

Optimierung autonom schaltender dynamischer Hybridsysteme

Dissertation
Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktoringenieur (Dr.-Ing.)

vorgelegt der Fakultät für Informatik und
Automatisierung
der Technischen Universität Ilmenau

von Dipl.-Ing. Ines Mynttinen
geboren am 31.08.1972 in Saalfeld

Gutachter:

- 1.) Prof. Dr.-Ing. Pu Li
- 2.) Prof. Dr.-Ing. Olaf Stursberg
- 3.) Prof. Dr. Erich Runge

Tag der Einreichung: 30.09.2012
Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 10.04.2013

urn:nbn:de:gbv:ilm1-2013000208

Danksagung

Die Fertigstellung dieser Arbeit steht am Ende der sehr fruchtbringenden Zeit, während der ich am Fachgebiet Simulation und Optimale Prozesse der Fakultät Informatik und Automatisierung der Technischen Universität Ilmenau zur Forschung über die Optimierung dynamischer Hybridsysteme beitragen konnte.

An dieser Stelle gebührt mein besonderer Dank Herrn Prof. Dr.-Ing. P. Li, der diese Arbeit fachlich begleitet hat. In der Zusammenarbeit mit ihm konnte ich Schwierigkeiten bewältigen, und neue Ideen konnten ihre Umsetzung finden. Seine freundliche Art war sehr motivierend und trug dazu bei, dass ich die Arbeit in seinem Fachgebiet als große Bereicherung empfand.

Des Weiteren bedanke ich mich ganz herzlich bei Prof. Dr. A. Hoffmann und Prof. Dr. E. Runge, die bei speziellen fachlichen Fragen mit Rat und Tat zur Verfügung standen.

Auch an meine Kollegen im Fachgebiet geht ein herzlicher Dank für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre. Die Kollegen hatten jederzeit ein offenes Ohr für meine Belange. Die zahlreichen fachlichen Diskussionen trugen entscheidend dazu bei, Ideen zu entwickeln und die Forschungsarbeit voranzubringen.

Inhaltsverzeichnis

I	Einführung und Grundlagen	5
1	Einleitung	7
2	Optimierung dynamischer Hybridsysteme	11
2.1	Heuristische Methoden	11
2.2	MINLP	14
2.3	Regularisierungsmethoden	18
2.4	Kontinuierliche dynamische Probleme	20
3	Systembeschreibung	25
3.1	Modellierung dynamischer Hybridsysteme	25
3.1.1	Definition eines dynamischen Hybridsystems	26
3.1.2	Modellkomponenten	26
3.1.3	Zeitentwicklung eines dynamischen Hybridsystems	30
3.1.4	Auswahl der Betriebsmodi mittels binärer Variablen	30
3.2	Lösbarkeit hybrider DAE-Systeme	32
3.2.1	Existenz und Eindeutigkeit	33
3.2.2	Transversalität versus Tangentialität des Schaltens	34
3.2.3	Richtungsableitungen	35
II	Optimierung autonom schaltender dynamischer Hybridsysteme	39
4	Statische Probleme	43
4.1	Eigenschaften von MPCC	44

4.1.1	Optimalitätsbedingungen erster Ordnung	44
4.1.2	Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung	49
4.2	Regularisierung statischer Probleme	50
4.2.1	Relaxation	51
4.2.2	Strafverfahren	54
4.2.3	Glättung	57
5	Regularisierung dynamischer Probleme	63
5.1	Formulierung des dynamischen Hybridproblems	66
5.2	Orthogonale Kollokation	69
5.3	Regularisierung durch Glättung	72
5.3.1	Wahl der Glättungsfunktion	72
5.3.2	Abschätzung geeigneter Werte des Glättungsparameters	73
5.3.3	Numerische Bestimmung des Glättungsparameters	75
5.3.4	Demonstration der Glättungsmethode an einem mathematischen Beispiel	75
5.4	Zweiebenenproblem mit Strafverfahren	78
5.4.1	Formulierung des Zweiebenenproblems	78
5.4.2	Optimalitätsbedingungen des inneren Minimierungsproblems	79
5.4.3	Strafverfahren für komplementäre Beschränkungen	80
5.4.4	Numerische Bestimmung des Strafparameters	81
5.4.5	Demonstration des Strafverfahrens an einem mathematischen Bei- spiel	82
6	Stückweise Optimierung	85
6.1	Numerische Lösung hybrider DAE-Systeme	85
6.1.1	Detektion von Ereignissen	87
6.1.2	Lokalisierung von Ereignissen	88
6.2	Stückweise Optimierung	89
6.3	Parameterschätzung mittels Zerlegung	90

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	3
6.3.1 Problemzerlegung	91
6.3.1.1 Externe Bestimmung der Schaltzeiten	92
6.3.1.2 Interne Bestimmung der Schaltzeiten	96
6.3.2 Parameterabgleich	98
7 Fallstudien	101
7.1 Dreitanksystem	101
7.2 Industrieller Verdampfer	106
7.2.1 Prozessbeschreibung	106
7.2.2 Simulation, Sensitivitätsberechnung und Parameter- schätzung mittels einer Glättungsmethode	111
7.2.2.1 Simulation des industriellen Verdampfers	112
7.2.2.2 Sensitivitätsberechnung für das geglättete Modell	115
7.2.2.3 Parameterschätzung mittels Glättungsmethode	118
7.2.3 Bestimmung der optimalen Steuerung des Anfahrprozesses mittels Zerlegungsansatz	119
8 Zusammenfassung	125
8.1 Methodenbewertung	125
8.2 Zusammenfassung	127
9 Anhang	131

Teil I

Einführung und Grundlagen

Kapitel 1

Einleitung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Entwicklung und dem Test von Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme. Unter “Dynamischen Hybridsystemen” werden hier dynamische Systeme verstanden, bei denen zwischen verschiedenen diskreten Betriebsmodi umgeschaltet werden kann bzw. gemäß genau definierten Schaltbedingungen umgeschaltet wird. Die Modellgleichungen solcher Systeme enthalten unstetige Terme und ändern beim Umschalten möglicherweise sogar ihre Struktur. Hybridsysteme werden auch als geschaltete oder gemischt diskret-kontinuierliche Systeme bezeichnet. Klassische Beispiele für Hybridsysteme sind elektrische Schaltkreise [2, 122], mechanische Systeme, die Reibung oder Stöße enthalten [55, 162] und verfahrenstechnische Prozesse.

Die Optimierung dynamischer Hybridsysteme ist allein schon deshalb notwendig, weil bei industriell relevanten Prozessen (z. B. bei Anfahrprozessen oder Verdampfungsprozessen) häufig Hybridsysteme auftreten. Die Lösung solcher Optimierungsprobleme stellt aus den weiter unten zu diskutierenden Gründen eine wissenschaftliche Herausforderung dar.

Die Anwendung von Methoden der dynamischen Optimierung in der Industrie ist nicht zuletzt dadurch begründet, dass in der heutigen globalisierten Welt die Wettbewerbsfähigkeit von Unternehmen mit hohen Anforderungen an die Effizienz aller Prozesse verbunden ist. Zudem steigen die Anforderungen an die Umweltverträglichkeit industrieller Prozesse. Für die Prozessindustrie bedeutet dies beispielsweise, dass Abgase gereinigt und Nebenprodukte möglichst weitgehend vermieden bzw. abgebaut werden sollen. Die Reduktion des Energieverbrauchs soll die CO₂-Bilanz verbessern. Um dies zu erreichen, kann neben einer energieeffizienten Fahrweise die im Prozess entstehende Abwärme zurückgeführt oder anderweitig genutzt werden. Als ein Mittel zur Effizienzsteigerung gewinnen derzeit verstärkt Lean-Prinzipien an Bedeutung. Diese verwenden spezifische Methoden zur Gestal-

tung “schlanker” Prozesse, d. h. zur bestmöglichen Ausnutzung aller Ressourcen. Dies schließt grundsätzlich alle Bereiche von Produktion und Management ein und führt somit zu einer hoch komplexen Aufgabe. Die Verbesserung solch komplexer Prozesse durch intuitives Vorgehen ist schon weitgehend ausgereizt. Die modellgestützte Optimierung mittels mathematischer Lösungsmethoden birgt dagegen noch ein beachtliches Potential. Dies konnte für das Produktdesign [94, 104], die Optimierung von Einkaufs- und Verkaufsstrategien unter Marktbedingungen und die optimale stationäre und kontinuierliche dynamische Prozessführung bereits belegt werden [14, 29, 83, 101, 113, 128].

Zum Zwecke der dynamischen Optimierung werden die betrachteten Prozesse in der Regel durch gewöhnliche Differentialgleichungssysteme (DGL-Systeme) oder differential-algebraische Gleichungssysteme (DAE-Systeme) modelliert. Handelt es sich um kontinuierliche Prozesse, können die Modellgleichungen direkt als Nebenbedingungen in dem jeweiligen Optimierungsproblem berücksichtigt werden. Das Lösen von industriellen Optimierungsproblemen dieser Art gehört heute bereits zum Stand der Technik [14, 33]. Dies trifft allerdings nur zu, solange es sich um kontinuierliche Prozesse handelt. Wie bereits erwähnt wurde, enthalten viele dynamische Systeme jedoch als besonderes Merkmal Umschaltprozesse zwischen verschiedenen Betriebsmodi und sind deshalb als Hybridsysteme zu klassifizieren.

Das hybride Verhalten kann verschiedene Ursachen haben. So können Umschaltungen als Mittel dienen, um den Detaillierungsgrad und damit die Komplexität des Modells so zu verringern, dass es zur Optimierung verwendet werden kann. Dementsprechend werden beispielsweise elektrische Schaltkreise häufig als Hybridsysteme modelliert, da man Übergangseffekte beim Schließen von elektrischen Schaltern vernachlässigen kann. Es ist auch möglich, dass die zugrunde liegenden physikalischen Phänomene ein Umschalten zwischen verschiedenen Gleichungen notwendig machen. So ändern sich bei Phasenübergängen, wie sie während des Anfahrens von Destillations- und Rektifikationsanlagen auftreten, die thermodynamischen Eigenschaften sprunghaft [158]. Schließlich können auch externe Umstände die Formulierung eines verfahrenstechnischen Prozesses als Hybridsystem nahelegen. So werden bei der Dampferzeugung im Kraftwerksprozess beim Anfahren und Umsteuern weite Bereiche von Druck und Enthalpie durchschritten. Um die Wasser-Dampf-Eigenschaften korrekt zu beschreiben [1], empfiehlt es sich daher, die von der „International Association for the Properties of Water and Steam“ (IAPWS) vorgeschlagenen und verifizierten Funktionen zu verwenden. Dabei sind je nach Druck- und Enthalpiebereich verschiedene Zustandsgleichungen zu wählen. Auch in biologischen Systemen, wie sie bei der Beschreibung von Fermentationsprozessen Verwendung finden, ändert sich das Verhalten in Abhängigkeit vom Nahrungsangebot so stark, dass für verschiedene Bereiche unterschiedliche Parametrisierungen notwendig sind [129].

All diese Umschaltprozesse führen zu Knicken oder sogar Sprüngen in den Zustandstrajektorien bzw. ihren Ableitungen. Enthält ein Optimierungsproblem eine solche Modellbeschreibung, versagen die ansonsten hoch effizienten gradientenbasierten Optimierungsverfahren in den meisten Fällen. Dynamische Hybridsysteme erfordern daher eine besondere Behandlung. Die große Herausforderung hierbei besteht darin, die gemischt diskret-kontinuierlichen Optimierungsprobleme so zu formulieren, dass

1. die Lösungsmethode möglichst allgemein anwendbar ist und
2. eine Lösung von hinreichender Genauigkeit mit
3. vertretbarem Rechenaufwand gefunden werden kann.

Diese drei Kriterien können nach wie vor nicht gleichzeitig erfüllt werden. Eine allgemeine Anwendbarkeit der Methode stellt keine speziellen Anforderungen an die Struktur des Problems. Allerdings führt die allgemeine, exakte Formulierung letztlich auf ein Problem, welches nur mit einem Rechenaufwand gelöst werden kann, der grob gesagt exponentiell mit der Problemgröße anwächst. Für komplexe industrielle Prozesse scheidet die Lösung der Probleme deshalb am Rechenaufwand. Formuliert man dagegen das Problem zwar allgemein, aber nur approximativ, kann man den exponentiell steigenden Rechenaufwand vermeiden, erreicht aber eine geringere Genauigkeit. Eine gute Genauigkeit bei angemessenem Rechenaufwand kann unter Umständen erreicht werden, wenn spezielles Wissen über das Problem zur Reduktion seiner Komplexität führt, ohne dabei an Genauigkeit zu verlieren. Damit erhält man allerdings eine individuelle Problemformulierung, die nicht mehr dem Kriterium der allgemeinen Anwendbarkeit genügt. Es wird also im konkreten Fall immer darum gehen, unter verschiedenen Methoden eine geschickte Auswahl zu treffen, so dass die drei genannten Kriterien in einem ausgewogenen, dem Problem angemessenen Verhältnis stehen. Ziel dieser Arbeit ist es deshalb, verfügbare Methoden weiterzuentwickeln, zu testen und bezüglich der Kriterien Allgemeinheit, Genauigkeit und Rechenaufwand zu bewerten.

Die vorliegende Arbeit ist folgendermaßen gegliedert. Teil I gibt einen Überblick über den Stand der Forschung zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme (Kapitel 2) und stellt die Grundlagen für die Modellierung dynamischer Hybridsysteme bereit (Kapitel 3). Die Modellierung (Abschnitt 3.1.1) ist Bestandteil einer jeden modellbasierten Optimierung und damit für die übrigen Teile der Arbeit von Bedeutung. Beabsichtigt man, die als DAE-System vorliegende Beschreibung eines dynamischen Hybridsystems in der Optimierung zu verwenden, muss die Lösbarkeit des DAEs gesichert sein (Abschnitt 3.2). In diesem Zusammenhang ist

besonders die Charakteristik des Umschaltverhaltens zu beachten, die anhand der Transversalität des Schaltens (Abschnitt 3.2.2) oder mit Hilfe der Richtungsableitungen (Abschnitt 3.2.3) bewertet wird.

Teil II stellt den Hauptteil dieser Arbeit dar. Hier werden die Theorie und Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme entwickelt und anhand von Fallstudien getestet. Da die in dieser Arbeit untersuchten Regularisierungsmethoden auf Methoden zur Lösung statischer Probleme mit komplementären Beschränkungen (Mathematical Programs with Complementarity Constraints - MPCC) zurückgehen, werden in Kapitel 4 zunächst die Eigenschaften dieser Problemklasse vorgestellt (Abschnitt 4.1) und anschließend Relaxation, Strafverfahren und Glättung als Regularisierungsstrategien für MPCC eingeführt (Abschnitt 4.2). Kapitel 5 beschäftigt sich mit den Methoden zur Glättung dynamischer Optimierungsprobleme mit Umschaltungen zwischen verschiedenen Betriebsmodi. Hierzu wird in Abschnitt 5.1 zunächst das hybride dynamische Optimierungsproblem allgemein formuliert. Abschnitt 5.2 stellt die für die dynamische Optimierung notwendigen Grundlagen bereit. In den darauf folgenden Abschnitten werden (i) eine Glättungsmethode und (ii) eine Formulierung als Zweiebenenproblem (Bilevel-Problem) mit Strafverfahren als Strategien zur Behandlung des schaltenden Systemverhaltens vorgestellt. In Abschnitt 5.3 wird die Idee der Glättung aus den Abschnitten 4.2.1 und 4.2.3 aufgegriffen. Jetzt wird jedoch anstelle der komplementären Beschränkung die Stufenfunktion geglättet, welche für die Auswahl des richtigen Betriebsmodus sorgt. Als alternative Regularisierungsmethode verwendet die in Abschnitt 5.3.4 dargestellte Methode die Idee der Strafverfahren aus Abschnitt 4.2.2. Bei dynamischen Hybridsystemen mit autonomem Schaltverhalten führt dieser Ansatz zur Kombination einer Bilevel-Formulierung mit der Bestrafung der Verletzung komplementärer Beschränkungen. Der dritte methodische Ansatz (Kapitel 6) verwendet die im Rahmen der Simulation dynamischer Hybridsysteme entwickelte Idee zum Anhalten und Neustarten der Integration an den Umschaltpunkten des Systems (Abschnitt 6.1). Die Schritte zur Umsetzung dieses Verfahrens sind analog zu denen der Simulation. Sie werden aber in der Optimierung anders realisiert (Abschnitt 6.2). Die externe bzw. interne Bestimmung der Schaltzeiten wird am Beispiel von Problemen der Parameterschätzung erklärt (Abschnitt 6.3). Die Funktionsweise aller in den Kapiteln 5 und 6 beschriebenen Methoden wird durch kleine Fallbeispiele illustriert. Eine Anwendung auf komplexere Systeme findet sich in den Kapiteln 7.1 und 7.2. Während in Kapitel 7.1 die Glättungsmethode und die Bilevel-Methode mit Strafverfahren miteinander und mit einer heuristischen Methode verglichen werden, zeigt Kapitel 7.2 das Vorgehen bei der Vorbereitung und Durchführung der Parameterschätzung anhand eines industriellen Verdampfers. Für diesen Verdampfer wird auch der Zerlegungsansatz aus Kapitel 6 am Beispiel eines optimalen Anfahrprozesses getestet.

Kapitel 2

Stand der Forschung zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme - Überblick

Die derzeit gängigen Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme lassen sich als i) heuristische Methoden, ii) gemischt ganzzahlige Programmierung und iii) Regularisierungsmethoden klassifizieren. Abbildung 2.1 nennt wichtige Vertreter dieser Methodenklassen und gibt Stichworte zum Funktionsprinzip einer jeden Methodenklasse. Die Abschnitte 2.1-2.3 gehen dann auf die Funktionsprinzipien etwas genauer ein. In diesen Abschnitten werden jeweils auch Beispiele für die Anwendung der Methoden im Rahmen der Optimierung dynamischer Hybridsysteme gegeben. In den Abschnitten 2.1 und 2.2 werden die Gründe aufgeführt, weshalb manche Methoden in vorliegender Arbeit nicht im Detail untersucht werden. Da die Optimierung dynamischer Hybridsysteme auf der Optimierung kontinuierlicher dynamischer Systeme basiert, gibt Abschnitt 2.4 einen Überblick über die Methoden zur Optimierung dieser Systeme.

Insgesamt sind die Ausführungen dieses Kapitels bewusst allgemein gehalten worden. Sie sollen lediglich einen Überblick vermitteln. Mathematische Zusammenhänge werden hier nicht dargestellt. Stattdessen werden die Funktionsprinzipien der Methoden verbal beschrieben und umfangreiche Hinweise auf weiterführende Literatur zu Methoden und Anwendungen gegeben.

2.1 Heuristische Methoden

Die heuristischen Optimierungsmethoden basieren auf dem Prinzip “Simulation in der Optimierung” (Abb. 2.2), d. h. Simulation und Optimierung erfolgen weitge-

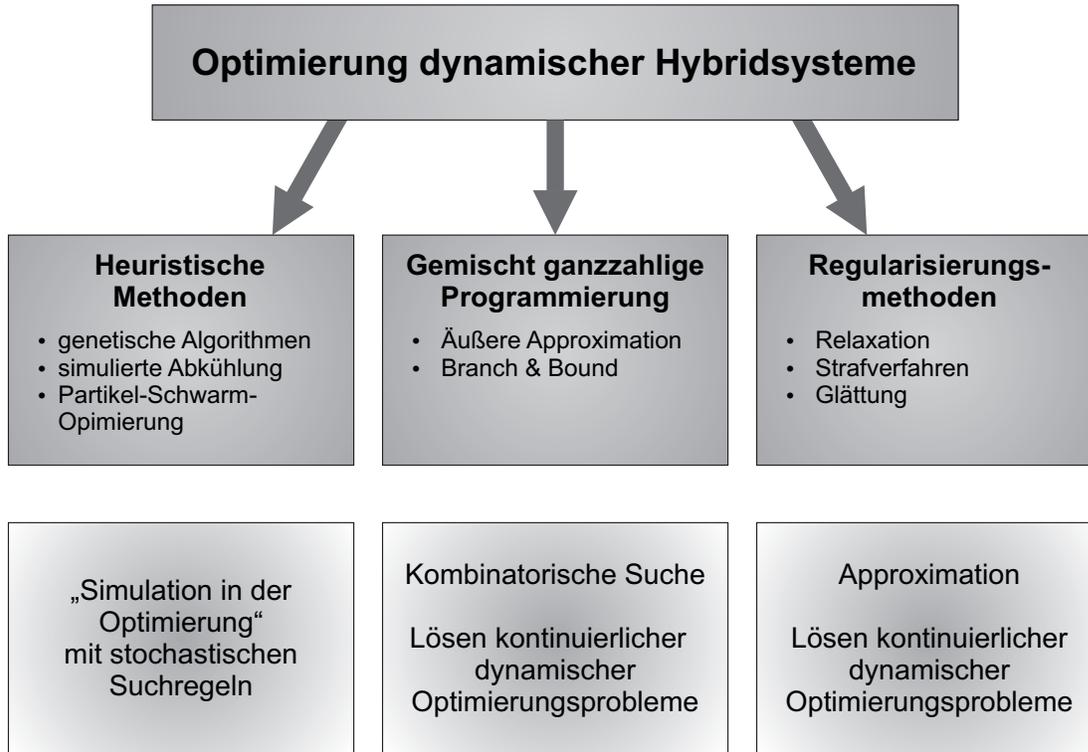


Abbildung 2.1: Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme.

hend getrennt und sind nur durch die Übergabe relevanter Daten verbunden. Im Simulationsteil wird das dynamische System wiederholt mit zufällig vorgegebenen Konfigurationen der Optimierungsvariablen, d. h. mit vorgegebenen Parameterwerten p und Steuergrößen u simuliert. Handelt es sich um ein Hybridsystem (siehe Kapitel 3.1.1), ist ein spezieller Simulator zur Behandlung der Umschaltvorgänge notwendig. Um das korrekte Schaltverhalten zu realisieren, wird seit vielen Jahren das Konzept mit Schaltfunktionen und zugehörigen Schaltern umgesetzt [35, 43, 79, 117]. Numerische Verfahren zur Lösung von schaltenden, d. h. gemischt diskret-kontinuierlichen Systemen nutzen entweder die abschnittsweise Integration [11, 20, 69], Time-Stepping-Algorithmen [68, 147] oder Discrete-Event-Simulation [82, 127, 164, 165]. Die Simulationsergebnisse, d. h. die Trajektorien der Zustandsvariablen $x(t)$, $y(t)$, dienen im Optimierungsteil zur Auswertung der Zielfunktion $\mathcal{J}(x, y, u)$. Im Optimierungsteil werden die freien Variablen durch methodenspezifische Suchregeln, für die im Gegensatz zu Methoden der mathematischen Programmierung keine Gradienteninformationen benötigt werden, schrittweise gezielt verbessert ($p_{\text{neu}}, u_{\text{neu}}$), und es folgt der nächste Simulationsschritt. Diese Prozedur wird so lange wiederholt, bis die maximale Anzahl von Iterationen erreicht ist.

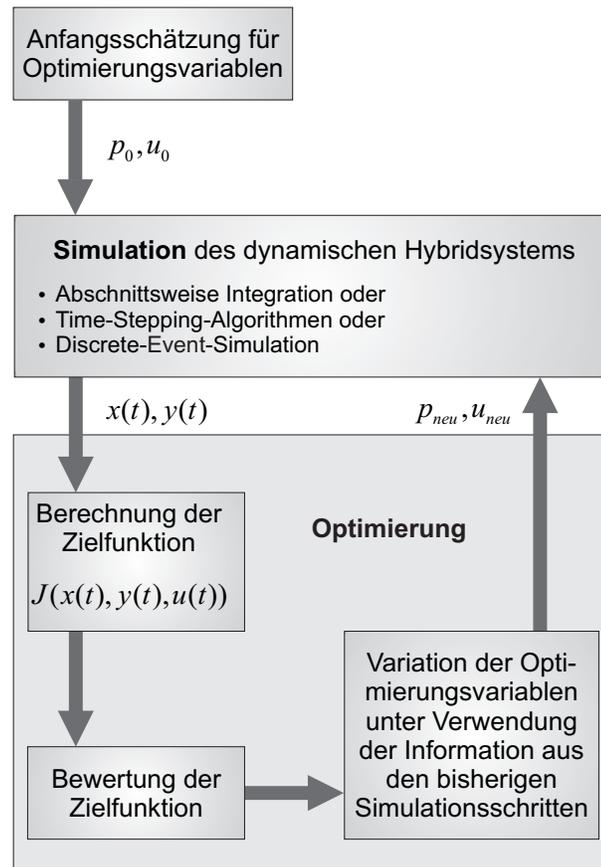


Abbildung 2.2: Funktionsweise heuristischer Methoden bei der Optimierung dynamischer Hybridsysteme.

Die bis dahin gefundene beste Konfiguration der Optimierungsvariablen wird als Lösung angesehen. Optimalität kann bei diesen Verfahren aber nicht garantiert werden. Aufgrund der vielfach wiederholten Simulationsschritte ist der Rechenaufwand für heuristische Verfahren hoch, wenn das Optimierungsproblem viele Optimierungsvariablen enthält.

Wichtige Vertreter der heuristischen Methoden sind Genetische Algorithmen (GA), Partikel-Schwarm-Optimierung (PSO), die Simulierte Abkühlung (SA) [124, 166] und Kontrollierte Zufällige Suche (Integrated Controlled Random Search - ICRS) [15, 40, 75].

Da das Umschalten des Systems in dem allen heuristischen Verfahren gemeinsamen Simulationsteil behandelt wird, und weil heuristische Methoden meist keine Annahmen bzgl. Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Zielfunktion machen, sind

im Optimierungsteil, d. h. bei der heuristischen Suche in der Regel keine zusätzlichen Schwierigkeiten zu erwarten.

Die Optimierung dynamischer Hybridsysteme wurde z. B. für die Windenergiegewinnung [120] und für das Unit-Commitment-Problem [119] mittels PSO sowie für chemische Prozesse mittels ICRS [15] durchgeführt.

Bezüglich der Relevanz heuristischer Methoden für die in der vorliegenden Arbeit bearbeitete Fragestellung sind die folgenden Punkte zu berücksichtigen:

- Es existiert eine große Vielfalt unterschiedlicher heuristischer Methoden, die bereits Gegenstand umfangreicher Forschungsarbeiten waren. Eine gründliche Untersuchung dieser Methoden würde allein schon quantitativ den Rahmen dieser Arbeit sprengen.
- Da bei den heuristischen Methoden das dynamische Hybridsystem *simuliert* wird, müssten die Lösbarkeit und Lösungsmethoden für hybride DAE-Systeme eingehend untersucht werden, bzw. es müsste vorausgesetzt werden, dass ein hinreichend guter Löser für geschaltete DAE-Systeme verfügbar ist. Dazu existieren bereits mehrere ausführliche Arbeiten [97, 105, 153].
- Es ist zu vermuten, dass die Erkenntnisse über die Optimierung dynamischer Hybridsysteme im Allgemeinen eher gering wären, da die bei der Optimierung eventuell auftretenden Schwierigkeiten eher durch die besondere Form der Zielfunktion bedingt und damit problemspezifisch sind.

Aus diesen Gründen wird sich die vorliegende Arbeit kaum mit heuristischen Methoden beschäftigen.¹

2.2 Gemischt ganzzahlige nichtlineare Programmierung

Die gemischt ganzzahlige nichtlineare Programmierung (Mixed-Integer Nonlinear Programming, MINLP) ist ein wichtiger Ansatz zur Lösung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme. Um im Rahmen eines Optimierungsproblems zu gewährleisten, dass in dem zugrunde liegenden Hybridsystem aus einer Reihe möglicher Betriebsmodi immer nur ein Modus aktiv ist, diese Modi also komplementär zueinander sind, können zum Ein- bzw. Ausschalten der Modi binäre - also ganzzahlige - Variablen verwendet werden. Mit diesen ganzzahligen Variablen kann

¹Eine Ausnahme bildet der Vergleich zwischen Reformulierungsmethoden und der PSO in Abschnitt 7.1.

das Optimierungsproblem als MINLP formuliert werden. Die Lösung eines solchen Problems hat den Vorteil, dass damit die Komplementarität zwischen den Betriebsmodi exakt erfüllt wird.

Die MINLP wurde unter anderem mit dem Ziel entwickelt, die Optimierung von Prozess-Design und Prozess-Steuerung miteinander zu verbinden. In den vergangenen 25 Jahren wurden beachtliche Anstrengungen in dieser Richtung unternommen [16, 18, 22, 139]. Zunächst betrachtete man stationäre Probleme [78, 125]. Doch bei vielen Systemen erfordert die zeitliche Veränderung einen dynamischen Ansatz. Das System wird hierfür als hybrider Automat [5, 20, 21, 80, 103, 143] oder als „Mixed-Logic Dynamic System“ [27, 84] modelliert. Auch die Formulierung als allgemeines disjunktives Programm (General Disjunctive Program – GDP) [116, 133] ist möglich. All diese Formulierungen führen schließlich auf MINLPs zur Optimierung der Hybridsysteme. Anwendungsbeispiele finden sich für eine Batchdestillationsanlage [116], Trinkwassernetzwerke [96] und Rektifikationsanlagen [16].

Übersichten über numerische Algorithmen zum Lösen gemischt ganzzahliger Optimierungsprobleme sind in [67, 77] zu finden. Gemeinsam ist diesen Methoden, dass man das ursprüngliche, schwierig zu lösende MINLP in leichter zu lösende Teilprobleme aufteilt. Es wird dann abwechselnd im Raum der ganzzahligen Variablen und im Raum der kontinuierlichen Variablen gearbeitet. Die Aufteilung gemischt ganzzahliger nichtlinearer Optimierungsprobleme in Teilprobleme erfolgt in der Regel entweder durch eine Dekompositionsmethode [63, 73, 116, 156] oder mittels eines Suchbaumes, der den Raum der ganzzahligen Variablen abbildet [38, 67, 114]. Die Abbildungen 2.3 und 2.4 zeigen schematisch an den Beispielen der Äußeren Approximation (Outer Approximation, OA) [30, 84, 92] und des Branch and Bound Verfahrens (B&B) [63, 145, 156] die Prinzipien von Dekomposition (Abb. 2.3) und Suchbaum (Abb. 2.4).

Bei der Äußeren Approximation (Abb. 2.3) wird für ein kontinuierliches dynamisches Unterproblem ein nichtlineares Programm (NLP) mit festen ganzzahligen (z. B. binären) Variablen z gelöst. Die Lösung liefert einen Schätzwert für die kontinuierlichen Variablen x . Um diesen Wert x_{guess} herum erfolgt die Linearisierung des MINLP. Das resultierende gemischt ganzzahlige lineare Problem (Mixed-Integer Linear Program, MILP) lässt sich relativ leicht lösen und stellt in der k -ten Iteration eine bessere Konfiguration $z^{(k)}$ im Raum der ganzzahligen Variablen zur Verfügung. Mit dieser wird das dynamische Unterproblem erneut gelöst, was zu einem verbesserten x_{guess} führt. Es folgt die nächste Iteration k . Der Algorithmus bricht ab, wenn sich die Lösungen des MILP und des NLP nur noch um eine vordefinierte Toleranz unterscheiden.

Im Branch & Bound Verfahren (Abb. 2.4) wird zunächst die Lösung des rela-

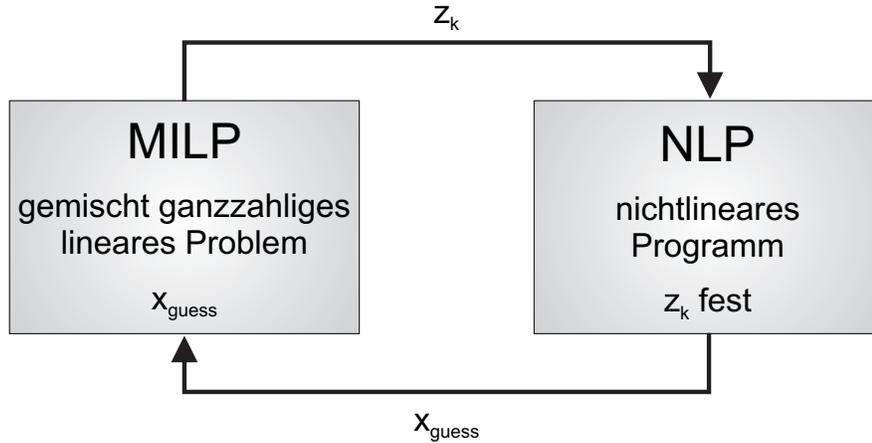


Abbildung 2.3: Optimierung der ganzzahligen Variablen durch Äußere Approximation im Rahmen der MINLP.

xierten Problems, d. h. eines NLPs mit $0 \leq z \leq 1$ berechnet, die die untere Schranke für die Lösung des gemischt ganzzahligen Problems darstellt. Außerdem wird eine obere Schranke J_{max} gesetzt. Anschließend wird ein NLP mit festem ganzzahligen z_1 (Branch) und relaxierten, d. h. kontinuierlichen z_2, \dots, z_N gelöst. Wird durch Festlegen der ganzzahligen Variable z_1 der zulässige Bereich leer, muss dieser Zweig nicht weiter untersucht werden (der Zweig wird “abgeschnitten”). Die Suche wird an diesem Zweig auch dann gestoppt, wenn für die gefundene Lösung der Zielfunktionswert $J_r^{(k)}$ größer als die obere Schranke ist (Bound). Ist dagegen $J_r^{(k)} < J_{max}$, und die Lösung ist ganzzahlig, wird $J_{max}^{(neu)} = J_r^{(k)}$ gesetzt und an einem anderen Zweig weiter nach einer noch besseren Lösung gesucht. Handelt es sich bei der gefundenen Lösung um eine nicht ganzzahlige Lösung, erfolgt die nächste Verzweigung für z_2 und ein NLP mit festen (ganzzahligen) z_1 und z_2 und relaxierten z_3, \dots, z_N wird gelöst. Durch das “Abschneiden” von Zweigen wird die Größe des Suchraumes und damit der erforderliche Rechenaufwand verringert. Im ungünstigsten Fall werden alle Konfigurationen der ganzzahligen Variablen untersucht. An der Lösung sind alle $z_i, i = 1, \dots, N$ ganzzahlig und für das zugehörige NLP wird Optimalität erreicht.

Wie zu sehen war, werden sowohl bei der OA als auch beim B&B-Verfahren im Raum der kontinuierlichen Variablen wiederholt kontinuierliche dynamische Unterprobleme als NLP gelöst. Hierfür nutzt man einen sequentiellen [44, 135] oder simultanen [9, 13, 32] Ansatz. Der simultane Ansatz fand im Rahmen der MINLP Anwendung auf Design und Steuerung von Destillationskolonnen [51, 116], chemische Reaktionen [12, 66] und industrielle Verdampfer [143]. Weitere erfolgreiche

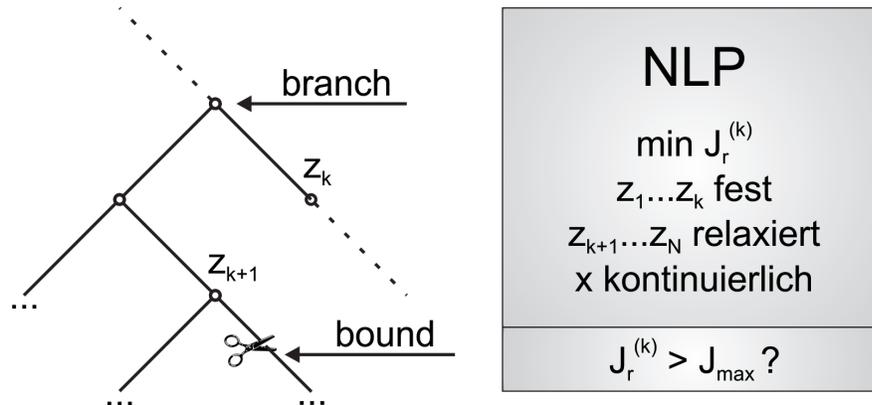


Abbildung 2.4: Optimierung der ganzzahligen Variablen durch Branch & Bound im Rahmen der gemischt ganzzahligen Programmierung.

Anwendungen finden sich in [30, 89, 92].

Handelt es sich bei der im MINLP enthaltenen Systembeschreibung um ein dynamisches Hybridsystem, weisen die ganzzahligen Variablen eine Zeitabhängigkeit auf. In diesem Fall muss theoretisch für jeden Zeitpunkt der Wert der ganzzahligen Variablen bestimmt werden. Bei gesteuerten Umschaltungen kann das Schalten zu jedem Zeitpunkt und beliebig oft erfolgen. Autonome Umschaltungen nutzen Informationen über den Systemzustand und finden unter genau definierten Bedingungen statt. Wann diese Bedingungen erfüllt sind, ergibt sich erst aus der Systemdynamik unter Beachtung der entsprechenden Steuergrößen. Da im Rahmen der gemischt ganzzahligen Programmierung keine kontinuierliche Zeit behandelt werden kann, müssen dynamische Probleme in einer angemessenen Weise diskretisiert werden und man betrachtet dann die Werte für z_{ij} in den Zeitintervallen $[t_j, t_{j+1}]$. Da diese z_{ij} dann auf dem Intervall konstant sind, ist es notwendig, dass die Umschaltunkte auf den Intervallgrenzen liegen. Insbesondere für Systeme mit autonomem Schaltverhalten ist dies problematisch. Außerdem erhält man bei Problemen mit zeitabhängigen ganzzahligen Variablen bei feinen Diskretisierungen einen sehr großen Suchraum. Der Rechenaufwand wird dann zur kritischen Größe [53].

Für vorliegende Arbeit wurde aus folgenden Gründen die Entscheidung getroffen, den Ansatz der gemischt ganzzahligen nichtlinearen Programmierung nicht weiter zu verfolgen:

- Aufgrund des kombinatorischen Charakters ist derzeit nicht zu erwarten, dass das Problem des mit der Systemgröße unter Umständen exponentiell steigenden Rechenaufwandes grundsätzlich gelöst werden kann. Es gibt Mög-

lichkeiten, den Rechenaufwand durch verschiedene Maßnahmen zu reduzieren (z. B. [142]). Bisher hat sich jedoch noch kein Verfahren durchgesetzt und die Beurteilung auf Grundlage weniger Anwendungsbeispiele birgt die Gefahr eines Fehltrags.

- Es existieren bereits qualitativ hochwertige Publikationen zum Thema und die Forschung wird weiterhin von Arbeitsgruppen vorangetrieben, die über langjährige Erfahrungen auf diesem Gebiet verfügen.
- Der Ansatz ist so komplex, dass allein die gemischt ganzzahlige nichtlineare Programmierung Inhalt einer eigenen Arbeit sein sollte, während hier die Untersuchung verschiedener Methoden, ihr Vergleich und die Entwicklung neuer Ideen im Vordergrund stehen sollen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Forschung zur gemischt ganzzahligen nichtlinearen Programmierung zwar weiterhin von großem Interesse ist, aus den genannten Gründen jedoch nicht Inhalt dieser Arbeit sein wird.

Als vielversprechende Alternative zur gemischt ganzzahligen nichtlinearen Programmierung bietet es sich an, einen Regularisierungsansatz zu verwenden. Dies ist vor allem bei autonomen Umschaltungen von Vorteil. Verschiedene Möglichkeiten zur Regularisierung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme werden im folgenden Abschnitt dargestellt.

2.3 Regularisierungsmethoden

Die Regularisierungsmethoden (Abb. 2.5) stellen die dritte Klasse von Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme dar. In der Literatur wird man sich häufiger der Bezeichnung “Relaxationsmethoden” begegnen. Hier wurde bewusst der Begriff “Regularisierungsmethoden“ gewählt, da innerhalb dieser Methodenklasse eine Abgrenzung zwischen Bestrafung, Glättung und Relaxation erfolgt (siehe Abbildung 2.1). Um eine begriffliche Verwirrung zu vermeiden, wird deshalb als Oberbegriff “Regularisierung” verwendet.

Die Regularisierungsmethoden basieren auf der Idee, das ursprüngliche hybride dynamische Optimierungsproblem auf geeignete Weise durch eine Folge leichter zu lösender kontinuierlicher dynamischer Optimierungsprobleme zu approximieren. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit wird die Annäherung an das ursprüngliche Hybridproblem durch einen kleiner werdenden so genannten Approximationsparameter quantifiziert. Die Hoffnung ist natürlich, dass die Lösungen des appro-

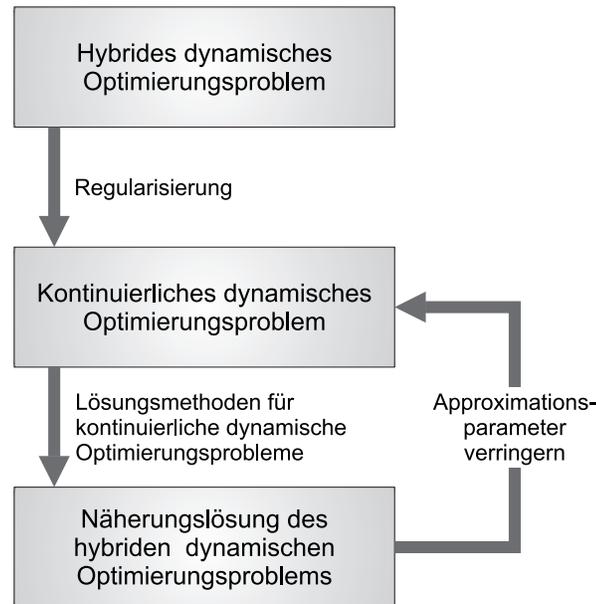


Abbildung 2.5: Lösung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme durch Approximation.

ximierten Problems bei kleiner werdendem Approximationsparameter gegen die Lösung des ursprünglichen Hybridproblems streben.

Die zur Regularisierung verwendeten Approximationsmethoden gehen zumeist auf Forschungsarbeiten über statische Optimierungsprobleme mit komplementären Beschränkungen zurück. Für statische Probleme gibt es zahlreiche theoretische Arbeiten zu Stationaritätsbedingungen der MPCCs [6, 49, 50, 65, 132], zur Beschränktheit und Eindeutigkeit der Lagrangemultiplikatoren und zur Konvergenz der Lösung approximierter, geglätteter Probleme gegen die Lösung des ursprünglichen MPCCs [6, 65, 85, 138, 144]. Außerdem wurden entsprechende Algorithmen zum Lösen der Probleme entwickelt [17, 91, 99, 130]. Über numerische Tests verschiedener Algorithmen anhand einer Reihe von Beispielproblemen wurde berichtet [24, 64, 98, 52].

Regularisierungsmethoden machen sich die Tatsache zunutze, dass im Unterschied zum ursprünglichen nicht-glatten MPCC das regularisierte Problem durch ein gewöhnliches Lösungsverfahren für nichtlineare Programme gelöst werden kann. Es sei hier betont, dass es nötig ist, eine Reihe solch approximierter Probleme zu lösen, um der Lösung des Originalproblems hinreichend nahe zu kommen. Die Approximation des MPCC, bzw. die Approximation der im MPCC enthaltenen komplementären Beschränkung kann durch Relaxation [24, 91, 132, 144], Straf-

verfahren [6, 24, 31, 85] oder Glättung erfolgen [24, 46, 62, 91, 132]. Bei der Relaxation wird die komplementäre Beschränkung so relaxiert, dass sie nur bis auf einen kleinen Relaxationsparameter erfüllt werden muss. Im Strafverfahren geht die komplementäre Beschränkung als Strafterm in die Zielfunktion ein. Bei der Glättung wird die komplementäre Beschränkung durch eine bis auf einen kleinen Parameter äquivalente, differenzierbare Funktion ersetzt. Unter Verwendung einer dieser Regularisierungsmethoden wird das Problem mit komplementärer Beschränkung in ein gewöhnliches glattes Problem mit kontinuierlichen Variablen verwandelt.

Da es sich bei den in dieser Arbeit betrachteten Problemen um dynamische Probleme handelt, sind neben den Regularisierungsmethoden Verfahren der dynamischen Optimierung anzuwenden, über deren Entwicklung und aktuellen Stand der folgende Abschnitt einen kurzen Überblick gibt.

2.4 Dynamische Optimierung kontinuierlicher Probleme

In den 1950er/60er Jahren begann man sich intensiv mit der kontinuierlichen dynamischen Optimierung zu beschäftigen. Dynamische Optimierung bedeutet, dass im Optimierungsproblem eine Modellbeschreibung, welche Differentialgleichungen zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung des Systems enthält, zu berücksichtigen ist. Die Zielfunktion kann - wie z. B. bei der Parameterschätzung oder Datenvalidierung - zur Bewertung der Abweichung zwischen einer Zeitreihe von Messdaten und den durch das Modell bestimmten Zustandstrajektorien dienen. Sie kann aber auch als Optimalsteuerungsproblem definiert sein, bei dem der Zustand des Systems zum Endzeitpunkt t_f (z. B. die Konzentration eines gewünschten Produktes bei einem chemischen Prozess), die Zeit bis zum Erreichen eines Referenzzustandes (z. B. eines neuen Arbeitspunktes) oder die Prozessführung über den gesamten Optimierungszeitraum (z. B. Energieverbrauch, Rohstoffkosten, Abweichung vom Referenzwert) bewertet wird.

Die Methoden zur Optimierung solcher zeitabhängiger Probleme können entweder der Klasse der indirekten Methoden oder der Klasse der direkten Methoden zugeordnet werden (siehe Abb. 2.6). Zu den indirekten Methoden gehören die dynamische Programmierung nach Bellman [25, 26] sowie das Maximumprinzip nach Pontryagin [126]. Diese beiden Ansätze sind allerdings für große Probleme, wie sie typischerweise aus praktischen Anwendungen resultieren, nicht oder kaum anwendbar [100].

