{NC}\right)$$

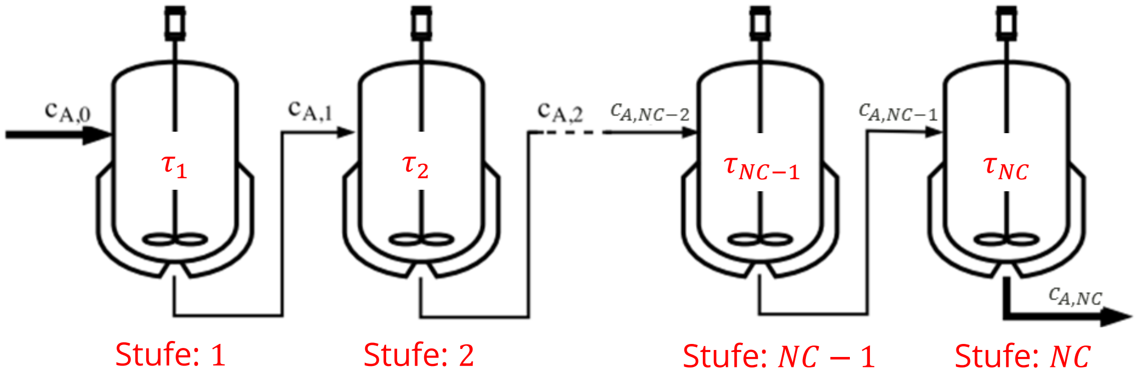
(NC-1)-te Stufe:

$$c_{A,NC-1} = f\left(c_{A,NC-2}, \tau_{NC-1}\right)$$

Daraus folgt:

$$c_{A,NC} = f\left(f\left(c_{A,NC-2}, \tau_{NC-1}\right), \tau_{NC}\right) = f\left(c_{A,NC-2}, \tau_{NC-1}, \tau_{NC}\right)$$

usw.



Bellmann‘sche Rekursion der Zielfunktion

Zerlegung der Gesamtzielfunktion in rekursiv definierte Teilsummen

- Gesamtzielfunktion

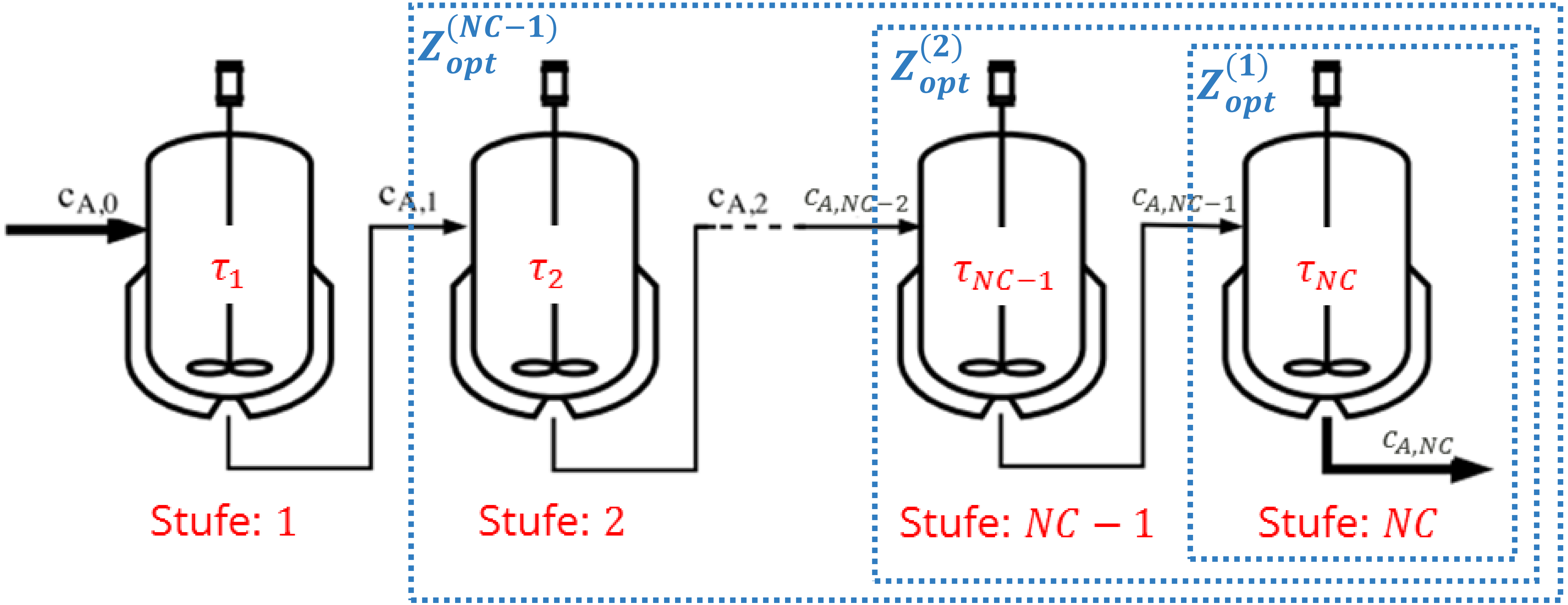
$$Z^{(NC)} = \sum_{j=1}^{NC} Z_j\left(\underline{x}_{j-1}, \underline{u}_j\right)$$