Als Alternative zu den indirekten Methoden wurden die so genannten direkten Methoden entwickelt. Die Grundidee der direkten Methoden ist die Zeitdiskretisierung kontinuierlicher Steuer- und/oder Zustandsvariablen. Die direkten Methoden

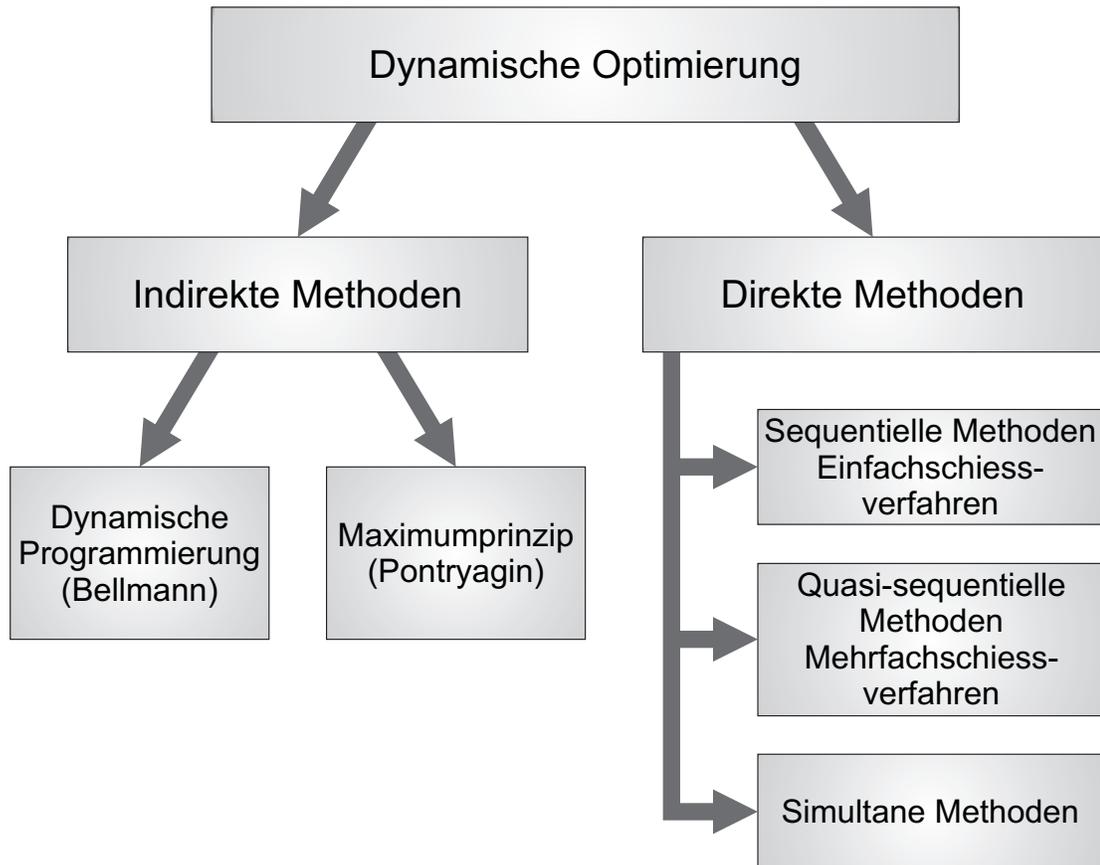


Abbildung 2.6: Methoden der dynamischen Optimierung.

lassen sich in sequentielle und simultane Methoden aufteilen [28, 30, 155]. Weiterentwicklungen (z. B. quasi-sequentielle Methoden bzw. Mehrfachschießverfahren) verbinden die Vorteile der sequentiellen und simultanen Methoden miteinander, indem sie Ideen beider Methoden nutzen [19, 36, 54, 83, 148, 159].

Bei den sequentiellen Methoden [47, 86, 155] kommt eine den in Abschnitt 2.1 beschriebenen heuristischen Verfahren ähnliche Programmstruktur zum Einsatz (Abb. 2.7). Die zeitlich variablen Steuergrößen werden parametrisiert, d. h. sie werden stückweise als Polynome dargestellt. Die Optimierungsvariablen sind dann die jeweiligen Polynomkoeffizienten und gegebenenfalls Parameter des Modells. Mit festen Anfangsschätzwerten all dieser Parameter kann dann das dynamische Modell integriert und die Zielfunktion berechnet werden. Die Auswahl neuer, verbesserter Parameter wird anhand der Gradienteninformation getroffen. Der Optimierungsalgorithmus bricht ab, wenn bestimmte Zielkriterien erfüllt sind. Der

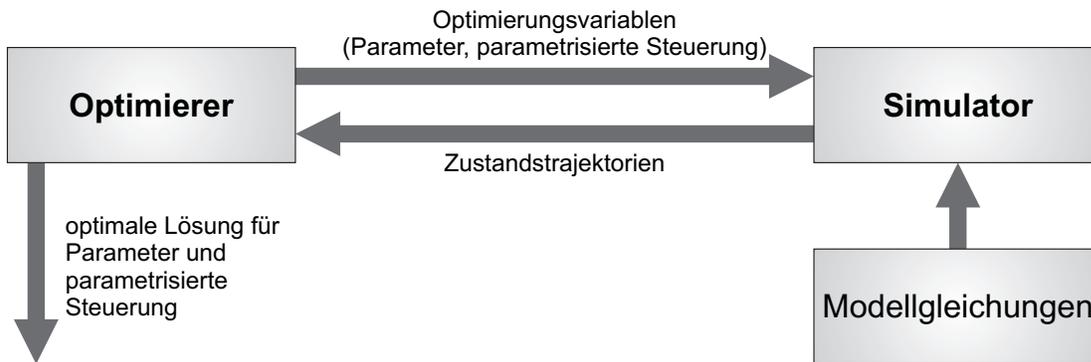


Abbildung 2.7: Struktur bei sequentiellen und heuristischen Verfahren.

Vorteil der sequentiellen Methoden besteht in der moderaten Größe des resultierenden NLPs. Da die Modellgleichungen durch Simulation gelöst werden, sind sequentielle Methoden einfach, aufgrund vielfach wiederholter Simulationsschritte jedoch rechnerisch aufwendig. Außerdem sind zeitkontinuierliche Nebenbedingungen schwierig einzubinden.

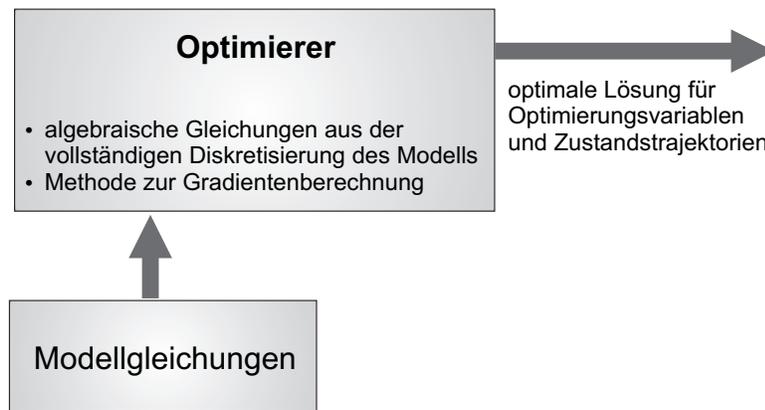


Abbildung 2.8: Struktur bei simultanen Verfahren.

Simultane Ansätze [30, 57, 134] binden das Lösen der Modellgleichungen direkt in die Optimierung ein (Abb. 2.8). Es ist also kein Simulationsschritt notwendig. Im Gegensatz zu den sequentiellen Verfahren werden hier neben den Steuergrößen auch alle anderen kontinuierlichen Variablen des dynamischen Modells diskretisiert, so dass ein großes NLP entsteht, weil nicht nur die Modellparameter und die parametrisierten Steuerungen sondern auch die diskretisierten Zustandsvariablen als Optimierungsvariablen behandelt werden. Da aber die dünne (sparse)

Besetzung der entstehenden Matrizen vom NLP-Solver ausgenutzt werden kann, sind diese Verfahren bzgl. des Rechenaufwandes auch für große Probleme noch effizient. Zeitkontinuierliche Nebenbedingungen werden ebenso wie die übrigen Systemgleichungen diskretisiert und können deshalb leicht in das NLP integriert werden.

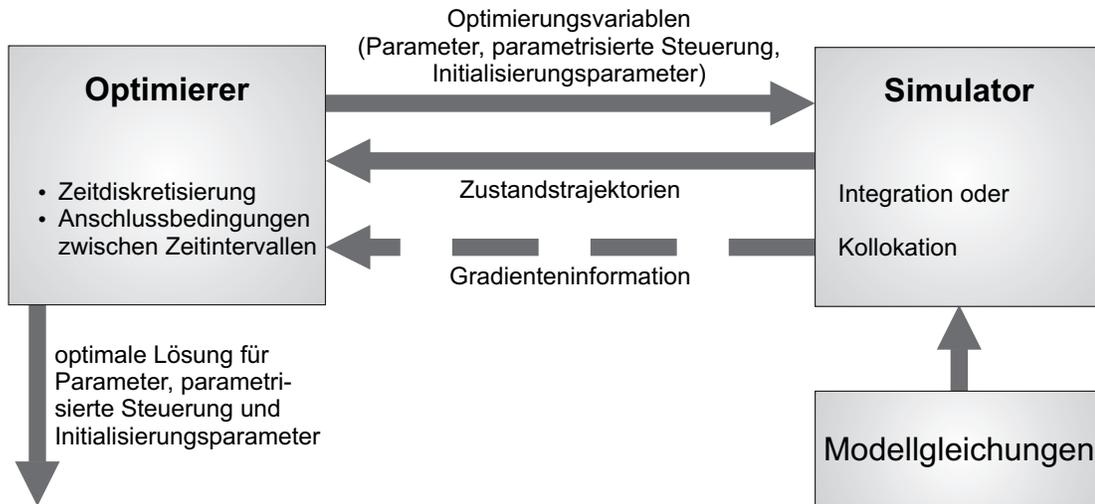


Abbildung 2.9: Struktur beim Mehrfachschießverfahren.

Als Beispiel einer Mischform der sequentiellen und simultanen Methoden wird in Abb. 2.9 die Struktur für das Mehrfachschießverfahren gezeigt. Auch hier gibt es einen Optimierer und einen Simulator. Die Steuerungen werden parametrisiert. Für die Zustandsvariablen wird ebenfalls eine Zeitdiskretisierung durchgeführt. Für jedes so entstandene Zeitintervall werden zusätzliche Initialisierungsparameter eingeführt, durch die einerseits das Modellsystem zu Beginn des Intervalls initialisiert wird und andererseits die Kontinuität der Zustandsgrößen erreicht werden soll.

Als Optimierungsvariablen werden jetzt die Modellparameter, die parametrisierten Steuerungen und die Initialisierungsparameter an den Simulator übergeben. Im Simulator werden die Modellgleichungen separat für jedes Zeitintervall entweder durch Integration oder durch Kollokation z. B. mit dem Newton-Raphson-Verfahren gelöst. Wichtig ist, dass die Gradienten an allen Stützstellen effizient berechnet werden können. Der Vorteil dieser Struktur ist, dass hier auch zeitabhängige Nebenbedingungen berücksichtigt werden können. Zugleich wird durch die Simulationssschritte die Anzahl der Optimierungsvariablen im Vergleich zum simultanen Ansatz verringert.

Die benötigte Diskretisierung der Modellgleichungen kann im einfachsten Fall mittels des expliziten Euler-Verfahrens durchgeführt werden. Fortgeschrittenere Methoden nutzen die Kollokation auf finiten Elementen [61]. Durch die Kollokation erreicht man schon mit relativ wenigen Zeitintervallen eine gute Genauigkeit [8, 53, 149]. Solch effiziente Lösungsverfahren für kontinuierliche dynamische Probleme werden in [9, 13, 19, 61, 51, 149] beschrieben und z. B. auf die Batchdestillation [102, 161], gekoppelte Kolonnensysteme [83, 159] und das Anfahren von Rektifikationsanlagen [161] angewandt.

In der Anwendung auf dynamische Hybridsysteme wurde die Verbindung von Regularisierungsmethoden für MPCC (Abschnitt 2.3) mit dynamischer Programmierung in [23, 31] durch differentielle Inklusionen vom Filippov-Typ [60] realisiert. Eine Glättungsmethode wurde für die optimale Steuerung für ein mechanisches System eingesetzt [146]. Zur Parameterschätzung für des Modell eines metabolischen Fließgleichgewichtes wurden Variationsungleichungen bei der Glättung des Optimierungsproblems verwendet [131].

Wie in diesem Abschnitt zu sehen war, wurden verschiedene Methoden zum Lösen kontinuierlicher dynamischer Optimierungsprobleme entwickelt und einige davon auch bei der Optimierung dynamischer Hybridsysteme eingesetzt. Auch in diese Arbeit baut die Optimierung dynamischer Hybridsysteme auf der Optimierung kontinuierlicher dynamischer Probleme auf. Für vorliegende Arbeit wurde ein simultaner Ansatz gewählt, bei dem die vollständige Diskretisierung des Problems nach dem Schema der orthogonalen Kollokation, die später in Abschnitt 5.2 beschrieben wird, erfolgt.

Kapitel 3

Beschreibung dynamischer Hybridsysteme

Da die vorliegende Arbeit Optimierungsprobleme zum Thema hat, deren Nebenbedingungen durch die Modellbeschreibung des jeweils betrachteten dynamischen Hybridsystems gegeben sind, wird sich dieses Kapitel zunächst mit den Besonderheiten der Modellierung von Hybridsystemen beschäftigen. Anschließend wird kurz auf die Anforderungen an DAE-Systeme bezüglich ihrer Lösbarkeit eingegangen, bevor Eigenschaften der Schaltvorgänge diskutiert werden. Die Ausführungen dieses Kapitels werden im zweiten Teil der Arbeit bei der Optimierung dynamischer Hybridsysteme als Grundlage dienen.

3.1 Modellierung dynamischer Hybridsysteme

Die Modellierung dynamischer kontinuierlicher und hybrider Systeme führt wie üblich zu Beschreibungen durch DGL- oder DAE-Systeme (siehe Abb. 3.1). Allgemein sollen die (systeminternen) differentiellen Zustandsvariablen mit $x(t)$ und die algebraischen Zustandsvariablen mit $y(t)$ bezeichnet werden. Die Trajektorien $x(t)$ und $y(t)$ hängen von dem Anfangszustand x_0 , den Modellparametern p sowie den Steuer- bzw. Eingangsgrößen $u(t)$ ab. Es wird vereinfachend angenommen, dass die systeminternen Variablen $x(t)$ und $y(t)$ zugleich die Ausgangsgrößen des Systems sind. An dieser Stelle wurde noch keine Annahme über die Stetigkeit der Zustandstrajektorien gemacht. Dieser Punkt ist aber dann von Bedeutung, wenn es sich um ein Hybridsystem handelt. In den folgenden Abschnitten wird zunächst der Begriff “dynamisches Hybridsystem” definiert. Anschließend werden ausgehend von einem einfachen Beispiel die Komponenten des Modells eines dyna-

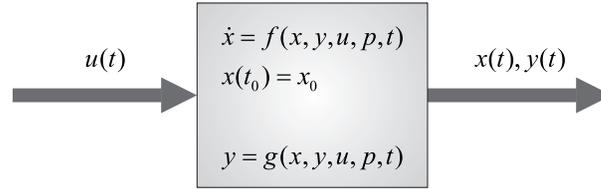


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung des Modells eines dynamischen Systems.

mischen Hybridsystems eingeführt (Abschnitt 3.1.2). Abschnitt 3.1.3 veranschaulicht die Zeitentwicklung eines dynamischen Hybridsystems, welches sich durch ein Modell gemäß Abschnitt 3.1.2 beschreiben lässt. In Abschnitt 3.1.4 werden binäre Variablen zur Auswahl von Betriebsmodi des Systems eingeführt, um das Modell für einige später zu behandelnde Formulierungen hybrider dynamischer Optimierungsprobleme vorzubereiten.

3.1.1 Definition eines dynamischen Hybridsystems

In Anlehnung an Cellier [41] wird ein Hybridsystem als ein System definiert, dessen Entwicklung während eines Zeitintervalls (t_0, t_f) durch eine feste oder variable Menge von DGLs oder DAEs beschrieben wird, wobei mindestens eine Zustandsvariable oder ihre Zeitableitung innerhalb des betrachteten Zeithorizonts nicht kontinuierlich ist. Demnach sind Hybridsysteme durch die enge Kopplung zwischen diskreten und kontinuierlichen Elementen ihrer Zeitentwicklung charakterisiert. Die kontinuierliche Entwicklung wird üblicherweise durch DGLs oder DAEs beschrieben. Daneben treten Elemente auf, wie z. B. Entscheidungsvariablen (boolean variables), ganzzahlige Variablen (integer variables) oder Variablen, für die nur diskrete Werte zugelassen sind.

3.1.2 Modellkomponenten

Um die Komponenten eines dynamischen Hybridmodells zu erklären, soll zu Beginn dieses Abschnitts ein einfaches Tanksystem (Abb. 3.2) beschrieben werden. Die Dynamik dieses Systems ist durch die Massenbilanz

$$\frac{dm}{dt} = F_{ein} - F_{aus} - F_{\text{Überlauf}} \quad (3.1)$$

mit

$$\begin{aligned} F_{ein} &= v \cdot F_{max}, \quad v = \{v_1, v_2, v_3\}, \\ F_{aus} &= f_1(h), \\ F_{\ddot{U}berlauf} &= \begin{cases} f_2(h) & \text{wenn } h \geq h_{krit} \\ 0 & \text{wenn } h < h_{krit} \end{cases} \end{aligned}$$

gegeben. Hier bezeichnen m den Masseninhalt des Tanks, F_{ein} den durch das diskret schaltbare Ventil 1 gesteuerten (zustandsunabhängigen) Massenzufluss, v die Öffnung dieses Ventils, F_{aus} den (zustandsabhängigen) Massenabfluss am Tankauslass und $F_{\ddot{U}berlauf}$ den (zustandsabhängigen) Massenausfluss, der erst bei Erreichen eines kritischen Füllstandes h_{krit} aktiviert wird.

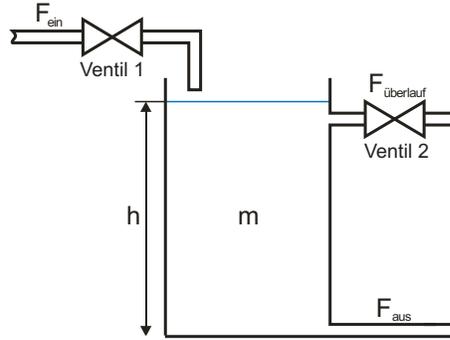


Abbildung 3.2: Tanksystem.

Solange z. B. das Ventil 1 in seiner anfänglichen Position verharrt und der Füllstand unterhalb des kritischen Füllstandes bleibt, beschreibt Gleichung (3.1) mit $F_{ein} = const \cdot F_{max}$, $F_{\ddot{U}berlauf} = 0$ die kontinuierliche Entwicklung des Masseninhaltes. Wird jedoch das Ventil 1, welches in diesem Modell nur über die diskreten Positionen $v = \{v_1, v_2, v_3\}$ verfügt, geschaltet, oder wird der kritische Füllstand erreicht, ändert sich instantan der Massenzu- oder -abfluss. Dieses Umschalten lässt sich als Schalten zwischen verschiedenen “Betriebsmodi” $m \in M$ auffassen, wobei sich für dieses einfache Tankbeispiel 3×2 Modi ergeben, welche durch die DGLs

$$\frac{dm}{dt} = F_{ein,i} - F_{aus} - F_{\ddot{U}berlauf,j}, \quad i = 1, 2, 3, j = 1, 2$$

beschrieben werden. Die Trajektorien des Masseninhaltes, der Zu- und Abflüsse sowie deren Ableitungen zeigen an Umschaltpunkten Knicke bzw. Sprünge.

Die anhand dieses konkreten Beispiels eingeführten Bestandteile eines dynamischen Hybridsystems sollen nun verallgemeinert werden. Die folgenden Elemente charakterisieren ein dynamisches Hybridsystem:

1. Es existiert eine endliche Indexmenge M verfügbarer Modi.
2. Das System wird durch eine endliche Anzahl differentieller Variablen $x = \{x_{n_x}, n_x = 1 \dots N_x\}$ und algebraischer Variablen $y = \{y_{n_y}, n_y = 1 \dots N_y\}$ mit den Differentialgleichungen $0 = \mathcal{F}^{(m)}(\dot{x}, x, y, u, t)$ und den algebraischen Gleichungen $0 = \mathcal{G}^{(m)}(x, y, u, p, t)$, $[\mathcal{F}^{(m)}, \mathcal{G}^{(m)}]^\top : \mathbb{R}^{N_x(m)} \times \mathbb{R}^{N_x(m)} \times \mathbb{R}^{N_y(m)} \times \mathbb{R}^{N_u(m)} \times \mathbb{R}^{N_p(m)} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{N_x(m)} \times \mathbb{R}^{N_y(m)}$ für jeden Modus beschrieben. Die unabhängigen Variablen sind durch die zeitvarianten Steuergrößen $u = \{u_{n_u}, n_u = 1 \dots N_u\}$, die zeitinvarianten Parameter $p = \{p_{n_p}, n_p = 1 \dots N_p\}$ sowie die Zeit t gegeben.
3. Die konsistente Initialisierung (x_0, y_0) gibt den Systemzustand zur Zeit t_0 wieder, d. h. unter der Bedingung $x(t_0) = x_0$ genügen die Anfangswerte $y(t_0)$ den algebraischen Gleichungen.
4. Die so genannte Schaltfläche im erweiterten Phasenraum $\mathbb{R}^{n_x+n_y+1}$

$$\Sigma_{mk} := \{(x, y, t) : \psi^{mk}(x, y, t) = 0\} \quad (3.2)$$

enthält die Schaltfunktionen $\psi^{mk}(x, y, t)$ für die Übergänge zu allen vom jeweils aktuellen Modus m erreichbaren Modi k . Diese Übergangsbedingungen können vom Systemzustand (implizite Schaltbedingung) oder von der Zeit (explizite Schaltbedingung) abhängen. Das Verhalten der Schaltfunktionen in der Nähe des Umschaltpunktes wird unten noch genauer zu diskutieren sein.

5. Die Übergangsfunktionen $\mathcal{T}^{mk}(x^-(t_s))$ bilden den Endzustand des Vorgängermodus x^- zur Schaltzeit t_s auf den Initialzustand des Nachfolgemodus ab.

Die Trajektorien der Systemvariablen bestehen also aus einer Reihe von so genannten Epochen $\mathcal{I} = \{J_i := [t_{i-1}, t_i], i = 1 \dots N_{ep}\}$, in denen sich das System im jeweils aktuellen Modus befindet. Die Abfolge der Modi wird in $\mathcal{M} = \{m_i, m \in M, i = 1 \dots N_{ep}\}$ zusammengefasst. Das Umschalten kann im Wechsel mindestens einer Modellgleichung $f_{n_x}^{(m)}(x, y, u, t)$ oder $g_{n_y}^{(m)}(x, y, u, t)$ zum Schaltzeitpunkt oder einem durch $\mathcal{T}^{mk}(x^-(t_s))$ bestimmten Sprung mindestens einer Zustandsvariablen bestehen. Im ersten Fall bezeichnet man die Umschaltungen als Schalter, im zweiten Fall als Impuls [122]. Laut dieser Klassifikation lassen sich beim einführenden Tankbeispiel die Umschaltungen des Eingangsventils als Impuls einordnen. Die Änderung der Gleichung für den Überlauf, die aus dem Überschreiten des kritischen Füllstandes resultiert, stellt hingegen einen Schalter dar. Eine Unterscheidung des Umschaltverhaltens als gesteuert bzw. autonom

ergibt sich aus expliziten bzw. impliziten Schaltbedingungen. Die explizite Schaltfunktion $\psi(t) = t - t_s$ hängt lediglich von der Zeit ab und erlaubt die Vorgabe und damit die Steuerung des Schaltverhaltens von außen (siehe z. B. das Umschalten des Einlassventils im Tankbeispiel). Implizite Schaltfunktionen $\psi(x, y)$ bewirken autonomes, vom Systemzustand abhängiges Umschalten. Abbildung 3.3 zeigt den

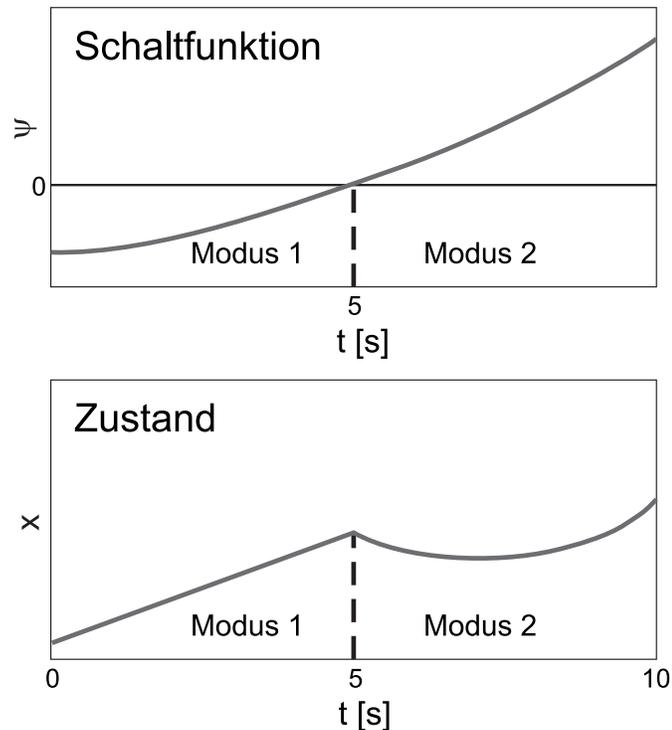


Abbildung 3.3: Implizites Schalten.

Zustand eines autonom schaltenden Systems in Abhängigkeit von der Zeit (unten). Diesem Zustand entspricht jeweils ein Wert der Schaltfunktion (oben). Wenn die Schaltbedingung $\psi(x) = 0$ erreicht ist, schaltet das System vom Modus 1 in den Modus 2. Das Umschalten wird als Knick in der Zustandstrajektorie sichtbar. Ein Beispiel für autonomes Umschalten ist das Aktivieren des Überlaufes beim Tank unter der Bedingung, dass der kritische Füllstand erreicht oder überschritten wurde.

In dieser Arbeit wird die Optimierung von Systemen mit autonomen Schaltvorgängen untersucht.

3.1.3 Zeitentwicklung eines dynamischen Hybridsystems

Wie die Komponenten eines autonom schaltenden dynamischen Hybridsystems (Abschnitt 3.1.2) die Zeitentwicklung dieses Systems bestimmen, wird durch Abb. 3.4 am Beispiel eines Systems mit drei Betriebsmodi veranschaulicht: Die Menge

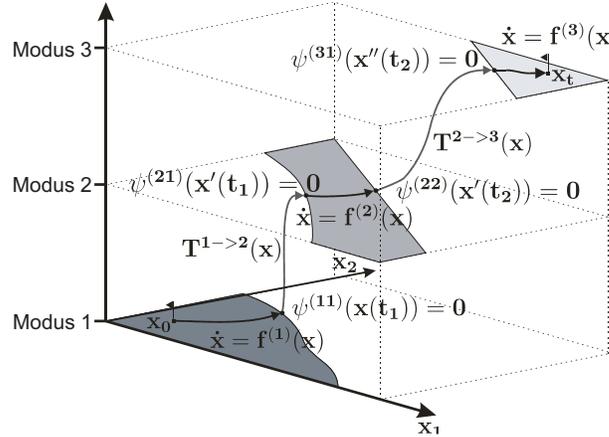


Abbildung 3.4: Zeitentwicklung eines Hybridsystems.

der Modi $M = \{1, 2, 3\}$ wird durch die drei Ebenen symbolisiert. Zu Beginn seiner Entwicklung befindet sich das System im Modus $m = 1$ mit den Initialwerten $x(t_0) = x_0$. Die Gleichungen $0 = \mathcal{F}^{(1)}(\dot{x}, x, y, u, t)$ und $0 = \mathcal{G}^{(1)}(x, y, u, t)$ bestimmen die Entwicklung in der (dunkelgrauen) Ebene des Modus 1. Wird die erste Schaltbedingung zur Zeit t_1 erfüllt, d. h. $\psi^{(12)} = 0$, springt der Systemzustand $(x(t_1), y(t_1))^-$ gemäß \mathcal{T}^{12} auf $(x(t_1), y(t_1))^+$, und der neue Satz von Gleichungen $0 = \mathcal{F}^{(2)}(\dot{x}, x, y, u, t)$ und $0 = \mathcal{G}^{(2)}(x, y, u, t)$ wird aktiviert. Die Entwicklung in diesem Modus (mittelgraue Fläche) endet zur Übergangszeit t_2 , wo das System zu $m = 3$ übergeht. Es folgt eine Periode der kontinuierlichen Entwicklung in diesem Modus, z. B. bis ein gewünschter Targetzustand x_t erreicht ist. Soll das Systemverhalten lediglich simuliert werden, ist die Beschreibung aus Abschnitt 3.1.2 hinreichend. Soll das Modell hingegen die Nebenbedingungen eines Optimierungsproblems repräsentieren, kann es sinnvoll sein, die Auswahl der Modi durch binäre Variablen zu beschreiben. Diese wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

3.1.4 Auswahl der Betriebsmodi mittels binärer Variablen

Anhand der Definitionen (1-5) aus Abschnitt 3.1.2 wird sofort klar, wie eng die diskrete mit der kontinuierlichen Systemdynamik verbunden ist. Soll das hybride

Modell zur Optimierung verwendet werden, ist es sinnvoll, die diskrete und kontinuierliche Dynamik zunächst entsprechenden formal unabhängigen binären bzw. kontinuierlichen Variablen zuzuordnen. Hierdurch wird später die Behandlung der Umschaltungen in einem Optimierungsproblem erleichtert. In das oben eingeführte Tankbeispiel führt man deshalb für die beiden zu treffenden Entscheidungen bezüglich der Stellung des Ventils 1 die Variablen $z_{1,i}$, $i = 1, \dots, 3$ und bezüglich des Zustandes des Überlaufs (ein/aus) die Variable z_2 ein, so dass im Modell

$$\frac{dm}{dt} = F_{ein,i} - F_{aus} - F_{\text{Überlauf}}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.3)$$

$$F_{ein} = \sum_{i=1}^{M=3} z_{1,i} \cdot v_i \cdot F_{max}, \quad (3.4)$$

$$F_{aus} = f_1(h), \quad (3.5)$$

$$F_{\text{Überlauf}} = z_2 \cdot f_2(h), \quad (3.6)$$

$$z_{1,i} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } t \in [t_{i,min}, t_{i,max}]^{(k)}, \quad k = 1, \dots, N_{vi} \\ 0 & \text{wenn } t \notin [t_{i,min}, t_{i,max}]^{(k)} \end{cases} \quad (3.7)$$

$$z_2 = \begin{cases} 1 & \text{wenn } h \geq h_{krit} \\ 0 & \text{wenn } h < h_{krit} \end{cases} \quad (3.8)$$

$$t_s : t = t_{i,max}^{(k)} \vee h = h_{krit}, \quad (3.9)$$

$$t \in [t_0, t_f] \quad (3.10)$$

die Gleichungen der kontinuierlichen Systemdynamik (3.3, 3.6) keine explizite Entscheidung sondern stattdessen die binären Variablen z enthalten. Die jeweils aktuellen Werte der binären Variablen hängen vom “diskreten Teil” des Modells (3.7-3.8) ab. Die Schaltbedingung (3.7) muss so formuliert sein, dass jeweils nur ein z_1 ungleich 0 sein kann. Die Zeitpunkte $t_{i,max}^{(k)}$ der gesteuerten Schaltvorgänge zwischen den Ventilstellungen und damit die Werte der Entscheidungsvariablen z_1 werden als Eingangsgrößen von außen vorgegeben oder ihre optimalen Werte sind durch die Optimierung zu bestimmen. Die Zeitpunkte der autonomen Schaltvorgänge, d. h. die Werte von z_2 (3.8), werden hingegen anhand der Werte der zugehörigen Schaltfunktionen (3.8) bestimmt. Es ist zu beachten, dass das Modell (3.3)-(3.10) die zeitkontinuierliche Entwicklung des Systems beschreibt, die $(z_{1,i}, z_2)$ also *zeitkontinuierliche*, aber *wertdiskrete* Variablen sind.

Für ein allgemeines dynamisches Hybridsystem sind nach Einführung der binären Variablen die Definitionen (1-5) zu ergänzen:

1. Die Anzahl N_z der binären Variablen $z = \{z_{e,m_e}, e = 1 \dots N_e, m_e = 1 \dots N_{m_e}\}$

ergibt sich als $N_z = \sum_{e=1}^{N_e} N_{e,m_e}$ aus der Anzahl der zu treffenden Entscheidungen $N_e = N_{e,c} + N_{e,a}$ und der Anzahl der Modi pro Entscheidung N_{m_e} . $N_{e,c}$ und $N_{e,a}$ sind die Anzahlen der kontrollierten und autonomen Entscheidungen.

2. Die binären Variablen gehen in die Modellgleichungen ein, so dass $0 = \mathcal{F}(\dot{x}, x, y, z, u, t)$ und $0 = \mathcal{G}(x, y, z, u, p, t)$, $[\mathcal{F}, \mathcal{G}]^\top : \mathbb{R}^{N_x} \times \mathbb{R}^{N_x} \times \mathbb{R}^{N_y} \times \mathbb{R}^{N_z} \times \mathbb{R}^{N_u} \times \mathbb{R}^{N_p} \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^{N_x} \times \mathbb{R}^{N_y}$.
3. Für alle kontrollierten Umschaltungen bestimmt die Zugehörigkeit der aktuellen Zeit zu einem der vordefinierten Intervalle die Werte der entsprechenden binären Variablen, und die Gleichheit der aktuellen Zeit mit der Endzeit eines solchen Intervalls definiert die Umschaltzeit.
4. Für die autonomen Umschaltungen bestimmen die Schaltfunktionen die Übergangsbedingungen und damit sowohl die Werte der entsprechenden binären Variablen als auch die Zeitpunkte der impliziten Schaltvorgänge.

Das allgemeine Modell lautet somit

$$0 = \mathcal{F}(\dot{x}, x, y, z, u, p, t), \quad (3.11)$$

$$0 = \mathcal{G}(x, y, z, u, p, t),$$

$$z_m = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \psi^{mk}(x, y) > 0, \quad \forall k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$t_s : \quad \psi^{mk}(x, y) = 0, \quad (3.12)$$

$$x(t_0) = x_0, \quad x(t_s)^+ = \mathcal{T}^{mk}(x(t_s)^-). \quad (3.13)$$

Die differentiellen und algebraischen Gleichungen enthalten also nun die Entscheidungsvariablen z , wodurch zu jedem Zeitpunkt die für den aktuellen Modus relevante Gleichung "aktiviert" wird. Die Schaltzeiten werden durch die Schaltbedingung (3.12) bestimmt. Durch (3.13) sind die Initialzustände zur Zeit t_0 und zu allen Zeitpunkten t_s im jeweils aktuellen Modus gegeben.

3.2 Lösbarkeit hybrider DAE-Systeme

Die Lösbarkeit hybrider DAE-Systeme im Sinne von Existenz und Eindeutigkeit der Lösung soll in Abschnitt 3.2.1 diskutiert werden, weil sie Modelleigenschaften erfordert, die auch bei der Optimierung dynamischer Hybridsysteme von Bedeutung sind. Dies betrifft insbesondere die Beschreibung autonomer Schaltvorgänge durch Schaltfunktionen und Übergangsfunktionen. Ob Schaltfunktionen die

Umschaltzeitpunkte und Nachfolgemodi eindeutig bestimmen, kann anhand der Transversalität bzw. Tangentialität des Schaltens (Abschnitt 3.2.2) oder mit Hilfe der so genannten Richtungsableitungen (Abschnitt 3.2.3) festgestellt werden.

3.2.1 Existenz und Eindeutigkeit

Die theoretischen Aspekte der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen für geschaltete Systeme werden in [74, 105, 153, 162] diskutiert. Wunderlich [162] betrachtet kontinuierliche und allgemeine Lösungen für lineare geschaltete Systeme sowie die Erweiterung auf nichtlineare geschaltete Systeme. Als wesentliche Voraussetzungen für eine determinierte Zustandstrajektorie über den Zeithorizont (t_0, t_f) werden dort gefordert:

1. Die DAE-Systeme aller Modi müssen unter Voraussetzung konsistenter Anfangsbedingungen $(x_0^{(m)}, y^{(m)})$ lösbar sein. Dies bedeutet insbesondere
 - (a) Die Konsistenz der Anfangsbedingungen $(x_0^{(1)}, y^{(1)})$ für das DAE-System des Startmodus ist erforderlich, d. h. unter der Bedingung $x_0^{(1)}$ genügen die Anfangswerte $y_0^{(1)}$ den algebraischen Gleichungen.
 - (b) Die Anfangsbedingungen eines jeden neu aktivierten Modus müssen ebenfalls konsistent sein. Das bedeutet, dass der Endzustand des Vorgängermodus nach Anwendung der Übergangsfunktionen $\mathcal{T}^{mk}(x(t_s)^-)$ in einen konsistenten Startzustand des neuen Modus führt.
 - (c) Für jeden einzelnen Modus ist die Anzahl abhängiger Variablen gleich der Anzahl der Gleichungen. Unabhängige Variablen, wie z. B. Steuergrößen müssen eindeutig bestimmt sein oder beispielsweise durch ein Optimierungsproblem bestimmt werden können.
2. Die Schaltzeiten müssen eindeutig bestimmbar sein. Als Kriterien für einen gutartigen Verlauf der Schaltfunktion in der Nähe des Umschaltpunktes, die z. B. auch zur eindeutigen Bestimmbarkeit der Schaltzeiten führen, werden einerseits die Transversalität bzw. Tangentialität des Schaltens [97] und andererseits Eigenschaften der Richtungsableitungen um den Schaltpunkt herum [122] diskutiert. Darauf wird weiter unten noch genauer eingegangen (siehe Abschnitte 3.2.2 und 3.2.3).
3. Die jeweiligen Nachfolgemodi müssen eindeutig bestimmbar sein. Da jede Schaltfläche ψ^{mk} den Übergang zu einem spezifischen Modus k darstellt, wird der Modus ausgewählt, dessen Schaltfläche zuerst erreicht wird. Erreicht der Systemzustand die Schaltfläche jedoch dort, wo sich zwei benachbarte Schaltflächen schneiden, ist der Nachfolgemodus nicht eindeutig bestimmt.

In diesem Fall ist eine zusätzliche Vereinbarung zum Vorrang eines der beiden möglichen Übergänge vonnöten.

Punkt 1 ist für die Existenz der Lösung essentiell. Die Punkte 2-3 sind für die eindeutige Lösbarkeit von Bedeutung. Auch bei Optimierungsproblemen für autonom schaltende Hybridsysteme sind die Konsistenz der Anfangsbedingungen aller Modi sowie die eindeutige Bestimmbarkeit der Schaltzeitpunkte und Nachfolgemodi erforderlich. Die Diskussion zur Transversalität bzw. Tangentialität der Schaltfunktion sowie zu den Eigenschaften der Richtungsableitungen, die für die eindeutige Bestimmbarkeit der Schaltzeiten wichtig sind, erfolgt in den beiden folgenden Abschnitten 3.2.2 und 3.2.3.

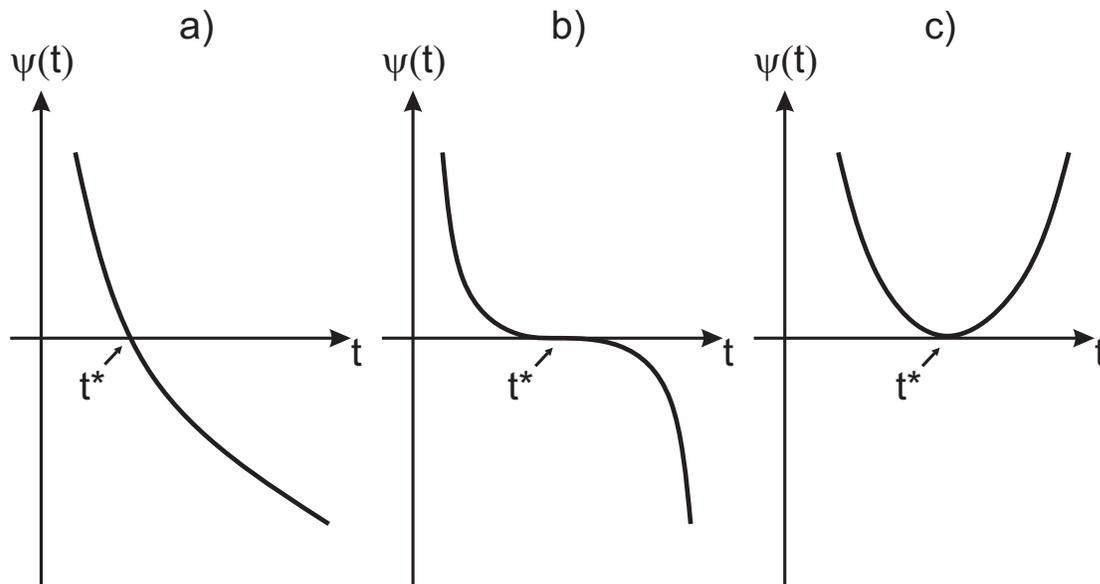


Abbildung 3.5: Transversale und Tangentiale Ereignisse bei Systemen mit implizitem Schalten.

3.2.2 Transversalität versus Tangentialität des Schaltens

Transversale Schaltvorgänge werden im Allgemeinen mit gutartigem Systemverhalten assoziiert [97]. Nach [160] sind alle Ereignisse transversal, bei denen die Zustandstrajektorie am Schaltpunkt nicht tangential zur Schaltfläche liegt. In ähnlicher Weise werden in [150] Funktionen (analog zu unseren Schaltfunktionen) definiert, welche eine Schaltmannigfaltigkeit (analog zur in dieser Arbeit beschriebenen Schaltfläche) definieren. Überträgt man die Argumentation aus [150] auf die

hier verwendete Terminologie, ist ein Ereignis als transversal anzusehen, wenn die Schaltfunktion, welche das Ereignis auslöst, am Ereignis das Vorzeichen wechselt und ihre erste Ableitung nicht verschwindet. Letztere Bedingung lässt sich durch die Formulierung abschwächen, dass ein transversales Ereignis dann vorliegt, wenn die Schaltfunktion in einer hinreichend kleinen Umgebung des Ereignisses das Vorzeichen wechselt. Beispiele für transversale und tangentiale Ereignisse finden sich in Abb. 3.5. Abbildung 3.5a zeigt den Verlauf der Schaltfunktion beim transversalen Schalten. Die Schaltfunktion ist monoton fallend, d. h. $d\psi/dt < 0$ und zum Zeitpunkt t^* wechselt die Schaltfunktion ihr Vorzeichen. In Abb. 3.5b ist am Zeitpunkt t^* zwar $d\psi/dt = 0$, aber auch hier findet ein Vorzeichenwechsel der Schaltfunktion statt. Deshalb lässt sich der Schaltvorgang im Fall b) ebenfalls als transversal bezeichnen [97]. In Abb. 3.5c ändert sich das Vorzeichen der Schaltfunktion zum Zeitpunkt t^* nicht. Hier liegt demnach tangentiales Schalten vor.

Um die Transversalität bzw. Tangentialität des Schaltens zu veranschaulichen, soll ein Beispielsystem¹ mit einer autonomen Schaltbedingung betrachtet werden:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \begin{cases} 4 - x & \text{wenn } \psi(x) \geq 0 \\ 0.7x & \text{wenn } \psi(x) < 0 \end{cases} & (3.14) \\ x(t_0) &= -3 \\ \psi(x) &= -x^3 + 5x^2 - 7x + p. \end{aligned}$$

Für Parameterwerte $p > 3$ hat die Schaltfunktion $\psi(x)$ eine Nullstelle, für Parameterwerte $p < 3$ drei Nullstellen und für $p = 3$ zwei Nullstellen. Abbildung 3.6 zeigt die Trajektorien $x(t)$ sowie die zugehörigen Schaltfunktionen, für die in der Legende angegebenen Parameterwerte. Die durch die Nullstellen der Schaltfunktionen ausgelösten Ereignisse werden hinsichtlich ihrer Transversalität untersucht, in dem man die erste Ableitung der Schaltfunktion berechnet und überprüft, ob zum Einen ein Vorzeichenwechsel der Schaltfunktion stattfindet und zum Anderen die Ableitung der Schaltfunktion ungleich Null ist. Beide Kriterien sind bei Parameterwerten $p > 3$ oder $p < 3$ für alle Nullstellen erfüllt. Die Ereignisse sind also transversal. Ist $p = 3$, verschwindet der Gradient der Schaltfunktion am Umschaltzeitpunkt $x_{0,1} = 1$ und es findet kein Vorzeichenwechsel statt. Somit liegt an diesem Punkt tangentiales Schalten vor.

3.2.3 Richtungsableitungen

Wie oben bereits erwähnt, kann anhand der so genannten Richtungsableitungen festgestellt werden, ob für ein dynamisches Hybridsystem ein gutartiges Schaltver-

¹Ein ähnliches Beispiel findet sich in [20].

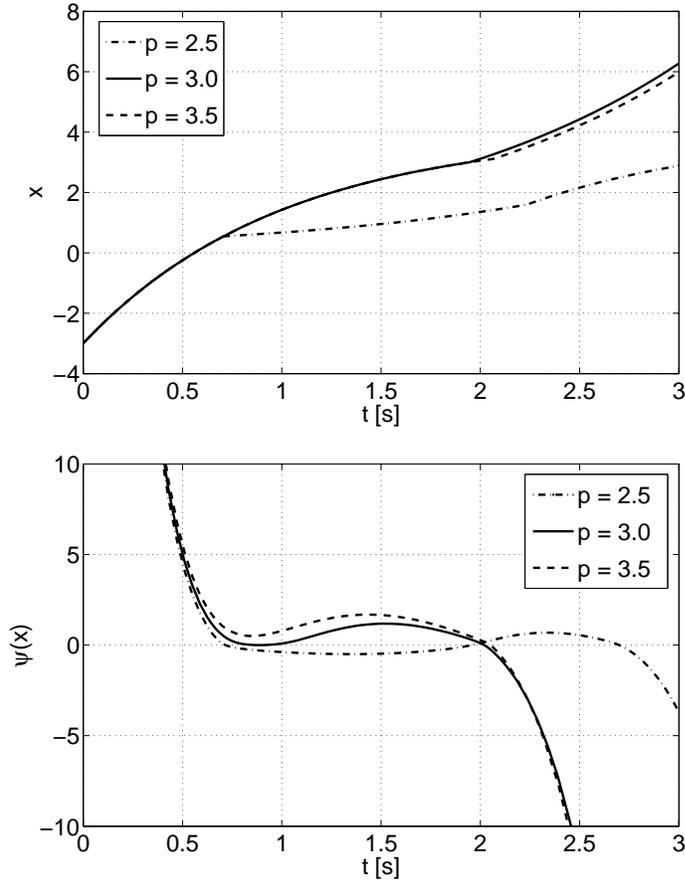


Abbildung 3.6: Zustandstrajektorien (oben) und Schaltfunktionen (unten) für das Beispiel (3.14).

halten mit eindeutig bestimmbareren Schaltzeiten zu erwarten ist. Die Richtungsableitungen der beiden benachbarten Betriebsmodi berechnen sich nach [123] gemäß

$$\begin{aligned}
 D^{(1)}\psi &= \frac{d^{(1)}\psi}{dt} = \nabla_x \psi \cdot \dot{x}^{(1)} + \nabla_t \psi, \\
 D^{(2)}\psi &= \frac{d^{(2)}\psi}{dt} = \nabla_x \psi \cdot \dot{x}^{(2)} + \nabla_t \psi.
 \end{aligned} \tag{3.15}$$

aus der Schaltfunktion $\psi(x)$. Dabei erfordert Gleichung (3.15) die Regularität der Schaltfunktion, wobei eine Schaltfunktion ψ dann als regulär bezeichnet wird, wenn sie stetig und außerhalb der Schaltfläche Σ glatt ist. Sie erfülle folgende Eigenschaft: Für eine Funktion $\psi^{(1)} = \psi$ gilt auf $\Sigma^{(1)} := \{x, y, t : \psi(x, y, t) > 0\}$.

Sie sei auf $\Sigma^{(1)} \cup U(\Sigma)$ glatt. Hierbei ist $U(\Sigma)$ eine hinreichend kleine Umgebung von Σ . Dieselben Eigenschaften gelten für eine analoge Funktion $\psi^{(2)}$ [122]. In der hier verwendeten Notation kennzeichnet $\Sigma^{(1)}$ den Punkt auf der Schaltfläche unmittelbar vor dem Umschalten vom Modus 1 in den Modus 2 und $\Sigma^{(2)}$ den entsprechenden Punkt unmittelbar nach dem Umschalten.

Um nun die Art des Umschaltverhaltens erkennen zu können, werden die Vorzeichen der Richtungsableitungen vor und nach dem Umschalten ausgewertet. Hängt die Schaltfunktion - wie im Fall impliziter Schaltfunktionen - nicht explizit von der Zeit ab, vereinfacht sich die Richtungsableitung zu $D\psi = \nabla_x \psi \cdot \dot{x}$. Ist zum Zeitpunkt des Eintretens der Zustandstrajektorie in die Schaltfläche $\nabla \psi_x f^{(1)} > 0$ und $\nabla \psi_x f^{(2)} > 0$ bzw. $\nabla \psi_x f^{(1)} < 0$ und $\nabla \psi_x f^{(2)} < 0$, so durchquert die Zustandstrajektorie die Schaltfläche in einem Winkel ungleich Null, d. h. sie verlässt die Schaltfläche unmittelbar nach dem Schaltvorgang (Abb. 3.7 links). Im obigen Beispiel soll für $p = 2.5$ der erste Umschaltzeitpunkt betrachtet werden: Die Schaltfunktion erreicht bei $x_{0,1} = 0.55$ von oben ihre erste Nullstelle. Die Ableitung der Schaltfunktion nach x ist an dieser Stelle $\nabla \psi_x < 0$. Die Zeitableitung des Zustandes vor dem Umschalten ist $\dot{x}^- = f^{(1)} > 0$ und nach dem Umschalten $\dot{x}^+ = f^{(2)} > 0$, d. h. $\nabla \psi_x f^{(1)} < 0$ und $\nabla \psi_x f^{(2)} < 0$ und die Trajektorie entfernt sich nach dem Umschalten von der Schaltfläche.

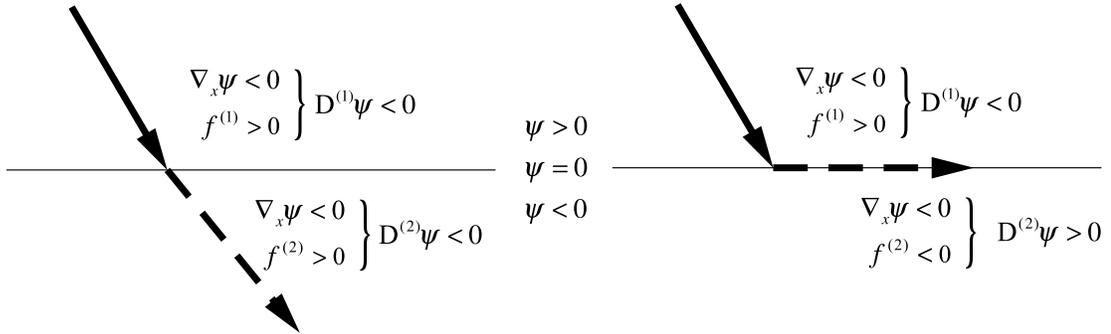


Abbildung 3.7: Bedeutung der Richtungsableitungen beim impliziten Schalten.

Im Falle, dass $D^{(1)}\psi > 0$ und $D^{(2)}\psi < 0$ bzw. $D^{(1)}\psi < 0$ und $D^{(2)}\psi > 0$, verläuft die Trajektorie in der Schaltfläche, bis eine dieser beiden Funktionen ihr Vorzeichen ändert (Abb. 3.7 rechts). Die Lösung wird als Filippov-Lösung oder auch gleitende Bewegung (“sliding motion”) bezeichnet. Solche Systeme sind für gewöhnliche Lösungsverfahren problematisch, können aber durch spezielle Verfahren gelöst werden [11, 80]. Bei der gleitenden Bewegung wird die Zeitentwicklung des Systems *in* der Schaltfläche durch die DGL

$$\dot{x} = \alpha f^{(1)} + (1 - \alpha) f^{(2)}, \quad \alpha \in [0, 1] \quad (3.16)$$

beschrieben [60, 105]. Durch Einsetzen von (3.16) in (3.15), erhält man für α und $(1 - \alpha)$ die expliziten Ausdrücke

$$\alpha = \frac{-D^{(2)}\psi}{D^{(1)}\psi - D^{(2)}\psi}, \quad (1 - \alpha) = \frac{D^{(1)}\psi}{D^{(1)}\psi - D^{(2)}\psi},$$

welche eingesetzt in (3.16) auf

$$\dot{x} = \frac{D^{(1)}\psi f^{(2)} - D^{(2)}\psi f^{(1)}}{D^{(1)}\psi - D^{(2)}\psi} \quad (3.17)$$

führen. Ein naheliegender Ansatz zur Behandlung von gleitender Bewegung ist, diese als neuen Modus aufzufassen mit

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \text{Gleichung (3.17)}, \\ \psi^{mk}(x, t) &= -D^{(1)}\psi \cdot D^{(2)}\psi, \\ \mathcal{T}^{mk}(x(t_s)^-) &= x(t_s)^+ - x(t_s)^-. \end{aligned}$$

Obwohl die Untersuchung von Systemen mit Filippov-Lösungen sicherlich vor allem aus theoretischer Sicht interessant wäre, sollen solche Systeme in der vorliegenden Arbeit nicht weiter betrachtet werden, da dies den Rahmen der Arbeit sprengen würde. Die Richtungsableitungen sind in dieser Arbeit insofern von Belang, als sich anhand der Gleichheit der Vorzeichen bzw. der Vorzeichenwechsel zwischen $\nabla\psi_x f^{(1)}$ und $\nabla\psi_x f^{(2)}$ leicht überprüfen lässt, ob ein Modellsystem zu den in der Arbeit betrachteten dynamischen Hybridsystemen ohne Filippov-Lösung gehört oder nicht.

Nachdem nun das Konzept eines Hybridsystems beschrieben und die Lösbarkeit sowie die Eigenschaften der Schaltfunktionen diskutiert wurden, werden sich die Ausführungen im Teil II Optimierungsproblemen zuwenden, deren Nebenbedingungen durch die in den Kapiteln 3.1.1 und 3.2 formalisierten dynamischen Hybridsysteme gegeben sind.

Teil II

Optimierung autonom schaltender dynamischer Hybridsysteme

Bei der Optimierung autonom schaltender dynamischer Hybridsysteme besteht die große Herausforderung darin, die gemischt diskret-kontinuierliche Dynamik so zu behandeln, dass ein sinnvoller Kompromiss hinsichtlich der hinreichend genauen Lösung des Optimierungsproblems, des damit verbundenen Rechenaufwandes und der Allgemeinheit der Problemformulierung und somit der Übertragbarkeit der Herangehensweise gefunden wird. Der Stand der Forschung ist, dass Löser für gemischt-ganzzahlige Probleme existieren, die aber bei zeitabhängigen ganzzahligen Variablen zu einem sehr hohen Rechenaufwand führen. Andererseits sind effektive Löser für nichtlineare kontinuierliche Probleme verfügbar. Wendet man jedoch Löser für nichtlineare kontinuierliche Programme auf Hybridsysteme an, kann meist keine Lösung gefunden werden. Für dynamische Probleme mit Schaltverhalten lässt sich vermuten, dass nur die Umschaltunkte zwischen den Betriebsmodi des Systems kritische Punkte sind, da nur hier Unstetigkeiten der Zustandstrajektorien oder ihrer Gradienten auftreten. Dieser Gedanke wird später wieder aufgegriffen, wenn in Kapitel 6 der Zerlegungsansatz für dynamische Hybridprobleme entwickelt wird. Vorerst soll das hybride dynamische Optimierungsproblem als Ganzes betrachtet werden. Baut man auf den gängigen direkten Methoden zur Lösung dynamischer Probleme (Abschnitt 2.4) auf, stellt man schnell fest, dass nicht allein die relativ wenigen Umschaltunkte kritisch sind. Wie bei den direkten Methoden üblich, wird zuerst eine Diskretisierung durchgeführt, die das Problem in ein zumeist sehr großes nichtlineares Programm überführt. In diesem diskretisierten Problem werden *für jeden Zeitpunkt* Nebenbedingungen formuliert, die die Komplementarität der Betriebsmodi sichern, denn die Umschaltzeiten sind nicht a priori bekannt. Zur Lösung dieses diskretisierten Problems verwendet man dann typischerweise einen Löser (z. B. IPOPT [157]), der mit derartigen Problemen umgehen kann. Allerdings verletzen in dem diskretisierten Problem die Ungleichungsnebenbedingungen, welche die Komplementarität der Betriebsmodi zu allen diskreten Zeitpunkten beschreiben, gerade an der Lösung die Bedingungen linearer Unabhängigkeit [6]. Die Erfüllung dieser Bedingungen würde garantieren, dass die Lagrange-Multiplikatoren eindeutig und beschränkt sind [115]. Bei Hybridsystemen werden jedoch die hybriden Eigenschaften des Modellsystems durch Ungleichungsnebenbedingungen modelliert, die an der Lösung gleichzeitig aktiv und deren Gradienten dort linear abhängig sind. Die Bedingungen linearer Unabhängigkeit können deshalb in diesem Fall nicht zur Überprüfung der Beschränktheit und Eindeutigkeit der Lagrange-Multiplikatoren herangezogen werden.

Diese Schwierigkeit beim Lösen des Optimierungsproblems sollte verschwinden, wenn es möglich ist, diese kritischen Ungleichungsnebenbedingungen, bzw. die Unstetigkeit der Zustandstrajektorien oder ihrer Gradienten zu eliminieren. Hierfür werden in dieser Arbeit zwei konzeptionell verschiedene Ansätze verfolgt.

Einerseits wird die Komplementarität zwischen den Betriebsmodi relaxiert, d. h.

es wird eine “Mischung” der Dynamiken der benachbarten Betriebsmodi gestattet, was zur Regularisierung des nicht-glaten Optimierungsproblems führt. Die Regularisierung bewirkt also die Glättung des zu lösenden Problems, so dass das regularisierte Problem die Bedingungen linearer Unabhängigkeit erfüllt. Die Regularisierung muss allerdings so durchgeführt werden, dass das korrekte Schaltverhalten des Systems erhalten bleibt. Dies ist durch die Formulierung einer Näherung für die Komplementaritätsbedingung und iteratives Lösen verwandter Probleme zu erreichen.

Das andere in diesem Teil der Arbeit entwickelte Konzept “beseitigt” innerhalb des Optimierungsproblems die Knicke in den Trajektorien und bewirkt so die Eliminierung der Nichtglattheit. Dies kann durch Zerlegung des Problems in glatte Unterprobleme erreicht werden. Das Umschalten erfolgt dann gewissermaßen außerhalb der Optimierung. Hierbei ist allerdings die Kontinuität zwischen den Trajektorien der Teilprobleme zu gewährleisten. Außerdem muss die Wahl der Unteraufgaben zur Optimalität des Gesamtproblems führen. Zusätzlich ist es nötig, dass die Zeitpunkte der Übergänge zwischen den Betriebsmodi richtig bestimmt werden.

Die Implementierung der für diesen Teil der Arbeit benötigten Programme erfolgte für die in Kapitel 5 untersuchten Methoden in JModelica, einer Modelica-basierten Software zur Simulation und Optimierung dynamischer Systeme [3, 4]. Für die in Kapitel 6 vorgeschlagene Methode wurden die Programme dagegen in Matlab implementiert, da in diesem Fall die Funktionalität von JModelica nicht ausreichend war. Der Leser soll in dieser Arbeit jedoch nicht mit Details der Implementierung belastet werden. Deshalb sei der interessierte Leser sowohl für JModelica als auch für Matlab auf die vorhandenen umfangreichen Dokumentationen verwiesen.

In dem nun folgenden Kapitel 4 werden Eigenschaften statischer Probleme mit komplementären Beschränkungen und Regularisierungsmethoden für solche Probleme dargestellt. In Kapitel 5 werden Regularisierungsmethoden zum Lösen autonom schaltender dynamischer Optimierungsprobleme vorgeschlagen. Zunächst wird in Abschnitt 5.1 das Optimierungsproblem formuliert. Anschließend wird in Abschnitt 5.2 die für diese Arbeit verwendete Methode zum Lösen kontinuierlicher dynamischer Optimierungsprobleme erklärt. Auf den Ausführungen des Kapitels 4 aufbauend werden als Methoden zur Optimierung autonom schaltender Systeme in Kapitel 5 eine Glättungsmethode für dynamische Hybridsysteme (Abschnitt 5.3) und die Erweiterung eines Strafverfahrens (Abschnitt 5.3.4) vorgeschlagen. In Kapitel 6 wird als neuer Ansatz die Lösung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme mittels der Optimierung stückweise kontinuierlicher Teilprobleme diskutiert (Abschnitt 6.2).

Kapitel 4

Statische Probleme mit komplementären Beschränkungen

Da eine Reihe von Lösungsansätzen für dynamische Probleme mit komplementären Beschränkungen auf Methoden für “Mathematical Programs with Complementarity Constraints” (MPCCs), d. h. auf statische Probleme mit komplementären Beschränkungen zurückgehen, dient hier die allgemeine Formulierung eines MPCC gemäß

$$\min_x \mathcal{J}(x) \tag{4.1}$$

$$\text{mit } h(x) = 0, \tag{4.2}$$

$$g(x) \geq 0, \tag{4.3}$$

$$G(x)^\top H(x) = 0, \tag{4.4}$$

$$G(x), H(x) \geq 0 \tag{4.5}$$

mit der Zielfunktion $\mathcal{J} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, den kontinuierlichen Variablen $x \in \mathbb{R}^n$, den Gleichungsnebenbedingungen $h : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^p$ und $G(x)^\top H(x) : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ sowie den Ungleichungsnebenbedingungen $g : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^q$, $G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ und $H : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ als Ausgangspunkt. Wenn das innere Produkt der beiden Vektorfunktionen $G(x)$ und $H(x)$ gleich 0 ist (4.4), spricht man auch von Komplementarität zwischen $G(x)$ und $H(x)$. Diese kann auch durch die Schreibweise $G(x) \perp H(x)$ ($G(x)$ orthogonal zu $H(x)$) ausgedrückt werden. Die Komplementarität zwischen den beiden Vektoren $G(x)$ und $H(x)$ wird später mit der Komplementarität zwischen den Betriebsmodi eines dynamischen Hybridsystems in Zusammenhang gebracht werden (siehe Kapitel 5).

An einem für das MPCC (4.1-4.5) zulässigen Punkt x^* sind die Nebenbedingungen

(4.2-4.5) erfüllt, und es lassen sich die Mengen der aktiven Ungleichungsnebenbedingungen

$$\begin{aligned}\mathcal{I}_g &\stackrel{\text{def}}{=} \{i \in \{1, 2, \dots, q\} \mid g_i(x^*) = 0\}, & (4.6) \\ \mathcal{I}_G &\stackrel{\text{def}}{=} \{i \in \{1, 2, \dots, m\} \mid G_i(x^*) = 0\}, \\ \mathcal{I}_H &\stackrel{\text{def}}{=} \{i \in \{1, 2, \dots, m\} \mid H_i(x^*) = 0\}\end{aligned}$$

definieren. Die in $\mathcal{I}_G \cup \mathcal{I}_H$ enthaltene Menge $\mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H$ wird als “biactive set” bezeichnet.

Relaxiert man das Problem (4.1-4.5), verschwinden die komplementären Nebenbedingungen (4.4, 4.5) und man erhält [132]

$$\min_x \quad \mathcal{J}(x) \quad (4.7)$$

$$\text{mit } h(x) = 0, \quad (4.8)$$

$$g(x) \geq 0, \quad (4.9)$$

$$G_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{I}_G \setminus \mathcal{I}_H, \quad (4.10)$$

$$H_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{I}_H \setminus \mathcal{I}_G, \quad (4.11)$$

$$G_i(x), H_i(x) \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H. \quad (4.12)$$

Im folgenden Abschnitt 4.1 wird dieses relaxierte Problem bei der Formulierung der Optimalitätsbedingungen für das MPCC (4.1-4.5) verwendet. In Abschnitt 4.2 wird dann der Vorteil des relaxierten Problems gegenüber dem Originalproblem bzgl. des Lösens der Probleme ausführlich behandelt.

4.1 Eigenschaften mathematischer Programme mit komplementären Beschränkungen

Im Allgemeinen können die optimalen Lösungen von MPCC durch Optimalitätsbedingungen erster und zweiter Ordnung charakterisiert werden.

4.1.1 Optimalitätsbedingungen erster Ordnung

Die Bedingungen erster Ordnung stellen notwendige Bedingungen dafür dar, dass x^* die Lösung eines Optimierungsproblems ist. Da sie jedoch sowohl im Falle eines Minimums als auch im Falle eines Maximums erfüllt werden, sind sie nicht hinreichend, sondern erfordern zusätzlich die Erfüllung der Bedingung zweiter Ordnung. Um die Lösung des Problems (4.1-4.5) später als solche identifizieren zu

können, sollen im Folgenden zunächst Definitionen der Stationarität betrachtet werden:

Definition 1. (B-Stationarität) [132] Ein für (4.1-4.5) zulässiger Punkt x^* ist Bouligand- oder B-stationär, wenn $d = 0$ das folgende lineare Problem mit Gleichgewichtsnebenbedingungen löst:

$$\begin{aligned} & \min_d \quad \nabla \mathcal{J}(x^*)^\top d & (4.13) \\ \text{mit} \quad & g(x^*) + \nabla g(x^*)^\top d \geq 0, \quad h(x^*) + \nabla h(x^*)^\top d = 0, \\ & 0 \leq G(x^*) + \nabla G(x^*)^\top d \perp H(x^*) + \nabla H(x^*)^\top d \geq 0. \end{aligned}$$

Der Nachteil dieser Definition ist, dass B-Stationarität im Allgemeinen schwer zu überprüfen ist, da hierzu das Lösen von $2^{\hat{m}}$ linearen Programmen nötig ist [132]. Dabei ist \hat{m} die Mächtigkeit des "bivariate set" $\mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H$. Die Überprüfung der Stationarität läuft also im schlimmsten Fall auf ein kombinatorisches Problem hinaus. Statt des Problems (4.1-4.5) wird deshalb auf das relaxierte Problem (4.7-4.12) zurückgegriffen. Dieses wird durch Linearisierung approximiert. Damit lässt sich dann strenge Stationarität folgendermaßen definieren:

Definition 2. (Strenge Stationarität) [132] Ein für (4.1-4.5) zulässiger Punkt x^* ist streng stationär, wenn $d = 0$ das folgende lineare Problem mit Gleichgewichtsnebenbedingungen löst:

$$\begin{aligned} & \min_d \quad \nabla \mathcal{J}(x^*)^\top d & (4.14) \\ \text{mit} \quad & g(x^*) + \nabla g(x^*)^\top d \geq 0, \\ & h(x^*) + \nabla h(x^*)^\top d = 0, \\ & \nabla G_i(x^*)^\top d = 0, \quad i \in \mathcal{I}_G \setminus \mathcal{I}_H, \\ & \nabla H_i(x^*)^\top d = 0, \quad i \in \mathcal{I}_H \setminus \mathcal{I}_G, \\ & \nabla G_i(x^*)^\top d \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \\ & \nabla H_i(x^*)^\top d \geq 0, \quad i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H. \end{aligned}$$

Diese Bedingung ist zugleich strenger und einfacher zu prüfen. Sie schließt die B-Stationarität ein und kann auch praktisch verwendet werden. Das Problem (4.14) definiert die strenge Stationarität für (4.1)-(4.5) und ist zugleich die linearisierte Approximation für Problem (4.7)-(4.12).

Die Lagrangefunktion für das MPCC lautet [138]

$$\mathcal{L}(x, \lambda, \mu, \tau, \nu) = \mathcal{J}(x) - \lambda^\top g(x) - \mu^\top h(x) - \tau^\top G(x) - \nu^\top H(x) \quad (4.15)$$

enthält die Lagrangemultiplikatoren $(\lambda, \mu, \tau, \nu)$. Die Optimalität für (4.1)-(4.5) ist dann gegeben, wenn die Karush-Kuhn-Tucker (KKT) Bedingungen erfüllt sind. Das bedeutet, dass für den Gradienten der Lagrangefunktion (4.15) bezüglich x an einem zulässigen Punkt x^*

$$\begin{aligned} \nabla \mathcal{L} = \nabla \mathcal{J}(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{I}_g} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) - \sum_{i=1}^p \mu_i^* \nabla h_i(x^*) \\ - \sum_{i \in \mathcal{I}_G} \tau_i^* \nabla G_i(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{I}_H} \nu_i^* \nabla H_i(x^*) = 0 \end{aligned} \quad (4.16)$$

gilt und gleichzeitig die Zulässigkeitsbedingungen für (4.1)-(4.5)

$$\begin{aligned} 0 &= h_i(x^*), \quad i = 1, 2, \dots, p, \\ 0 &= g_i(x^*), \quad i \in \mathcal{I}_g, \\ 0 &\leq \lambda_i^*, \quad i \in \mathcal{I}_g, \\ 0 &< g_i(x^*), \quad i \in \{1, 2, \dots, q\} \setminus \mathcal{I}_g, \\ 0 &= G_i(x^*), \quad i \in \mathcal{I}_G, \\ 0 &= H_i(x^*), \quad i \in \mathcal{I}_H, \\ 0 &\leq \tau_i^*, \quad i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \\ 0 &\leq \nu_i^*, \quad i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \\ 0 &< G_i(x^*), \quad i \in \{1, 2, \dots, m\} \setminus \mathcal{I}_G, \\ 0 &< H_i(x^*), \quad i \in \{1, 2, \dots, m\} \setminus \mathcal{I}_H \end{aligned} \quad (4.17)$$

erfüllt sind [132]. Damit x^* eine Lösung ist, müssen die Lagrangemultiplikatoren $(\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)$ eindeutig und beschränkt sein [71, 95]. Dies ist gesichert, wenn die Mangasarian-Fromovitz-Bedingung (Mangasarian-Fromovitz constraint qualification - MFCQ) [71] oder sogar die (strengere) Bedingung der linearen Unabhängigkeit der Nebenbedingungen (linear independence constraint qualification - LICQ) [95] erfüllt ist. Die MFCQ und die LICQ werden folgendermaßen definiert :

Definition 3. (MFCQ) [115, 85] Wenn für das Problem (4.1-4.5) die Gradienten

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^M \stackrel{\text{def}}{=} \{\nabla h_i(x^*) | i = 1, \dots, p\} \cup \{\nabla G_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_G \setminus \mathcal{I}_H\} \\ \cup \{\nabla H_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_H \setminus \mathcal{I}_G\} \cup \{\nabla(G_i^T(x^*)H_i(x^*)) | i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H\} \end{aligned} \quad (4.18)$$

aus den Mengen aller *Gleichungsnebenbedingungen* am zulässigen Punkt x^* linear unabhängig sind, ist die Mangasarian-Fromovitz-Bedingung (MFCQ) am Punkt x^* erfüllt.

Definition 4. (LICQ) [115, 85] Wenn für das Problem (4.1-4.5) die Gradienten

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^L \stackrel{\text{def}}{=} & \{ \nabla g_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_g \} \cup \{ \nabla h_i(x^*) | i = 1, \dots, p \} \\ & \cup \{ \nabla G_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_G \} \cup \{ \nabla H_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_H \} \\ & \cup \{ \nabla (G_i^\top(x^*) H_i(x^*)) | i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H \} \end{aligned} \quad (4.19)$$

aus den Mengen aller *aktiven Nebenbedingungen* am zulässigen Punkt x^* linear unabhängig sind, ist die Bedingung der linearen Unabhängigkeit der Nebenbedingungen (LICQ) am Punkt x^* erfüllt.

Für ein MPCC (4.1-4.5) können die MFCQ und somit auch die strengere LICQ jedoch nicht erfüllt werden, weil am Punkt x^* die Bedingungen (4.4) und (4.5) gleichzeitig aktiv sind [50, 85]. Dasselbe gilt dann auch für die .

Das folgende Beispiel illustriert dies für ein MPCC:

$$\begin{aligned} \min_{x, z_1, z_2} \quad & \{ \mathcal{J}(x, z_1, z_2) = x^2 + z_1 - z_2 \} \\ \text{mit} \quad & g_1 : z_1 \geq 0, \\ & g_2 : z_2 \geq 0, \\ & g_3 : z_2 \leq 4, \\ & g_4 : z_1 z_2 \leq 0, \\ & g_5 : x - z_1 \leq 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

An der Lösung $x^* = 0$, $z_1^* = 0$, $z_2^* = 4$ und $z_1^* z_2^* = 0$ sind die Gradienten der aktiven Nebenbedingungen

$$\nabla g = [\nabla g_1, \nabla g_3, \nabla g_4, \nabla g_5] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 4 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

linear abhängig. In dieser Situation sind die gewöhnliche MFCQ und LICQ also nicht adäquat und müssen deshalb für MPCC/MPEC erweitert werden. Dies geschieht nachstehend:

Definition 5. (MPEC-MFCQ) [85] Wenn für das Problem (4.1-4.5) die Gradienten

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{\text{MM}} \stackrel{\text{def}}{=} & \{ \nabla h_i(x^*) | i = 1, \dots, p \} \\ & \cup \{ \nabla G_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_G \setminus \mathcal{I}_H \} \cup \{ \nabla H_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_H \setminus \mathcal{I}_G \} \end{aligned} \quad (4.22)$$

aus den Mengen der *Gleichungsnebenbedingungen* am zulässigen Punkt x^* linear unabhängig sind, ist die Mangasarian-Fromovitz-Bedingung (MPEC-MFCQ) für das MPEC am Punkt x^* erfüllt.

Diese Definition schließt die aus (4.8), (4.10) und (4.11) resultierenden Mengen der aktiven Nebenbedingungen ein. Wie leicht zu erkennen ist, handelt es sich also hier um die lineare Unabhängigkeit der aktiven Nebenbedingungen des *relaxierten* Problems. Ist die lineare Unabhängigkeit der Vektoren (4.22) gegeben, sind die Lagrangemultiplikatoren $(\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)$ des Problems (4.14) beschränkt [71].

Definition 6. (MPEC-LICQ) [85] Wenn für das Problem (4.1-4.5) die Gradienten

$$\begin{aligned} \mathcal{A}^{\text{ML}} \stackrel{\text{def}}{=} & \{ \nabla g_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_g \} \cup \{ \nabla h_i(x^*) | i = 1, \dots, p \} \\ & \cup \{ \nabla G_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_G \} \cup \{ \nabla H_i(x^*) | i \in \mathcal{I}_H \} \end{aligned} \quad (4.23)$$

am zulässigen Punkt x^* linear unabhängig sind, ist die Bedingung der linearen Unabhängigkeit der Nebenbedingungen (MPEC-LICQ) für das MPEC am Punkt x^* erfüllt.

Auch hier handelt es sich offenbar um die Bedingungen des relaxierten Problems [6]. Wenn die soeben definierte MPEC-LICQ erfüllt ist, sind die Lagrangemultiplikatoren $(\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)$ des Problems (4.14) eindeutig [95]. Damit ist ihre Beschränktheit trivial. In diesem Fall sind B-Stationarität und strenge Stationarität äquivalent [132].

Die Erfüllung der MPEC-MFCQ und der MPEC-LICQ soll nun für Beispiel (4.20) überprüft werden: Durch die MPEC-Erweiterung entfällt der Gradient ∇g_4 und es verbleiben die Gradienten der aktiven Beschränkungen

$$[\nabla g_1, \nabla g_3, \nabla g_5] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Hier treten im Gegensatz zu (4.21) keine linear abhängigen Vektoren mehr auf, d. h. die MPEC-LICQ und der MPEC-MFCQ sind erfüllt.

Mit Definition 6 (MPEC-LICQ) lässt sich folgender Satz formulieren:

Satz 1 [136] Ist x^* eine Lösung des MPCC (4.1-4.5) und ist dort die MPEC-LICQ erfüllt, dann ist x^* streng stationär, und der Vektor $(\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)$ der Lagrangemultiplikatoren, der den Bedingungen 4.17 genügt, ist eindeutig.

Mit dieser Eigenschaft ist Konvergenz zu einem streng stationären Punkt viel leichter als wenn die LICQ bzw. die MFCQ für des ursprüngliche Problem (4.4) gefordert wäre [24]. Wie zu sehen war, ist die Erfüllung der MPEC-LICQ (MPEC-MFCQ) gleichbedeutend mit der Erfüllung der LICQ (MFCQ) des relaxierten

Problems (4.7-4.12), weil bei letzterem die Nebenbedingungen (4.4) des Originalproblems an der Lösung nicht mehr als aktive Nebenbedingungen auftreten. Das bedeutet, dass durch Einführen einer geeigneten Relaxation das Lösen eines MPCC wesentlich erleichtert wird. Verschiedene Möglichkeiten der Relaxation werden in Abschnitt (4.2) behandelt.

4.1.2 Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung

Die Bedingungen zweiter Ordnung liefern dort, wo die Bedingung erster Ordnung erfüllt ist, das hinreichende Kriterium dafür, dass x^* eine Lösung von (4.1-4.5) ist.

Eine Menge S normierter kritischer Richtungen für das Originalproblem (4.1-4.5) wird folgendermaßen definiert [132]:

$$\begin{aligned}
S \stackrel{\text{def}}{=} & \{s \mid \|s\|_2 = 1\} \cap & (4.24) \\
& \{s \mid \nabla h(x^*)^\top s = 0\} \cap \\
& \{s \mid \nabla g_i(x^*)^\top s = 0 \forall i : \lambda_i > 0\} \cap \\
& \{s \mid \nabla g_i(x^*)^\top s \geq 0 \forall i : \lambda_i = 0\} \cap \\
& \{s \mid \nabla G_i(x^*)^\top s = 0 \forall i \in \mathcal{I}_G \setminus \mathcal{I}_H\} \cap \\
& \{s \mid \nabla G_i(x^*)^\top s = 0 \forall i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \tau_i > 0\} \cap \\
& \{s \mid \nabla G_i(x^*)^\top s \geq 0 \forall i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \tau_i = 0\} \cap \\
& \{s \mid \nabla H_i(x^*)^\top s = 0 \forall i \in \mathcal{I}_H \setminus \mathcal{I}_G\} \cap \\
& \{s \mid \nabla H_i(x^*)^\top s = 0 \forall i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \nu_i > 0\} \cap \\
& \{s \mid \nabla H_i(x^*)^\top s \geq 0 \forall i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \nu_i = 0\} \cap \\
& \{s \mid \min(\nabla G_i(x^*)^\top s, \nabla H_i(x^*)^\top s) = 0 \\
& \quad \forall i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \tau_i = 0, \nu_i = 0\}.
\end{aligned}$$

Bei der entsprechenden Menge \bar{S} des relaxierten Problems entfällt die Menge in der letzten Zeile (4.24), d. h.

$$\begin{aligned}
S &= \bar{S} \cap \{s \mid \min(\nabla G_i(x^*)^\top s, \nabla H_i(x^*)^\top s) = 0 \\
& \quad \forall i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H, \tau_i = 0, \nu_i = 0\}. & (4.25)
\end{aligned}$$

Der Unterschied zwischen S und \bar{S} verschwindet, wenn eine der folgenden strengen Komplementaritätsbedingungen erfüllt ist.

Definition 7. (Stufen strenger Komplementarität - OSK, PSK, USK)
[132] Es sei x^* ein streng stationärer Punkt, an dem die MPEC-LICQ erfüllt ist.

1. Die oberste Stufe strenger Komplementarität (OSK) ist gegeben, wenn für die Lagrangemultiplikatoren $(\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)$, welche (4.17) genügen, $\{i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H | \tau_i^* > 0\} = \{i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H | \nu_i^* > 0\} = \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H$.
2. Partielle strenge Komplementarität (PSK) ist gegeben, wenn für die Lagrangemultiplikatoren $(\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)$, welche (4.17) genügen, $\{i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H | \tau_i^* > 0\} \cup \{i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H | \nu_i^* > 0\} = \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H$.
3. Die unterste Stufe strenger Komplementarität (USK) ist gegeben, wenn $\mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H = \emptyset$.

Die hinreichende Bedingung zweiter Ordnung (Second Order Sufficient Condition, SOSOC) benötigt außerdem die zweite Ableitung der Lagrangefunktion. Für ein MPCC wird die MPEC-SOSOC folgendermaßen definiert:

Definition 8. (MPEC-SOSOC) [132] Es sei x^* ein streng stationärer Punkt. Die MPEC-SOSOC ist an x^* erfüllt, wenn es ein $\sigma > 0$ gibt, so dass für jedes $s \in \mathcal{S}$ die Lagrangemultiplikatoren $(\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)$ den Bedingungen (4.16) und (4.17) genügen und

$$s^\top \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*) s \geq \sigma.$$

4.2 Regularisierungsstrategien für komplementäre Beschränkungen

Ziel der Regularisierung ist jeweils die Glättung des zu lösenden Problems, so dass die Erfüllung der LICQ bzw. MFCQ des regularisierten Problems zur Erfüllung der MPEC-LICQ bzw. MPEC-MFCQ des Originalproblems führt. Das heißt, es werden Regularisierungen gesucht, die dazu führen, dass wie bei (4.7-4.12) nicht beide Bedingungen (4.4) und (4.5) enthalten sind bzw. so umformuliert wurden, dass sie nicht gleichzeitig aktiv sein können. Um dies zu erreichen, können die komplementären Beschränkungen (4.4) approximativ oder exakt umformuliert werden. Die approximativen Methoden können wiederum in Relaxationsmethoden und Strafverfahren unterschieden werden. Um das Originalproblem zu lösen, ist es in diesen beiden Fällen notwendig, eine Reihe von Näherungsproblemen zu lösen. Der für die Regularisierung verantwortliche Parameter wird dabei so variiert, dass man dem Grenzfall des Originalproblems immer näher kommt. Die Einführung einer exakten Umformung zeichnet sich dadurch aus, dass eine dem Originalproblem äquivalente Formulierung des Problems erreicht wird, so dass das einmalige Lösen

bereits zum Ziel führt. Im Allgemeinen führen Regularisierungsstrategien immer zu einem Kompromiss zwischen Genauigkeit der Lösung einerseits und der numerischen Stabilität und Robustheit andererseits.

4.2.1 Relaxation

Zur Relaxierung der komplementären Beschränkungen (4.4) wurde von Scholtes [138] die folgende Problemformulierung vorgeschlagen:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\eta : \min_x \mathcal{J}(x) & \quad (4.26) \\ \text{mit } h(x) &= 0, \\ g(x) &\geq 0, \\ G_i(x)H_i(x) &\leq \eta, \forall i = 1, \dots, M, \\ G_i(x), H_i(x) &\geq 0. \end{aligned}$$

Die Relaxation wird durch den Parameter $\eta \geq 0$ bestimmt und $\eta = 0$ würde das Problem (4.1)-(4.5) als Grenzfall einschließen. In (4.26) wird die Komplementarität von $G(x)$ und $H(x)$ komponentenweise realisiert, d. h. die Relaxation ergibt $i = 1, \dots, M$ Ungleichungsnebenbedingungen. Überprüft man für obiges Beispiel die LICQ und MFCQ, ist leicht zu sehen, dass hier keine lineare Abhängigkeit der Gradienten der aktiven Beschränkungen zu erwarten ist, da $G_i(x) = 0$ und $G_i(x)H_i(x) = \eta$ bzw. $H_i(x) = 0$ und $G_i(x)H_i(x) = \eta$ nicht gleichzeitig erfüllt werden können. Für die Formulierung (4.26) ist die Lagrangefunktion

$$\begin{aligned} \bar{\mathcal{L}}(x, \lambda, \mu, \tau, \nu) &= \mathcal{J}(x) - \lambda^\top g(x) - \mu^\top h(x) \\ &\quad - \tau^\top G(x) - \nu^\top H(x) \\ &\quad - \sum_{i=1}^M \rho_i (\eta - G_i(x)H_i(x)). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Die Optimalität von x^* ist dann erreicht, wenn Lagrangemultiplikatoren $(\tilde{\lambda}_i, \tilde{\mu}_i, \tilde{\tau}_i, \tilde{\nu}_i)$ existieren, so dass die notwendige Bedingung erster Ordnung

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla \mathcal{J}(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{I}_g} \tilde{\lambda}_i \nabla g_i(x^*) - \sum_{i=1}^p \tilde{\mu}_i \nabla h_i(x^*) \\ &\quad - \sum_{i \in \mathcal{I}_G} \tilde{\tau}_i \nabla G_i(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{I}_H} \tilde{\nu}_i \nabla H_i(x^*) \\ &\quad + \sum_{i=1}^M \rho_i (\nabla G_i(x^*)H_i(x^*) + G_i(x^*)\nabla H_i(x^*)) \end{aligned} \quad (4.28)$$

mit den Zulässigkeitsbedingungen

$$\begin{aligned}
0 &= h_i(x^*), i = 1, 2, \dots, p & (4.29) \\
0 &= g_i(x^*), i \in \mathcal{I}_g \\
0 &\leq \tilde{\lambda}_i, i \in \mathcal{I}_g \\
0 &< g_i(x^*), i \in \{1, 2, \dots, q\} \setminus \mathcal{I}_g \\
0 &= G_i(x^*), i \in \mathcal{I}_G \\
0 &= H_i(x^*), i \in \mathcal{I}_H \\
0 &\leq \tilde{\tau}_i, i \in \mathcal{I}_G \\
0 &\leq \tilde{\nu}_i, i \in \mathcal{I}_H \\
0 &\leq \rho_i, i = 1, 2, \dots, m \\
0 &< G_i(x^*), i \in \{1, 2, \dots, m\} \setminus \mathcal{I}_G \\
0 &< H_i(x^*), i \in \{1, 2, \dots, m\} \setminus \mathcal{I}_H
\end{aligned}$$

erfüllt wird. Man beachte, dass für die Lagrangemultiplikatoren $(\tilde{\tau}, \tilde{\nu})$ die Nichtnegativität für alle Elemente in \mathcal{I}_G bzw. \mathcal{I}_H notwendig ist. Die Beziehung zwischen den Lagrangemultiplikatoren $(\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)$ der Lösung von (4.1)-(4.5) und den Lagrangemultiplikatoren $(\tilde{\lambda}, \tilde{\mu}, \tilde{\tau}, \tilde{\nu}, \rho)$ der Lösung von (4.26) wird durch

$$\begin{aligned}
\tilde{\lambda}_i &= \lambda_i^*, i \in \mathcal{I}_g & (4.30) \\
\tilde{\mu}_i &= \mu_i^*, i = 1, 2, \dots, p \\
\tilde{\tau}_i &= \tau_i^* + \rho_i H_i(x^*), i \in \mathcal{I}_G \\
\tilde{\nu}_i &= \nu_i^* + \rho_i G_i(x^*), i \in \mathcal{I}_H
\end{aligned}$$

beschrieben, wobei die Multiplikatoren $\rho_i, i = 1, 2, \dots, m$ den Bedingungen

$$\begin{aligned}
\rho_i &\geq \tilde{\rho}_i \stackrel{\text{def}}{=} \max\left(0, \frac{-\tau_i^*}{H_i(x^*)}\right), i \in \mathcal{I}_G \setminus \mathcal{I}_H & (4.31) \\
\rho_i &\geq \tilde{\rho}_i \stackrel{\text{def}}{=} \max\left(0, \frac{-\nu_i^*}{G_i(x^*)}\right), i \in \mathcal{I}_H \setminus \mathcal{I}_G \\
\rho_i &\geq \tilde{\rho}_i \stackrel{\text{def}}{=} 0, i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H
\end{aligned}$$

genügen müssen.

Die hinreichende Bedingung zweiter Ordnung für das Problem (4.26) lautet

$$\begin{aligned}
\sigma &\leq s^T \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*) s & (4.32) \\
&\leq s^T \nabla_{xx}^2 \tilde{\mathcal{L}}(x^*, \tilde{\lambda}, \tilde{\mu}, \tilde{\tau}, \tilde{\nu}, \rho) s, \forall s \in \tilde{S},
\end{aligned}$$

wobei

$$s^\top \nabla_{xx}^2 \tilde{\mathcal{L}}(x^*, \tilde{\lambda}, \tilde{\mu}, \tilde{\tau}, \tilde{\nu}, \rho) s = s^\top \nabla_{xx}^2 \mathcal{L}(x^*, \lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*) s + \sum_{i=1}^m \rho_i \left(\nabla G_i(x^*) \nabla H_i(x^*)^\top + \nabla H_i(x^*) \nabla G_i(x^*)^\top \right) \quad (4.33)$$

gilt. Man beachte, dass hier die Menge \tilde{S} mit $\epsilon > 0$ gemäß

$$\tilde{S} = \bar{S} \cap \left\{ s \mid \min(\nabla G_i(x^*)^\top s, \nabla H_i(x^*)^\top s) \leq \epsilon \right. \\ \left. \forall i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H : \tau_i = 0, \nu_i = 0 \right\} \quad (4.34)$$

ergänzt wird.

Weitere Eigenschaften des Regularisierungsschemas (4.26) werden in [132, 138] untersucht und die numerischen Eigenschaften werden in [24] an zahlreichen Beispielen getestet. Die Untersuchungen der Regularisierung betreffen

1. die Existenz einer lokalen Lösung von (4.26) in der Nähe der Lösung von (4.1)-(4.5),
2. den Abstand zwischen den Lösungen von (4.26) und (4.4),
3. die Beschränktheit der Multiplikatoren von (4.26),
4. die lokale Eindeutigkeit der Lösung von (4.26).

Der Beweis der Existenz der Lösung von (4.26) in der Nähe der Lösung x^* von (4.1-4.5) sowie der Abstand zwischen den beiden Lösungen verwendet die Definitionen 5 (MPEC-MFCQ) und 8 (MPEC-SOSC) aus dem vorherigen Abschnitt und ein Ergebnis von [37]. An dieser Stelle soll nur das Resultat angegeben werden:

Satz 2 [132] Es sei x^* ein streng stationärer Punkt von (4.1-4.5) an welchem die MPEC-MFCQ und MPEC-SOSC erfüllt sind. Dann gibt es positive Konstanten $r_0, \bar{\eta}, M$, so dass die globale Lösung $x^*(\eta)$ des auf der Kugel $\|x(\eta) - x^*\| \leq r_0$ lokalisierten Problems \mathcal{P}_η (4.26) die Bedingung $\|x(\eta) - x^*\| \leq M\eta^{1/2}$ erfüllt, d. h. $x^*(\eta) \rightarrow x^*$, wenn $\eta \searrow 0^+$.

Ergänzend zu diesem Satz sei eine Aussage zur Beschränktheit der Lagrangemultiplikatoren gemacht:

Satz 3 [132] Es sei x^* ein streng stationärer Punkt von (4.1-4.5) an welchem die MPEC-LICQ erfüllt ist. Wenn die Lösung $x(\eta)$ des durch einen kleinen positiven Parameter η regularisierten Problems $\|x(\eta) - x^*\| = \mathcal{O}(\eta)$ genügt, dann

1. ist $G_i(x(\eta))H_i(x(\eta)) < \eta$ für jedes kleine positive η und jedes $i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H$ und
2. sind die zur Lösung $x(\eta)$ gehörigen Lagrangemultiplikatoren beschränkt für $0 < \eta \rightarrow 0$.