- Berechnung rekursiver Teilsummen:

$$Z^{(1)} = Z_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC}\right)$$
$$Z^{(2)} = Z_{NC-1}\left(\underline{x}_{NC-2}, \underline{u}_{NC-1}\right) + Z_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC}\right)$$
$$Z^{(3)} = Z_{NC-2}\left(\underline{x}_{NC-3}, \underline{u}_{NC-2}\right) + Z_{NC-1}\left(\underline{x}_{NC-2}, \underline{u}_{NC-1}\right) + Z_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC}\right)$$
$$\dots$$
$$Z^{(NC-j+1)} = \sum_{j=i}^{NC} Z_j\left(\underline{x}_{j-1}, \underline{u}_j\right)$$

Die für die Dekomposition des Problems heranzuziehende Methode wird **Dynamische Optimierung** genannt.

Beispiel: Reaktorkaskade



Bellmann'sche Rekursion der Zielfunktion
Optimale Lösung der (NC)-ten Stufe

Zielfunktion – unter der Annahme, dass der Austrittszustand ($\underline{x}_{NC}$) bekannt ist, wird der optimale Steuervektor $\underline{u}_{NC,opt}$ für beliebige Eintrittszustände ($\underline{x}_{NC-1}$) gesucht:

$$
\begin{aligned}
Z^{(1)} &= Z_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC}\right) \\
Z_{opt}^{(1)} &= \min_{\underline{u}_{NC}}\left[Z_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC}\right)\right] = Z_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC,opt}\right) \\
Z_{opt}^{(1)} &= Z_{opt}^{(1)}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC,opt}\right)
\end{aligned}
$$

Für den Eintrittszustand der Stufe $\underline{x}_{NC-1}$ gilt dann:

$$\underline{x}_{NC} = \underline{f}_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC,opt}\right)$$

→ Durch Invertieren der Funktion folgt:

$$\underline{x}_{NC-1} = \underline{f}_{NC}^{-1}\left(\underline{x}_{NC}, \underline{u}_{NC,opt}\right)$$

Bellmann'sche Rekursion der Zielfunktion
Optimale Lösung der (NC-1)-ten Stufe

Zielfunktion – unter der Annahme, dass Eintritts- $\underline{x}_{NC-2}$ und Austrittszustand $\underline{x}_{NC-1}$ bekannt sind, wird der optimale Steuervektor $\underline{u}_{NC-1,opt}$ gesucht:

$$Z_{opt}^{(2)} = \min_{\underline{u}_{NC-1}} \left[Z_{NC-1}\left(\underline{x}_{NC-2}, \underline{u}_{NC-1}\right) + Z_{NC}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC,opt}\right)\right]$$

$$Z_{opt}^{(2)} = Z_{NC-1}\left(\underline{x}_{NC-2}, \underline{u}_{NC-1,opt}\right) + Z_{NC}\left(\underline{f}_{NC}^{-1}\left(\underline{x}_{NC}, \underline{u}_{NC,opt}\right), \underline{u}_{NC,opt}\right)$$

$$Z_{opt}^{(2)} = Z_{opt}^{(2)}\left(\underline{x}_{NC-2}, \underline{u}_{NC-1,opt}, \underline{u}_{NC,opt}\right)$$

Für den Eintrittszustand der Stufe gilt dann:

$$\underline{x}_{NC-1} = \underline{f}_{NC-1}\left(\underline{x}_{NC-2}, \underline{u}_{NC-1,opt}\right)$$

→ Durch invertieren der Funktion folgt:

$$\underline{x}_{NC-2} = \underline{f}_{NC-1}^{-1}\left(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC-1,opt}\right)$$

→ Durch Einsetzen des Eintrittszustand von Stufe NC folgt:

$$\underline{x}_{NC-2} = \underline{f}_{NC-1}^{-1}\left(\underline{f}_{NC}^{-1}\left(\underline{x}_{NC}, \underline{u}_{NC,opt}\right), \underline{u}_{NC-1,opt}\right)$$

Bellmann'sche Rekursion der Zielfunktion
Optimale Lösung der (1)-ten Stufe

Zielfunktion – unter der Annahme, dass Eintritts- $\underline{x}_0$ und Austrittszustand $\underline{x}_1$ bekannt sind, wird der optimale Steuervektor $\underline{u}_{1,opt}$ gesucht:

$$Z_{opt}^{(NC)} = \min_{\underline{u}_1} \left[Z_1\left(\underline{x}_0, \underline{u}_1\right) + \sum_{j=2}^{NC} Z_j\left(\underline{x}_{j-1}, \underline{u}_{j,opt}\right) \right]$$

Mit dem

$$\underline{x}_{j-1} = \underline{f}_j^{-1}\left(\underline{f}_{j+1}^{-1}\left(\dots \underline{f}_{NC-1}^{-1}\left(\underline{f}_{NC}^{-1}\left(\underline{x}_{NC}, \underline{u}_{NC,opt}\right), \underline{u}_{NC-1,opt}\right) \dots\right), \underline{u}_{j,opt}\right)$$

folgt

$$Z_{opt}^{(NC)} = \min_{\underline{u}_1} \left[Z_1\left(\underline{x}_0, \underline{u}_1\right) + \sum_{j=2}^{NC} Z_j\left(\underline{f}_j^{-1}\left(\underline{f}_{j+1}^{-1}\left(\dots \underline{f}_{NC-1}^{-1}\left(\underline{f}_{NC}^{-1}\left(\underline{x}_{NC}, \underline{u}_{NC,opt}\right), \underline{u}_{NC-1,opt}\right) \dots\right), \underline{u}_{j,opt}\right), \underline{u}_{j,opt}\right) \right]$$

Alternativ kann auch geschrieben werden:

$$Z_{opt}^{(NC)} = \min_{\underline{u}_1} \left[Z_1\left(\underline{x}_0, \underline{u}_1\right) + Z_{opt}^{(NC-1)}\left(\underline{x}_1, \underline{u}_{2,opt}, \dots, \underline{u}_{NC,opt}\right) \right]$$

Bellmann'sche Rekursion der Zielfunktion

- Es folgt die Rekursionsvorschrift:

$$Z_{opt}^{(1)} = \min_{\underline{u}_{NC}}\left[Z_{NC}(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC})\right]$$