Zwei weitere, dem Problem (4.26) ähnliche Relaxationen sind

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_\eta : \min_x \mathcal{J}(x) & \quad (4.35) \\ \text{mit } h(x) & = 0, \\ g(x) & \geq 0, \\ G(x)^\top H(x) & \leq \eta, \\ G(x), H(x) & \geq 0, \end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{\eta,eq} : \min_x \mathcal{J}(x) & \quad (4.36) \\ \text{mit } h(x) & = 0, \\ g(x) & \geq 0, \\ G(x)^\top H(x) & = \eta, \\ G(x), H(x) & \geq 0. \end{aligned}$$

Im Unterschied zu (4.26) wird bei diesen beiden Formulierungen nur eine Ungleichungs- bzw. Gleichungsnebenbedingung einführt. Die für (4.26) gemachten Aussagen gelten entsprechend. Nur die lokale Eindeutigkeit der Lösung, die für (4.26) bewiesen werden kann, läßt sich so nicht auf (4.35) übertragen [132]. Für (4.36) gilt Satz 2 mit dem Unterschied, dass hier einerseits die Abschätzung $\|x(\eta) - x^*\| = \mathcal{O}(\eta^{1/2})$ durch die schwächere Abschätzung $\mathcal{O}(\eta^{1/4})$ ersetzt werden muss und andererseits anstelle der MPEC-MFCQ die schärfere MPEC-LICQ gefordert ist. Der Beweis findet sich in [132].

4.2.2 Strafverfahren

Anstelle der in Abschnitt (4.2.1) gezeigten Relaxationsverfahren kann auch ein Strafverfahren zur Regularisierung eingesetzt werden. Bei diesem ist keine strenge

Komplementarität von $G(x)$ und $H(x)$ gefordert. Die Formulierung

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{pen} : \min_x \mathcal{J}(x) &+ \rho G(x)^\top H(x) & (4.37) \\ \text{mit } h(x) &= 0, \\ g(x) &\geq 0, \\ G(x), H(x) &\geq 0, \\ \rho &\in \mathbb{R} \end{aligned}$$

ist exakt in dem Sinne, dass ein stationärer Punkt von (4.1-4.5) unter gewissen Annahmen ein lokaler Minimierer von (4.37) ist [76].

Satz 4 [132] Es sei x^* ein streng stationärer Punkt von (4.1-4.5). Dann sind für jedes hinreichend große ρ die folgenden Behauptungen wahr:

1. x^* ist ein stationärer Punkt von (4.37).
2. Wenn die MPEC-LICQ am Punkt x^* erfüllt ist, ist für (4.37) die LICQ an x^* erfüllt. Wenn die MPEC-MFCQ am Punkt x^* erfüllt ist, ist für (4.37) die MFCQ an x^* erfüllt.
3. Wenn die MPEC-SOSC am Punkt x^* erfüllt ist, dann existiert ein kritisches $\hat{\rho} > 0$, so dass für alle $\rho > \hat{\rho}$ die SOSC für (4.37) am Punkt x^* erfüllt ist.

Die erste Behauptung ist gleichbedeutend mit der Erfüllung der KKT-Bedingung für (4.37), d. h. man kann Lagrangemultiplikatoren $(\hat{\lambda}, \hat{\mu}, \hat{\tau}, \hat{\nu})$ finden, die $\nabla \hat{\mathcal{L}}(x^*) = 0$ erfüllen. $\nabla \hat{\mathcal{L}}(x^*)$ hat dieselbe Form wie in (4.28) - mit den Unterschieden, dass in $\nabla \hat{\mathcal{L}}(x^*)$ die Lagrangemultiplikatoren $(\hat{\lambda}, \hat{\mu}, \hat{\tau}, \hat{\nu})$ an die Stelle der Multiplikatoren $(\tilde{\lambda}, \tilde{\mu}, \tilde{\tau}, \tilde{\nu})$ treten und die ρ_i durch das in der dritten Aussage des Satzes 4 genannte $\rho > \hat{\rho}$ mit der Definition

$$\rho \geq \hat{\rho} \stackrel{\text{def}}{=} 1 + \max \left(0, \max_{i \in \mathcal{I}_G \setminus \mathcal{I}_H, \tau_i^* < 0} - \frac{\tau_i^*}{H_i(x^*)}, \max_{i \in \mathcal{I}_H \setminus \mathcal{I}_G, \nu_i^* < 0} - \frac{\nu_i^*}{G_i(x^*)} \right) \quad (4.38)$$

ersetzt werden. Analog lassen sich (4.30), (4.32) und (4.33) übertragen. Die für die zweite Aussage des Satzes 4 benötigte Erfüllung der MFCQ/LICQ bzw. der MPEC-MFCQ/MPEC-LICQ für (4.1-4.5) bzw. (4.37) folgt unmittelbar aus den zugehörigen Definitionen (3, 4, 5 und 6) und den aktiven Nebenbedingungen von (4.1-4.5) bzw. (4.37) am Punkt x^* .

Auch die Umkehrung der Aussagen aus Satz 4 lässt sich beweisen [132], und es folgt

Satz 5 [132] Es sei x^* ein stationärer Punkt des Problems (4.37) und $G(x)^\top H(x) = 0$. Dann ist x^* streng stationär für (4.1-4.5). Wenn außerdem x^* der LICQ für das Problem (4.37) genügt, dann erfüllt (4.1-4.5) die MPEC-LICQ. Nimmt man zusätzlich zur Stationarität an, dass x^* der SOSC für das Problem (4.37) genügt, dann erfüllt (4.1-4.5) die MPEC-SOSC, so dass x^* ein strenger lokaler Minimierer von (4.1-4.5) ist.

Bisher ließen sich über die Relaxation (4.26) und das Strafverfahren (4.37) weitgehend analoge Aussagen machen. Anders verhält es sich bezüglich der Exaktheit der Lösungen der jeweiligen regularisierten Probleme. Während es sich bei der Relaxation aus Abschnitt (4.2.1) immer um Näherungslösungen des Originalproblems handelt, erhält man durch die Bestrafung eine exakte Lösung.

Satz 6 [132] Es sei x^* ein streng stationärer Punkt von (4.1-4.5), die MPEC-LICQ und der PSK (Definition 7) seien erfüllt. Dann gibt es eine Umgebung U von x^* und ein Skalar $\rho^* > 0$, so dass für alle $\rho > \rho^*$ jeder stationäre Punkt von (4.37) in U auch für (4.1-4.5) streng stationär ist.

Damit dieser Satz gilt, ist zu gewährleisten, dass die Lösung von (4.37) auch für (4.1-4.5) zulässig ist. Um dies zu zeigen, wird eine kleine Konstante $\varepsilon > 0$ als

$$\varepsilon = \frac{1}{2} \min \left(\min_{i \notin \mathcal{I}_H} H_i(x^*), \min_{i \notin \mathcal{I}_G} G_i(x^*), \min_{i | \tau_i^* > 0} \tau_i^*, \min_{i | \nu_i^* > 0} \nu_i^* \right) \quad (4.39)$$

definiert. Die Umgebung U wird klein genug gewählt, so dass

$$x \in U \Rightarrow H_i(x) \geq \varepsilon \quad \forall i \notin \mathcal{I}_H \quad \text{und} \quad G_i(x) \geq \varepsilon \quad \forall i \notin \mathcal{I}_G. \quad (4.40)$$

Außerdem soll

$$\|(\lambda, \mu, \tau, \nu) - (\lambda^*, \mu^*, \tau^*, \nu^*)\|_\infty \leq \varepsilon \quad (4.41)$$

gelten, wobei die Lagrangemultiplikatoren $(\lambda, \mu, \tau, \nu)$ für jedes beliebige $x \in U$ der Optimalitätsbedingung erster Ordnung $\nabla_x \mathcal{L}(x, \lambda, \mu, \tau, \nu) = 0$ genügen. Der kritische Wert ρ^* wird so groß gewählt, dass

$$\rho^* \varepsilon + \tau_i^* - \varepsilon > 0 \quad \text{und} \quad \rho^* \varepsilon + \nu_i^* - \varepsilon > 0 \quad \forall i = 1, 2, \dots, m.$$

Man betrachtet jetzt ein $\hat{x} \in U$, welches für (4.37) stationär ist, wenn $\rho \geq \rho^*$. Die Wahl der Umgebung U bedingt, dass $\mathcal{I}_G(\hat{x}) \subset \mathcal{I}_G$ und $\mathcal{I}_H(\hat{x}) \subset \mathcal{I}_H$. Hier enthalten $\mathcal{I}_G(\hat{x})$ und $\mathcal{I}_H(\hat{x})$ alle die Indizes, für die $G_i(\hat{x}) = 0$ bzw. $H_i(\hat{x}) = 0$. Die Stationarität von $\hat{x} \in U$ für (4.37) impliziert die Existenz von Lagrangemultiplikatoren $(\hat{\lambda}, \hat{\mu}, \hat{\tau}, \hat{\nu})$, die $\nabla_x \mathcal{L}(\hat{x}, \hat{\lambda}, \hat{\mu}, \hat{\tau} - \rho H(\hat{x}), \hat{\nu} - \rho G(\hat{x})) = 0$ genügen. Aus dieser Optimalitätsbedingung und (4.41) ergibt sich dann

$$\|\hat{\tau} - \rho H(\hat{x}) - \tau^*\|_\infty \leq \varepsilon \quad \text{und} \quad \|\hat{\nu} - \rho G(\hat{x}) - \nu^*\|_\infty \leq \varepsilon. \quad (4.42)$$

Die Zulässigkeit von \hat{x} für (4.1-4.5) ist für $\mathcal{I}_G \setminus \mathcal{I}_H$ bzw. $\mathcal{I}_H \setminus \mathcal{I}_G$ und $\mathcal{I}_H \cap \mathcal{I}_G$ separat zu untersuchen. Aus (4.42) folgt, dass

$$\hat{\tau}_i \geq \rho H_i(\hat{x}) + \tau_i^* - \varepsilon > 0 \quad \forall i \in \mathcal{I}_G \quad (4.43)$$

und

$$\hat{\nu}_i \geq \rho G_i(\hat{x}) + \tau_i^* - \varepsilon > 0 \quad \forall i \in \mathcal{I}_H. \quad (4.44)$$

Da infolge der KKT-Bedingungen $\hat{\tau}_i$ und $G_i(\hat{x})$ bzw. $\hat{\nu}_i$ und $H_i(\hat{x})$ jeweils komplementär sind, folgen $G_i(\hat{x}) = 0$ und $H_i(\hat{x}) = 0 \forall i \notin \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H$. Im Falle, dass $i \in \mathcal{I}_G \cap \mathcal{I}_H$ ist unter Verwendung der PSK (Definition 7) zu erkennen, dass entweder $\tau_i^* > 0$ oder $\nu_i^* > 0$. Für $\tau_i^* > 0$ folgt aus (4.43) $\hat{\tau}_i - \rho H_i(\hat{x}) \geq \tau_i^* - \varepsilon$. Die rechte Seite ist gemäß der Definition für ε (4.39) positiv. Weil $\rho H_i(\hat{x}) \geq 0$, gilt auch $\hat{\tau}_i \geq 0$, und wegen der Komplementarität von $\hat{\tau}_i$ und $G_i(\hat{x})$ ist $G_i(\hat{x}) = 0$. Dieselbe Argumentation gilt natürlich für $\hat{\nu}_i$. Dies bedeutet, dass für alle i entweder $G_i(\hat{x})$ oder $H_i(\hat{x})$ oder beide gleich Null sind und demzufolge die Lösung \hat{x} von (4.37) auch für (4.1-4.5) zulässig ist. Somit folgt die Aussage von Satz 6.

4.2.3 Glättung

Als Verfahren der äquivalenten Umformung der komplementären Beschränkungen (4.4) und (4.5) soll an dieser Stelle die Glättung durch NCP- Funktionen (nonlinear complementarity problem functions) dargestellt werden. Bereits die Bezeichnung "nonlinear complementarity problem function" (NCP Funktion) deutet auf die große Bedeutung dieser Gruppe von Funktionen zur Glättung nichtlinearer Optimierungsprobleme mit komplementären Beschränkungen hin. Unter Verwendung von NCP-Funktionen sollen die Nebenbedingungen

$$\begin{aligned} G_i(x), H_i(x) &\geq 0 \\ G_i(x)H_i(x) &= 0, \quad \forall i = 1, \dots, M \end{aligned}$$

umformuliert werden. Um die Notation zu vereinfachen, werden im Weiteren anstelle von M komplementären Funktionen $G_i(x), H_i(x)$ zwei komplementäre Variablen a, b verwendet, d. h. die Komplementaritätsbedingung

$$\begin{aligned} a, b &\geq 0, \\ ab &= 0 \end{aligned} \quad (4.45)$$

soll umformuliert und geglättet werden.

Als Ausgangspunkt dienen die Fischer-Burmeister-Funktion [62]

$$\phi_{\text{FB}}(a, b) = \sqrt{a^2 + b^2} - (a + b) \quad (4.46)$$

bzw. die Variante

$$\tilde{\phi}_{\text{FB}}(a, b) = \frac{1}{2} \left(a + b - \sqrt{a^2 + b^2} \right), \quad (4.47)$$

welche äquivalente Umformungen von (4.45) darstellen. Alternativ kann die Minimumfunktion [46]

$$\phi_0(a, b) = \min \{a, b\} \quad (4.48)$$

bzw.

$$\phi_0(a, b) = a - \max \{0, a - b\} \quad (4.49)$$

verwendet werden. Letztere Formulierung lässt sich mit der Stufenfunktion

$$\sigma(x) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } x \geq 0 \\ 0 & \text{wenn } x < 0 \end{cases} \quad (4.50)$$

als

$$\phi_0(a, b) = a - \int_{-\infty}^{a-b} \sigma(x) dx \quad (4.51)$$

schreiben. Die Fischer-Burmeister-Funktionen und die Minimumfunktion sind zwar äquivalent zu (4.45), aber nicht überall differenzierbar. Für die Fischer-Burmeister-Funktionen $\phi_{\text{FB}}(a, b)$ und $\tilde{\phi}_{\text{FB}}(a, b)$ betrifft das den Punkt $(a, b) = (0, 0)$ und für die stückweise glatte Minimumfunktion $\phi_0(a, b)$ die Gerade $\{a, b \in \mathbb{R}^2 | a = b\}$. Um die durch die Nichtglattheit bedingten Schwierigkeiten zu vermeiden, können sowohl die Fischer-Burmeister-Funktionen als auch die Minimumfunktion geglättet werden.

Die geglättete Fischer-Burmeister-Funktion lautet

$$\tilde{\phi}_{\text{FB}}(a, b, \tau) = \frac{1}{2} \left(a + b - \sqrt{a^2 + b^2 + 2\tau^2} \right). \quad (4.52)$$

Anstelle des Terms $2\tau^2$ [48] wird auch 2τ , τ oder τ^2 [70, 87, 90] verwendet.

Die Glättungsfunktionen der Minimumfunktion, die in [90, 151, 163] untersucht wurden, werden in der so genannten Chen-Mangasarian-Familie zusammengefasst. Die verbindende Idee aller Funktionen in dieser Familie beruht auf (4.50-4.51) und der Schreibweise der Stufenfunktion als Integral

$$\phi_0(a, b) = \int_{-\infty}^{a-b} \delta(x) dx \quad (4.53)$$

über die Dirac'sche Deltadistribution mit den Eigenschaften

$$\delta \geq 0, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (4.54)$$

Verallgemeinernd lässt sich anstelle der Dirac'schen Deltadistribution eine beliebige parametrisierte, stückweise kontinuierliche Dichtefunktion $\frac{1}{\tau}\rho\left(\frac{x}{\tau}\right)$ einsetzen, für die

$$\frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} \rho\left(\frac{x}{\tau}\right) dx = 1 \quad \text{und} \quad \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} |x| \rho\left(\frac{x}{\tau}\right) dx < \infty$$

gilt. Damit erhält man die Approximation der Stufenfunktion (4.53)

$$\varphi(a, b, \tau) = \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{a-b} \rho\left(\frac{x}{\tau}\right) dx$$

und die Approximation des hinteren Terms in (4.51)

$$p(a, b, \tau) = \int_{-\infty}^{a-b} \varphi(x, \tau) dx \tag{4.55}$$

durch Integration der approximierten Stufenfunktion bzw. durch zweifache Integration der Dichtefunktion. Für eine Auswahl der in der Literatur vorgeschlagenen und hinsichtlich ihrer Eigenschaften untersuchten geglätteten NCP-Funktionen sollen die jeweiligen approximierten Stufenfunktionen und Dichtefunktionen angegeben werden [46, 48]:

- Sigmoidale Funktion für neuronale Netze

$$\begin{aligned} \rho(x, \tau) &= \frac{1}{\tau} \frac{\exp[-x/\tau]}{(1 + \exp[-x/\tau])^2} \\ \varphi(x, \tau) &= \frac{1}{1 + \exp[-x/\tau]} \\ \phi(a, b, \tau) &= b + \tau \ln [1 + \exp[-(a-b)/\tau]] \end{aligned}$$

- Chen-Harker-Kanzow-Smale-Funktion

$$\begin{aligned} \rho(x, \tau) &= \frac{2\tau^2}{(x^2 + 4\tau^2)^{3/2}} \\ \varphi(x, \tau) &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{x}{\sqrt{x^2 + 4\tau^2}} \right) \\ \phi(a, b, \tau) &= \frac{a + b - \sqrt{(a-b)^2 + 4\tau^2}}{2} \end{aligned}$$

- Picard-Glättungsfunktion

$$\begin{aligned}\rho(x, \tau) &= \frac{1}{2\tau} \exp[-|x|] \\ \varphi(x, \tau) &= \frac{1}{2} \exp[-|x|] \\ \phi(a, b, \tau) &= a - \frac{\tau}{2} \exp[-|a - b|/\tau]\end{aligned}$$

- Pinar-Zenios Glättungsfunktion

$$\begin{aligned}\rho(x, \tau) &= \begin{cases} \frac{1}{\tau} & \text{wenn } 0 \leq x \leq \tau \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\ \varphi(x, \tau) &= \begin{cases} 0 & \text{wenn } x < 0 \\ \frac{x}{\tau} & \text{wenn } 0 \leq x \leq \tau \\ 1 & \text{wenn } x > \tau \end{cases} \\ \phi(a, b, \tau) &= \begin{cases} a + \frac{\tau}{2} & \text{wenn } a - b < 0 \\ \frac{(a-b)^2}{2\tau} & \text{wenn } 0 \leq a - b \leq \tau \\ b - \frac{\tau}{2} & \text{wenn } a - b > \tau \end{cases}\end{aligned}$$

- Zang-Glättungsfunktion

$$\begin{aligned}\rho(x, \tau) &= \begin{cases} \frac{1}{\tau} & \text{wenn } -\frac{\tau}{2} \leq x \leq \frac{\tau}{2} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \\ \varphi(x, \tau) &= \begin{cases} 0 & \text{wenn } x < -\frac{\tau}{2} \\ \frac{x}{\tau} + \frac{1}{2} & \text{wenn } -\frac{\tau}{2} \leq x \leq \frac{\tau}{2} \\ 1 & \text{wenn } x > \frac{\tau}{2} \end{cases} \\ \phi(a, b, \tau) &= \begin{cases} 0 & \text{wenn } a - b < -\frac{\tau}{2} \\ \frac{1}{2\tau} (a - b + \frac{\tau}{2})^2 & \text{wenn } -\frac{\tau}{2} \leq a - b \leq \frac{\tau}{2} \\ a - b & \text{wenn } a - b > \frac{\tau}{2} \end{cases}\end{aligned}$$

Es lässt sich zeigen, dass die geglätteten Fischer-Burmeister-Funktionen oder die (geglätteten) Funktionen der Chen-Mangasarian-Familie mit

$$\phi_i(a, b, \tau) = 0$$

der Relaxation $a \cdot b = \eta$ entsprechen [24].

Darüber hinaus teilen sich die geglätteten Fischer-Burmeister-Funktionen und die NCP-Funktionen der Chen-Mangasarian-Familie die folgenden wichtige Eigenschaften, die für numerische Methoden der Optimierung relevant sind [48]:

1. Für jedes feste $\tau > 0$ ist $\phi(a, b, \tau)$ kontinuierlich differenzierbar für alle $(a, b)^\top \in \mathbb{R}^2$, und die partiellen Ableitungen genügen

$$(0, 0) \leq \left(\frac{\partial \phi(a, b, \tau)}{\partial a}, \frac{\partial \phi(a, b, \tau)}{\partial b} \right) \leq (1, 1).$$

2. Für jedes feste $(a, b)^\top \in \mathbb{R}^2$ ist $\phi(a, b, \tau)$ kontinuierlich differenzierbar, monoton fallend und konkav bezüglich $\tau > 0$. Insbesondere gilt für $\tau_1 > \tau_2 > 0$

$$0 \leq \phi(a, b, \tau_2) - \phi(a, b, \tau_1) \leq \kappa(\tau_1 - \tau_2)$$

mit $\kappa = \max \left\{ \frac{1}{\tau} \int_{-\infty}^{\infty} |x| \rho\left(\frac{x}{\tau}\right) dx < \infty, 1/\sqrt{2} \right\}$. Darüber hinaus ist die NCP-Funktion mit dem Parameter $\tau = 0$ gleich der unglätteten Funktion, d. h. $\phi(a, b, 0) = \phi_0(a, b)$.

3. Für jedes feste $(a, b)^\top \in \mathbb{R}^2$ existiert der Limes

$$\nabla \phi_0(a, b) := \lim_{\tau \rightarrow 0} \left(\frac{\partial \phi(a, b, \tau)}{\partial a}, \frac{\partial \phi(a, b, \tau)}{\partial b} \right).$$

Außerdem ist

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\phi_0((a, b) + h) - \phi_0(a, b) - \phi_0'((a, b) + h)h^\top}{\|h\|} = 0.$$

Weitere Eigenschaften von geglätteten Fischer-Burmeister- und Minimumfunktionen werden in [45, 154] untersucht.

Die Umformulierung mittels dieser geglätteten NCP-Funktionen führt für nichtlineare Optimierungsprobleme mit komplementären Beschränkungen auf Klassen parametrischer Approximationen nichtlinearer Gleichungssysteme. Für jegliches lösbares NCP wurde der Nachweis für die Existenz einer beliebig genauen Lösung sowohl der glatten nichtlinearen Gleichungen mit hinreichend kleinem τ als auch des zugehörigen glatten NCP erbracht [46]. Die vorgeschlagenen Algorithmen basieren in der Regel auf der Newton-Methode. Exakte Lösungen der glatten nichtlinearen Gleichungssysteme für mehrere, kleiner werdende Werte des Parameters τ generieren einen inneren Pfad und sind somit eng mit Innere-Punkt-Methoden verwandt. Einen Überblick über Algorithmen sowie die Konvergenzanalyse gibt [48]. Dort wird außerdem der Bezug zu verschiedenen Anwendungen wie z. B. Variationsungleichungen, semi-infiniten Programmen, beschränkten Optimierungsproblemen und Problemen mit Gleichgewichtsnebenbedingungen hergestellt.

Kapitel 5

Optimierung autonom schaltender dynamischer Hybridsysteme mittels Regularisierungsmethoden

In diesem Kapitel sollen die Optimierungsprobleme aus Kapitel 4 auf den dynamischen Fall, d. h. auf hybride dynamische Optimierungsprobleme erweitert werden. Wie bereits erwähnt, existieren für das hybride dynamische Optimierungsproblem Nebenbedingungen in Form der Modellbeschreibung eines autonom schaltenden Hybridsystems gemäß Abschnitt 3.1.4. In Kapitel 3 wurde der Modellierung der Schaltvorgänge durch Schaltfunktionen, Übergangsfunktionen und binäre Variablen zur Auswahl der Modi besondere Aufmerksamkeit geschenkt, da sich autonom schaltende Hybridsysteme gerade durch diese Modellbestandteile von gewöhnlichen dynamischen Systemen unterscheiden. In Abschnitt 3.1.4 waren die zustandsabhängigen binären Variablen $z(\psi(x, y))$ zum Zwecke der Auswahl des richtigen Modus aus einer Reihe verfügbarer komplementärer Betriebsweisen des Systems eingeführt worden. Die MPCCs aus Kapitel 4 enthielten ihrerseits die komplementären Funktionen $G(x)$ und $H(x)$. Da sowohl die verschiedenen Schaltvariablen z als auch die Funktionen $G(x)$ und $H(x)$ jeweils zueinander komplementär sind, entsprechen die Variablen z des dynamischen Hybridproblems den Funktionen $G(x)$ und $H(x)$ des (statischen) MPCCs. Der große Unterschied besteht darin, dass im Unterschied zu den zeitunabhängigen $G(x)$, $H(x)$ die Variablen $z(\psi(x, y))$ von den zeitabhängigen Zustandsgrößen $x(t)$ und $y(t)$ abhängen und somit selbst zeitabhängig sind. Wenn das dynamische Problem mittels einer direkten Methode (siehe Abschnitt 2.4) gelöst werden soll, wird es zunächst diskretisiert. Dabei werden die zeitabhängigen $z(\psi(x(t), y(t)))$ für jeden diskreten Zeitpunkten t_i durch die komplementären Variablen $z_i = z(\psi(x_i, y_i))$ ersetzt, wo-

bei die x_i, y_i die Zustände $x(t_i), y(t_i)$ bezeichnen. Man erhält damit ein NLP mit sehr vielen komplementären Variablen, d. h. ein großes MPCC. Die Aussagen aus Kapitel 4 sollten also dafür gelten.

Bevor auf die konkrete Umsetzung von Methoden zur Optimierung dynamische Hybridprobleme eingegangen wird, soll zunächst ein Überblick über das Vorgehen bei der Lösung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme mittels Regularisierung gegeben werden (Abb. 5.1). Das hybride dynamische Optimierungsproblem

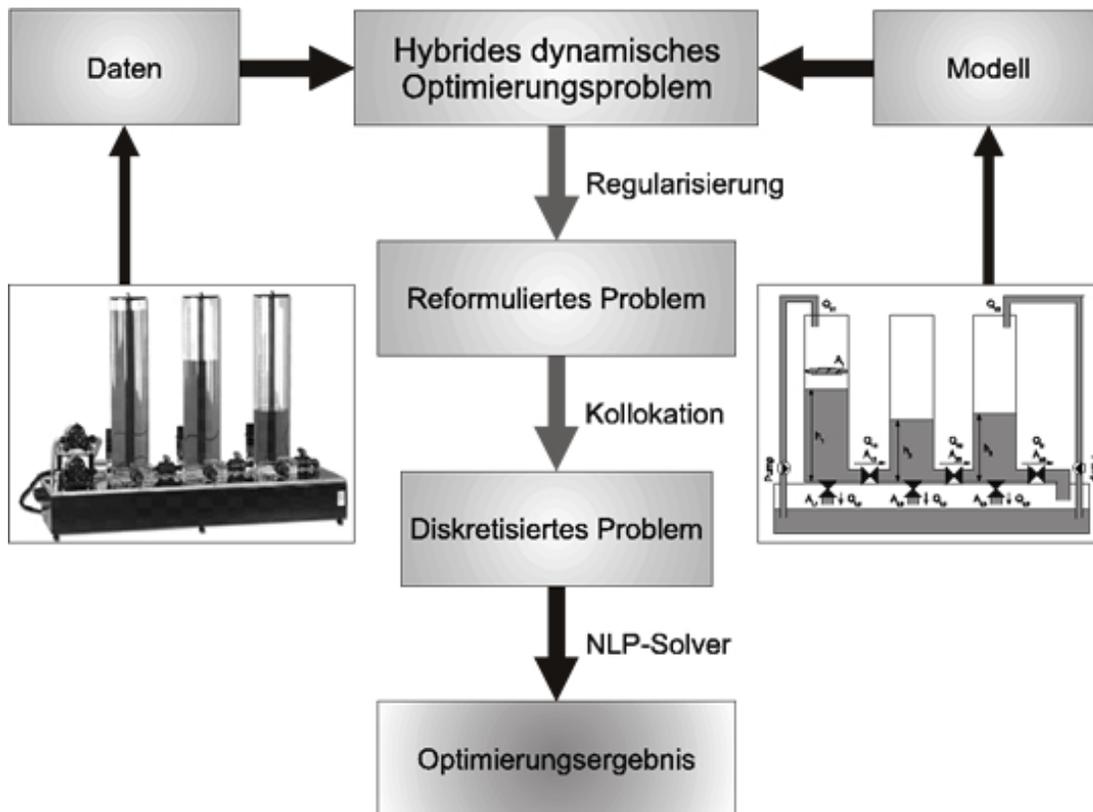


Abbildung 5.1: Lösung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme [109].

enthält das Modell als Nebenbedingung. Die am realen System gewonnenen Daten dienen z. B. der Modellvalidierung. Desweiteren können Messdaten auch direkt in die Zielfunktion eingehen, wie dies z. B. bei der Parameterschätzung und Datenvalidierung der Fall ist. Je nach Zielstellung treten unterschiedliche Optimierungsvariablen auf. Da die Zeitpunkte t_s des Umschaltens noch nicht bekannt sind, müssen auch diese in der Optimierung bestimmt werden. Die Optimierung muss also die Modellgleichungen aller Betriebsmodi berücksichtigen. Da es sich bei dem hybriden dynamischen Optimierungsproblem aufgrund der Umschaltun-

gen um ein nicht-glattes Problem handelt, wird eine Regularisierungsmethode zur Glättung verwendet. Das entstandene umformulierte Problem stellt dann ein dynamisches kontinuierliches Optimierungsproblem dar. Nach der Diskretisierung, z. B. durch Kollokation kann das Problem durch einen NLP-Solver gelöst werden. Der Unterschied im Vergleich zum Vorgehen bei der Lösung eines herkömmlichen dynamischen Optimierungsproblems mit kontinuierlicher Dynamik liegt im Schritt der Regularisierung. Das Zusammenspiel von Regularisierung und Diskretisierung wird in Abb. 5.2 veranschaulicht. Zunächst wird einer der Regularisierungsansät-

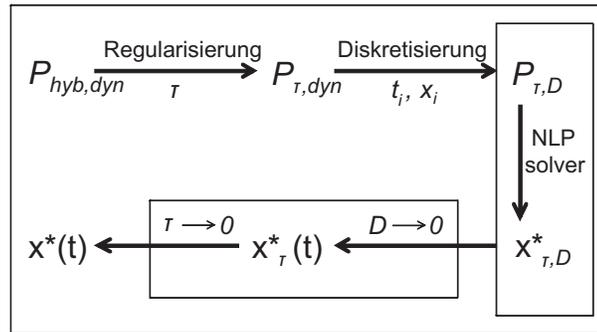


Abbildung 5.2: Zusammenspiel von Regularisierung und Diskretisierung bei der Optimierung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme.

ze auf das Originalproblem $\mathcal{P}_{hyb,dyn}$ angewandt. Dies führt auf das regularisierte dynamische Optimierungsproblem $\mathcal{P}_{\tau,dyn}$, bei dem der Reformulierungsparameter $\tau > 0$ den Grad der Regularisierung bestimmt. Durch die Diskretisierung des unendlich dimensionalen Problems $\mathcal{P}_{\tau,dyn}$ entsteht ein großes NLP $\mathcal{P}_{\tau,D}$, das mittels eines NLP-Solvers gelöst werden kann. Diese Lösung $x_{\tau,D}^*$ nähert sich der Lösung $x_{\tau}^*(t)$ des regularisierten Problems $\mathcal{P}_{\tau,dyn}$, wenn die Intervalllänge der Zeitdiskretisierung immer kleiner wird ($D \rightarrow 0$). Die Konvergenz hängt dabei von der Diskretisierungsmethode ab [19, 149]. Für die Lösung $x_{\tau}^*(t)$ lässt sich unter gewissen Umständen annehmen, dass sie zur Lösung $x^*(t)$ des ursprünglichen Problems konvergiert, wenn $\tau \rightarrow 0$ [146].

Zu Beginn dieses Kapitels wird in Abschnitt 5.1 das Optimierungsproblem, dessen Gleichungsnebenbedingungen durch die Modellbeschreibung eines dynamischen Hybridsystems mit impliziten Schaltbedingungen, d. h. autonomem Schaltverhalten, gegeben ist, formuliert. Da das Problem letztlich mit der simultanen Methode (siehe Abschnitt 2.4) gelöst werden soll, wird zunächst in Abschnitt 5.2 die Diskretisierung des Problems durch Kollokation auf finiten Elementen erklärt.

Anschließend wird für das in Abschnitt 5.1 formulierte Problem eine Glättungsmethode, ein Strafverfahren und später in Kapitel 6 eine Methode zur Zerlegung

des Problems in rein kontinuierliche Teilprobleme als mögliche Lösungsstrategien vorgeschlagen (Abschnitte 5.3, 5.3.4 und Kapitel 6.3). Mit diesen Ansätzen leistet die vorliegende Arbeit ihren Beitrag zur Forschung und Methodenentwicklung für die Optimierung autonom schaltender dynamischer Systeme.

In Abschnitt 5.3 wird für die Glättungsmethode eine praktische Abschätzung für die Wahl des Glättungsparameters gegeben (Abschnitt 5.3.2) und ein Algorithmus zum Auffinden des geeignetsten Wertes des Glättungsparameters vorgeschlagen (Abschnitt 5.3.3).

Abschnitt 5.3.4 zeigt, wie das Strafverfahren aus Abschnitt 4.2.2 mit einer Zweiebenenformulierung kombiniert wird, um das dynamische Hybridproblem zu glätten. In Abschnitt 5.4.1 wird das Zweiebenenproblem formuliert. Das innere Minimierungsproblem wird dann durch seine Optimalitätsbedingungen ersetzt (Abschnitt 5.4.2) und die komplementären Beschränkungen werden mittels des Strafverfahrens behandelt (Abschnitt 5.4.3). Hier spielt die Wahl des Strafparameters eine wichtige Rolle für die Konvergenz der Lösung des regularisierten Problems gegen die Lösung des Originalproblems. Die numerische Bestimmung des Strafparameters wird in Abschnitt 5.4.4 beschrieben.

Die Effektivität sowohl der Glättungsmethode als auch des Zweiebenenproblems mit Strafverfahren wird anhand eines ersten (mathematischen) Fallbeispiels demonstriert (Abschnitte 5.3.4 und 5.4.5).

5.1 Formulierung des dynamischen Hybridproblems

Das Optimierungsproblem für ein autonom schaltendes dynamisches Hybridsystem soll an dieser Stelle zunächst allgemein als

$$\min_{u,p} \mathcal{J}(x, y, u, p, t) \quad (5.1)$$

$$\text{mit } \dot{x} = \sum_{m=1}^M z_m f^{(m)}(x, y, u, p, t), \quad (5.2)$$

$$y = \sum_{m=1}^M z_m g^{(m)}(x, y, u, p, t), \quad (5.3)$$

$$z_m = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \psi^{mk}(x, y) > 0, \quad \forall k \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.4)$$

$m, k = 1, \dots, M, m \neq k,$

$$t_s : \psi^{mk}(x, y) = 0, \quad (5.5)$$

$$x(t_0) = x_0, x(t_s)^+ = \mathcal{T}^{mk}(x(t_s)^-), \quad (5.6)$$

$$x_{min} \leq x \leq x_{max}, \quad (5.7)$$

$$u_{min} \leq u \leq u_{max}, \quad (5.8)$$

$$p_{min} \leq p \leq p_{max}, \quad (5.9)$$

formuliert werden. Für diese Problemformulierung wurde die Notation aus Kapitel 3 verwendet. In dem dynamischen Hybridproblem (5.1)-(5.9) sind die Gleichungsnebenbedingungen (5.2) und (5.3) durch die Modellbeschreibung eines autonom schaltenden dynamischen Hybridsystems aus Abschnitt 3.1.4 gegeben - mit dem Unterschied, dass hier die Modellgleichungen (5.2) und (5.3) in expliziter Form auftreten. Es sei daran erinnert, dass die Schaltvariablen z_m ebenso wie die Zustandsvariablen x und y zeitabhängig sind. Die Ungleichungsnebenbedingungen (5.7)-(5.9) stellen Beschränkungen dar, die z. B. aus Sicherheitsanforderungen resultieren können. Die konkrete Form der Zielfunktion $\mathcal{J}(u, p)$ wird durch die Optimierungsaufgabe vorgegeben. So kann die Minimierung der Zielfunktion zur Parameterschätzung bzw. Datenvalidierung dienen. Das Ziel der Parameterschätzung ist es, basierend auf Messdaten die Parameterwerte zu finden, die zur besten Übereinstimmung der Datenreihen mit der Simulation des Modells führen. Bei der Datenvalidierung dagegen geht es darum, die Daten so zu verbessern, dass sie möglichst gut zu dem Modell passen. Die Zielfunktion ist also in beiden Fällen ein Maß für die Abweichung zwischen Messdaten und Modellvariablen. Mit den Messdaten der zu N Zeitpunkten t_n , $n = 1, \dots, N$ gemessenen D Zustandsvariablen kann die Abweichung zwischen realem System und Modell z. B. als Least Squares

$$\mathcal{J}(x(t), p) = \sum_{d=1}^D \sum_{n=1}^N \frac{\left(x_d(t_n, p) - x_{dn}^{(mess)}\right)^2}{\sigma_d^2} \quad (5.10)$$

formuliert werden. Hier bezeichnet σ_d^2 die als bekannt angenommene Varianz der Messdaten. Die Least-Squares-Formulierung beruht auf der Annahme normal verteilter, unkorrelierter Messabweichungen. In diesem Fall werden die Parameterwerte bzw. Daten gefunden, die mit höchster Wahrscheinlichkeit die verwendeten Messreihen erzeugen würden.

Die Zielfunktion kann aber auch als Optimalsteuerungsproblem definiert sein, bei dem der Zustand des Systems zum Endzeitpunkt t_f (z. B. die Konzentration eines gewünschten Produktes), die Zeit bis zum Erreichen eines Referenzzustandes (z. B. eines neuen Arbeitspunktes) oder die Prozessführung über den gesamten Optimierungszeitraum (z. B. Energieverbrauch, Rohstoffkosten, Abweichung vom Referenzwert) bewertet wird. Eine allgemeine Formulierung der Zielfunktion eines

Optimalsteuerungsproblems lautet

$$\mathcal{J}(x, u, t) = \phi(x_f, t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \tilde{f}(x, u, t) dt.$$

Hier bezeichnen $\phi(x_f, t_f)$ ein Kriterium zum Ende des betrachteten Zeithorizonts und $\tilde{f}(x, u, t)$ ein die Prozessführung beschreibendes Kriterium. In einer solchen Zielfunktion sind die Steuergrößen $u(t)$ die Optimierungsvariablen. Zusätzlich kann die Optimierung der Steuergrößen auch mit der Optimierung von Design- und Prozessparametern verbunden werden. Um die Notation zu vereinfachen, werden sich die folgenden Ausführungen auf ein dynamisches System mit zwei Betriebsmodi beschränken. Dadurch wird die Allgemeinheit der später verwendeten Ansätze nicht eingeschränkt, da die für die Lösung des Systems angenommene Eindeutigkeit der Lösung impliziert, dass für jede Umschaltung von einem Vorgängermodus in einen Nachfolgemodus der Nachfolgemodus eindeutig bestimmt werden kann [105]. Das bedeutet, an jedem Umschaltprozess sind genau zwei Modi beteiligt. Enthält eine Modellbeschreibung mehr als zwei Betriebsmodi, können zusammengesetzte Schaltfunktionen konstruiert werden, die aus elementaren Zweimodi-Schaltfunktionen bestehen. Für ein bimodales System ergibt sich das Optimierungsproblem

$$\min_{u, p} \mathcal{J}(x, y, u, p, t) \quad (5.11)$$

$$\text{mit } \dot{x} = z f^{(1)}(x, y, u, p, t) + (1 - z) f^{(2)}(x, y, u, p, t), \quad (5.12)$$

$$y = z g^{(1)}(x, y, u, p, t) + (1 - z) g^{(2)}(x, y, u, p, t), \quad (5.13)$$

$$z = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \psi(x, y) > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.14)$$

$$t_s : \quad \begin{aligned} \psi(x, y) &= 0, \\ x(t_0) &= x_0, \end{aligned} \quad (5.15)$$

$$x(t_s)^+ = \mathcal{T}(x(t_s)^-), \quad (5.16)$$

$$x_{min} \leq x \leq x_{max}, \quad (5.17)$$

$$u_{min} \leq u \leq u_{max}, \quad (5.18)$$

Soll ein solches Optimierungsproblem gelöst werden, ist zum Einen das bereits umfangreich diskutierte schaltende Verhalten zu berücksichtigen. Zum Anderen handelt es sich um ein *dynamisches* Optimierungsproblem. Für diese Problemklasse wurden die bereits in Abschnitt 2.4 im Überblick dargestellten effizienten Verfahren entwickelt. Für die für vorliegende Arbeit durchgeführten Berechnungen

wurde die simultane Methode benutzt. Dabei wurde zur Diskretisierung die Kollokation auf finiten Elementen verwendet, die im folgenden Abschnitt dargestellt wird.

5.2 Diskretisierung durch orthogonale Kollokation

Die Zeitdiskretisierung, wie sie z. B. beim simultanen Lösungsverfahren für dynamische Optimierungsprobleme durchzuführen ist, verwendet Integrations schemata, bei denen die Zustände zu einem bestimmten Zeitpunkt aus den Informationen über die Zeitableitungen sowie über die Zustände zu anderen Zeitpunkten bestimmt werden. Im einfachsten Fall kann man sich hier das explizite Eulerverfahren vorstellen. Ein in den letzten Jahren populär gewordenes Diskretisierungsschema ist die Kollokation auf finiten Elementen, welches äquivalent zum impliziten Runge-Kutta-Schema ist [7, 53]. Die Kollokationsmethode beruht darauf, dass sich eine Funktion gemäß

$$x(t) \approx \sum_{k=0}^{N_c} x_k L_k(t) \quad t \in [t_0, t_f] \quad (5.19)$$

approximieren lässt.¹ Hier sind t_0, t_f der Anfangs- und Endzeitpunkt des betrachteten Zeitintervalls. Als Interpolationspolynome werden die Lagrange polynome

$$L_k(t) = \prod_{\ell=0, \ell \neq k}^{N_c} \frac{t - t_\ell}{t_k - t_\ell} \quad (5.20)$$

verwendet, wobei die t_k, t_ℓ die den so genannten Kollokationspunkten entsprechenden Zeitpunkte sind. Die x_k in Gleichung (5.19) sind die Funktionswerte an den Kollokationspunkten. Für die Kollokationspunkte bedient man sich der Nullstellen orthogonaler Polynome, weshalb man die Polynomapproximation (5.19) auch als orthogonale Kollokation bezeichnet (siehe Anhang A). Es werden auf das Intervall $[0, 1]$ verschobene Legendrepolynome gewählt, da sie eine gleichmäßig gute Approximation auf dem gesamten Intervall liefern. Mit Gleichung (5.19) lassen sich die Differentialgleichungen

$$\dot{x}(t) = f(x, u, p, t),$$

welche die Dynamik des Systems beschreiben, durch

$$\sum_{k=0}^{N_c} x_k \dot{L}_k(t) \approx f(x, u, p, t) \quad t \in [t_0, t_f] \quad (5.21)$$

¹Um das Lesen dieses Abschnitts zu erleichtern, wurden alle hier verwendeten Indizes in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

approximieren. Da die gewählten Kollokationspunkte aus dem Intervall $[0, 1]$ stammen, soll die Zeit t in Gleichung (5.21) durch die normierte Zeit

$$\tau = \frac{t - t_0}{\Delta t} \in [0, 1], \quad \Delta t = t_f - t_0 \quad (5.22)$$

ersetzt werden. Dadurch geht natürlich auch dt in $\Delta t d\tau$ über und man erhält für (5.21)

$$\sum_{k=0}^{N_c} x_k \frac{L_k(\tau)}{d\tau} \approx \Delta t f(x, u, p, \tau). \quad (5.23)$$

Wertet man einen solchen Ausdruck an allen Kollokationspunkten τ_j aus, erhält man aufgrund der Interpolationseigenschaft (siehe Anhang A) das Gleichungssystem

$$\sum_{k=0}^{N_c} x_k \frac{L_k(\tau)}{d\tau} \Big|_{\tau_j} = \Delta t f(x_j, u_j, p, \tau_j), \quad j = 1, \dots, N_c, \quad (5.24)$$

welches für die x_k , $k = 1, \dots, N_c$ z. B. mit Hilfe des Newton-Raphson-Verfahrens gelöst werden kann.