Erster Schritt der dynamischen Optimierung

$$Z_{opt}^{(NC-j+1)} = \min_{\underline{u}_j}\left[Z_j(\underline{x}_{j-1}, \underline{u}_j) + Z_{opt}^{(NC-j)}(\underline{x}_j, \underline{u}_{j+1,opt}, \dots, \underline{u}_{NC,opt})\right]$$

Rückwärtsrechnen mit sinkendem j (NC-1 nach 1)

$$Z_{opt}^{(NC)} = \min_{\underline{u}_1}\left[Z_1(\underline{x}_0, \underline{u}_1) + Z_{opt}^{(NC-1)}(\underline{x}_1 = \underline{f}(\underline{x}_0, \underline{u}_1), \underline{u}_{2,opt}, \dots, \underline{u}_{NC,opt})\right]$$

Lösung des Optimierungsproblems

$$\underline{x}_j = \underline{f}_j\left(\underline{f}_{j-1}\left(\dots \underline{f}_2\left(\underline{f}_1(\underline{x}_0, \underline{u}_1), \underline{u}_2\right) \dots\right), \underline{u}_j\right)$$

Vorwärtsrechnen mit wachsendem j zur Berechnung der Zustände in den Stufen

Bellmann'sche Rekursion der Zielfunktion
Schlussfolgerungen

Die rekursive Anwendung der Rekursionsformel führt dazu, dass

- in jedem Schritt, beginnend mit der Stufe NC und endend mit der Stufe 1 jeweils ein Optimierungsproblem zu lösen ist, welches nur von den Steuergrößen der Stufe i als Entscheidungsvariablen abhängt und
- damit das Problem in n Teilprobleme zerlegt wurde, die von geringerer Dimension sind als das vollständige Problem. → **Dekomposition des Problems**

Lösung des dynamischen Optimierungsproblems erfolgt in zwei Schritten:

1. **Rückwärtsrechnung:**
   Lösung für Teilprobleme beginnend mit (NC)-ter Stufe in Form von Funktionen in Abhängigkeit vom Eingangszustand aufstellen.
2. **Vorwärtsrechnung:**
   Berechnung der Zustände in den Stufen beginnend mit der ersten Stufe durch Einsetzen der Eingangszustände und optimalen Steuervektoren.

Dr.rer.nat. Valentin Khaydarov
Kontakt: valentin.khaydarov@tu-dresden.de

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit!

Bellmann‘sche Rekursion der Zielfunktion

- Da folgende Beziehung j $= NC - i + 1$ zwischen den Indizes i und j besteht, kann die Iterationsvorschrift auch wie folgt ausgedrückt werden:

$$\boxed{\begin{aligned}
Z_{opt}^{(1)} &= \min_{\underline{u}_{NC}}\left[Z_{NC}(\underline{x}_{NC-1}, \underline{u}_{NC})\right] \\
Z_{opt}^{(i)} &= \min_{\underline{u}_{NC-i+1}}\left[Z_{NC-i+1}(\underline{x}_{NC-i}, \underline{u}_{NC-i+1}) + Z_{opt}^{(i-1)}(\underline{x}_{NC-i+1}, \underline{u}_{NC-i+2,opt}, \dots, \underline{u}_{NC,opt})\right] \\
Z_{opt}^{(i)} &= \min_{\underline{u}_{NC-i+1}}\left[Z_{NC-i+1}(\underline{x}_{NC-i}, \underline{u}_{NC-i+1}) + Z_{opt}^{(i-1)}(\underline{x}_{NC-i+1}, \underline{u}_{NC-i+2,opt}, \dots, \underline{u}_{NC,opt})\right] \\
\underline{x}_{NC-i+1} &= \underline{f}_{NC-i+1}\left(\underline{f}_{NC-i}\left(\dots \underline{f}_2\left(\underline{f}_1(\underline{x}_0, \underline{u}_1), \underline{u}_2\right) \dots\right), \underline{u}_{NC-i+1}\right)
\end{aligned}}$$