Werden die x_k im gesamten interessierenden Zeithorizont auf diese Weise ausgewertet, handelt es sich um eine globale Kollokation. Um auch auf einem relativ großen Intervall $[t_0, t_f]$ eine ausreichende Genauigkeit zu erzielen, müssen Polynome genügend hoher Ordnung verwendet werden. In diesem Fall ist dann ein großes nichtlineares Gleichungssystem zu lösen. Der notwendige Speicherplatzbedarf und die Rechenzeit sind entsprechend hoch. Alternativ lässt sich auch eine lokale Kollokation (Kollokation auf finiten Elementen) durchführen. Hierbei wird zuerst der gesamte Zeithorizont $[t_0, t_f]$ in N Teilintervalle (finite Elemente) $[t_{i,0}, t_{i,f}]$, $i = 0, \dots, N - 1$ geteilt, wobei man fordert, dass die Zustände am Übergang zwischen benachbarten Teilintervallen kontinuierlich sind, d. h. $x(t_{i,f}) = x(t_{i+1,0})$, $i = 0, \dots, N - 2$. Für die Approximation der Systemzustände auf den Teilintervallen genügen jetzt Polynome niedriger Ordnung (z. B. $N_c = 3$). Die Matrix des zu lösenden Gleichungssystems weist dann eine blockdiagonale Struk-

tur auf. Nach der soeben beschriebenen Diskretisierung erhält man das NLP

$$\min_{x_{ij}, y_{ij}, u_{ij}, p} \mathcal{J}(x_{ij}, y_{ij}, u_{ij}, p, t_{ij}), \quad (5.25)$$

$$i = 0, \dots, N_e - 1, j = 1, \dots, N_c$$

$$\text{mit } \sum_{k=0}^{N_c} x_{ik} \frac{L_k(\tau)}{d\tau} \Big|_{\tau_j} = \Delta t_i (z_{ij} f^{(1)}(x_{ij}, y_{ij}, u_{ij}, p, t_{ij}) + (1 - z_{ij}) f^{(2)}(x_{ij}, y_{ij}, u_{ij}, p, t_{ij})), \quad (5.26)$$

$$y_{ij} = z_{ij} g^{(1)}(x_{ij}, y_{ij}, u_{ij}, p, t_{ij}) + (1 - z_{ij}) g^{(2)}(x_{ij}, y_{ij}, u_{ij}, p, t_{ij}), \quad (5.27)$$

$$z_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \psi(x_{ij}, y_{ij}) > 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.28)$$

$$x(t_0) = x_0.$$

Die Bedeutung der in diesem NLP auftretenden Indizes ist Tabelle 5.1 zu entnehmen. Die Anzahl der (Gleichungs-)Nebenbedingungen ergibt sich als $N_{eq} =$

Index	Werte	Bedeutung	Gleichung
i	$1, \dots, N_e$	1. Index der Zeitdiskretisierung, Nummer des Zeitintervalls	(5.25)-(5.28)
j	$1, \dots, N_c$	2. Index der Zeitdiskretisierung, Nummer des Kollokationspunktes innerhalb des Zeitintervalls. Diese seien auf allen Intervallen identisch.	(5.24)-(5.28)
k	$0, \dots, N_c$	Index der zur Interpolation von x bzw. \dot{x} verwendeten Stützstellen	(5.19)-(5.20) (5.21) (5.23) (5.24) (5.26)
ℓ	$0, \dots, N_c$ $\ell \neq k$	Indizes der zur Berechnung des k-ten Lagrangepolynoms verwendeten übrigen Stützstellen	(5.20)

Tabelle 5.1: Indizes bei der orthogonalen Kollokation in Abschnitt 5.2.

$N_x N_e N_c + N_y N_e N_c + 2 N_e N_c$ aus der Anzahl der $N_e N_c$ Gleichungen für N_x differentielle Variablen, der entsprechenden Anzahl Gleichungen für N_y algebraische Variablen und $N_e N_c$ Gleichungen für jede der beiden Schaltvariablen. Das Problem hat $N_{opt} = N_p + N_u N_e N_c + N_{eq}$ Optimierungsvariablen. Die Variablenbeschränkungen (5.11)-(5.18) wurden in (5.25)-(5.28) der Übersichtlichkeit halber weggelassen.

Wegen der Stufenfunktion (5.28) und den damit verbundenen Umschaltungen in (5.26) und (5.27) ist das Problem (5.25)-(5.28) nicht glatt. Deshalb wird eine Regularisierung durchgeführt.

5.3 Regularisierung durch eine Glättungsmethode

Eine erste, konzeptionell einfache Regularisierungsmethode ist die Glättung. Im Gegensatz zu den Relaxations- und Glättungsmethoden aus Abschnitt 4.2.1, wo die Orthogonalität zwischen den Vektoren $G(x)$ und $H(x)$ relaxiert wurde, wird hier die Stufenfunktion selbst geglättet, so dass die Komplementarität der Betriebsmodi außerhalb einer kleinen Region $[t_{s-}, t_{s+}]$ um die Schaltzeit t_s herum erfüllt ist. Während im Originalproblem (5.11)-(5.18) das System zu dem durch die Schaltfunktion $\psi(x, y)$ definierten Zeitpunkt instantan umschaltet, geht im geglätteten Problem das System schnell, aber kontinuierlich in den neuen Modus über. Während des Übergangs wird das System durch eine Linearkombination der beiden benachbarten Modi beschrieben. Das Gewicht wird dabei durch den Wert der geglätteten Stufenfunktion festgelegt. Diese Art von Glättung ist allgemein auf dynamische Hybridprobleme mit impliziten Schaltbedingungen anwendbar. Man beachte, dass die Komplexität des Problems bei dieser Formulierung trotz der Schaltvorgänge nicht steigt, da die Werte für z durch Funktionen bestimmt werden und sich deshalb die Anzahl der Optimierungsvariablen nicht erhöht. Die Genauigkeit der Methode hängt vom Modellsystem und der Steilheit der geglätteten Stufenfunktion ab. Dies wird weiter unten noch genauer untersucht.

5.3.1 Wahl der Glättungsfunktion

Die kontinuierliche Funktion, die den Übergang zwischen den Betriebsmodi bewirkt, sollte außerhalb der Umschaltregion die Werte 0 und 1 haben und nahe der Schaltfläche ihre Werte kontinuierlich zwischen 0 und 1 ändern. Als eine geeignete Funktion wird hier

$$z(\psi(x, y)) = \frac{1}{1 + \exp\left[-\frac{\psi(x, y)}{\tau}\right]} \quad (5.29)$$

gewählt. Somit lautet das geglättete dynamische Problem

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{glatt,dyn} : \quad & \min_{x,y,u,p} \mathcal{J}(x,y,u,p) & (5.30) \\ \text{mit } \dot{x} &= z f^{(1)}(x,y,u,p,t) + (1-z) f^{(2)}(x,y,u,p,t), \\ y &= z g^{(1)}(x,y,u,p,t) + (1-z) g^{(2)}(x,y,u,p,t), \\ x(t_0) &= x_0, \\ z(\psi(x,y)) &= \frac{1}{1 + \exp\left[-\frac{\psi(x,y)}{\tau}\right]}. \end{aligned}$$

Für die geglättete Stufenfunktion (5.29) skaliert die Breite der Übergangsregion, d. h. die Dauer des Schaltvorganges, mit dem Glättungsparameter τ (Abb. 5.3).

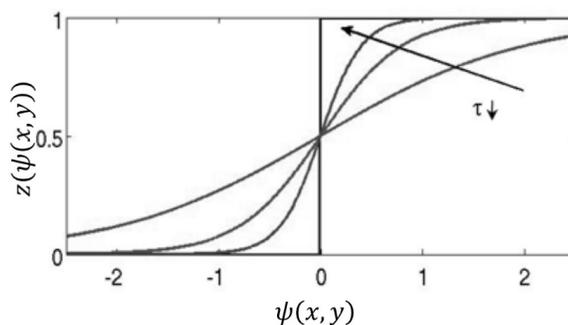


Abbildung 5.3: Verlauf der Glättungsfunktion in Abhängigkeit von τ .

Eine Näherungslösung des Originalproblems sollte also durch Lösen einer Reihe von Problemen mit immer kleiner werdenden τ -Werten gefunden werden, wobei der Limes $\lim_{n \rightarrow \infty} \tau_n = 0$ der exakten Lösung entspricht. Stewart und Anitescu [146] beweisen für eine andere parametrisierte Schaltfunktion mit ähnlichen Eigenschaften wie (5.29), dass nicht nur die Zustandstrajektorien, sondern auch die Sensitivitäten des geglätteten Problems gegen die des Originalproblems konvergieren, wenn der Glättungsparameter τ gegen 0 geht. Darüberhinaus stellen diese Autoren fest, dass es ausreicht, wenn $z_\tau(\psi(x,y))$ “schnell genug” gegen 0 bzw. 1 geht, falls $\psi(x,y)/\tau > 1$ und $\psi(x,y)/\tau < -1$.

5.3.2 Abschätzung geeigneter Werte des Glättungsparameters

Aus dem bisher Gesagten geht hervor, dass der Glättungsparameter τ möglichst klein gewählt werden sollte, damit das Verhalten des approximierten Problems

dem des Originalproblems möglichst nahe kommt. Zugleich sollte τ aber nicht zu klein sein, da dann ein steifes DAE-System entsteht und mit numerischen Schwierigkeiten gerechnet werden muss (siehe auch [106]). Deshalb ist eine Abschätzung für einen geeigneten Wert des Glättungsparameters, die einerseits eine hinreichend gute Näherungslösung ermöglicht, andererseits aber auch zu gutem numerischen Verhalten des Problems führt, äußerst nützlich. Zum Zweck einer solchen Abschätzung werden die Schaltfunktionen und Zustandstrajektorien analysiert. Dabei sind insbesondere zwei Dinge relevant für ein gutes Verhalten des approximierten Problems: Erstens ist es von Vorteil, wenn die beiden benachbarten Dynamiken um den Schaltzeitpunkt nicht zu stark voneinander abweichen. Dies ist jedoch modellspezifisch. Zweitens sollte die Übergangszeit im Vergleich zu typischen Zeitskalen der übrigen Systemdynamik kurz sein, d. h.

$$\left| \frac{dz}{dt} \right|_{\psi \approx 0} \gg \left| \frac{dx_i}{dt} \right|_{\psi \approx 0} \quad \forall i, i = 1, \dots, n, \quad (5.31)$$

wobei n die Anzahl der vom Schaltprozess betroffenen Zustände ist. $\psi \approx 0$ bedeutet, dass die Ungleichung in der Umgebung von $\psi = 0$ erfüllt sein soll. Die Ungleichung (5.31) ist äquivalent zu

$$\left| \frac{dz}{dx_i} \right|_{\psi \approx 0} \gg 1 \quad \forall i, i = 1, \dots, n \quad (5.32)$$

bzw.

$$\left| \frac{dz}{d\psi} \frac{d\psi}{dx_i} \right|_{\psi \approx 0} \gg 1 \quad \forall i, i = 1, \dots, n. \quad (5.33)$$

Für die Glättungsfunktion (5.29) ist

$$\left| \frac{dz}{d\psi} \right| = \frac{2}{\tau} \left(1 + \cosh \left[\frac{\psi(x)}{\tau} \right] \right)^{-1}. \quad (5.34)$$

Mit Einsetzen von (5.34) in (5.33) folgt

$$\tau \ll 2 \left(1 + \cosh \left[\frac{\psi(x)}{\tau} \right] \right)^{-1} \frac{d\psi}{dx_i}.$$

Hiermit lässt sich τ zu

$$\tau = \frac{1}{4c} \left| \frac{d\psi}{dx_i} \right|_{\psi=0} \quad (5.35)$$

abschätzen, wobei die Erfahrung zeigt, dass in der Praxis $c \approx 10 \dots 100$ in der Regel zu einer hinreichend guten Approximation führen wird. Neben der ausreichenden

Steilheit der Schaltfunktion ist eine geringe Krümmung derselben von Vorteil, da die Beziehung (5.33) in der gesamten Übergangsregion erfüllt sein sollte. Dies bedeutet, dass sich anhand der ersten und zweiten Ableitung der Schaltfunktion nach den Zustandsvariablen die Eignung der Glättungsmethode für ein spezifisches Modellsystem abschätzen lässt.

5.3.3 Numerische Bestimmung des Glättungsparameters

Wie bereits die Diskussion im vorhergehenden Kapitel zeigte, ist der geeignete Wert des Glättungsparameters modellspezifisch. Die Abschätzung eines solchen Wertes des Glättungsparameters gemäß Gleichung (5.35) kann auch nur ein Richtwert sein, der durch das Lösen einer Reihe von Problemen mit kleiner werdendem Glättungsparameter Schritt für Schritt verbessert wird. Man startet also mit dem durch diese Abschätzung gefundenen Wert τ^0 , wobei ein moderater Wert c eingesetzt wird. Dadurch wird sichergestellt, dass das Anfangsproblem glatt genug ist und durch einen NLP-Solver die Lösung $\mathcal{J}^k = \mathcal{J}(x^*, x^k, \tau^k)$ $k = 0$ gefunden werden kann. Dabei kennzeichnet x^* die optimale Lösung, x^k , $k = 0, \dots, K$ steht für den Anfangsschätzwert für x in der aktuellen τ -Iteration und τ^k für den aktuellen Glättungsparameter. In der nächsten Iteration ($k = k + 1$) wird τ verringert. Dies kann beispielsweise durch Multiplikation mit einem konstanten Faktor $\bar{c} < 1$ geschehen. Das Problem wird wieder gelöst und die Differenz der beiden Zielfunktionen $\Delta^k = \mathcal{J}^k - \mathcal{J}^{k-1}$ kann berechnet werden. Im Folgenden wird eine Reihe von Problemen mit jeweils verringertem Glättungsparameter gelöst und Δ^k berechnet. Die Schleife wird jeweils fortgesetzt, wenn $\text{sign}\Delta^k = \text{sign}\Delta^{k-1}$ und Δ betragsmäßig fällt. Die Ungleichheit $\text{sign}\Delta^k \neq \text{sign}\Delta^{k-1}$ oder betragsmäßig steigendes Δ kann auf numerische Instabilitäten hindeuten. Deshalb sollte hier die Konvergenz der Zustandstrajektorien überprüft oder die Sequenz der Optimierungsprobleme abgebrochen und $\mathcal{J}(x^*, x^{k-1}, \tau^{k-1})$ als optimale Lösung angesehen werden. Wird die Sequenz aller Lösungen in Abhängigkeit vom Glättungsparameter dargestellt, lässt sich gegebenenfalls mit einem zusätzlichen Extrapolationsschritt die Lösung des Originalproblems bestimmen.

5.3.4 Demonstration der Glättungsmethode an einem mathematischen Beispiel

Im Folgenden soll die Wirkungsweise der Glättungsmethode an einem einfachen Beispiel veranschaulicht werden. Hierfür wird ein mathematisches Beispiel mit einer Zielfunktion vom Bolza-Typ und einer dynamischen Gleichung mit einer

Umschaltbedingung als Beschränkung gewählt [146]:

$$\begin{aligned} \min_{x_0} \quad \mathcal{J}(x) &= (x_f - 5/3)^2 + \int_{t_0}^{t_f} x^2 dt & (5.36) \\ \text{mit } \dot{x} &= 2 - \text{sign}(\psi(x)), \\ \psi(x) &= x, \\ x(t_0 = 0) &= x_0, \\ x(t_f = 2) &= x_f. \end{aligned}$$

Der Anfangszustand x_0 ist der freie Parameter in der Optimierung. Die Endzeit

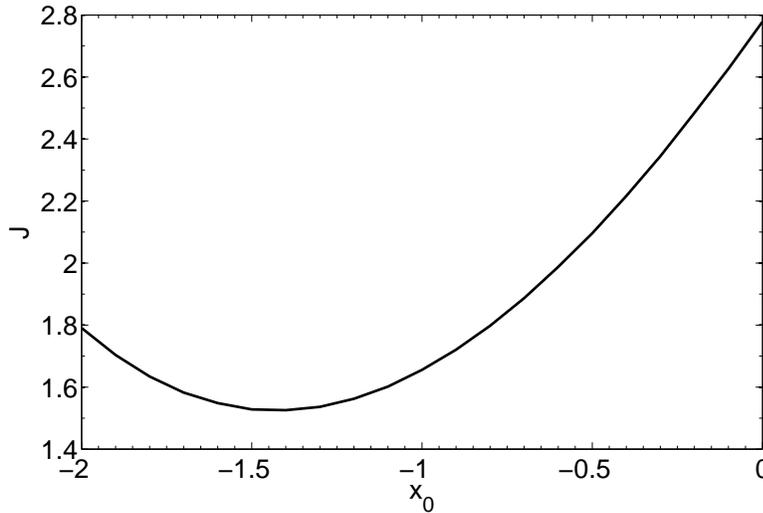


Abbildung 5.4: Zielkriterium des Problems (5.36) in Abhängigkeit vom freien Parameter x_0 .

$t_f = 2$ ist fix. Die Signumfunktion in der Modellgleichung führt zum Umschalten der Dynamik zwischen $\dot{x}^{(1)} = 3$ und $\dot{x}^{(2)} = 1$, wenn $\psi(x) = 0$. Dieses Beispiel ist zur ersten Demonstration der Wirksamkeit der Glättungsmethode besonders geeignet, da die Lösung analytisch berechnet werden kann. Die Zielfunktion $\mathcal{J}(x)$ ist in Abb. 5.4 in Abhängigkeit vom Anfangszustand x_0 dargestellt. Die analytische Lösung liegt bei $x_0^* = -1.4276$ mit dem Zielfunktionswert $\mathcal{J}(x_0^*) = 1.5238$. Das System ist so beschaffen, dass die Richtungsableitungen $D^{(1)}\psi$ und $D^{(2)}\psi$ aus Abschnitt 3.2.3 die Bedingung $D^{(1)}\psi > 0$ und $D^{(2)}\psi > 0$ erfüllen, der Zustand nach dem Schaltvorgang also nicht in der Schaltfläche festgehalten wird. Mittels der Glättungsmethode wird das Problem (5.36) umformuliert. Hierzu wird die

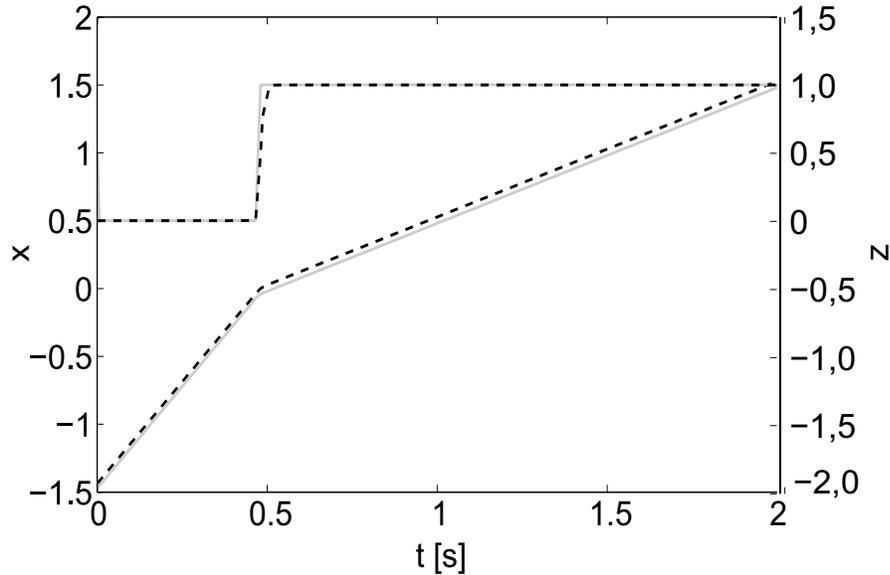


Abbildung 5.5: Optimale Trajektorien des Zustandes x (unten) und der Schaltvariable z (oben) aus Problem (5.36) durch Lösen mit der Glättungsmethode (schwarz gestrichelt) bzw. mit dem Strafverfahren (grau durchgezogen).

Schaltvariable z eingeführt, so dass

$$\begin{aligned} \min_{x_0} \mathcal{J}(x) &= (x_f - 5/3)^2 + \int_{t_0}^{t_f} x^2 dt & (5.37) \\ \text{mit } \dot{x} &= z + 3(1 - z), \\ z(x) &= \frac{1}{1 + \exp\left[-\frac{x}{\tau}\right]}, \\ x(t_0 = 0) &= x_0, \\ x(t_f = 2) &= x_f. \end{aligned}$$

Dieses unendlich dimensionale Problem wird mit der Kollokationsmethode (siehe Abschnitt 5.2) diskretisiert und so in ein endlich dimensionales Problem transformiert. Als Lösung dieses diskretisierten Problems findet man $x_0^* = -1.4360$ und $\mathcal{J}(x_0^*) = 1.5354$. Abbildung 5.5 (gestrichelte Linien) zeigt die Trajektorien des Zustandes x (unten) und der Schaltvariable z (oben). Da wie oben diskutiert die Genauigkeit der Lösung entscheidend vom Glättungsparameter abhängt, wurde sein Einfluss auf die Lösung untersucht. Die Abschätzung Gleichung (5.35) besagt, dass für dieses Problem Werte $\tau = 0.025 \dots 0.0025$ in die Nähe der Lösung des Originalproblems führen sollten. Dies wird durch Abb. 5.6 bestätigt. Höhere τ -Werte liefern Lösungen, die deutlich von der Lösung des Originalproblems abweichen.

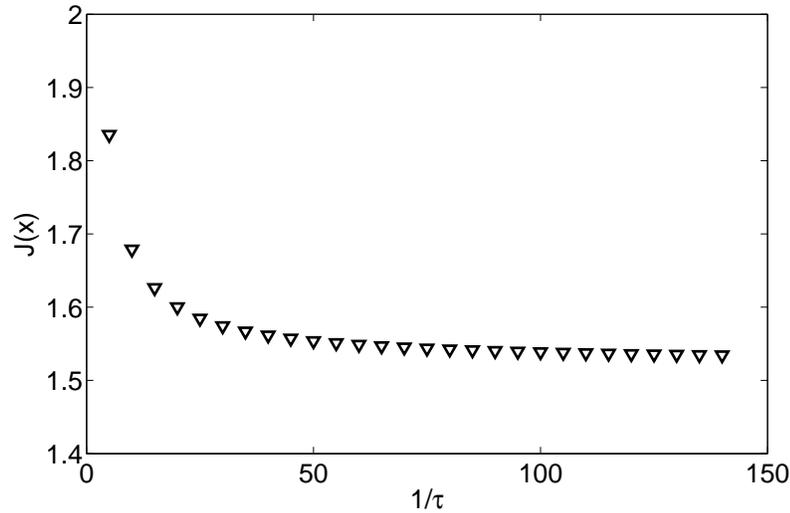


Abbildung 5.6: Abhängigkeit der Zielfunktion des Problems (5.36) vom Glättungsparameter.

Die Lösung des approximierten Problems nähert sich asymptotisch dem wahren Wert. Für kleinere als die in Abb. 5.6 gezeigten τ -Werte kommt es zu numerischen Instabilitäten, die sich als Sprünge der Zielfunktionswerte zwischen zwei benachbarten τ -Iterationen bemerkbar machen. Um die Glattheit des Problems zu gewährleisten, wurde der beschriebene Algorithmus zur Lösung des Problems mit dem Glättungsparameter $\tau^0 = 0.025$ initialisiert und schließlich als numerisch kleinstmöglicher Wert $\tau = 7 \cdot 10^{-3}$ erreicht.

5.4 Kombination von Zweiebenenproblem und Strafverfahren

In einem alternativen Ansatz zur Regularisierung des Problems wird ungenau- es bzw. falsches Schaltverhalten durch zusätzliche Beiträge in der Zielfunktion bestraft. Hierbei kombiniert man das Prinzip des Strafverfahrens mit einer Zweiebenen-Optimierung.

5.4.1 Formulierung des Zweiebenenproblems

Die Formulierung des Bilevelproblems dient dazu, die impliziten Schaltbedingungen so in das Optimierungsproblem einzufügen, dass durch die Optimierung das

autonome Umschalten realisiert werden kann. Diese Aufgabe kommt dem inneren Minimierungsproblem zu. Das vollständige Zweiebenenproblem wird gemäß

$$\min_{x,y,u,p} \mathcal{J}(x, y, u, p, t) \quad (5.38)$$

$$\text{mit } \dot{x} = z f^{(1)}(x, y, u, p, t) + (1 - z) f^{(2)}(x, y, u, p, t), \quad (5.39)$$

$$y = z g^{(1)}(x, y, u, p, t) + (1 - z) g^{(2)}(x, y, u, p, t), \quad (5.40)$$

$$x(t_0) = x_0,$$

mit $z(\psi(x, y))$ als Lösung des inneren Problems

$$\min_z -z\psi(x, y) \quad (5.41)$$

$$z \in [0, 1] \quad (5.42)$$

formuliert. Die Nebenbedingungen (5.39) und (5.40) enthalten die Modellgleichungen. Zu jedem Zeitpunkt wird der Wert der Schaltvariablen z gemäß dem aktuellen Wert der Schaltfunktion $\psi(x, y)$ optimiert. Das Minimum liegt bei $z = 1$ wenn $\psi(x, y) > 0$, bei $z = 0$ wenn $\psi(x, y) < 0$ und $z \in [0, 1]$ wenn $\psi(x, y) = 0$. Deshalb führt das Problem (5.38) zu der Inklusion

$$z(t) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \psi(x, y) > 0 \\ 0 & \text{wenn } \psi(x, y) < 0 \\ \in [0, 1] & \text{wenn } \psi(x, y) = 0 \end{cases}$$

und der Wert der Schaltvariable an den Nullstellen der Schaltfunktion ist nicht genauer bestimmt. Da für diese Arbeit aber Systeme von Interesse sind, die unmittelbar nach dem Umschalten die Schaltfläche verlassen, liegt der Fall $\psi(x, y) = 0$ nur an einem kritischen Punkt vor, dessen Einfluss auf die nachfolgende Systemdynamik vernachlässigt werden kann.

5.4.2 Optimalitätsbedingungen des inneren Minimierungsproblems

Im nächsten Schritt wird das innere Minimierungsproblem durch seine KKT-Bedingungen ersetzt. Damit wird das Zweiebenenproblem mittels der nicht-negativen

Lagrangemultiplikatoren λ_0, λ_1 zu

$$\min_{x,y} \mathcal{J}(x, y, u, p, t) \quad (5.43)$$

$$\text{mit } \dot{x} = zf^{(1)}(x, y, u, p, t) + (1-z)f^{(2)}(x, y, u, p, t), \quad (5.44)$$

$$y = zg^{(1)}(x, y, u, p, t) + (1-z)g^{(2)}(x, y, u, p, t), \quad (5.45)$$

$$x(t_0) = x_0,$$

$$0 = -\psi(x, y) - \lambda_0 + \lambda_1 \quad (5.46)$$

$$0 = \lambda_0 z, \quad (5.47)$$

$$0 = \lambda_1(1-z), \quad (5.48)$$

$$\lambda_0, \lambda_1 \geq 0, z \in [0, 1]. \quad (5.49)$$

Dieser Ansatz ist gerechtfertigt, da das innere Minimierungsproblem ein lineares Programm in y ist und deshalb seine KKT-Bedingungen sowohl notwendig als auch hinreichend für die Optimalität sind. Man vergesse bei (5.43)-(5.49) nicht, dass außer den Variablen x, y auch die Lagrangemultiplikatoren λ_0, λ_1 und die Schaltvariable z von der Zeit abhängen.

5.4.3 Strafverfahren für komplementäre Beschränkungen

In Problem (5.43)-(5.49) wurde das richtige Schaltverhalten durch die KKT-Bedingungen des inneren Minimierungsproblems sichergestellt. Die Komplementarität zwischen den Betriebsmodi ist jetzt auf die Beziehungen (5.47) und (5.48) zwischen den Schaltvariablen z und den Lagrangemultiplikatoren λ_0, λ_1 übergegangen. Das Problem (5.43)-(5.49) wird nun mit dem in Abschnitt 4.2.2 diskutierten Ansatz regularisiert. Die komplementären Beschränkungen (5.47 und 5.48) werden als Strafterme in die Zielfunktion aufgenommen, was zu

$$\min_{x,y,u,p,z,\lambda_0,\lambda_1} \mathcal{J}(x, y, u, p) + \rho \int_{t_0}^{t_f} (\lambda_0 z + \lambda_1(1-z)) dt \quad (5.50)$$

$$\text{mit } \dot{x} = zf^{(1)}(x, y, u, p, t) + (1-z)f^{(2)}(x, y, u, p, t), \quad (5.51)$$

$$y = zg^{(1)}(x, y, u, p, t) + (1-z)g^{(2)}(x, y, u, p, t), \quad (5.52)$$

$$x(t_0) = x_0,$$

$$0 = -\psi(x, y) - \lambda_0 + \lambda_1, \quad (5.53)$$

$$\lambda_0, \lambda_1 \geq 0, z \in [0, 1] \quad (5.54)$$

mit einem Strafparameter $\rho > 0$ führt. Anstelle des Skalarproduktes im (statischen) MPCC (4.37) wird im dynamischen Problem in der Zielfunktion (5.50) die Definition des Skalarproduktes

$$\langle a, b \rangle = \int_0^{t_f} a(t)b(t)dt$$

für den Vektorraum der auf $[0, t_f]$ definierten, reellwertigen stetigen Funktionen verwendet. Da sowohl z als auch $\lambda_{0/1}$ aufgrund der Nebenbedingungen (5.54) positiv sind, wird der Strafterm in der Zielfunktion dann minimal, wenn $z \perp \lambda_0$ und $(1 - z) \perp \lambda_1$ bzw. $0 = \lambda_0 z$ und $0 = \lambda_1(1 - z)$, d. h. wenn die Nebenbedingungen (5.47) und (5.48) des Problems (5.43)-(5.49) erfüllt sind. In Abschnitt 4.2.2 war gezeigt worden, dass das Strafverfahren in dem Sinne exakt ist, dass ein stationärer Punkt von (4.1-4.5) unter gewissen Annahmen ein lokaler Minimierer von (4.37) ist. Die dort gemachten Aussagen lassen sich allerdings nicht ohne Weiteres auf die unendlich-dimensionalen, zeitkontinuierlichen Probleme (5.43)-(5.49) und (5.50)-(5.54) übertragen. Diskretisiert man aber diese beiden Probleme, entstehen große NLPs, für welche die Aussagen aus Abschnitt 4.2.2 gelten. Die Umformulierung und Regularisierung dynamischer Optimierungsprobleme mit autonomen Umschaltungen gemäß (5.50)-(5.54) ist allgemein auf dynamische Hybridprobleme anwendbar. Es besteht die Möglichkeit, sowohl autonome als auch gesteuerte Umschaltungen zu realisieren. Die Schaltvariablen $z(t)$ werden bei diesem Verfahren optimiert, was zu einer Erhöhung der Anzahl der Optimierungsvariablen und damit auch des Rechenaufwandes führt. Bezüglich der Genauigkeit ist zu erwarten, dass die Lösung des Problems (5.50)-(5.54) nach Diskretisierung mit der Lösung des Problems (5.43)-(5.49) nach Diskretisierung übereinstimmt, weil das Strafverfahren exakt ist [76]. Allerdings lässt sich keine Aussage darüber machen, inwieweit die exakte Lösung des diskretisierten Problems mit der Lösung des zeitkontinuierlichen Problems übereinstimmt. Insbesondere bei Verwendung der sonst sehr genauen Kollokationsmethode wird die Polynominterpolation (5.21) in den finiten Elementen, welche Umschaltunkte enthalten, zu Fehlern bei der Berechnung der Zustandstrajektorien führen.

5.4.4 Numerische Bestimmung des Strafparameters

Wie auch bei der Glättungsmethode ist der Regularisierungsparameter, d. h. der Strafparameter ρ für die Genauigkeit der Lösung wesentlich. Die theoretischen Aussagen zu den Eigenschaften des Strafverfahrens erfordern einen hinreichend hohen Wert für ρ . Es zeigte sich jedoch, dass die numerische Lösung des Problems nicht durch einmaliges Lösen mit einem solch hohen Wert ρ möglich ist. Auch in [85] wird darauf hingewiesen, dass durch die Bestrafung der Verletzung

der Komplementarität in (4.37) lokale Minima in die Zielfunktion eingeführt werden. Infolge der vielen komplementären Variablen im diskretisierten dynamischen Problem ist zu erwarten, dass diese Schwierigkeit noch verstärkt auftritt. Beim einmaligen Lösen des Problems mit einem hohen Wert für ρ wird deshalb der Algorithmus sehr wahrscheinlich in einem lokalen Minimum hängen bleiben. Aus diesem Grund wird mit einem kleineren als dem letztlich erforderlichen Wert für ρ begonnen. Es wird damit eine Lösung des diskretisierten, geglätteten Problems gefunden, die aber für das diskretisierte Problem mit komplementären Beschränkungen nicht zulässig ist, d. h. die geforderte Komplementarität wird nicht erfüllt sein. Der Zielfunktionswert an der Lösung des geglätteten Problems ist dann typischerweise kleiner als der Zielfunktionswert an der Lösung des nichtglatten Problems. Mit dieser vorläufigen Lösung wird das nächste Problem initialisiert, für welches dann ein höherer Wert ρ verwendet wird. So nähert man sich schrittweise dem Wert $\rho > \rho^*$ und der stationäre Punkt des Problems mit Straftermen ((5.50)-(5.54)) nach Diskretisierung ist auch für das Problem mit den komplementären Beschränkungen ((5.43)-(5.49)) nach Diskretisierung stationär, was zugleich die Zulässigkeit für das letztere Problem impliziert. Wie es für exakte Strafverfahren typisch ist, nähert sich dabei der Zielfunktionswert des (diskretisierten) Problems mit Straftermen von unten dem Zielfunktionswert des (diskretisierten) Originalproblems [76].

5.4.5 Demonstration des Strafverfahrens an einem mathematischen Beispiel

Die Effektivität des Strafverfahrens wird anhand des Beispiels (5.36) gezeigt. Das Zweiebenenproblem wird mittels der KKT-Bedingungen des inneren Problems umformuliert. Die Verletzung der Komplementarität zwischen den Schaltvariablen z bzw. $1 - z$ und den zugehörigen Lagrangemultiplikatoren des inneren Problems λ_0 bzw. λ_1 wird bestraft, was auf das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} \min_{x,y,p,\varphi,\lambda_0,\lambda_1} \quad & (x_f - 5/3)^2 + \int_{t_0}^{t_f} x^2 dt & (5.55) \\ & + \rho \int_{t_0}^{t_f} (\lambda_0 z + \lambda_1 (1 - z)) dt \\ \text{mit} \quad & 0 = z + 3(1 - z), \\ & 0 = -x - \lambda_0 + \lambda_1, \\ & \lambda_0, \lambda_1 \geq 0, z \in [0, 1] \\ & x(t_0) = x_0, x(t_f = 2) = x_f \end{aligned}$$

führt. Auch hier wird zur Diskretisierung die Kollokationsmethode verwendet.

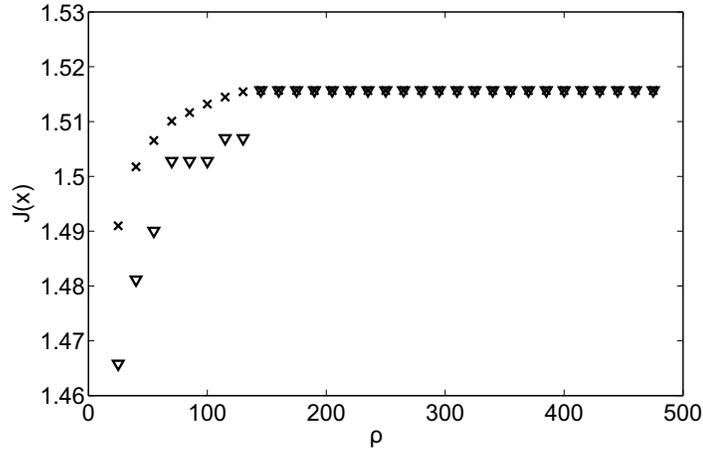


Abbildung 5.7: Abhängigkeit der Zielfunktion des Problems (5.36) inklusive Strafterm (Kreuze) bzw. nach Subtraktion des Strafterms (Dreiecke) in Abhängigkeit vom Strafparameter.

Für die optimalen Werte der Zielfunktion und des zu optimierenden Anfangszustandes ergeben sich $\mathcal{J}(x_0^*) = 1.4967$ und $x_0^* = -1.4882$. Der kritische Wert des Strafparameters ist $\rho^* = 145$.

Der optimale Wert der Zielfunktion des Problems (5.55) ist kleiner als der analytische Wert. Diese Abweichung könnte entweder auf das Strafverfahren oder die Diskretisierung des Problems zurückzuführen sein. Abbildung 5.7 belegt jedoch, dass die Lösung des bestrafte, diskretisierten Problems auch für das diskretisierte Problem mit komplementären Beschränkungen exakt ist. Der Wert der Zielfunktion nähert sich von unten einem Wert an, der ab einem hinreichend großem ρ bei weiterer Erhöhung von ρ konstant bleibt. Außerdem wird für diese großen ρ -Werte der Strafterm zu 0. Die Exaktheit des Strafverfahrens ist also gegeben. Dies deutet darauf hin, dass schon der Diskretisierungsschritt zu Abweichungen führt, so dass man durch Lösen des diskretisierten Problems mit Strafterm nicht die genaue Lösung des dynamischen Originalproblems erhält. Abbildung 5.8 zeigt die Rechenzeiten bei der Lösung der Probleme (5.37) und (5.55) in Abhängigkeit von der Diskretisierung. Für die Kollokation auf finiten Elementen wurden jeweils pro Intervall $N_c = 3$ Kollokationspunkte verwendet. Die Anzahl der finiten Elemente wurde variiert. Bei der Glättungsmethode zeigte sich, dass die Anzahl der Iterationen und somit auch die Rechenzeit bei Erhöhung der Anzahl finiter Elemente nur geringfügig ansteigt. Für die Zweiebenenformulierung mit Strafverfahren dagegen kann das Problem nur mit einer moderaten Anzahl finiter Elemente gelöst werden, da die Anzahl der Iteration mit Erhöhung der Anzahl finiter Elemente

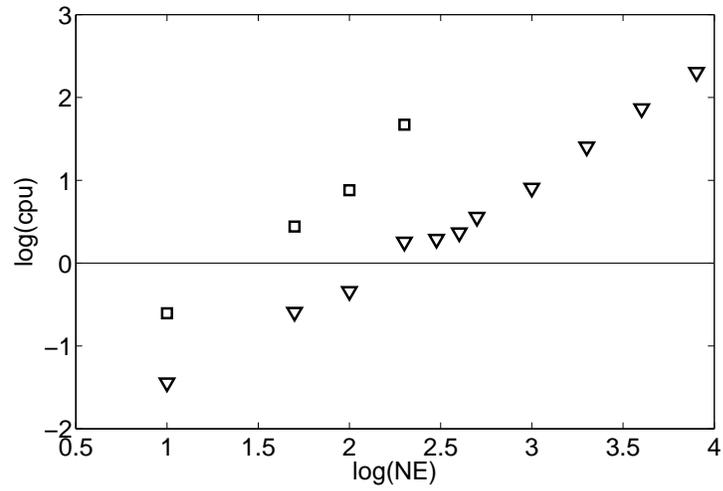


Abbildung 5.8: Rechenzeit für das Lösen des Problems (5.36) mittels Glättungsmethode (Dreiecke) bzw. Strafverfahren (Quadrate) in Abhängigkeit von der Anzahl N_e der finiten Elemente.

bzw. der Anzahl der Optimierungsvariablen stark ansteigt.

Kapitel 6

Stückweise Optimierung dynamischer Hybridsysteme

In diesem Kapitel wird eine Methode entwickelt, bei der die Optimierung autonom schaltender dynamischer Probleme abschnittsweise durchgeführt wird. Die Grundidee besteht darin, den Zeithorizont des Gesamtproblems so in Teilintervalle zu zerlegen, dass durch jeden Schaltvorgang eine Intervallgrenze entsteht. Innerhalb der Intervalle ist die Zeitentwicklung des Systems kontinuierlich. Somit können auf den Teilintervallen Methoden der kontinuierlichen dynamischen Optimierung eingesetzt werden. Die Idee der Zerlegung in Teilintervalle mit kontinuierlicher Zeitentwicklung geht auf die abschnittsweise Integration bei der Lösung geschalteter DAE-Systeme zurück. Bei dieser numerischen Methode werden während der Integration der Gleichungen des aktuellen Modus die Zeitpunkte der Ereignisse detektiert, lokalisiert und anschließend die Integration am Umschaltzeitpunkt im neuen Modus gestartet.

Da die stückweise Optimierung dynamischer Hybridsysteme in Analogie zur Simulation geschalteter DAE-Systeme entwickelt wird, beschäftigt sich der folgende Abschnitt 6.1 mit der Vorgehensweise bei der Simulation, bevor dann in Abschnitt 6.2 erklärt wird, wie diese Verfahrensweise auf die Optimierung zu übertragen ist.

6.1 Numerische Lösung hybrider DAE-Systeme

In diesem Abschnitt werden die beim numerischen Lösen hybrider DAE-Systeme auftretenden Besonderheiten behandelt. Aus Kapitel 3.1.1 folgte, dass das Modell eines dynamischen Hybridsystems über einen kontinuierlichen Teil (DAEs) und einen diskreten Teil (Umschalten von Modellgleichungen, Übergangsfunktionen)

verfügt, die über die Schaltbedingungen miteinander verbunden sind. Entsprechend muss auch der Simulator für ein solches System einen diskreten Teil, einen kontinuierlichen Teil und eine Schnittstelle zwischen beiden aufweisen. Dabei ist es prinzipiell möglich, von Methoden zur Simulation kontinuierlicher Systeme auszugehen und diese durch den diskreten Teil zur Behandlung der Umschalttereignisse zu ergänzen. Alternativ kann man auch den umgekehrten Weg gehen und einem Simulator für diskrete Systeme den kontinuierlichen Teil hinzufügen [41, 42, 165]. Da bei der physikalischen Modellierung dynamischer Hybridsysteme die Beschreibung durch DAEs als der natürlichere Zugang erscheint, wird hier der erste Weg gewählt.

Bei der numerischen Lösung hybrider DAE-Systeme sind mehrere Gesichtspunkte zu berücksichtigen, von denen einige auch für kontinuierliche DAE-Systeme gelten, andere hingegen mit den Umschaltvorgängen zusammenhängen. Auf Aspekte, die auch für die Lösung kontinuierlicher DAE-Systeme relevant sind wie z. B. die Auswahl/Implementierung einer robusten numerischen Integrationsmethode, soll jedoch an dieser Stelle nicht eingegangen werden. Es ist lediglich darauf hinzuweisen, dass Methoden zur Integration kontinuierlicher Systeme auf geschaltete Systeme nicht direkt angewendet werden können. Ein wesentlicher Grund hierfür ist, dass die meist stattfindende Schrittweitensteuerung in der Nähe von Unstetigkeiten zu einem gravierenden Verlust an Effizienz führt [42, 72]. Zur Simulation geschalteter dynamischer Systeme wird also wie oben erwähnt ein Simulator benötigt, bei dem der kontinuierliche Teil durch einen diskreten Teil ergänzt wird. Der diskrete Teil der Simulation umfasst z. B. die Änderung von Modellparametern am Schaltpunkt, Ersetzen von Modellgleichungen und Berechnung des neuen Systemzustandes aus Übergangsfunktionen (siehe Abschnitt 3.1.1). Die Schnittstelle zwischen kontinuierlicher und diskreter Simulation muss entscheiden, wann ein Ereignis stattfindet, d. h. die Umschaltbedingung des aktuellen Modus muss erfüllt sein.

Im Folgenden soll die abschnittsweise Integration als ein möglicher numerischer Zugang zur Simulation geschalteter dynamischer Systeme beschrieben werden. Die einzelnen Integrationsabschnitte entstehen dadurch, dass bei Erfüllung der Schaltbedingung die Integration abgebrochen sowie der neue Modus ausgewählt und initialisiert wird. Bei Integration im aktuellen Modus wird dieser bis zum Ende eines jeden Integrationsintervalls unabhängig vom Wert der Schaltfunktion festgehalten (discontinuity locking) (Abb. 6.1) [30, 121], d. h. die Integration wird von der Anfangszeit $t_{0,Int}$ des Integrationsintervalls bis zu seiner Endzeit $t_{f,Int}$ für den zur Zeit $t_{0,Int}$ gültigen Modus durchgeführt. Die Schaltfunktionen ψ liefern die Information, ob in diesem Intervall ein Schaltvorgang hätte stattfinden müssen. Das bedeutet, die Nullstellen der Schaltfunktionen sind zu detektieren und möglichst genau zu lokalisieren. Konnte in einem Integrationsintervall eine Nullstelle

bestimmt werden, wird die Zeit von $t_{f,Int}$ auf t_s zurückgesetzt, das System im neuen Modus initialisiert und die Integration erneut gestartet. In den folgenden Unterabschnitten werden gängige Methoden zum Auffinden von Ereignissen und zur Bestimmung der genauen Schaltzeitpunkte beschrieben.

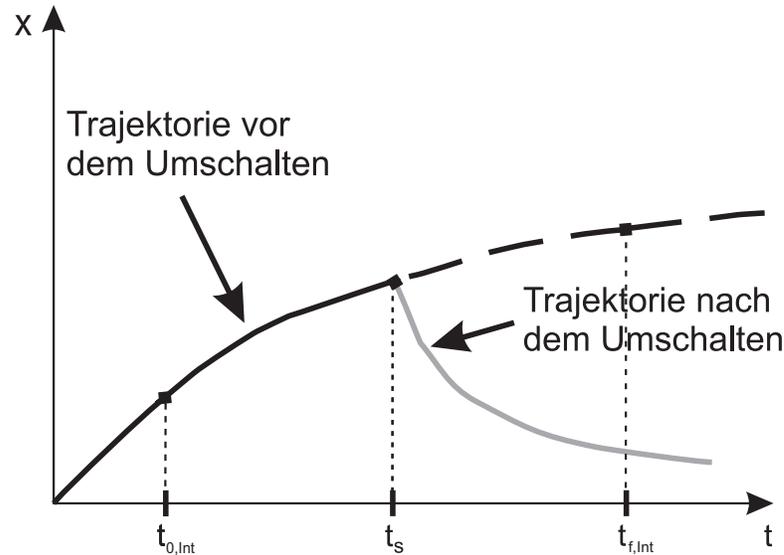


Abbildung 6.1: Discontinuity locking.

6.1.1 Detektion von Ereignissen

Um Ereignisse, d. h. Umschaltunkte aufzufinden, können die Schaltfunktionen an das bestehende DAE-System angehängt und zusammen mit diesem integriert werden [39, 118]. Dieses Vorgehen erhöht jedoch den Aufwand für die Integration, zumal Schaltfunktionen eine deutlich kleinere Schrittweite erfordern können als das übrige System. Alternativ können die Schaltfunktionen am Anfangs- und Endpunkt der Integrationsintervalle aus dem Systemzustand berechnet werden. Anschließend wird das Über-/Unterschreiten eines kritischen Wertes [88] oder ein Vorzeichenwechsel [10, 11, 121] der Schaltfunktionen detektiert. Vorzeichenwechsel können jedoch nur eine ungerade Anzahl von Nullstellen im betrachteten Intervall anzeigen. Deshalb wird als weitere Größe die Zeitableitung der Schaltfunktion herangezogen [39]. Ein Vorzeichenwechsel zwischen der Schaltfunktion $\psi_{0,Int}$ zu Beginn des Integrationsintervalls und der Approximation

$$\hat{\psi}_{f,Int} = \psi_i + \Delta t_{int} \cdot \dot{\psi}_{0,Int} \quad (6.1)$$

am Ende des Integrationsintervalls kann dann auf eine Nullstelle hinweisen [11]. Das Auffinden von Vorzeichenwechseln der Schaltfunktion unter Verwendung des exakten Wertes am Intervallende oder der Näherung (6.1) vermeidet für Intervalle weitab von den Grenzen der Modi das Starten einer aufwendigen Prozedur zur Nullstellensuche. Diese wird erst nach der Detektion einer Nullstelle zur Lokalisierung des Umschaltpunktes eingesetzt.

6.1.2 Lokalisierung von Ereignissen

Ein gängiges Verfahren zur Lokalisierung von Nullstellen ist die Bisektion [118, 140] der betroffenen Intervalle. Eine Modifikation davon findet sich im Illinois-Algorithmus [56]. Hierbei werden die Intervallgrenzen iterativ immer dichter zueinander geschoben, bis der Umschaltpunkt mit gewünschter Genauigkeit bestimmt wurde. Alternativ können die Nullstellen durch Interpolation oder Extrapolation berechnet werden. Hierfür werden die Werte der Schaltfunktion an allen verfügbaren Gitterpunkten genutzt. Welche Punkte verfügbar sind, hängt von der Integrationsmethode ab. So werden lineare und quadratische Interpolation in [81], kubische Interpolation in [34] und Polynome q -ter Ordnung in [39, 88] verwendet. Als Polynome werden z. B. die durch die BDF-Methode generierten Polynome [121] oder Lagrangepolynome [11] verwendet. Der Ansatz in [59] konstruiert basierend auf einer Taylorentwicklung zweiter Ordnung Extrapolationspolynome, welche über das aktuelle Integrationsintervall hinausgehen. Der Vorteil dieser Extrapolation besteht darin, dass im Gegensatz zu den Interpolationsmethoden die Integration der aktuellen Gleichungen ausschließlich auf ihrem Gültigkeitsbereich stattfindet. Sie ist demzufolge sogar in der Nähe von Singularitäten geeignet.

Für alle genannten Arten von Polynomen erfolgt dann die Nullstellensuche jeweils mittels der Newton-Raphson-Methode. Auch die Simulation auf dem betroffenen Intervall durch Diskretisierung mit dem impliziten Eulerverfahren oder Diskretisierungsschemata höherer Ordnung und simultanes Lösen mit der Newton-Raphson-Methode wurden zur Nullstellensuche vorgeschlagen [11]. Da die Nullstellensuche auf dem (kleinen) Integrationsintervall erfolgt, sind die Startwerte gut und Konvergenz wird in der Regel schnell erreicht.

Die Detektion und die Lokalisierung der Nullstellen der Schaltfunktion können in der Optimierung natürlich nicht auf dieselbe Weise erfolgen wie soeben beschrieben wurde. Im folgenden Abschnitt wird deshalb erklärt, wie die stückweise Optimierung erfolgen soll und welche Rolle dabei das Auffinden der Zeitpunkte, an denen die Umschaltbedingung erfüllt ist, spielt.

6.2 Zerlegung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme und stückweise Optimierung

Die in diesem Abschnitt zu entwickelnde Methode beruht auf einem gänzlich anderen Ansatz als die bisher beschriebenen Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme. Die Detektion und Lokalisierung von Umschaltereignissen wird mit dem Grundgedanken des Bellmannschen Optimalitätsprinzips kombiniert. Letzteres besagt, dass eine Zustandstrajektorie von einem Anfangszustand x_0 bis zu einem Referenzzustand x_t dann optimal ist, wenn alle Teiltrajektorien optimal sind [26]. Dieses Prinzip ist allerdings nur anwendbar, wenn die Teiltrajektorien unabhängig voneinander sind. Diese Tatsache legt nahe, dass bestimmte Modelleigenschaften erforderlich sind, damit die Methode der stückweisen Optimierung angewandt werden kann. Der Ansatz ist somit von geringerer Allgemeinheit als die bisher beschriebenen Methoden. Wenn ein System für die Durchführung der Zerlegung und stückweisen Optimierung geeignet ist, weist die Methode bezüglich der Rechenzeit jedoch große Vorteile auf. Außerdem wird die Komplementarität der Modi exakt erfüllt.

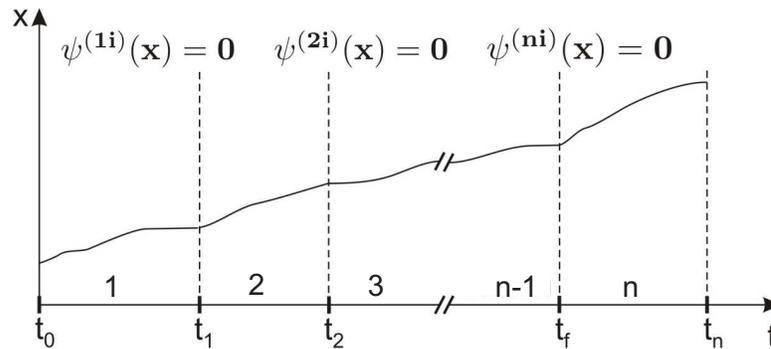


Abbildung 6.2: Zerlegung des hybriden dynamischen Gesamtproblems in kontinuierliche dynamische Teilprobleme.

Der erste Schritt der neuen Lösungsmethode ist die Zerlegung des hybriden Gesamtproblems in kontinuierliche Teilprobleme (Abb. 6.2). Die Formulierung von Teilproblemen garantiert, dass in jedem Fall nur ein Modus aktiv ist und es sich bei den Teilproblemen demzufolge um kontinuierliche dynamische Optimierungsprobleme handelt, die wesentlich einfacher zu lösen sind als das Originalproblem (6.2-6.7), weil Standardansätze zur Lösung kontinuierlicher dynamischer Optimierungsprobleme verwendet werden können (siehe Abschnitt 2.4). Die Nichtglattheit oder Diskontinuität wird nun außerhalb der Optimierungsprobleme behandelt.

Die Optimierung der Teilprobleme beginnt jeweils mit dem Zeitpunkt, zu dem

in einen Modus geschaltet wird und endet zu dem Zeitpunkt, zu dem die Erfüllung einer Schaltbedingung das Umschalten in einen anderen Modus erfordert. Da die Umschaltzeiten von der Steuerung und der Dynamik des Systems abhängen, sind die Zeiten t_1, \dots, t_S nicht fest, sondern durch die Optimierung der Endzeiten $t_{f,s}$, $s = 1, \dots, S$ der jeweiligen Teilprobleme zu bestimmen. Hierfür ist das Auffinden von Zeitpunkten, zu denen die Schaltbedingung $\psi(x) = 0$ erfüllt ist, d. h. im Prinzip die Detektion und Lokalisierung von Ereignissen notwendig. Dies kann grundsätzlich innerhalb oder außerhalb der Optimierungsprobleme erfolgen. Beispiele für beide Möglichkeiten werden in den Abschnitten 6.3.1.1 und 6.3.1.2 gezeigt.

Wenn der Umschaltzeitpunkt *außerhalb* der Optimierungsprobleme bestimmt werden soll, verwendet man Inter- oder Extrapolation zur genauen Bestimmung der Nullstelle der Schaltfunktion. Darauf geht Abschnitt 6.3.1.1 am Beispiel der Parameterschätzung genauer ein. Innerhalb des Optimierungsproblems dagegen dienen zusätzliche Nebenbedingungen zur Bestimmung der Umschaltzeit. Das Vorgehen hierfür wird in Abschnitt 6.3.1.2 beschrieben. Für das Folgeproblem $s + 1$ wird gemäß der aktiven Schaltbedingung der neue Modus ausgewählt und die Initialisierung in diesem Modus erfolgt anhand der Zustände $(x(t_{f,s}), y(t_{f,s}))$ des Vorgängerproblems gemäß der Übergangsfunktionen (siehe Abschnitt 3.1.1). Dabei schließt sich das Folgeproblem jeweils zeitlich an das Vorgängerproblem an, d. h. die Startzeiten sind $t_{0,0} = t_0$ für das erste Teilproblem und $t_{0,s} = t_s$, $s = 1, \dots, S$ für die folgenden Abschnitte. Die Endzeiten sind gegeben durch $t_{f,s} = t_s$, $s = 1, \dots, S$ für die ersten $S - 1$ Abschnitte bzw. $t_{f,S} = t_f$ für den letzten Abschnitt.

Die Umsetzung der Zerlegung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme in leichter zu lösende kontinuierliche dynamische Optimierungsprobleme wird an zwei einfachen Parameterschätzproblemen dargestellt.

6.3 Lösung hybrider dynamischer Parameterschätzprobleme mittels Zerlegungsansatz

Am Ausgangspunkt der Betrachtungen dieses Abschnittes steht ein allgemeines Parameterschätzproblem, welches wie in Abschnitt 5.1 Gleichung (5.10) durch die Funktion der kleinsten Quadrate gegeben ist. Die Modellgleichungen stellen wieder die Nebenbedingungen des Problems dar, wobei für das Hybridsystem eine Modellbeschreibung gemäß Abschnitt 3.1.1 zu verwenden ist. Die allgemeine Problemformulierung zur Parameterschätzung von Hybridsystemen nimmt damit die folgende Form an

$$\min_p \mathcal{J}(p) = \sum_{d=1}^{D_1} \sum_{n=1}^N (\hat{x}_{dn} - x_d(t_n)) V^{-1} (\hat{x}_{dn} - x_d(t_n)) \quad (6.2)$$

$$+ \sum_{d=1}^{D_2} \sum_{n=1}^N (\hat{y}_{dn} - y_d(t_n)) W^{-1} (\hat{y}_{dn} - y_d(t_n))$$

$$\text{mit } \dot{x} = f^{(m)}(x, y, p, t) \quad \text{wenn } \psi^{mk}(x, y) \geq 0, \quad \forall k, \quad (6.3)$$

$$k = 1, \dots, K,$$

$$y = g^{(m)}(x, y, p, t), \quad (6.4)$$

$$x(t_0) = x_0, \quad (6.5)$$

$$x^+(t_s) = \mathcal{T}^{mk}(x^-(t_s)), \quad (6.6)$$

$$t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_S,$$

$$p_{min} \leq p \leq p_{max}. \quad (6.7)$$

In der Zielfunktion wird über die Datensätze aller $D_{1/2}$ zu N Zeitpunkten gemessenen differentiellen (D_1) und algebraischen (D_2) Zustandsgrößen summiert. Die Messwerte werden für die differentiellen Variablen mit \hat{x}_{dn} bzw. für die algebraischen Variablen mit \hat{y}_{dn} bezeichnet. Die entsprechenden Modellvariablen sind $x_d(t_n)$ und $y_d(t_n)$. Die Gewichte der einzelnen Messreihen sind durch die bekannten Varianz-Kovarianz-Matrizen V und W bestimmt. Zu jedem Zeitpunkt $t \in [t_0, t_f]$ führen die zustandsabhängigen Schaltfunktionen in (6.3) zur Auswahl des richtigen Modus unter K verfügbaren Modi. Solange $\psi^{mk} > 0, \forall k$ erfolgt die kontinuierliche Zeitentwicklung des Systems gemäß dem DAE-System (6.3, 6.4). Sobald $\psi^{mk} = 0$, müssen die Übergangsfunktionen ausgewertet und das System im neuen Modus initialisiert werden. Der Anfangszustand des ersten Teilproblems ist durch (6.5) gegeben, während die Anfangszustände am Eintritt in einen neuen Modus durch (6.6) bestimmt werden. Über den gesamten Zeithorizont $[t_0, t_f]$ hinweg treten S Schaltereignisse zu den Zeiten $t_s, s = 1, \dots, S$ auf, die sich in Abhängigkeit von den zu schätzenden Parametern aus der Systemdynamik ergeben. In Übereinstimmung mit Abb. 6.2 wird hier der Endzeitpunkt der gesamten Optimierung als letzter ‘‘Umschaltunkt’’ aufgefasst, der durch die explizite Schaltfunktion $\psi(t) = t_f - t = 0$ gegeben ist.

6.3.1 Problemzerlegung

Auf das Problem (6.2-6.7) wird nun der in Abschnitt 6.2 beschriebene Zerlegungsansatz angewandt. Dieser teilt das nicht-glatte Gesamtproblem in eine Reihe glat-

ter Unterprobleme auf:

$$\min_p \mathcal{J}_s(p) = \sum_{d=1}^{D_1} \sum_{n=1}^{SN} (\hat{x}_{dn} - x_d(t_n)) V^{-1} (\hat{x}_{dn} - x_d(t_n)) \quad (6.8)$$

$$+ \sum_{d=1}^{D_2} \sum_{n=1}^{SN} (\hat{y}_{dn} - y_d(t_n)) W^{-1} (\hat{y}_{dn} - y_d(t_n)),$$

$$s = 1, \dots, S, \quad (6.9)$$

$$\text{mit } \dot{x}^{(s)} = f^{m_s}(x, y, p, t), \quad x(t_0) = x_0^{(s)}, \quad (6.10)$$

$$y^{(s)} = g^{m_s}(x, y, p, t), \quad (6.11)$$

$$p_{min} \leq p \leq p_{max}. \quad (6.12)$$

Die Gesamttrajektorie wird so in S Unterabschnitte zerlegt, wobei in einem jeden nur ein einziger Modus m_s aktiv ist, d. h. man erhält durch die Parameterschätzung die auf den jeweiligen Unterabschnitten optimalen Parameterwerte p_s^* . Wie aus diesen die Lösung des Gesamtproblems berechnet werden kann, zeigt Abschnitt 7.2.2.3. Für die S Teilprobleme (6.8)-(6.12) resultieren die Endzeiten der Abschnitte und die Nachfolgemodi aus den Schaltbedingungen $\psi^{mk} = 0$ im jeweils aktuellen Modus (Abb. 6.2). Die Zielfunktionen enthalten jetzt lediglich die Messwerte an den für den aktuellen Unterabschnitt relevanten SN Zeitpunkten. Die Methode kann also offenbar nur dann erfolgreich angewandt werden, wenn für jeden Unterabschnitt genügend Daten zur Verfügung stehen, um die Parameterwerte ausreichend genau zu schätzen, d. h. die Zeiten zwischen den Messungen sollten im Vergleich zur Verweildauer in einem Modus kurz sein. Diese Bedingung kann für eine Vielzahl von Systemen erfüllt werden. So finden beim Anfahren, der Außerbetriebnahme oder Umsteuerungsprozessen von Verdampfersystemen oder Kraftwerkskomponenten nur relativ selten Übergänge zwischen den Betriebsmodi statt. Außerdem erlauben in vielen Fällen ausgereifte technische Möglichkeiten ein häufiges Erfassen der Messgrößen.

Im Gegensatz zu (6.2)-(6.7) treten die Übergangsfunktionen $\mathcal{T}^{mk}(x^-(t_s))$ und die Gleichungen aller alternativen Modi in den Unterproblemen (6.8-6.12) nicht mehr auf. An dieser Stelle muss entschieden werden, ob die Umschaltzeiten innerhalb oder außerhalb der Optimierungsprobleme bestimmt werden sollen. Die beiden Möglichkeiten werden in den folgenden Unterabschnitten nacheinander behandelt.

6.3.1.1 Externe Bestimmung der Schaltzeiten

Für die S Abschnitte kontinuierlicher Systemdynamik wird anhand der experimentellen, fehlerbehafteten Daten zunächst eine Vermutung für den Zeitpunkt

des jeweils nächsten Ereignisses aufgestellt. Hierfür wird zunächst angenommen, dass die Schaltfunktionen mittels der Messdaten ausgewertet werden können, d. h. die Schaltfunktionen mögen ausschließlich messbare oder beobachtbare Variablen enthalten. Als beobachtbar gelten dabei die Variablen, die durch algebraische Gleichungen aus den Messdaten berechnet werden können. Allerdings ist es nicht möglich, die in Abschnitt 6.1 präsentierten Methoden zur Detektion von Ereignissen direkt anzuwenden. Da die Messdaten den realen Prozess inklusive Schaltverhalten widerspiegeln, kann kein “discontinuity locking” durchgeführt werden, um die Modi über den Ereigniszeitpunkt hinaus festzuhalten. Für den Verlauf der aus Messdaten ermittelten Schaltfunktion können verschiedene Fälle auftreten: Wenn am Umschaltzeitpunkt ein Wechsel von Modellgleichungen stattfindet und gutartiges Schaltverhalten, d. h. ein transversales Ereignis mit den Richtungsableitungen $\nabla\psi f^{(1)} > 0$ und $\nabla\psi f^{(2)} > 0$ bzw. $\nabla\psi f^{(1)} < 0$ und $\nabla\psi f^{(2)} < 0$ vorliegt (siehe Abschnitte 3.2.2 und 3.2.3), führt die Zeitentwicklung des Systems nach dem Umschalten immer weiter in das Gebiet des neuen Modus hinein. Besteht der Schaltvorgang hingegen in einem Impuls, d. h. in einem durch $\mathcal{T}^{mk}(x^-(t_s))$ bestimmten Sprung mindestens einer Zustandsvariablen (siehe Abschnitt 3.1.2), kann der Impuls den Systemzustand wieder in das Gebiet des vorherigen Modus zurückwerfen. Das Schalten besteht hier nur im Ausführen der Übergangsfunktion \mathcal{T}^{mk} , der Betriebsmodus bleibt erhalten. In diesem Fall ist also eine einfache Detektion der Nullstellen der Schaltfunktion basierend auf Messwerten nicht zielführend.

Deshalb wurde an dieser Stelle folgendermaßen vorgegangen, um die Schaltzeiten aufzufinden: Zuerst werden Messzeitpunkte gesucht, zu denen die Werte der Schaltfunktion unter einer bestimmten Schwelle liegen. Um diese Zeiten herum erfolgt anschließend die auch in der Simulation übliche Suche nach Vorzeichenwechseln in $\psi^{mk}(x^{(dat)}, y^{(dat)})$ (Abschnitt 6.1.1). Der Unterschied besteht darin, dass hier Messwerte anstelle der dort ausgewerteten Integrationsergebnisse stehen. Durch die einfache Suche nach Vorzeichenwechseln werden Intervalle zwischen Messwerten gefunden, die einen durch einen Schalter vermittelten Übergang vollziehen. Konnte kein solcher Übergang ermittelt werden, wird die Differenzschaltfunktion $\Delta\psi_n^{(dat)} = \psi_n^{(dat)} - \psi_{n-1}^{(dat)}$, $n = 1, \dots, N$ auf Vorzeichenwechsel untersucht. Ein solcher Vorzeichenwechsel deutet auf potentielle Schaltpunkte hin. Wurde ein Ereignis im Intervall $[t_{n-1}, t_n]$ detektiert, wird die Schaltzeit, d. h. die Endzeit des s -ten Parameterschätzproblems auf $t_{f,s} = t_n$ gesetzt. Da jedoch das Umschalten im realen System vor dem Zeitpunkt t_n stattgefunden haben kann, das System sich also zu $t_{f,s}$ bereits im neuen Modus befindet, wird der Datenpunkt $(x_n^{(dat)}, y_n^{(dat)})$ in das s -te Parameterschätzproblem nicht mehr einbezogen.

Das folgende Beispiel für die Optimierung eines hybriden dynamischen Optimie-

rungsproblems durch Zerlegung in Teilprobleme mit externer Bestimmung der Schaltzeiten wurde aus Schittkowski [137] entlehnt. Es handelt sich um ein Modell mit zwei Zuständen, z. B. die Konzentrationen eines Medikaments im Blut $x_1 = c_A$ und im Urin $x_2 = c_B$. Die Modellgleichungen

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= -k_1 x_1, & x_1(0) &= D_0 = 100, \\ \dot{x}_2 &= k_1 x_1 - k_2 x_2, & x_2(0) &= 0\end{aligned}\tag{6.13}$$

repräsentieren die einfache Kinetik der Reaktion



Das Medikament geht mit einer Rate k_1 vom Blut in den Urin über, wo der Abbau mit der Rate k_2 erfolgt. Die Übergangsbedingungen sind durch

$$\psi^{11}(x_1(t)) = x_1(t) - x_{low}, \quad x_{low} = 7.5,\tag{6.14}$$

$$x_1^+ = \mathcal{T}(x_1^-) = x_1^- + D, \quad D = 40\tag{6.15}$$

gegeben. Hier bezeichnen x_{low} und D die minimal erlaubte Konzentration des Medikaments im Blut und die erneute Dosis des Medikaments, die dann gegeben wird, wenn die minimale Dosis erreicht wurde. Dieses Modell stellt den besonderen Fall dar, in dem der Übergang ausschließlich in einem Sprung der Zustandsvariable x_1 , also in einem Impuls besteht. Das heißt, die Modellbeschreibung selbst bleibt auch nach dem ‘‘Übergang’’ unverändert. Die Lösung für die Zeiträume der kontinuierlichen Entwicklung ist

$$\begin{aligned}x_1(t) &= x_1(0) \exp \{-k_1 t\}, \\ x_2(t) &= \frac{k_1}{k_1 - k_2} x_1(0) [\exp \{-k_2 t\} - \exp \{-k_1 t\}], \\ x(t_0) &= x_0, \\ x(t_{0,s}) &= x(t_{f,s-1}) + D, \quad s = 1, 2, 3.\end{aligned}$$

Die durch Simulation mit $k_1 = 0.1$ und $k_2 = 0.05$ und Addition einer normalverteilten Messabweichung mit $\sigma = 2$ generierten Messwerte der beiden Zustände x_1 und x_2 für die Gabe einer hohen Initialdosis ($x_1(t = 0) = 100$) und drei anschließende weitere Zyklen der Wiederauffrischung mit $D = 40$ sind in Abb. 6.3 dargestellt (Kreuze). Für diese Messreihen wurden für jeden Abschnitt die beiden Ratenkonstanten k_1 und k_2 durch Parameterschätzung bestimmt. Da in diesem Beispiel die Schaltfunktion niemals negativ wird, werden die Umschaltereignisse ausschließlich durch Auswertung der Differenz-Schaltfunktion $\Delta\psi$ detektiert. Die Differenz-Schaltfunktion wurde dabei auf Basis der Messdaten ausgewertet.

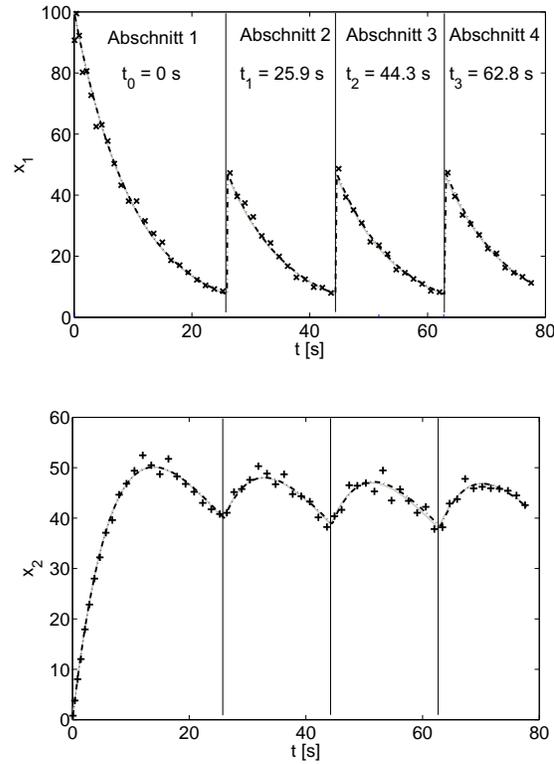


Abbildung 6.3: Zustandstrajektorien für das Modell (6.13), (6.14) und (6.15). Ergebnisse der stückweisen Parameterschätzung (durchgezogene graue Linie), Messwerte (Kreuze), Simulation mit den durch Parameterabgleich (Abschnitt 6.3.2) gefundenen globalen Parameterwerten (Strichpunktlinie).

Die drei Ereignisse wurden an den Zeitpunkten $(t_1, t_2, t_3) = (26.5, 44.9, 63.4)$ s lokalisiert. Die Parameterschätzung ist also für vier Abschnitte auszuführen. Im nächsten Schritt werden basierend auf den Messwerten und den Modellwerten der Variablen im aktuellen Modus die Modellparameter für jeden Abschnitt geschätzt. Die Modellwerte resultieren aus der Lösung der zugehörigen DGL- oder DAE-Systeme. Anhand der optimalen Zustandstrajektorie werden die Schaltzeit t_s^* und der Nachfolgemodus k berechnet. In diesem Beispiel ist die Auswahl des Nachfolgemodus stark vereinfacht, da wie gesagt keine Änderung der Modellgleichungen auftritt. Der Systemzustand $x(t_s^*)$ wird für den Startwert der Parameterschätzung des nächsten Unterabschnittes verwendet. In diesem Beispiel wird hierfür die Übergangsfunktion (6.15) ausgewertet. Nach dem Lösen der individuellen Parameterschätzprobleme erhält man für die einzelnen Abschnitte die in Tabelle 6.1 angegebenen Parameterwerte. Die Schätzwerte der Schaltzeiten können

Abschnitt	1	2	3	4	1-4
k_1	0.100183	0.100117	0.100021	0.097514	0.099668
k_2	0.049838	0.049779	0.050327	0.047721	0.049506

Tabelle 6.1: Ergebnisse der Parameterschätzung für die einzelnen Abschnitte sowie die Werte aus dem Parameterabgleich gemäß Abschnitt.

zu $(t_1, t_2, t_3) = (25.9, 44.3, 62.8)s$ korrigiert werden. Die Bestimmung der genauen Schaltzeitpunkte ist ein wesentlicher Schritt, denn befriedigende Parameterwerte sind nur zu erwarten, wenn die Initialisierung der Unterprobleme hinreichend genau ist.

6.3.1.2 Interne Bestimmung der Schaltzeiten

Im Gegensatz zur externen Bestimmung der Schaltzeiten werden bei der internen Bestimmung der Schaltzeiten die Endzeiten der Teilprobleme nicht als feste Parameter behandelt. Stattdessen wird die Endzeit jeweils als zusätzliche Optimierungsvariable betrachtet. Es ist daher nicht notwendig, auf Grundlage der Messdaten eine genaue Schätzung der Schaltzeit zu erhalten. Damit entfällt auch die Gefahr, dass bedingt durch Messfehler ein Umschaltzeitpunkt übersehen wird. Des Weiteren darf nun die Schaltfunktion auch von Zustandsvariablen abhängen, die nicht direkt messbar oder beobachtbar sind. Anstelle der Nullstellensuche anhand der Datensätze werden bei der internen Bestimmung der Schaltzeitpunkte zusätzliche Nebenbedingungen in die Optimierungsprobleme eingeführt. Einerseits ist es für das korrekte Schalten unerlässlich, dass zur Endzeit eine der im aktuellen Modus gültigen Schaltbedingungen erfüllt ist. Deshalb wird für die Endzeit $t_{f,s}$ die Nebenbedingung

$$\prod_{k=1}^K \psi_k(t_{f,s}) = 0 \quad (6.16)$$

eingeführt. Diese Bedingung kann jedoch nur gewährleisten, dass zum Zeitpunkt $t_{f,s}$ eine Schaltbedingung erfüllt ist. Um zu erreichen, dass die Schaltbedingung, welche *zuerst* erfüllt wird, den Endzeitpunkt bestimmt, wird die Nebenbedingung

$$\prod_{k=1}^K \psi_k(t) \geq 0 \quad (6.17)$$

dem Optimierungsproblem hinzugefügt.

Als Beispiel wird das Parameterschätzproblem für einen Massen-Schwinger mit Trockenreibung zwischen zwei Körpern betrachtet [58]. Geschätzt werden soll der

Reibungskoeffizient μ . In den Modellgleichungen

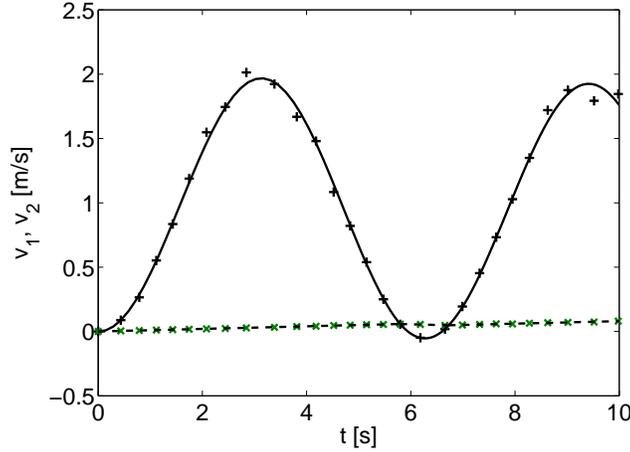


Abbildung 6.4: Zustandstrajektorien für das Modell (6.18), (6.19) und (6.20). Messwerte (Kreuze), Ergebnis der Parameterschätzung ($\dot{x}_1 = v_1$ durchgezogene Linie, $\dot{x}_2 = v_2$ gestrichelte Linie).

$$\begin{aligned}
 m_1 \ddot{x}_1 &= f_1(t) - \mu \operatorname{sign}(\dot{x}_1 - \dot{x}_2) \cdot |\dot{x}_1 - \dot{x}_2|, & (6.18) \\
 x_1(0) &= 1, \quad \dot{x}_1(0) = 0, \\
 m_2 \ddot{x}_2 &= f_2(t) + \mu \operatorname{sign}(\dot{x}_1 - \dot{x}_2) \cdot |\dot{x}_1 - \dot{x}_2|, \\
 x_2(0) &= 1, \quad \dot{x}_2(0) = 0, \\
 f_1(t) &= \sin t, \\
 f_2(t) &= 0,
 \end{aligned}$$

sind $m_{1/2}$ die Massen, $\ddot{x}_{1/2}$, $\dot{x}_{1/2}$, $x_{1/2}$ die Beschleunigungen, Geschwindigkeiten und Positionen der beiden Körper und $f_{1/2}(t)$ externe Kräfte. Die Schaltfunktionen und Übergangsfunktionen sind durch

$$\begin{aligned}
 \psi(\dot{x}_1, \dot{x}_2) &= \dot{x}_1 - \dot{x}_2, & (6.19) \\
 x_i^+ &= \mathcal{T}(x_i^-) = x_i^-, \quad i = 1, 2, & (6.20) \\
 \dot{x}_i^+ &= \mathcal{T}(\dot{x}_i^-) = \dot{x}_i^-
 \end{aligned}$$

gegeben. Abbildung 6.4 zeigt die der Parameterschätzung zugrunde liegenden, durch Simulation mit $\mu = 0.01 \text{ kg/s}$ und Addition einer normalverteilten Messabweichung mit $\sigma = 0.04 \text{ m/s}$ erzeugten Messwerte (Kreuze) sowie die optimalen Trajektorien der Geschwindigkeiten beider Körper. Die für die drei Optimierungsabschnitte bestimmten Werte μ sowie die Umschaltunkte sind in Tabelle 6.2 in

der ersten und zweiten Zeile zu finden. Die dritte Zeile enthält zum Vergleich die mittels des Programmpaketes DFNLP von Schittkowski bestimmten Umschaltzeiten [137]. Der entsprechende Parameterwert ist $\mu = 0.0100 \text{ kg/s}$.

Abschnitt	1	2	3
$\mu [N]$	0.0101	0.0108	0.0098
$t_s [s]$	5.7953	6.7264	10
$t_s^{(S)} [s]$	5.7902	6.7786	10

Tabelle 6.2: Durch abschnittsweise Optimierung bestimmte Parameterwerte des Massenschwingers mit Trockenreibung (Zeile 1), zugehörige Umschaltzeiten (Zeile 2) und in [137] dokumentierte, durch das Programmpaket DFNLP bestimmte Umschaltzeiten (Zeile 3).

6.3.2 Parameterabgleich

Wie bereits die beiden Beispiele aus den vorangegangenen Abschnitten zeigten, weichen die in allen Unterabschnitten geschätzten Parameter leicht voneinander ab. Dies ist aufgrund der zufälligen Messabweichungen zu erwarten. Dieser Abschnitt zeigt, wie aus den stückweise geschätzten Parametern für den gesamten Zeithorizont gültige Parameterwerte gefunden werden können, d. h. es wird ein Abgleich zwischen den Parametern der Teilintervalle durchgeführt. Hierfür werden die optimalen Parameterwerte sowie die Informationen über die Hessematrizen an den Lösungen der Teilprobleme genutzt.

Das Originalproblem kann wie in (6.2) als

$$\min_p \sum_{s=1}^S \mathcal{J}_s(p), \quad s = 1, \dots, S \quad (6.21)$$

als Summe der Zielfunktionen der Teilprobleme ausgedrückt werde. Die Zielfunktionswerte der einzelnen Abschnitte, die zu dem globalen Problem gehören, d. h. mit dem globalen optimalen Parametersatz vereinbar sind, sind allerdings nicht bekannt. Stattdessen verfügt man nach Zerlegung und Optimierung der Teilprobleme aber über die Informationen bezüglich der Zielfunktionswerte, der Parameter und der Ableitungen der Zielfunktion nach diesen Parametern an den Lösungspunkten dieser einzelnen Teilprobleme. Somit lassen sich die benötigten Zielfunktionswerte $\mathcal{J}_s(p)$ durch eine Taylorreihe zweiter Ordnung um die optimalen Werte $\tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)$ eines jeden Teilabschnittes herum als

$$\mathcal{J}_s(p) \approx \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*) + \frac{1}{2}(p_s^* - p) \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s}{dp_i dp_j} (p_s^* - p) \quad (6.22)$$

approximieren, wobei p den unbekanntem, über den ganzen Zeithorizont gültigen Parameter bezeichnet und p_s^* für die Parameter der einzelnen Abschnitte steht. Der Term erster Ordnung verschwindet, da am optimalen Punkt der Unterprobleme die Optimalitätsbedingung erster Ordnung erfüllt ist. Durch Einsetzen von (6.22) in (6.21) erhält man

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(p) \approx \sum_{s=1}^S \left\{ \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*) + p \frac{1}{2} \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j} p + p_s^* \frac{1}{2} \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j} p_s^* \right. \\ \left. - p \frac{1}{2} \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j} p_s^* - p_s^* \frac{1}{2} \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j} p \right\}. \end{aligned} \quad (6.23)$$

Am Minimum von $\mathcal{J}(p)$ ist die Optimalitätsbedingung erster Ordnung

$$\frac{d}{dp} \mathcal{J}(p) = 0$$

erfüllt. Mit (6.23) wird dies zu

$$0 = \left[\sum_{s=1}^S \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j} \right] p - \sum_{s=1}^S \left[\left(\frac{1}{2} \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j} \right)^\top p_s^* + \left(\frac{1}{2} \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j} \right) p_s^* \right].$$

Das bedeutet, die optimalen Parameter können durch Lösen des linearen Gleichungssystems

$$Ax = b$$

mit

$$A = \sum_{s=1}^S \frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j}$$

und

$$b = \sum_{s=1}^S \left[\frac{d^2 \tilde{\mathcal{J}}_s(p_s^*)}{dp_i dp_j} \right] p_s^*.$$

gefunden werden.

Für das Beispiel der Medikamentengabe mit den Modellgleichungen (6.13)-(6.15) werden die Ergebnisse der verschiedenen Parameterschätzungen aus den einzelnen Abschnitten abgeglichen. Das entsprechende lineare Gleichungssystem lautet für dieses Beispiel

$$\begin{bmatrix} \sum_s^S \frac{d^2 \mathcal{J}^{(s)}}{dk_1^2} & 0 \\ 0 & \sum_s^S \frac{d^2 \mathcal{J}^{(s)}}{dk_2^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_1^{(g)} \\ k_2^{(g)} \end{bmatrix} = \sum_{s=1}^S \begin{bmatrix} \frac{d^2 \mathcal{J}^{(s)}}{dk_1^2} & 0 \\ 0 & \frac{d^2 \mathcal{J}^{(s)}}{dk_2^2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_{1,s}^{(s)} \\ k_{2,s}^{(s)} \end{bmatrix}.$$

Als Lösung werden $k_1 = 0.0997$ und $k_2 = 0.0495$ gefunden. Die Trajektorien, welche sich mit diesen globalen Parameterwerten ergeben (Strichpunktlinie) sind in Abb. 6.3 zusammen mit den Messwerten und den Trajektorien für die stückweise ermittelten Parameter abgebildet.

Kapitel 7

Fallstudien

7.1 Parameterschätzung für ein Dreitanksystem

Als erster Anwendungsfall für ein reales System wird das schematisch in Abb. 7.1 dargestellte Dreitanksystem untersucht. Dieses System wurde ausgewählt, da sein Verhalten aufgrund seiner Einfachheit leicht verständlich ist, es andererseits aber die typischen Eigenschaften eines autonom schaltenden Hybridsystems zeigt, die die Optimierung zu einer nicht-trivialen Aufgabe machen [107]. Tanksysteme wur-

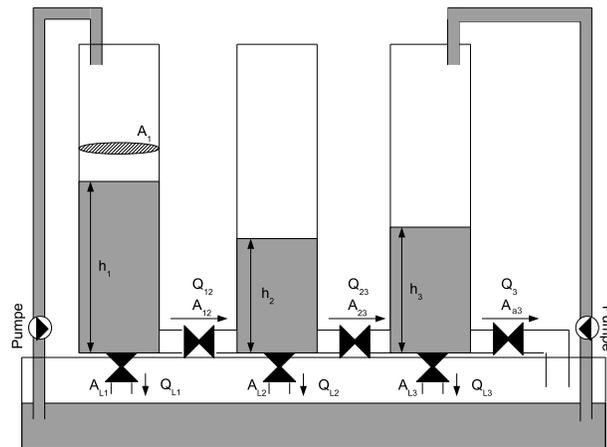


Abbildung 7.1: Dreitanksystem.

den bereits in anderen Studien als geeignete Testbeispiele verwendet [112, 152, 23]. Das betrachtete System besteht aus drei in Reihe geschalteten Tanks mit Querschnittsflächen A_i , $i = 1, 2, 3$. Der rechte und linke Tank besitzen jeweils einen

Zufluss Q_{zi} , $i = 1, 3$. Die Dynamik der Füllstände h_i , $i = 1, 2, 3$ der drei Tanks wird durch die Modellgleichungen

$$A_1 \cdot \dot{h}_1 = Q_{z1} - Q_{12} - Q_{L1}, \quad (7.1)$$

$$A_2 \cdot \dot{h}_2 = Q_{12} - Q_{23} - Q_{L2},$$

$$A_3 \cdot \dot{h}_3 = Q_{z3} + Q_{23} - Q_{L3} - Q_3,$$

$$Q_{Li} = A_{Li} \sqrt{2gh_i} \quad i = 1, 2, 3,$$

$$Q_{ij} = A_{ij} \text{sign}(\psi_{ij}) \sqrt{2g|\psi_{ij}|}, \quad (7.2)$$

$$\psi_{ij} = h_i - h_j, \quad (i, j) = \{(1, 2), (2, 3)\}.$$

beschrieben. Die Flüsse zwischen den Tanks Q_{12} , Q_{23} und die Abflüsse Q_{Li} , Q_3 werden durch das Torricelli-Gesetz modelliert. Die Flüsse durch die Lecks Q_{Li} werden in Relation zu den anderen Flüssen als klein angenommen. Die Signumfunktion schaltet die Flussrichtung zwischen zwei Tanks in Abhängigkeit von der Bedingung $\psi_{ij} = h_i - h_j$ zwischen $+1$ und -1 um. Der Gradient des zugehörigen Flusses divergiert am Umschaltunkt.

Mittels einer Parameterschätzung sollen basierend auf Messdaten die Durchflussparameter A_{ij} bestimmt werden. Die Messdaten werden simulativ erzeugt, um die Genauigkeit der geschätzten Parameter direkt bewerten zu können. Für die Simulation wurden die in Tabelle 7.1 zusammengefassten Parameterwerte verwendet. Eine normalverteilte Messabweichung ($\sigma = 0.2\text{cm}$) erzeugt eine typische Mess-

Parameter	Wert	Parameter	Wert
$A_i, i = 1, 2, 3$	1.49 cm	A_{L1}	$6 \cdot 10^{-3}\text{ cm}$
A_{12}	$6 \cdot 10^{-3}\text{ cm}$	A_{L2}	0 cm
A_{23}	$2 \cdot 10^{-3}\text{ cm}$	A_{L3}	$1 \cdot 10^{-4}\text{ cm}$
Q_{z1}	10 cm^3	A_{a3}	$1 \cdot 10^{-3}\text{ cm}$
Q_{z3}	5 cm^3		

Tabelle 7.1: Parameterwerte für die Simulation.

reihe. Für die Parameterschätzung werden $N = 10$ äquidistante Messwerte der Füllhöhe in Tank 3 ($h_3^{(mess)}$) im Zeithorizont $(t_0, t_f) = [0, 200]\text{s}$ benutzt. Die Zielfunktion des Parameterschätzproblems wird als Summe der kleinsten Quadrate (Least Squares)

$$\mathcal{J}(p) = \sum_{n=1}^N \left(h_3(t_n, p) - h_{3,n}^{(mess)} \right)^2 \quad (7.3)$$

formuliert. Die Modellgleichungen (7.1) bilden die Nebenbedingungen des Optimierungsproblems. Dabei wird die Bedingung (7.2) durch das Glättungsverfahren

(siehe Abschnitt 5.3) bzw. das Strafverfahren (siehe Abschnitt 5.3.4) zu

$$Q_{ij} = A_{ij} \hat{z}_{ij} \sqrt{2g|\psi_{ij}|}, \quad (7.4)$$

umformuliert, wobei für die Schaltvariablen $\hat{z}_{ij} = 2z_{ij} - 1$, $\hat{z}_{ij} \in [-1, 1]$, $(i, j) = \{(1, 2), (2, 3)\}$ gilt. Im Glättungsverfahren wird z_{ij} gemäß Gleichung (5.29) be-

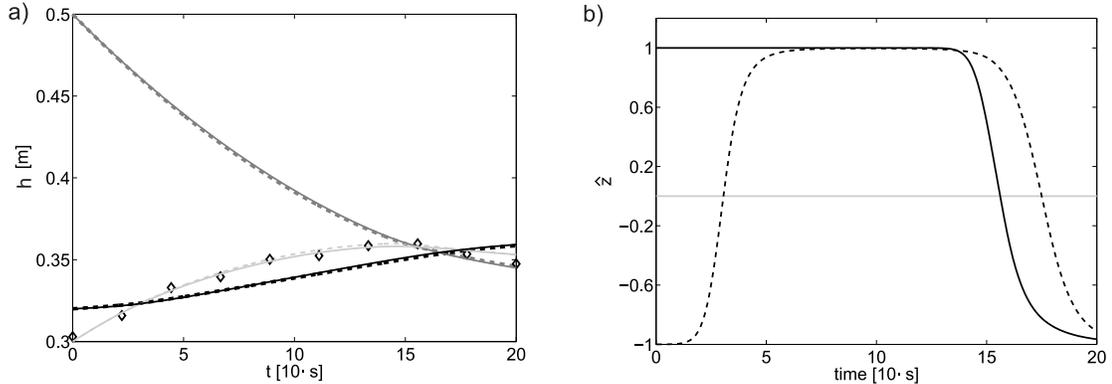


Abbildung 7.2: Glättungsverfahren: a) Simulierte (gestrichelt) und optimale (durchgehend) Trajektorien der Füllstände (h_1 - mittelgrau, h_2 - schwarz, h_3 - hellgrau) sowie Messwerte für h_3 . b) Zu den optimalen Trajektorien gehörende Schaltvariablen \hat{z}_{12} (durchgezogen) und \hat{z}_{23} (gestrichelt). Die graue durchgehende Linie markiert die Umschaltbedingung $\psi = 0$.

rechnet. Abbildung 7.2a) zeigt die simulierte Trajektorien aller drei Füllstände, die Messwerte für h_3 sowie die durch Parameterschätzung gefundenen optimalen Trajektorien $h_1(t)$, $h_2(t)$, $h_3(t)$. Die optimalen Trajektorien stimmen sehr gut mit denen aus der Simulation überein. Umschaltungen der Flussrichtung treten an den Nulldurchgängen $h_1 - h_2 = 0$ sowie $h_2 - h_3 = 0$ auf. Die zugehörigen Schaltvariablen (siehe Abb. 7.2b)) führen an den Schnittstellen der entsprechenden Trajektorien (d. h. $z_{12}(h_1 - h_2 = 0) = z_{23}(h_2 - h_3 = 0) = 0$) zu einem Fluss $Q_{12} = 0$ bzw. $Q_{23} = 0$. Die drei Umschaltungen finden zu den Zeitpunkten $t_1 = 34s$, $t_2 = 150s$ und $t_3 = 191s$ statt. Sie stimmen mit den Umschaltungen in der Simulation sehr gut überein (siehe Tabelle 7.2). Wie von dieser Art der Regularisierung zu erwarten ist, kommt es hier nicht zu instantanen, sondern zu allmählichen Übergängen zwischen den Modi. Dies hat allerdings auf das Ergebnis so gut wie keinen Einfluss. Eine gute Wahl für den Glättungsparameter ist $\tau = 0.18 \text{ cm}$. Der optimale Parameterwert A_{12} (siehe Tabelle 7.2) liegt sehr gut bei dem realen Parameter, während A_{23} deutlich mehr abweicht. Die Simulation des Systems zeigt, dass die Zielfunktion wesentlich sensitiver auf die Variation von A_{12} reagiert als auf die von A_{23} . Die Abweichung liegt also im Modell selbst

	exakt	Glättung	Strafverfahren	PSO
$A_{12} [10^{-5}m^2]$	6.00	6.15	6.06	6.28
$A_{23} [10^{-5}m^2]$	2.00	2.29	2.98	2.30
$t_1 [s]$	33	34	28	32
$t_2 [s]$	152	150	164	149
$t_3 [s]$	181	191	172	184

Tabelle 7.2: Ergebnisse der Parameterschätzung für das Dreitanksystem.

begründet und ist nicht Folge der Glättungsmethode. Insgesamt erweist sich also das Glättungsverfahren als geeignet.

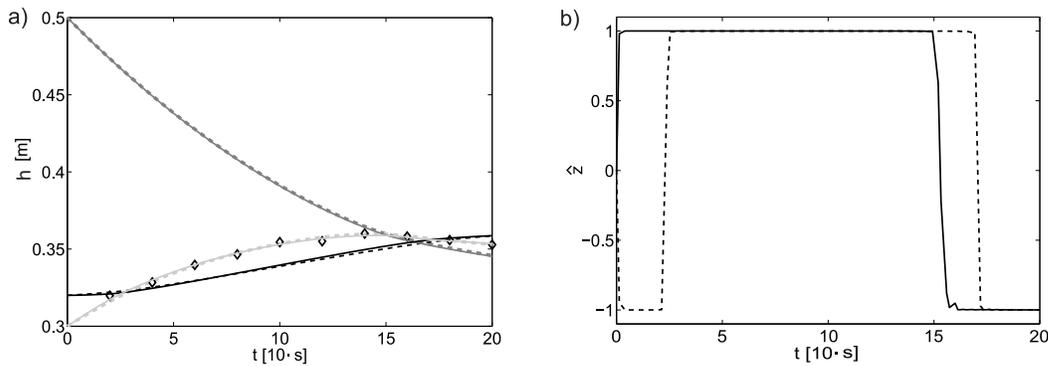


Abbildung 7.3: Strafverfahren: a) Simulierte (gestrichelt) und optimale (durchgehend) Trajektorien der Füllstände (h_1 - mittelgrau, h_2 - schwarz, h_3 - hellgrau) sowie Messwerte für h_3 . b) Zu den optimalen Trajektorien gehörende Schaltvariablen \hat{z}_{12} (durchgezogen) und \hat{z}_{23} (gestrichelt).

Bei der Regularisierung durch das Strafverfahren aus Abschnitt 5.3.4 werden die Nebenbedingungen des Parameterschätzproblems durch die KKT-Bedingungen

$$\begin{aligned}
 0 &= h_j - h_i - \lambda_{i0} + \lambda_{i1}, \\
 0 &= \lambda_{i0}(1 + \hat{z}_{ij}), \\
 0 &= \lambda_{i1}(1 - \hat{z}_{ij}), \\
 0 &\leq \lambda_{ij}, \quad (i, j) = \{(1, 2), (2, 3)\}
 \end{aligned} \tag{7.5}$$

des inneren Minimierungsproblems ergänzt, um das korrekte Schaltverhalten sicherzustellen. Gemäß Gleichung (5.50) geht die Bedingung der Komplementarität zwischen den Lagrangemultiplikatoren des inneren Problems λ_{i0} , λ_{i1} und den Schaltvariablen als Strafterm in die Zielfunktion ein. Die Ergebnisse der Parameterschätzung unter Verwendung des Strafverfahrens sind zusammen mit den

Simulationsergebnissen in Abb. 7.3 dargestellt. Die Messreihe wird sehr gut durch die optimale Trajektorie wiedergegeben. Die Umschaltungen finden zu den Zeitpunkten $t_1 = 28s$, $t_2 = 164s$ und $t_3 = 172s$ statt. Die Übergänge erfolgen fast augenblicklich. Die optimalen Parameterwerte (siehe Tabelle 7.2) sind ähnlich gut wie die mit der Glättungsmethode bestimmten Werte. Als guter Wert des Strafparameters wurde $\rho = 5 \cdot 10^{-4}ms^{-1}$ gefunden. Obwohl das Strafverfahren den Schaltvorgang durch das schnelle Umschalten besser repräsentiert, weichen die Schaltzeiten stärker als die Schaltzeiten der Glättungsmethode von den wirklichen Schaltzeiten ab (Tabelle 7.2). Außerdem erweist sich das Strafverfahren als numerisch weniger stabil als die Glättungsmethode. Dies ist z. B. an dem kleinen Peak bei etwa $t \approx 165s$ erkennbar. Die Wahl eines weniger geeigneten Wertes des Strafparameters führt leicht zu Oszillationen der Schaltvariablen um den Umschaltzeitpunkt herum.

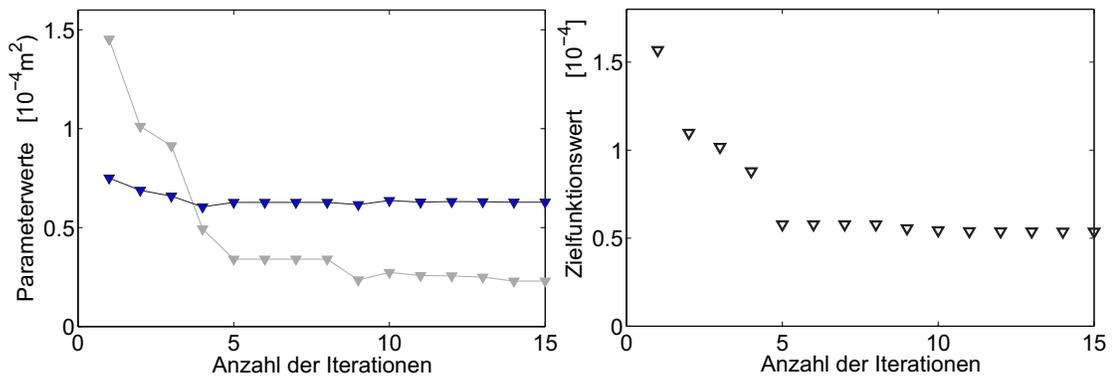


Abbildung 7.4: Parameterschätzung mittels PSO.

Die Resultate der Parameterschätzung für das Dreitanksystem mittels der Glättungsmethode und des Strafverfahrens wurden mit den durch eine PSO (Methodenbeschreibung siehe Anhang) bestimmten Parametern verglichen (Tabelle 7.2) [108]. Die Parameterwerte und Schaltzeiten wurden dort mit ähnlicher Genauigkeit gefunden. Hierfür waren bei diesem System mit den zwei zu schätzenden Parametern nur relativ wenige Iterationen ($n_{\text{iter}} = 15$) nötig (Abb. 7.4). Deshalb erwies sich die PSO in diesem Beispiel bezüglich der Rechenzeit als sehr günstig.

7.2 Simulation, Sensitivitätsberechnung, Parameterschätzung und Optimale Steuerung am Beispiel eines industriellen Verdampfers

In der Verfahrenstechnik spielen Verdampfungsprozesse eine wichtige Rolle. Ihr Ziel ist die Stofftrennung durch Aufkonzentrieren von Komponenten in Flüssigkeitsgemischen. Verdampfungsprozesse können technisch auf vielfältigste Weise realisiert werden. Eine Möglichkeit stellen Mehrstufensysteme dar, bei denen mehrere identische Verdampfeinheiten hintereinander geschaltet werden. In der vorliegenden Fallstudie wird das Modell einer solchen Verdampfeinheit betrachtet.

Nach der Prozessbeschreibung und Modellierung in Abschnitt 7.2.1 folgen in Abschnitt 7.2.2.1 die Simulation, Sensitivitätsberechnung und Parameterschätzung für ein geglättetes Verdampfermodell, d. h. Umschaltungen zwischen Betriebsmodi werden mittels der Glättungsmethode aus Abschnitt 5.3 realisiert. In Abschnitt 7.2.3 wird mit dem Zerlegungsansatz aus Abschnitt 6.2 die optimale Steuerung für einen Anfahrprozess des Verdampfers berechnet.

7.2.1 Prozessbeschreibung

Der Aufbau der Verdampfeinheit (im Folgenden als Verdampfer bezeichnet) ist in (Abb. 7.5) schematisch dargestellt. Das System besteht aus einem Tank und einem Wärmetauscher. Der Tank wird durch das Ventil V_1 mit einer aus drei flüssigen Komponenten bestehenden Mischung befüllt. Die Komponenten sind

1. ein Kohlenwasserstoff (A) mit hoher molarer Masse - auch als Produkt bezeichnet,
2. Wasser (B) und
3. Ethanol (C).

Die zugehörigen Massenanteile in der Flüssigkeit werden mit w_A , w_B , und w_C und die Massenanteile im Dampf mit ξ_A , ξ_B und ξ_C bezeichnet. Aufgrund ihrer hohen molaren Masse hat die Komponente A im Vergleich zu Wasser und Ethanol einen sehr niedrigen Dampfdruck. Der Dampfdruck der reinen Komponente A wird deshalb im Modell als $P_A^0 = 0$ angenommen. Im Tank werden die flüchtigen Komponenten verdampft. Infolgedessen erhöht sich der Anteil der nichtflüchtigen Komponente A in der Flüssigkeit. Das Produkt wird durch das Ventil V_2 ausgelassen, wenn die gewünschte Konzentration w_A erreicht ist. Der aus Wasser und Ethanol (B und C) bestehende Dampf entweicht durch das Ventil V_{v1}

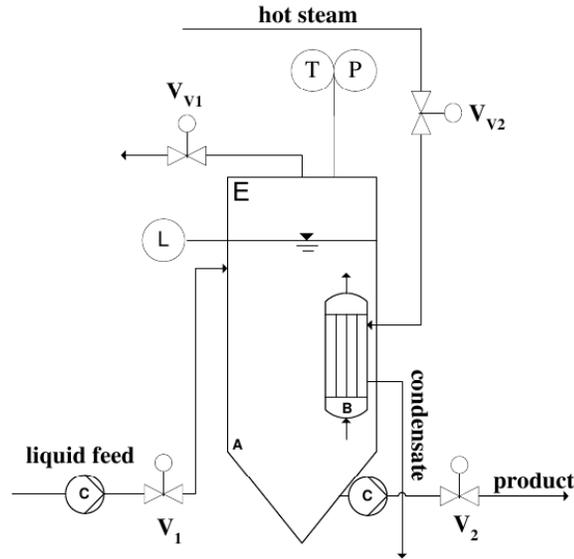


Abbildung 7.5: Industrieller Verdampfer schematisch [141].

aus dem Tank. Die Massenanteile ξ_B , und ξ_C werden durch das Phasengleichgewicht bestimmt. Um den Tank zu heizen, wird dem Wärmetauscher heißer Dampf zugeführt. Im Modell wird angenommen, dass der Dampf im Wärmetauscher vollständig kondensiert und als Flüssigkeit den Wärmetauscher verlässt.

In Abhängigkeit vom Druck im Verdampfer und von der Temperaturdifferenz zwischen Wärmetauscher und Tank lassen sich $M_1 = 2 \times 2$ Betriebsmodi unterscheiden: Ist die Temperatur des Wärmetauschers (T_{he}) höher als die des Tanks (T_{evap}), arbeitet der Wärmetauscher im Heizmodus (H), andernfalls im Modus nichtheizend (NH). Im Tank findet das Umschalten zwischen dem nicht-verdampfenden (NV) und dem verdampfenden (V) Modus statt, wenn der Druck im Verdampfer p_{evap} den Umgebungsdruck p_{amb} erreicht. Es können also die Modi nicht heizend/nicht verdampfend (NH, NV), heizend/nicht verdampfend (H, NV), heizend/verdampfend (H, V) und nicht heizend/verdampfend (NH, V) auftreten. Die zustandsabhängigen Schaltfunktionen

$$\begin{aligned}\psi^{(1)} &= p_{evap} - p_{amb} \\ \psi^{(2)} &= T_{he} - T_{evap}\end{aligned}\tag{7.6}$$

bestimmen die Zeitpunkte des Umschaltens zwischen den Betriebsmodi. Der Verdampfer zeigt also das für ein dynamisches Hybridsystem mit autonomer Schaltung typische Verhalten. Das hybride Verdampfermodell besteht dementsprechend

aus vier DAE-Systemen $[\mathcal{F}^{(m)}, \mathcal{G}^{(m)}]$, $m = 1, \dots, M_1$. Abbildung 7.6 gibt einen Überblick über die wichtigsten Variablen des Modells. Die Modellgleichungen wurden [141] entnommen. Dort sind auch die Werte der Modellparameter und die Beschreibung der thermodynamischen Eigenschaften der Stoffe bzw. Stoffgemische zu finden. Die DGLs des Modells beschreiben die Energie- und Massenbilanzen

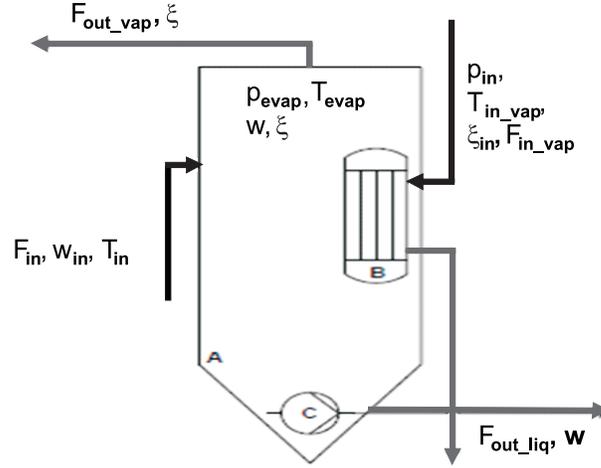


Abbildung 7.6: Schematische Übersicht über die Eingangs- und Zustandsgrößen des Verdampfermodells.

innerhalb des Tanks:

$$\dot{m}_i = \begin{cases} F_{in,liq} \cdot w_{i,in} - F_{out,liq} \cdot w_i & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) < 0, \\ F_{in,liq} \cdot w_{i,in} - F_{out,liq} \cdot w_i \\ -F_{out,vap} \cdot \xi_i & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) \geq 0 \end{cases} \quad (7.7)$$

$i = A, B, C$

$$\dot{U} = \begin{cases} \dot{U}_{in,liq} - \dot{U}_{out,liq} + Q & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) < 0, \\ \dot{U}_{in,liq} - \dot{U}_{out,liq} - \dot{U}_{out,vap} \\ -H_{out,vap} + Q & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) \geq 0. \end{cases} \quad (7.8)$$

Hier bezeichnen m_i die Massen der einzelnen Komponenten, F_{index} die ein- (“in”)/ausgehenden (“out”) Massenströme von Flüssigkeit (“liq”) und Dampf (“vap”), Q die vom Wärmetauscher zugeführte Energie, \dot{U} die Änderung der inneren Energie

des Stoffgemisches und \dot{U}_{index} die Energietransferterme

$$\begin{aligned}\dot{U}_{in,liq} &= F_{in} \cdot c_{p,liq}(w_{in}) \cdot T_{in} \\ \dot{U}_{out,liq} &= F_{out,liq} \cdot c_{p,liq}(w) \cdot T_{evap} \\ \dot{U}_{out,vap} &= F_{out,vap} \cdot c_{p,vap}(\xi) \cdot T_{evap} \\ H_{out,vap} &= F_{out,vap} \cdot h_v(\xi).\end{aligned}\quad (7.9)$$

Dabei sind $\dot{U}_{in,liq}$ die innere Energie der zugeführten Flüssigkeit, $\dot{U}_{out,liq}$ die innere Energie der abgeführten Flüssigkeit, $\dot{U}_{out,vap}$ die innere Energie des entweichenden Dampfes und $H_{out,vap}$ die Verdampfungsenthalpie des entweichenden Dampfes. Die inneren Energien hängen von der Temperatur ab. Sie werden außerdem durch die spezifische Wärmekapazität, welche ihrerseits von der Stoffzusammensetzung abhängt, bestimmt. Im nicht verdampfenden Modus ($\psi^{(1)}(p_{evap}) < 0$) sind nur Terme relevant, welche die Flüssigkeit betreffen, da laut Modellannahme die Masse des Dampfes vernachlässigt wird. Im verdampfenden Modus gehen dann zusätzlich die Terme für den Massenabfluss des Dampfes und die damit verbundenen Energieflüsse ein. Die gesamte innere Energie des im Tank befindlichen Stoffgemisches hängt von der Temperatur im Verdampfer ab:

$$U = \begin{cases} m_{liq} \cdot c_{p,liq}(w) \cdot T_{evap} & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) < 0, \\ m_{liq} \cdot c_{p,liq}(w) \cdot T_{evap} - m_{vap} \cdot c_{p,vap}(\xi) \cdot T_{evap} \\ - m_{vap} \cdot h_v(\xi) & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) \geq 0 \end{cases}\quad (7.10)$$

mit

$$m_{vap} = \frac{\left(\sum_{i=A,B,C} w_i P_i^0(T_{evap}) \right) \cdot V_{vap}}{R \cdot T_{evap} \cdot \sum_{i=A,B,C} \frac{w_i}{M_i}}.\quad (7.11)$$

Der Dampf wurde dabei als ideales Gas angenommen. Der Gesamtdruck ergibt sich gemäß dem Daltonschen Gesetz als Summe der Partialdrücke der beteiligten Komponenten. M bezeichnet die molare Masse, R die universelle Gaskonstante und P_i^0 , $i = A, B, C$ die Dampfdrücke der reinen Komponenten. Die Massen der einzelnen Komponenten lassen sich gemäß

$$m_i = \begin{cases} m_{liq} \cdot w_i & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) < 0, \\ m_{liq} \cdot w_i \\ + \frac{w_i P_i^0(T_{evap}) \cdot V_{vap}}{R \cdot T_{evap} \cdot \sum_{i=A,B,C} \frac{w_i}{M_i}} & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) \geq 0 \\ i = A, B, C \end{cases}\quad (7.12)$$

berechnen. Für die Massenanteile in der Flüssigkeit und im Dampf gelten außerdem die Summenbeziehungen

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{i=A,B,C} w_i & (7.13) \\ 1 &= \sum_{i=A,B,C} \xi_i \quad \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) \geq 0. \end{aligned}$$

Die Massenanteile im Dampf werden für den nicht-verdampfenden Modus gemäß Modellannahme auf 0 gesetzt. Dasselbe gilt wegen des geringen Dampfdruckes für die schwere Komponente A auch im verdampfenden Modus. Die Massenanteile der flüchtigen Komponenten lassen sich über das Verhältnis zwischen Partial- und Gesamtdruck und die Summenbeziehung berechnen:

$$\begin{aligned} \xi_A &= 0 \\ \xi_B &= \begin{cases} 0 & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) < 0, \\ \frac{w_B P_B^0(T_{evap})}{\sum_{i=A,B,C} w_i P_i^0(T_{evap})} & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) \geq 0 \end{cases} & (7.14) \\ \xi_C &= \begin{cases} 0 & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) < 0, \\ 1 - \xi_B & \text{wenn } \psi^{(1)}(p_{evap}) \geq 0. \end{cases} \end{aligned}$$

Druck und Dichte berechnen sich mit der Zustandsgleichung des idealen Gases gemäß

$$\begin{aligned} p_{evap} &= \frac{\sum_{i=A,B,C} \left[\frac{w_i}{M_i} \cdot P_i^0(T_{evap}) \right]}{\sum_{i=A,B,C} \frac{w_i}{M_i}}, & (7.15) \\ \rho_{vap} &= \frac{\sum_{i=A,B,C} w_i P_i^0(T_{evap})}{R \cdot T_{evap} \cdot \sum_{i=A,B,C} \frac{w_i}{M_i}}, \\ & i = A, B, C. \end{aligned}$$

Der Massenausstrom wird mit Hilfe einer Approximation der Bernoulligleichung [141] bestimmt.

Der Wärmetauscher wird durch die Gleichungen für den Wärmeübergang zum

Tank und die Temperatur im Wärmetauscher T_{he} gemäß

$$Q = \begin{cases} 0 & \text{wenn } \psi^{(2)}(T_{he}, T_{evap}) < 0, \\ F_{in,vap} \left(h_V(\xi_{in}) + c_{p,vap}(\xi_{in}) \cdot T_{in} \right. \\ \left. - c_{p,liq}(\xi_{in}) \cdot T_{he} \right) & \text{wenn } \psi^{(2)}(T_{he}, T_{evap}) \geq 0 \end{cases} \quad (7.16)$$

$$T_{he} = \begin{cases} T_{evap} & \text{wenn } \psi^{(2)}(T_{he}, T_{evap}) < 0, \\ T_{evap} + Q/kA & \text{wenn } \psi^{(2)}(T_{he}, T_{evap}) \geq 0 \end{cases} \quad (7.17)$$

beschrieben. k und A sind der Wärmeübergangskoeffizient und die für den Wärmeübergang relevante Kontaktfläche zum Tank. Der Druck im Wärmetauscher ist durch die Zustandsgleichung des idealen Gases gegeben. In die in den Modellgleichungen verwendeten thermodynamischen Eigenschaften wie Dichte, spezifische Wärmekapazitäten für Dampf und Flüssigkeit sowie die spezifische Verdampfungsenthalpie h_v gehen die entsprechenden Größen der einzelnen Komponenten ihren Massenanteilen entsprechend anteilig ein. Die Dampfdrücke der reinen Komponenten werden als Polynome dritten Grades approximiert. Die für die thermodynamischen Eigenschaften verwendeten Konstanten finden sich in [141]. Aus den Modellgleichungen lassen sich die Übergangsfunktionen $\mathcal{T}^{(mk)}$ ableiten (siehe z. B. Gleichung (7.14) für die Massenanteile im Dampf). Augenfällig ist der Sprung in den Massenanteilen des Dampfes (siehe Abb. 7.7). Die Kurve des entweichenden Dampfes $F_{out,vap}$ zeigt am Umschaltspunkt einen deutlichen Knick.

7.2.2 Simulation, Sensitivitätsberechnung und Parameterschätzung mittels einer Glättungsmethode

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse von Simulation, Sensitivitätsberechnung und Parameterschätzung für den im vorherigen Abschnitt beschriebenen Verdampfer präsentiert. Die Simulation wurde durchgeführt, um das mittels Gleichung (5.29) geglättete Modell mit dem Hybridmodell aus dem vorigen Abschnitt zu vergleichen, dabei Abweichungen quantitativ zu erfassen und ihre Abhängigkeit vom Glättungsparameter zu untersuchen. Parametersensitivitäten, d. h. Ableitungen von Zustandstrajektorien nach Modellparametern dx/dp bzw. dy/dp , wurden für Druck (p_{evap}), Temperatur (T_{evap}) und Massenanteil der Komponente C im Dampf (ξ_C) bezüglich des Glättungsparameters und der zu schätzenden Parameter berechnet. Die Parameterschätzung wurde basierend auf Messreihen dieser Zustandsgrößen durchgeführt. Auch hier wurde der Einfluss des Glättungsparameters untersucht.

7.2.2.1 Simulation des industriellen Verdampfers

Für diesen Abschnitt wurden von den Zustandsgrößen des Modells die leicht zu messenden und zugleich für die Sicherheit des Betriebs relevanten Größen Druck p_{evap} und Temperatur T_{evap} sowie der ausgehende Massenstrom des Dampfes F_{vap} und die Massenanteile ξ_B und ξ_C im Dampf als die Größen, die am deutlichsten Umschaltungen zeigen, zur Darstellung ausgewählt. Abbildung 7.7 zeigt, dass die Trajektorien des geglätteten Modells mit Glättungsparameter $\tau = 0.002$ bar und des ursprünglichen Hybridmodells nur geringfügig voneinander abweichen. Wenn

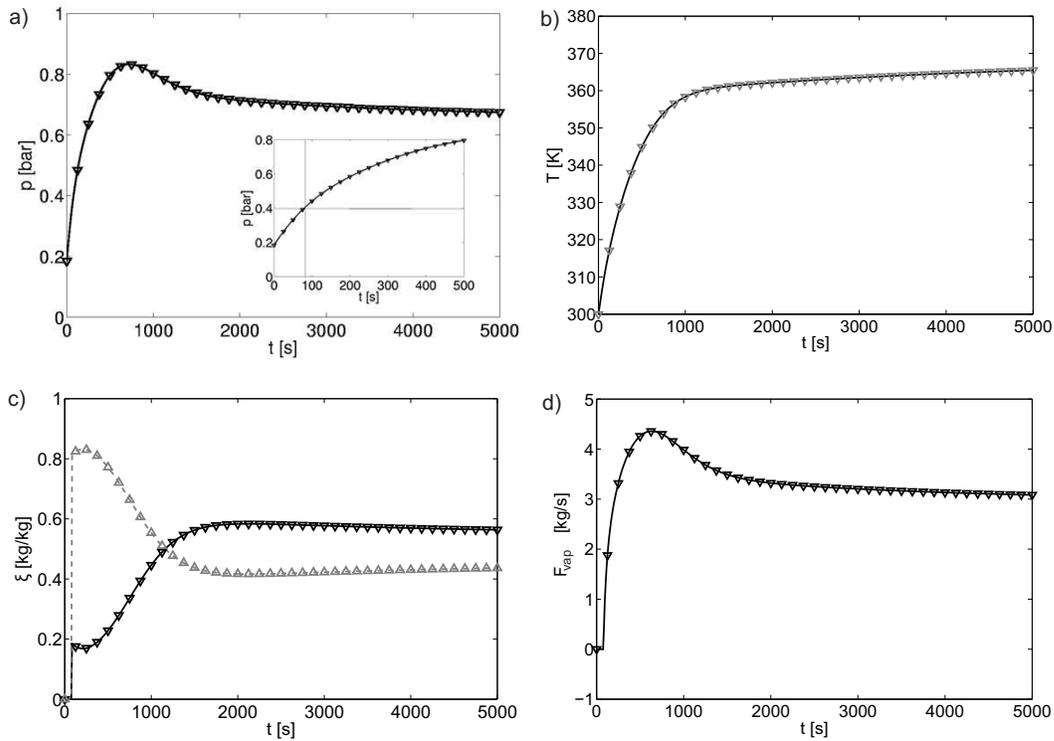


Abbildung 7.7: Vergleich der Simulationsergebnisse des Hybridmodells (Dreiecke) mit denen des durch die Glättungsmethode umformulierten Modells (Linien). a) Druck im Verdampfer. Das Inset zeigt den Druck in der Anfangsphase. Die Umschaltbedingung $p_{evap} - p_{amb} = 0$ markiert den Übergang zum verdampfenden Modus. b) Temperatur im Verdampfer. c) Massenanteile von Wasser (schwarz) und Ethanol (grau) im Dampf. d) Massenfluss des Dampfes durch das Ventil V_{v1} .

der Druck die Übergangsbedingung $\psi^{(1)} = p_{evap} - p_{amb} = 0$ erfüllt (Abb. 7.7a, Inset), schaltet der Verdampfer vom nichtverdampfenden zum verdampfenden Betriebsmodus. Infolgedessen springen wie zu erwarten die Massenanteile ξ_B und ξ_C

der flüchtigen Komponenten von 0 im nicht-verdampfenden Modus auf den durch das Phasengleichgewicht definierten Wert im verdampfenden Modus. Zugleich beginnt Dampf durch das Ventil V_{v1} abzufließen (Abb. 7.7d). Das Verdampfen der flüchtigen Komponenten B und C führt zu einer Abnahme ihrer Massenanteile in der Flüssigkeit. Dabei ist die Abnahme aufgrund des höheren Dampfdruckes und somit auch des höheren Massenausflusses von Ethanol stärker ausgeprägt. Deshalb schneiden sich die Kurven ξ_B und ξ_C bei $t \approx 1150$ s. Da der Druck im Verdampfer und ebenso der Dampfaustritt vom (temperaturabhängigen) Dampfdruck und den Massenanteilen aller flüssigen Komponenten abhängen, nehmen beide als Folge der zunehmenden Temperatur zunächst zu. Später verringern sie sich wegen der Abnahme der Massenanteile w_B und w_C in der Flüssigkeit. In der Übergangsregion wird die Dynamik durch eine Linearkombination beider Betriebsmodi beschrieben. Abbildung 7.8 zeigt, dass das geglättete Modell das ursprüngliche Hybridmodell umso besser approximiert, je kleiner der Glättungsparameter gewählt wird. Der Anstieg von ξ_B und ξ_C in der Übergangsregion steigt

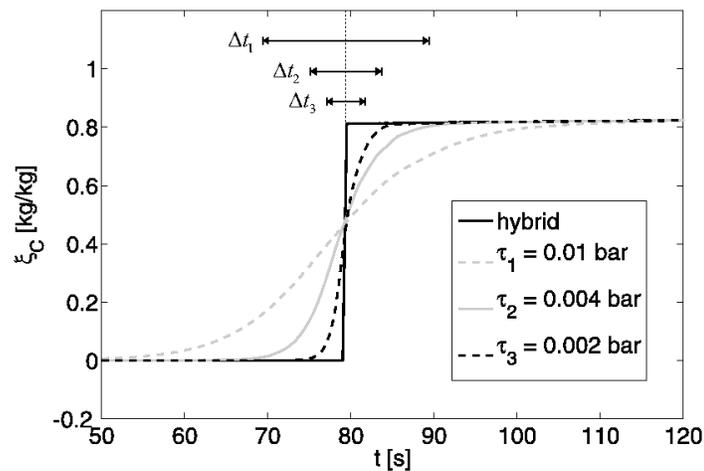


Abbildung 7.8: Vergleich des Massenanteils von Ethanol (ξ_C) im Dampf nach Simulation des Hybridmodells (schwarz durchgezogen) und verschiedenen Werten des Glättungsparameters. Die Pfeile oben im Bild geben die Breite der Übergangsregion an.

betragsmäßig und die Übergangszeit wird kürzer. Der steilere Anstieg ist durch den Anstieg der Glättungsfunktion $z(x)$ bedingt. Die Breite der Übergangsregion Δt kann durch einen Blick auf die Variation der um den exakten Schalterpunkt

$\psi(x(t^*)) = 0$ linearisierten Glättungsfunktion

$$\frac{\Delta z}{\Delta t} \approx \frac{\partial z}{\partial \psi} \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} \quad (7.18)$$

abgeschätzt werden. Mit $\Delta z = 1$ folgt die Abschätzung

$$\Delta t = \frac{4\tau}{\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{x^*} \left. \frac{\partial x}{\partial t} \right|_{t^*}}. \quad (7.19)$$

Mit der Abschätzung $\Delta p/\Delta t = 0.002 \text{ bar/s}$ (siehe Abb. 7.7a) lässt sich für den Verdampfer

$$\Delta t = \frac{4\tau}{\left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_{t^*}} \quad (7.20)$$

leicht berechnen. Die Breite der Übergangsregion für die Werte $\tau = \{0.01 \text{ bar}, 0.004 \text{ bar}, 0.002 \text{ bar}\}$ des Glättungsparameters folgt ziemlich gut dem durch Gleichung (7.20) vorhergesagten Verhältnis $\Delta t_1 : \Delta t_2 : \Delta t_3 = 5 : 2 : 1$ (siehe Abb. 7.8). Zwischen dieser Abschätzung bezüglich der Breite der Übergangsregion und der Argumentation in Abschnitt 5.3.2 besteht ein enger Zusammenhang dahingehend, dass die Modellapproximation für praktische Zwecke ausreichend gut ist, wenn

$$\left| \frac{dz}{dt} \right|_{\psi \approx 0} \gg \left| \frac{dx_i}{dt} \right|_{\psi \approx 0} \quad \forall i, i = 1, \dots, n. \quad (7.21)$$

In diesem Fall hat die kurze Zeitspanne, in der es durch die Linearkombination (siehe Gleichung (5.30)) zu einer Vermischung der Dynamiken benachbarter Modi mit nicht zu vernachlässigenden Anteilen kommt, nur einen geringen Einfluss auf die Zeitentwicklung des Systems. Die Abschätzung für angemessene Werte für τ (Abschnitt 5.3.2) konnte also für das Verdampfermodell bestätigt werden. Es sollte noch darauf hingewiesen werden, dass die Trajektorien des approximierten und das ursprünglichen Modells außerhalb der Übergangsregion nahezu identisch sind. Offenbar dehnt die Glättung für dieses Modell nur die Übergangsregion aus, treibt das System jedoch nicht in einen anderen Bereich des Zustandsraumes. Daraus lässt sich schließen, dass die Glättungsmethode grundsätzlich für das Verdampfermodell geeignet ist.

Für eine mehr quantitative Analyse der Konvergenz zwischen dem geglätteten und dem Originalmodell wurden die aus den Simulationsergebnissen beider Modelle berechneten mittleren quadratischen Abweichungen

$$s = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[\frac{x^{(hybrid)}(t_i) - x^{(smooth)}(t_i)}{\max[x^{(hybrid)}]} \right]^2 \quad (7.22)$$

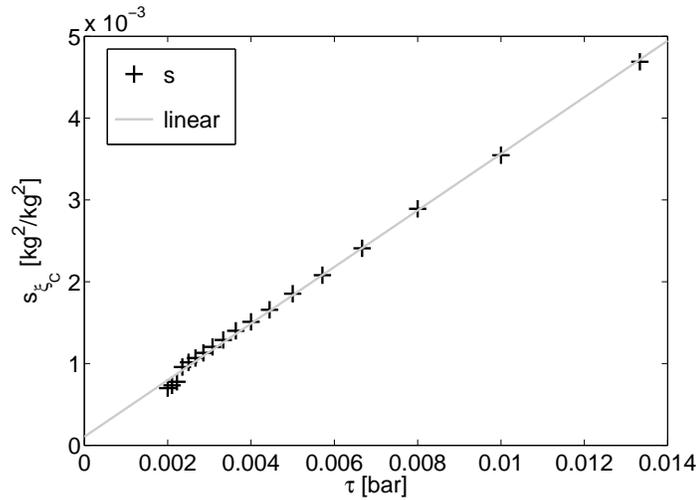


Abbildung 7.9: Summe der quadratischen Abweichung nach Gleichung (7.22) zwischen dem Massenanteil von Ethanol (ξ_C) im Dampf nach Simulation des ursprünglichen Hybridmodells und des geglätteten Modells in Abhängigkeit vom Glättungsparameter τ .

für die Zustandsvariablen ξ_C , T_{evap} und p_{evap} (Abb. 7.7a-c) berechnet. Für den Massenanteil der Komponente C im Dampf findet man numerisch, dass die mittlere quadratische Abweichung ungefähr $s = \alpha\tau + \epsilon$ mit $\alpha = 0.35$ und $\epsilon = 1 \cdot 10^{-4}$ folgt (Abb. 7.9). Theoretisch würde man $\epsilon = 0$ für hinreichend gutartige funktionale Abhängigkeiten und eine beliebig feine Diskretisierung $N \rightarrow \infty$ erwarten, d. h. der Unterschied wäre ausschließlich auf die Differenz zwischen der Stufenfunktion und der Glättungsfunktion zurückzuführen. Aber auch im Fall des Verdampfers wird die Abhängigkeit des diskontinuierlichen Zustandes vom Glättungsparameter durch die endliche Breite der Übergangsregion dominiert. Für die nahezu kontinuierlichen Zustandsvariablen T_{evap} und p_{evap} ist der Beitrag der Abweichung in der Übergangsregion erwartungsgemäß vernachlässigbar gering. Dies wird durch Abb. 7.10 bestätigt.

7.2.2.2 Sensitivitätsberechnung für das geglättete Modell

Die Berechnung der Sensitivitäten ist in verschiedener Hinsicht sinnvoll. Erstens ermöglicht die Existenz der Sensitivitäten den Einsatz gradientenbasierter Optimierungsmethoden. Die Bedingung der Existenz von Sensitivitäten wird durch die Glättung erfüllt. Außerdem konvergieren unter geeigneten Voraussetzungen die Zustandstrajektorien und die Sensitivitäten gegen die des Originalproblems, wenn

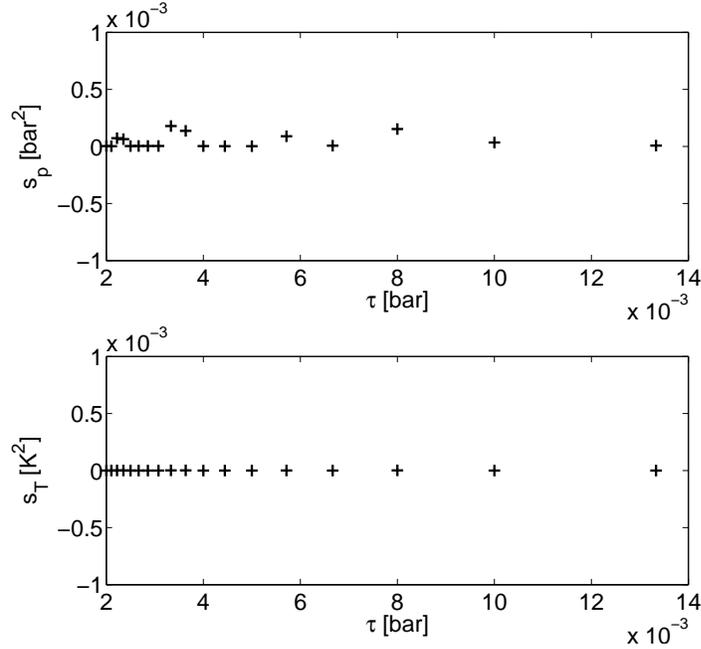


Abbildung 7.10: Summe der quadratischen Abweichung nach Gleichung (7.22) zwischen dem Druck im Verdampfer p_{evap} (oben) und der Temperatur im Verdampfer T_{evap} (unten) nach Simulation des ursprünglichen Hybridmodells und des geglätteten Modells in Abhängigkeit vom Glättungsparameter τ .

$\tau \rightarrow 0$ [146]. Zweitens ermöglicht die Berechnung der Sensitivitäten im Zusammenhang mit der Parameterschätzung (siehe folgender Abschnitt) eine Vorhersage, inwieweit das Glättungsverfahren zur Regularisierung des hybriden dynamischen Optimierungsproblems geeignet ist [111]. Drittens ist an der Sensitivität der gemessenen Zustandsgrößen bezüglich der zu schätzenden Parameter zu erkennen, ob die Auswahl der Messgrößen adäquat ist.

Abbildung 7.11 zeigt die Sensitivitäten der Zustandsvariablen ξ_C , T_{evap} und p_{evap} bezüglich des Glättungsparameters τ . Die Sensitivität der Zustandsvariable ξ_C quantifiziert die Beobachtung, die qualitativ schon aus Abschnitt 7.2.2.1 hervorging, dass der Massenanteil im Dampf nur in der Übergangsregion von der Glättung beeinflusst wird, d. h. man findet $d\xi/d\tau \approx 0$ außerhalb der Übergangsregion. Der Verlauf von $d\xi/d\tau$ wird leicht verständlich, wenn man Abb. 7.7c) betrachtet: Wenn τ steigt, d. h. $\Delta\tau = \tau_2 - \tau_1 > 0$, liegt die Kurve $\xi(\tau_2)$ über der von $\xi(\tau_1)$, solange $p_{evap} < p_{amb}$ und somit ist $\Delta\xi = \xi(\tau_2) - \xi(\tau_1) < 0$ während $\Delta\xi = \xi(\tau_2) - \xi(\tau_1) > 0$, wenn $p_{evap} > p_{amb}$. Die in Abb. 7.11 dargestellten Sensitivitäten wurden für den verhältnismäßig hohen Parameterwert $\tau = 0.01$ bar

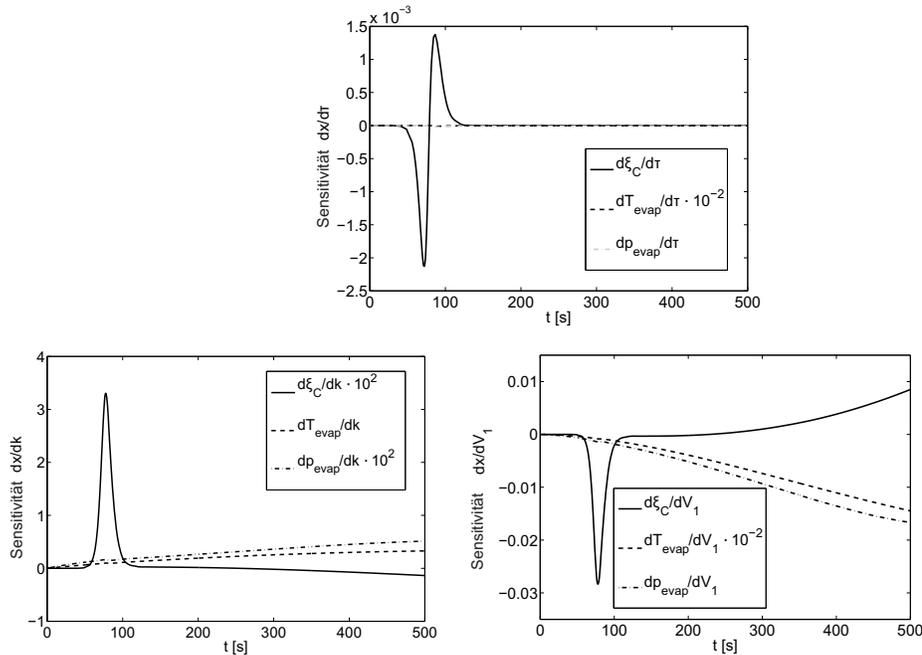


Abbildung 7.11: Sensitivität des geglätteten Modells bezüglich des Glättungsparameters τ (oben). Sensitivitäten des geglätteten Modells bezüglich des Wärmeübergangskoeffizienten k (unten links) und des maximalen Durchflusses durch das Einlassventil V_1 (unten rechts).

berechnet. Ein niedrigerer Wert für τ führt zu einer schmalen Übergangsregion. Die Auswirkung der Glättung auf den Druck (Strich-Punkt-Linie) und die Temperatur (gestrichelt) kann vernachlässigt werden, was wiederum in Einklang mit den Resultaten aus Abschnitt 7.2.2.1 (Abb. 7.10) steht.

Als Beispiel einer Parameterschätzung werden im nächsten Abschnitt die Ergebnisse für das Modell des industriellen Verdampfers gezeigt, für welches der Wärmeübergangskoeffizient k und die maximalen Durchflüsse durch die Ventile V_1 und V_2 auf der Grundlage der Messungen unterschiedlicher Zustandsgrößen (ξ_C , T_{evap} , p_{evap}) geschätzt werden. Der Massenanteil der Komponente C im Dampf (ξ_C) wird als Messgröße ausgewählt, weil er beim Übergang in den neuen Betriebsmodus springt und damit unter allen Zustandsgrößen das ausgeprägteste Hybridverhalten zeigt. Druck und Temperatur werden gewählt, weil sie in der Praxis am leichtesten einer Messung zugänglich sind. Wie den Abb. 7.11 zu entnehmen ist, ist die Sensitivität von ξ_C um den Übergang herum relativ groß. Eine Veränderung des Wärmeübergangskoeffizienten und des Flüssigkeitszuflusses, d. h. der zu heizenden Flüssigkeitsmasse, wirkt sich am deutlichsten indirekt über

den Schaltzeitpunkt für den Übergang $NV \rightarrow V$ auf die Sensitivität $d\xi_C/dk$ bzw. $d\xi_C/dV_1$ aus. Eine Erhöhung des Wärmeübergangskoeffizienten oder eine Verringerung des Flüssigkeitszuflusses verschiebt den Schaltzeitpunkt nach links, d. h. der Prozess wird beschleunigt. Somit sind die Sensitivitäten zunächst positiv ($d\xi/dk$) und negativ ($d\xi/dV_1$) und wechseln ihre Vorzeichen, wenn $\xi_C(t)$ das Maximum überschritten hat. Auch für Druck und Temperatur finden sich die höchsten Sensitivitäten bezüglich k und V_1 um den Umschaltzeitpunkt herum. Im Gegensatz zu den Sensitivitäten bezüglich τ zeigt sich die Abhängigkeit aller drei untersuchten Zustandsgrößen von k und V_1 aber auch außerhalb der Umschaltregion.

Die Sensitivitäten des Druckes und der Temperatur bezüglich k und V_1 steigen im Lauf der Zeit an und erreichen außerhalb der Übergangsregion höhere absolute Werte als die Sensitivitäten von ξ_C . Die Sensitivitäten aller drei Zustandsvariablen bezüglich des Flüssigkeitsausflusses durch das Ventil V_2 ähneln bis auf das Vorzeichen den Sensitivitäten bezüglich des Flüssigkeitszuflusses durch das Ventil V_1 . Die Ergebnisse in den Abb. 7.11 lassen erwarten, dass unter Verwendung der Messdaten der Größen ξ_C , T_{evap} , p_{evap} die Parameterwerte k , V_1 und V_2 gefunden werden können.

7.2.2.3 Parameterschätzung mittels Glättungsmethode

Für die Parameterschätzung wurden mit den Parameterwerten ($k^{(sim)} = 4.0 \text{ kW/h}$, $V_1^{(sim)} = 7.0 \text{ kg/s}$, $V_2^{(sim)} = 2.0 \text{ kg/s}$) simulativ Messdaten erzeugt und eine normalverteilte Messabweichung hinzuaddiert. Die Messreihen bestanden jeweils aus 51 äquidistanten Punkten im Zeithorizont $t \in [0, 500] \text{ s}$. Auch hier wurde das Parameterschätzproblem als Least-Squares-Optimierung formuliert.

Tabelle 7.3 zeigt die auf verschiedenen Messreihen basierenden Ergebnisse der Parameterschätzung. Der Wärmeübergangskoeffizient konnte unter Verwendung

	ξ_C	p_{evap}	T_{evap}	p_{evap} und T_{evap}
k [kW/h]	3.50	4.04	3.63	3.93
V_1 [kg/s]	8.50	6.45	6.52	6.27
V_2 [kg/s]	0.96	0.12	0.72	0.81

Tabelle 7.3: Ergebnisse der Parameterschätzung basierend auf Messreihen der Zustandsgrößen ξ_C , p_{evap} und T_{evap} , des Verdampfermodells. Die Ergebnisse der letzten Spalte basieren auf den Messwerten von p_{evap} und T_{evap} .

der Messungen für T_{evap} bzw. p_{evap} genau bestimmt werden, während ξ_C hier zu einem weniger guten Ergebnis führte. Der Einsatz beider Messreihen T_{evap} und p_{evap} konnte die Parameterschätzung nicht verbessern. Abbildung 7.12 zeigt

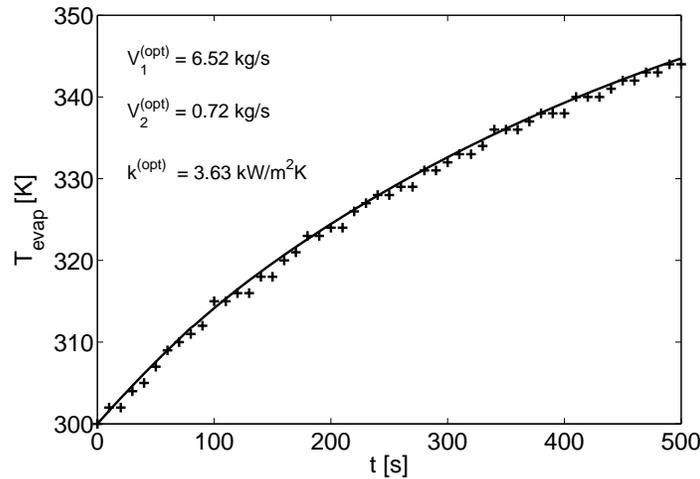


Abbildung 7.12: Optimale Trajektorie und Messwerte der Temperatur im Verdampfer sowie optimale Parameterwerte.

die Optimierungsergebnisse einer individuellen Realisation von “Messdaten” der Temperatur mit einer Standardabweichung $\sigma = 0.5 \text{ K}$.

Eine weitere Untersuchung befasste sich mit der Abhängigkeit des Optimierungsergebnisses vom Glättungsparameter τ . Auch hierfür wurde wieder die Messreihe für die Temperatur hinzugezogen. Um die Überlagerung durch andere Effekte auszuschalten, wurde hier jedoch auf die Messabweichung verzichtet, d. h. in diesem Experiment wurde $\sigma = 0$ gesetzt und nur der Parameter V_1 für den Flüssigkeitszufluss geschätzt. In dieser Situation kann der Parameter mit hoher Präzision bestimmt werden ($V_1^{(\text{opt})} = 6.98 \text{ kg/s}$). Die Zielfunktionswerte an der Lösung verringern sich mit dem Glättungsparameter τ (siehe Abb. 7.13), obwohl der Verlauf der Temperatur T_{evap} nur geringfügig durch die Glättungsmethode modifiziert wurde (siehe Abb. 7.10). In ähnlicher Weise erwiesen sich die optimalen Parameterwerte als ziemlich robust gegenüber dem Glättungsparameter.

7.2.3 Bestimmung der optimalen Steuerung des Anfahrprozesses mittels Zerlegungsansatz

Der Anfahrprozess des Verdampfers, d. h. das Befüllen und Aufheizen sowie das Erreichen des stationären Betriebszustandes soll zeitoptimal gestaltet werden. Die Steuergrößen dieses Prozesses sind die kontinuierlich veränderbaren Positionen der Ventile V_1 und V_{v2} . Die Ventile V_2 und V_{v1} erlauben nur die diskreten Einstellungen “offen”/“geschlossen”. Das Ventil des Dampfauslasses am Tank bleibt während

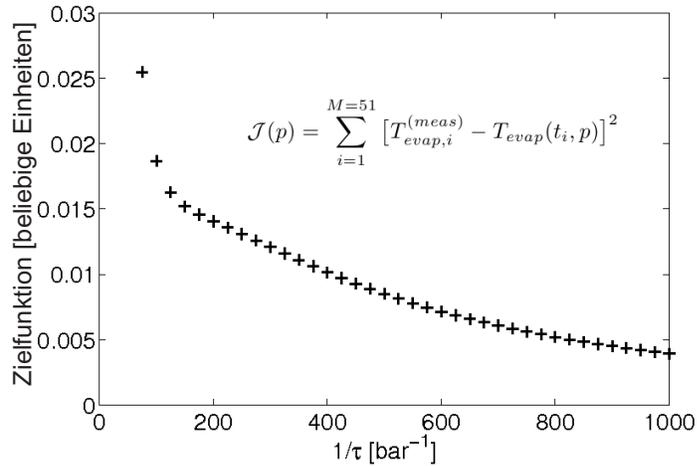


Abbildung 7.13: Wert der Zielfunktion in Abhängigkeit vom reziproken Glättungsparameter.

des gesamten Anfahrprozesses offen, da das Aufkonzentrieren des Produktes einen maximalen Abfluss der flüchtigen Komponenten erfordert. Das Ventil V_2 wird so lange geschlossen bleiben, bis die gewünschte Produktkonzentration erreicht ist, da nur in diesem Falle das Produkt als verwertbar gilt. Erst wenn die Zielkonzentration erreicht ist, wird das Ventil geöffnet und der Verdampfer erreicht den stationären Betriebszustand. Diese beiden Positionen des Produktauslassventils fügen dem Modell des Verdampfers 4 weitere, prinzipiell mögliche Modi hinzu. Für den Anfahrprozess sind jedoch nur drei der nunmehr acht Modi relevant:

1. “H/NV/ V_2 geschlossen”,
2. “H/V/ V_2 geschlossen”
3. “H/V/ V_2 offen”.

Daraus lassen sich die drei Teilaufgaben des Anfahrens ableiten:

1. Durchqueren des nichtverdampfenden Modus,
2. Erreichen der Referenzwerte des Füllstandes (d. h. der im Tank befindlichen Masse an Flüssigkeit) und der Produktkonzentration
 $[m_{liq}^{(ref)}, w_A^{(ref)}] = [15000 \text{ kg}, 0.8 \text{ kg/kg}]$.

Modus	Iterationen	CPU (IPOPT)	CPU (NLP)
1	43	1.494 s	3.112 s
2	46	3.552 s	7.972 s
3	90	3.304 s	7.832 s

Tabelle 7.4: Rechenzeit für die Optimierung des Anfahrprozesses mittels Zerlegungsansatz.

- Erreichen des stationären Betriebszustandes, nachdem der Produktauslass geöffnet wurde.

Diese Struktur ermöglicht die Anwendung der Idee der stückweisen Optimierung des Anfahrprozesses (siehe Kapitel 6) [110]. Offensichtlich führt aber die Definition der ersten Teilaufgabe nicht zur vollständigen Spezifikation des Endzustandes des ersten Abschnittes, da nur $p_{evap} = p_{amb}$ gefordert ist. Es bleiben also verschiedene Betriebsstrategien bestehen. In der ersten Strategie wird verlangt, dass neben

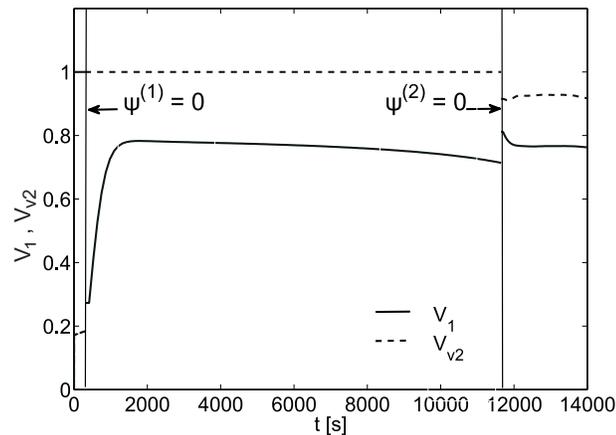


Abbildung 7.14: Optimale Steuerung des Anfahrprozesses: Stellung des Einlassventils V_1 (durchgehende Linien) und des Ventils für den Dampfstrom am Wärmetauscher (gestrichelte Linie). Die schwarzen gestrichelten Linien markieren den Übergang von “heizend/nicht verdampfend/ V_2 geschlossen” zu “heizend/verdampfend/ V_2 geschlossen” ($t = 300s$) bzw. von “heizend/verdampfend/ V_2 geschlossen” zu “heizend/verdampfend/ V_2 offen” ($t = 11650s$).

dem Druck auch der Füllstand seinen Referenzwert bereits am Ende des ersten Optimierungsabschnittes erreicht hat. Infolgedessen wird die Dauer der ersten Periode, in der sich der Verdampfer im Modus 1 befindet, im Wesentlichen durch

das Befüllen des Tanks bestimmt werden. Im Modus 2 muss dann der Füllstand gehalten und die Produktkonzentration in die Targetregion geführt werden. In einer zweiten möglichen Strategie erfolgt die Umschaltung zu Modus 2, sobald der Dampfdruck im Tank gleich dem Umgebungsdruck wird. Das Befüllen des Tanks bis zum Referenzzustand wird dann in Periode 2 verlagert. Im Modus 2 impliziert das Abschließen der Teilaufgabe einen eindeutig definierten Endzustand, so dass die Dynamik im letzten Optimierungsabschnitt von der Dynamik vergangener Abschnitte unabhängig ist. Abbildung 7.14 zeigt die optimale Steuerung der Ventile V_1 und $V_{v,2}$ und Abb. 7.15 die zugehörigen optimalen Trajektorien aller drei Teilaufgaben für die Strategie “zuerst befüllen, dann heizen”. Der Übergang von der ersten zur zweiten Teilaufgabe tritt bei $t_1 = 300 \text{ s}$ auf und der Übergang von der zweiten zur dritten Teilaufgabe bei $t_2 = 11650 \text{ s}$. Die zweite Strategie führte zu Schaltzeiten von $t_1 = 46 \text{ s}$ und $t_2 = 11636 \text{ s}$. Als bedeutendster Vorteil der Problemzerlegung und stückweisen Optimierung zeigt sich hier die geringe Rechenzeit. Die Tabelle 7.4 beinhaltet die Anzahl der Iterationen und die entsprechenden Zeit innerhalb IPOPT (ohne Berechnung der Zielfunktion) und separat die Zeit für die Evaluation der Zielfunktion. Die Lösung kann so schnell gefunden werden, da nur eine kleine Anzahl nichtlinearer kontinuierlicher Probleme gelöst werden muss. Demgegenüber steht die große Anzahl kontinuierlicher Probleme, die für eine ähnliche Problemstellung beim gemischt ganzzahligen Ansatz zu lösen ist [143]. Der Nachteil des Zerlegungsansatzes besteht darin, dass in der Regel nur die Einsicht in den Prozess das Formulieren sinnvoller Teilaufgaben gestattet. Dem kann allerdings entgegen gehalten werden, dass auch eine allgemeinere Methode Prozesseinsicht verlangt, wenn es um die Bewertung der Plausibilität der Ergebnisse geht.

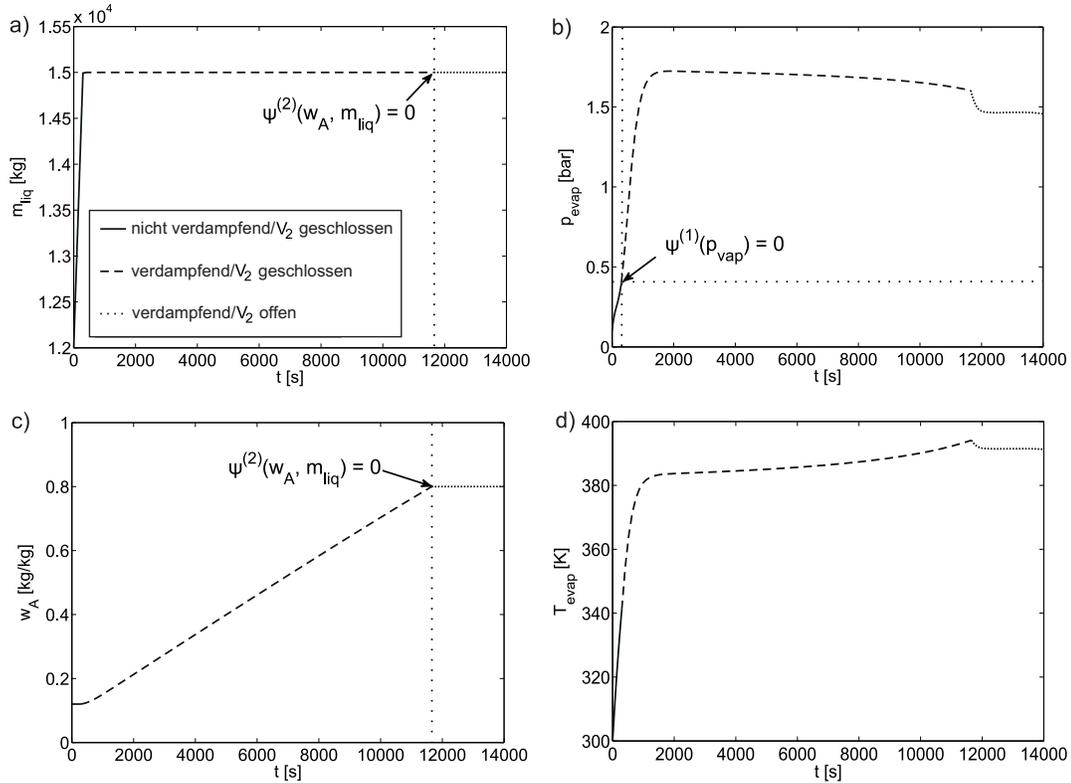


Abbildung 7.15: Optimale Steuerung des Anfahrprozesses: Flüssigkeitsmasse im Verdampfer (links oben), Druck im Verdampfer (rechts oben), Massenanteil des Produkts in der Flüssigkeit (links unten), Temperatur im Verdampfer (rechts unten). Die gestrichelten Linien markieren den Übergang von “heizend/nicht verdampfend/ V_2 geschlossen” zu “heizend/verdampfend/ V_2 geschlossen” ($t = 300s$) bzw. von “heizend/verdampfend/ V_2 geschlossen” zu “heizend/verdampfend/ V_2 offen” ($t = 11650s$).

Kapitel 8

Methodenbewertung und Zusammenfassung

Nachdem in den Kapiteln 5 und 6 die in dieser Arbeit vorgeschlagenen bzw. untersuchten Methoden beschrieben und in Kapitel 7 entsprechende Fallstudien präsentiert wurden, sollen hier nun die Vor- und Nachteile der Methoden diskutiert werden. Anschließend erfolgt die Zusammenfassung der Arbeit.

8.1 Methodenbewertung

In diesem Abschnitt sollen die untersuchten Methoden zusammenfassend bezüglich ihrer Allgemeinheit, ihrer Genauigkeit und bezüglich des jeweils erforderlichen Rechenaufwandes eingeschätzt werden. Zur Bewertung der Allgemeinheit einer Methode werden als Kriterien

1. die Eignung der Methode für Systeme mit autonomen und/oder gesteuerten Umschaltprozessen,
2. die Abhängigkeit der Anwendbarkeit der Methode von bestimmten Eigenschaften der Zielfunktion,
3. die Abhängigkeit der Anwendbarkeit der Methode von bestimmten Eigenschaften der Modellgleichungen,
4. die Eignung der Methode für Systeme mit vielen Umschaltungen und
5. die Eignung der Methode für Systeme mit kurzer Verweilzeit innerhalb mancher Modi

herangezogen.

Hinsichtlich der Genauigkeit ist zu untersuchen, ob zum Einen eine gute Lösung hinsichtlich der Optimierungsvariablen gefunden wird und ob zum Anderen die Umschaltprozesse richtig wiedergegeben werden. Die richtige Wiedergabe von Umschaltprozessen impliziert, dass einerseits die Komplementarität der Modi gesichert sein sollte und andererseits die Umschaltzeitpunkte t_s in Übereinstimmung mit der Schaltbedingung $\psi(x(t_s), y(t_s)) = 0$ genau bestimmt werden können.

Soll der Aufwand einer Methode eingeschätzt werden, ist z. B. die Bewertung des zur Implementierung notwendigen Aufwandes und der erforderlichen Rechenzeit sinnvoll.

Bei der nun folgenden Einordnung werden zuerst die beiden Regularisierungsmethoden (siehe Kapitel 5) behandelt. Anschließend erfolgt die Einschätzung für den Zerlegungsansatz (siehe Kapitel 6). Ein Überblick über die Vor- und Nachteile der diskutierten Methoden findet sich in Tabelle 8.1.¹

Regularisierung: Für die in Kapitel 5 vorgeschlagenen und untersuchten Regularisierungsmethoden wurde die Effektivität bei der Lösung dynamischer Optimierungsprobleme mit autonomen Umschaltungen anhand der Fallstudien in den Abschnitten 7.1 und 7.2 gezeigt. Das Glättungsverfahren und die Zweiebenenformulierung mit Strafverfahren sind allerdings von etwas geringerer Allgemeinheit als die in den Abschnitten 2.1 und 2.2 erwähnten, aber nicht näher untersuchten, heuristischen Verfahren und die MINLP, da sie speziell auf Systeme mit autonomen Umschaltungen zugeschnitten sind. Bedingt durch die Modellierung des Umschaltens führt das Glättungsverfahren immer zu einem Kompromiss zwischen numerischer Robustheit und Genauigkeit. Die Glättungsfunktion führt insbesondere für kleine Werte des Glättungsparameters zu steifen DAE-Systemen. Dafür beseitigt sie die durch harte Umschaltungen bedingte Nichtdifferenzierbarkeit an den Umschaltstellen. Wie in der Fallstudie zum Verdampfer (Abschnitt 7.2) zu sehen war, eignet sich die Glättungsmethode besonders gut, wenn sich die Zeitableitungen der benachbarten Modi nur wenig voneinander unterscheiden. Ein Impuls als Umschaltereignis (wie z. B. der Sprung der Massenanteile im Dampf) erhöht die Ungenauigkeit nicht. Für Systeme mit kurzen Verweilzeiten in den einzelnen Modi ist zu erwarten, dass die Genauigkeit abnimmt, weil es zum unvollständigen Umschalten kommen kann. Aus den genannten Gründen ist die Genauigkeit des Glättungsverfahrens also modellabhängig. Bezüglich der Rechenzeit verhält sich

¹In der Tabelle steht die Bewertung "gut" für die Genauigkeit der optimalen Parameter/Steuerungen ist der Eigenschaft heuristischer Verfahren geschuldet, dass Optimalität nicht garantiert werden kann. Beim Zerlegungsansatz hingegen bedeutet die Bewertung "gut" für die Genauigkeit der optimalen Parameter/Steuerungen, dass die bisherigen Testfälle gute Lösungen lieferten. Allerdings ist der Umfang an Erfahrung mit dieser Methode noch zu gering, um eine wirklich fundierte Aussage treffen zu können.

die Glättung sehr günstig, da keine zusätzlichen Optimierungsvariablen in das Problem eingeführt werden. Stattdessen werden Umschaltvorgänge durch Gleichungen modelliert.

In Hinblick auf die Genauigkeit lässt sich für das Zweiebenenproblem mit Strafverfahren feststellen, dass exakte Komplementarität der Betriebsmodi erreicht werden kann. Damit Schaltzeitpunkte korrekt bestimmt werden können, sollte der Gradient der Schaltfunktion in der Nähe der Umschaltung hinreichend groß sein. Allerdings ist die Genauigkeit der Umschaltzeitpunkte an die Diskretisierung gebunden. Wird die Schaltbedingung zwischen Diskretisierungspunkten erfüllt, kommt es zu Ungenauigkeiten. Für Systeme mit zeitlich dicht aufeinander folgenden Umschaltungen verbleibt unter Umständen der Systemzustand zu nahe an der Schaltfläche. In diesem Fall besteht die Gefahr, dass Umschaltzeitpunkte nicht gefunden werden. Auch beim Strafverfahren können sich bestimmte Modelleigenschaften also negativ auf die Genauigkeit der Lösung auswirken. Die Rechenzeit steigt beim Zweiebenenproblem mit Strafverfahren bei feinerer Diskretisierung deutlich an, da sich durch die Lagrangemultiplikatoren des inneren Minimierungsproblems die Anzahl der Optimierungsvariablen und somit der Rechenaufwand erhöht.

Zerlegungsansatz: Die Ideen des Kapitels 6 stellen in gewisser Weise einen Gegensatz zu den bisher verglichenen Methodenklassen dar. Wie schon in Abschnitt 6.2 erwähnt, ist der Zerlegungsansatz von geringerer Allgemeinheit, da nicht alle Optimierungsprobleme für autonom schaltende Systeme eine Zerlegung in Teilprobleme erlauben. Die Beispielfälle zeigten, wie die Zerlegung für Parameterschätzprobleme und Optimalsteuerungsprobleme durchgeführt werden kann. Die Genauigkeit der Methode hängt einerseits von der genauen Bestimmung der Endzeitpunkte der Optimierung der Teilprobleme und andererseits von der Genauigkeit des verwendeten Löser für kontinuierliche dynamische Optimierungsprobleme ab. Der Rechenaufwand steigt mit der Anzahl der Teilprobleme. Er erhöht sich deshalb für Systeme mit vielen Umschaltungen. Zeitlich dicht aufeinander folgende Umschaltungen sind weniger problematisch.

Abschließend soll festgehalten werden, dass es nach wie vor keine Lösungsmethode gibt, die allen Ansprüchen hinsichtlich Genauigkeit, Allgemeinheit und Rechenaufwand genügt. Anhand des Optimierungszieles und des zugrunde liegenden Modells lässt sich unter Kenntnis der Charakteristika verschiedener Methoden jedoch eine sinnvolle Methodenauswahl treffen.

8.2 Zusammenfassung

Die praktische Motivation dieser Arbeit ist durch die Absicht gegeben, zur Effizienzsteigerung industrieller Prozesse mathematische Optimierungsverfahren ein-

zusetzen. Inwieweit dies durchführbar ist, wird jedoch durch das Verhältnis zwischen den realen Gegebenheiten, d. h. den Eigenschaften der zu optimierenden Prozesse, den theoretischen Erkenntnissen, z. B. über Lösbarkeit der gestellten Probleme und Konvergenzeigenschaften sowie die Umsetzung theoretischer Erkenntnisse, d. h. die Implementierung von Lösungsverfahren bestimmt. Daraus resultiert in Bezug auf die Optimierung autonom schaltender dynamischer Hybridsysteme eine hohe wissenschaftliche Herausforderung.

Die Ausgangssituation zu Beginn dieser Arbeit stellte sich folgendermaßen dar: Für autonom schaltende Hybridsysteme existierten mathematische Untersuchungen zur Lösbarkeit der die Systeme beschreibenden DAE-Systeme und Algorithmen zur Simulation solcher Systeme. Bezüglich der Optimierung waren umfangreiche mathematische Arbeiten über statische Probleme mit komplementären Beschränkungen verfügbar. Als Algorithmen zur Lösung dynamischer hybrider Optimierungsprobleme waren bisher heuristische Verfahren, gemischt ganzzahlige Programmierung und Regularisierungsverfahren vorgeschlagen worden.

Ausgehend von den Erkenntnissen über (statische) MPCC wird in dieser Arbeit eine Glättungsmethode vorgeschlagen. Durch diesen Ansatz entstehen aus hybriden dynamischen Optimierungsproblemen kontinuierliche dynamische Optimierungsprobleme. Diese werden durch Diskretisierung mittels Kollokation auf finiten Elementen in große nichtlineare Programme überführt. Da die numerische Robustheit und die Genauigkeit der Lösung bei der Glättungsmethode von der geeigneten Wahl des Glättungsparameters abhängen, reicht einmaliges Lösen eines Problems meist nicht aus, um eine hinreichend genaue Lösung zu finden. Um die Bestimmung eines geeigneten Wertes des Glättungsparameters auf möglichst effiziente Weise durchführen zu können, wurde zunächst der Einfluss dieses Parameterwertes auf die Lösung der Probleme untersucht. Darauf aufbauend wurde eine Vorgehensweise entwickelt, wie ausgehend von einer problemspezifischen Abschätzung ein guter Wert des Glättungsparameters gefunden werden kann.

Auch zum Lösen von Optimierungsproblemen mit autonom schaltenden Hybridsystemen mittels Zweiebenenformulierung und Strafverfahren ist eine Diskretisierung des dynamischen Problems erforderlich. Hierfür wurde ebenfalls die Kollokationsmethode eingesetzt. Für die Lösung des diskretisierten Problems konnte in dieser Arbeit durch Fallstudien belegt werden, dass für das diskretisierte Problem mit Strafverfahren in Bezug auf das diskretisierte Problem mit komplementären Beschränkungen Exaktheit gilt. Es wurde eine Methode vorgeschlagen, wie ein hinreichend hoher Wert des Strafparameters, der für die Exaktheit der Lösung essentiell ist, erreicht werden kann.

Die Glättungsmethode und die Zweiebenenformulierung mit Strafverfahren wurden anhand von Beispielproblemen miteinander verglichen. In diesem Zusammen-

hang wurde auch eine Studie zur Abhängigkeit der Rechenzeit von der aus der Diskretisierung folgenden Anzahl der Zeitintervalle durchgeführt.

Als Alternative zu den Regularisierungsmethoden, heuristischen Methoden und MINLP wurde ein Ansatz zur Zerlegung des hybriden dynamischen Gesamtproblems vorgeschlagen. Die Zerlegung wird durchgeführt, damit jeweils am Ende der Teilprobleme in einen neuen Modus umgeschaltet werden kann und das Umschalten gewissermaßen außerhalb des Optimierungsproblems stattfindet. Es entstehen dadurch kontinuierliche dynamische Optimierungsprobleme, die mit den bereits gut etablierten Methoden für kontinuierliche Probleme gelöst werden können. Damit das Umschalten am Ende von Teilproblemen in Übereinstimmung mit dem ursprünglichen Modell stattfindet, müssen die Teilprobleme natürlich so definiert werden, dass am Endzeitpunkt eines jeden Teilproblems die jeweilige Schaltbedingung erfüllt wird. Die Initialisierung der einzelnen Teilprobleme muss in Übereinstimmung mit den Übergangsbedingungen zwischen den Modi geschehen. Am Beispiel der Parameterschätzung wurde vorgeführt, wie die Detektion der Schaltzeitpunkte innerhalb oder außerhalb der kontinuierlichen Optimierungsprobleme erfolgen kann. Für die Detektion der Schaltstellen, ihre genaue Lokalisierung und den Neustart der Optimierung im neuen Modus wurden Konzepte adaptiert, die sich bei der Simulation dynamischer Hybridsysteme bewährt haben.

Da es sich beim Zerlegungsansatz um eine völlig neue Methode handelt, sind die Erfahrungen damit bisher noch nicht sehr umfangreich. Es ist deshalb notwendig, die Methode an anderen Anwendungsfällen zu testen. Des Weiteren sollte versucht werden, Problemklassen zu identifizieren, für welche die Methode geeignet bzw. ungeeignet ist. Die zukünftige Weiterentwicklung des Zerlegungsansatzes kann dazu beitragen, die Eigenschaften der Methode insbesondere hinsichtlich ihrer allgemeinen Anwendbarkeit zu verbessern.

In Bezug auf die Regularisierungsmethoden wäre es für die zukünftige Forschung interessant, die Glättungsmethode und die Zweiebenenformulierung mit Strafverfahren für Systeme mit Filippov-Lösungen zu testen, bei denen sich das System für eine endlich lange Zeit in der Schaltfläche aufhält. Des Weiteren könnten Systeme mit einer größeren Anzahl von Schaltfunktionen bzw. kombinierten Schaltfunktionen untersucht werden.

Für alle untersuchten Methoden wird die zukünftige Forschung zeigen, ob sie sich auch in der Praxis bei hochkomplexen industriellen Anwendungen bewähren werden.

	Glättung	Strafverfahren	Zerlegung
Allgemeinheit			
autonom/ gesteuert	autonom	autonom	autonom
Abhängigkeit von der Zielfunktion	nein	nein	ja
Modell- abhängigkeit	teils	teils	nein
häufiges Umschalten	ja	ja	ja, CPU↑
kurze Verweilzeit	nein	nein	ja
Genauigkeit			
Komplementarität der Modi	Linear- kombination	exakt	exakt
Umschalt- zeitpunkte	keine (kontinuierlicher Übergang)	nicht ganz exakt (Diskretisierung)	exakt
optimale Parameter/ Steuerung	optimal für Nä- herungsproblem	optimal für diskretisiertes Problem	“gut”
Aufwand			
Rechenzeit: (autonome/ gesteuerte Schaltung)	gering	mittel	gering
Implementierung	einfach	mittel	einfach

Tabelle 8.1: Vergleichender Überblick über die Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme. Die Einträge der Tabelle fassen - teilweise stark pauschalisierend und vereinfachend - die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit und den Stand der Forschung zusammen. Vor der Methodenwahl für eine konkrete Anwendungen sollte die ausführliche Darstellung in Text konsultiert werden.

Kapitel 9

Anhang

A Orthogonale Kollokation

In dieser Arbeit wurde zum Lösen dynamischer Optimierungsprobleme der simultane Ansatz verwendet. Dabei wurde zur Diskretisierung des Problems das sehr effiziente Verfahren der orthogonalen Kollokation [61] genutzt.

Das Ziel der Kollokation ist es, eine Funktion $x(t)$ durch eine einfacher zu berechnende Funktion, z. B. durch ein Polynom zu approximieren. Für die Konstruktion eines solchen Polynoms wird die zusätzliche Forderung aufgestellt, dass das Polynom an bestimmten Stellen exakt sein möge, d. h.

$$x(t_i) = P(t_i) =: x_i, \quad t_i \in [a, b], \quad i = 1, \dots, N.$$

Diese Eigenschaft wird als Interpolationseigenschaft bezeichnet. Wie man leicht sieht, ist ein interpolierendes Polynom für eine Reihe gegebener Datenpunkte $(t_1, x_1), (t_2, x_2), \dots, (t_{N-1}, x_{N-1})$ eindeutig. Man überprüft leicht, dass das Interpolationspolynom die Form

$$P(t) = \sum_{i=1}^N L_i(t) x_i$$

hat. Dabei sind die $L_i(t)$ Lagrange-Polynome

$$L_i(t) = \prod_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^N \frac{t - t_j}{t_i - t_j} \tag{9.1}$$

mit der Eigenschaft

$$L_i(t) = \begin{cases} 1 & \text{für } t = t_i \\ 0 & \text{für } t = t_j \end{cases}.$$

Ähnliche Konzepte erlauben es, mit nur N Stützstellen und geeigneten Gewichts-faktoren Polynome bis zum Grad $2N-1$ exakt zu integrieren. Die zur Integration verwendete Quadraturregel soll die Gleichung

$$\int_a^b \omega(t)P(t)dt = \sum_{i=1}^N w_i P(t_i) \quad (9.2)$$

für alle Polynome vom Grad kleiner $2N$ erfüllen, wobei im Folgenden $\omega(t) = 1$ angenommen wird. Wenn $P(t)$ eine Funktion bis zu $(2N - 1)$ -ter Ordnung ist, kann sie allgemein als

$$P(t) = p_N(t)q_{N-1}(t) + r(t) \quad (9.3)$$

dargestellt werden. Die Ordnung von $q_{N-1}(t)$ ist $N-1$ und die Ordnung von $r(t)$ ist kleiner oder gleich $N - 1$. Die $p_N(t)$ sind orthogonale Polynome N -ter Ordnung. Orthogonale Polynome sind allgemein definiert durch ein so genanntes Skalarprodukt

$$\langle p_i(t) | p_{k \neq i}(t) \rangle = \int_a^b p_i(t)^* \rho(t) p_{k \neq i}(t) dt = 0 \quad (9.4)$$

mit einer reellen positiven Gewichtsfunktion $\rho(t)$. Soll kein Teil des Intervalls stärker betont werden als der andere, ist $\rho(t) = 1$, bzw. ein konstantes Vielfaches zu wählen. In diesem Fall sind die entsprechenden orthogonalen Polynome reskalierte Legendre-Polynome, die gewöhnlich auf $[-1,1]$ definiert werden. Für die in dieser Arbeit verwendete orthogonale Kollokation werden die Legendre-Polynome auf das Intervall $[0, 1]$ verschoben und man definiert

$$\tau = \frac{t - a}{b - a}$$

und geht von t zu τ über.

Setzt man nun (9.3) in Gleichung (9.2) ein, erhält man

$$\begin{aligned} & \int_0^1 \left(p_N(\tau)q_{N-1}(\tau) + r(\tau) \right) d\tau \\ &= \sum_{i=1}^N w_i \left(p_N(\tau_i)q_{N-1}(\tau_i) + r(\tau_i) \right) \end{aligned} \quad (9.5)$$

Die Polynome $q_{N-1}(\tau)$ lassen sich gemäß

$$q_{N-1}(\tau) = \sum_{k=1}^{N-1} c_k p_k(\tau)$$

nach den $p_N(\tau)$ entwickeln, wobei diese einen vollständigen, orthogonalen Basis-satz bilden. Gleichung (9.5) wird damit zu

$$\begin{aligned} \int_0^1 \left(p_N(\tau) \sum_{k=0}^{N-1} c_k p_k(\tau) + r(\tau) \right) d\tau \\ = \sum_{i=1}^N w_i \left(p_N(\tau_i) q_{N-1}(\tau_i) + r(\tau_i) \right) \end{aligned} \quad (9.6)$$

Aufgrund der polynomialen Exaktheit (9.2) sind die Beiträge für r auf beiden Seiten von (9.6) gleich groß. Umordnen von (9.6) ergibt

$$\sum_{k=0}^{N-1} c_k \int_0^1 p_N(\tau) p_k(\tau) d\tau = \sum_{i=1}^N w_i p_N(\tau_i) q_{N-1}(\tau_i).$$

Wegen der Orthogonalität (9.4) der $p(\tau)$ ist das Integral auf der linken Seite gleich Null, d. h. es gilt auch

$$\sum_{i=1}^N w_i p_N(\tau_i) q_{N-1}(\tau_i) = 0.$$

Diese Gleichung lässt sich erfüllen, indem man für die Zeitpunkte τ_i die Nullstellen orthogonaler Polynome, z. B. der auf das Intervall $[0, 1]$ verschobenen Legendre-Polynome verwendet. Die Gewichte w_i werden mit den Lagrange-Polynomen (9.1) durch

$$\int_0^1 L_i(\tau) d\tau = w_i \quad (9.7)$$

bestimmt. Verwendet man nun die Gewichte (9.7) in Gleichung (9.2), ergibt sich

$$\int_0^1 p(\tau) d\tau = \sum_{i=1}^N \int_0^1 L_i(\tau) p(\tau_i) d\tau$$

und nach Vertauschen von Summe und Integral

$$p(\tau) = \sum_{i=1}^N L_i(\tau) p(\tau_i).$$

Dieses Polynom kann zur Approximation der Funktion $x(t)$ verwendet werden, d. h.

$$x(\tau) \approx p(\tau) = \sum_{i=1}^N L_i(\tau)x(\tau_i).$$

Für dynamische Systeme ist wichtig, dass auch für die Zeitentwicklung gilt:

$$\dot{x}(\tau) \approx \dot{p}(\tau) = \sum_{i=1}^N \dot{L}_i(\tau)x(\tau_i).$$

Diese Approximation wird zur Diskretisierung dynamischer Optimierungsprobleme verwendet (siehe Abschnitt 5.2).

B Partikel-Schwarm-Optimierung

Die Partikel-Schwarm-Optimierung (PSO) wurde 1995 von dem Sozialpsychologen James Kennedy und dem Elektrotechnik-Ingenieur Russell Eberhart entwickelt [93]. Die Autoren selbst verorten ihre Methode in der Nähe genetischer bzw. evolutionärer Algorithmen. Zugleich werden Anleihen im “Artificial Life” gemacht - insbesondere Algorithmen, die die Bewegung von Vogel- oder Fischeschwärmen beschreiben sollen, sind hier von Interesse. Anstelle von Individuen betrachtet man in der PSO so genannte Partikel, denen jeweils individuelle “Positionen” und “Geschwindigkeiten” zugeordnet werden. Die Position eines Partikels wird durch einen Vektor beschrieben, der einen Wert für jede Dimension des Suchraumes enthält. Die Geschwindigkeit gibt an, wie schnell sich die Position eines Partikels pro Suchschritt ändert. Die Geschwindigkeit wird entsprechend den bisher gemachten “Erfahrungen”, d. h. anhand bisheriger bester individueller Positionen bzw. der bisher besten Position aller Partikel angepasst. Der Algorithmus, wie er auch für den Vergleich zwischen Regularisierungsmethoden und PSO (siehe Abschnitt 7.1) implementiert wurde, enthält folgende Arbeitsschritte:

1. Initialisierungsphase: Setzen von
 - (a) notwendigen Parametern wie Anzahl der Partikel, Anzahl der Iterationen, Dimension und Begrenzungen des Suchraumes,
 - (b) PSO-Parametern c_1 , c_2 , w_0 , w_f , die das Verhältnis zwischen der groben Suche in weiten Bereichen des Suchraumes (Exploration) und der feinen Suche in der Nähe einer potentiellen Lösung (Exploitation) balancieren,

- (c) maximaler und minimaler Partikelgeschwindigkeit entlang einer jeden Suchrichtung

$$v_d^{max} = \frac{1}{2}(x_d^{max} - x_d^{min})/\tau_{schritt},$$

wobei der Nenner $\tau_{schritt} = 1$ nur eingefügt wurde, um dem Ausdruck den Charakter einer ‚Geschwindigkeit‘ zu geben.

- (d) Anfangspositionen und -geschwindigkeiten aller Partikel,
2. Berechnung der Zielfunktion für alle Partikel,
 3. Aktualisierung der bisher besten gefundenen Positionen (i) jedes Partikels, (ii) aller Partikel,
 4. Abbruch, falls maximale Anzahl an Iterationen erreicht ist,
 5. Berechnung des Gewichtsparameters w ,
 6. Aktualisierung der Partikelgeschwindigkeit und Position (ggf. Beschränkung auf vorher festgelegte Bereiche), Aktualisieren des Laufindex für die Anzahl der Iterationen und Rückkehr zu Schritt 2.

Abbildungsverzeichnis

2.1	Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme.	12
2.2	Funktionsweise heuristischer Methoden.	13
2.3	Äußere Approximation.	16
2.4	Branch & Bound.	17
2.5	Lösung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme durch Approximation.	19
2.6	Methoden der dynamischen Optimierung.	21
2.7	Struktur bei sequentiellen und heuristischen Verfahren.	22
2.8	Struktur bei simultanen Verfahren.	22
2.9	Struktur beim Mehrfachschießverfahren.	23
3.1	Dynamisches System schematisch.	26
3.2	Tanksystem.	27
3.3	Implizites Schalten.	29
3.4	Zeitentwicklung eines Hybridsystems.	30
3.5	Transversales und Tangentiales Schalten.	34
3.6	Zustandstrajektorien und Schaltfunktionen für Beispiel (3.14).	36
3.7	Bedeutung der Richtungsableitungen.	37
5.1	Lösung hybrider dynamischer Optimierungsprobleme [109].	64
5.2	Zusammenspiel von Regularisierung und Diskretisierung.	65
5.3	Glättungsfunktion.	73
5.4	Zielkriterium des Problems (5.36).	76

5.5	Lösung des Problems (5.36).	77
5.6	Abhängigkeit der Zielfunktion des Problems (5.36) vom Glättungsparameter.	78
5.7	Abhängigkeit der Zielfunktion des Problems (5.36) vom Strafparameter.	83
5.8	Rechenzeit zum Lösen des Problems (5.36).	84
6.1	Discontinuity locking.	87
6.2	Problemzerlegung.	89
6.3	Zustandstrajektorien für das Modell (6.13)-(6.15).	95
6.4	Zustandstrajektorien für das Modell (6.18)-(6.20).	97
7.1	Dreitanksystem.	101
7.2	Parameterschätzung mit Glättungsmethode.	103
7.3	Parameterschätzung mit Strafverfahren.	104
7.4	Parameterschätzung mittels PSO.	105
7.5	Industrieller Verdampfer schematisch [141].	107
7.6	Eingangs- und Zustandsgrößen des Verdampfermodells.	108
7.7	Simulation des Hybridmodells bzw. des geglätteten Modells eines Verdampfers.	112
7.8	Simulation des Hybridmodells für verschiedene Werte des Glättungsparameters.	113
7.9	Summe der quadratischen Abweichung nach Gleichung (7.22) für ξ_C	115
7.10	Summe der quadratischen Abweichung nach Gleichung (7.22) für p_{evap} und T_{evap}	116
7.11	Sensitivitäten für das geglättete Verdampfermodell.	117
7.12	Optimale Trajektorie und Messwerte der Temperatur im Verdampfer.	119
7.13	Wert der Zielfunktion in Abhängigkeit vom reziproken Glättungsparameter.	120
7.14	Optimale Steuerung eines Anfahrprozesses: Steuergrößen.	121
7.15	Optimale Steuerung eines Anfahrprozesses: Zustandstrajektorien.	123

Tabellenverzeichnis

5.1	Indizes bei der orthogonalen Kollokation in Abschnitt 5.2.	71
6.1	Ergebnisse der Parameterschätzung für das Modell (6.13)-(6.15) mit Zerlegungsansatz.	96
6.2	Ergebnisse der Parameterschätzung für Modell (6.18)-(6.20) mit Zerlegungsansatz.	98
7.1	Parameterwerte für die Simulation.	102
7.2	Ergebnisse der Parameterschätzung für das Dreitanksystem.	104
7.3	Optimale Parameter für das Verdampfermodell nach Parameterschätzung.	118
7.4	Rechenzeit für die Optimierung des Anfahrprozesses mittels Zerlegungsansatz.	121
8.1	Vergleichender Überblick über die Methoden zur Optimierung dynamischer Hybridsysteme.	130

Symbolverzeichnis

BB	Branch and Bound
BDF	Backward Differentiation Formula
DAE	Differential-algebraische Gleichung
DGL	Differentialgleichung
GA	Genetische Algorithmen
GDP	General Disjunctive Program
IAPWS	International Association for the Properties of Water and Steam
ICRS	Integrated Controlled Random Search
IPOPT	Interior Point Optimizer
KKT	Karush-Kuhn-Tucker
LICQ	Linear Independence Constraint Qualification
MFCQ	Mangasarian-Fromovitz Constraint Qualification
MILP	Mixed-Integer Linear Program
MINLP	Mixed-Integer Nonlinear Programming
MPCC	Mathematical Program with Complementarity Constraints
MPEC	Mathematical Program with Equilibrium Constraints
NCP	Nonlinear Complementary Problem
NLP	Nichtlineares Programm
OA	Outer Approximation

- OSK Oberste Stufe strenger Komplementarität
- PSK Partielle strenge Komplementarität
- PSO Partikel-Schwarm-Optimierung
- SA Simulierte Abkühlung
- SOSC Second Order Sufficient Condition
- USK Unterste Stufe strenger Komplementarität

Literaturverzeichnis

- [1] *Revised Release on the IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam*. <http://www.iapws.org/relguide/IF97-Rev.pdf>, 1997.
- [2] V. Acary, O. Bonnefon, and B. Brogliato. Time-stepping numerical simulation of switched circuits with the nonsmooth dynamical systems approach. *Trans. Comp.-Aided Des. Integ. Cir. Sys.*, 29(7):1042–1055, 2010.
- [3] J. Akesson. *Languages and Tools for Optimization of Large-Scale Systems*. PhD thesis, Lund University, Lund, Sweden, 2007.
- [4] J. Akesson. *JModelica User's Guide*. Modelon AB, 2010. <http://www.jmodelica.org/page/236>.
- [5] R. Alur, C. Courcoubetis, N. Halbwachs, T. A. Henzinger, P. H. Ho, X. Nicolin, J. Sifakis, and S. Yovine. The algorithmic analysis of hybrid systems. *Theor. Comput. Sci.*, 138:3–34, 1995.
- [6] M. Anitescu, P. Tseng, and S. J. Wright. Elastic-mode algorithms for mathematical programs with equilibrium constraints: global convergence and stationarity properties. *Math. Program.*, 110:337–371, 2007.
- [7] U. Ascher, J. Christiansen, and R. D. Russell. A collocation solver for mixed order systems of boundary value problems. *Math. Comput.*, 33(146):659–679, 1979.
- [8] U. M. Ascher and L. R. Petzold. *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*. SIAM, 1998.
- [9] M. P. Avraam, N. Shah, and C. C. Pantelides. Modelling and optimization of general hybrid systems in the continuous time domain. *Comp. Chem. Eng.*, 22:221, 1998.
- [10] V. Bahl and A. Linninger. A new methodology for modeling discrete event systems. In *10th ESCAPE*, pages 163–169, 2000.

- [11] V. Bahl and A. Linninger. Modeling of event-driven continuous-discrete processes. In *LNCS*, volume 2034, pages 387–402. Springer Verlag, 2001.
- [12] P. Bahri, J. A. Bandoi, and J. A. Rogmanoli. Integrated flexibility and controllability analysis in design of chemical processes. *AIChE*, 43:997–1015, 1997.
- [13] S. Balakrishna and L. T. Biegler. A unified approach for the simultaneous synthesis of reaction, energy, and separation systems. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 32:1372–1382, 1993.
- [14] J. R. Banga, E. Balsa-Canto, C. G. Moles, and A. A. Alonso. Dynamic optimization of bioprocesses: Efficient and robust numerical strategies. *J. Biotechnol.*, 117(4):407–419, 2005.
- [15] J. R. Banga and W. D. Seider. Global optimization of chemical processes using stochastic algorithms. In C. A. Floudas and P. M. Pardalos, editors, *State of the art in global optimization*, pages 563–583. Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [16] V. Bansal, J. D. Perkins, and E. N. Piskopoulos. A case study in simultaneous design and control using rigorous, mixed-integer dynamic optimization models. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 41(4):760, 2002.
- [17] J. F. Bard. Convex two-level optimization. *Math. Program.*, 40:15–27, 1988.
- [18] M. D. Barrera and L. B. Evans. Optimal design and operation of batch processes. *Chem. Eng. Comm.*, 82:45, 1989.
- [19] M. Bartl, P. Li, and L. T. Biegler. Improvement of state profile accuracy in nonlinear dynamic optimization with the quasi-sequential approach. *AIChE*, 57:2185–2197, 2011.
- [20] P. I. Barton and C. K. Lee. Modeling, simulation, sensitivity analysis, and optimization of hybrid systems. *ACM T. Model. Comp. S.*, 12(4):256–289, 2002.
- [21] P. I. Barton, C. K. Lee, and M. Yunt. Optimization of hybrid systems. *Comp. Chem. Eng.*, 30:1576–1589, 2006.
- [22] P. I. Barton and T. Park. Analysis and control of combined discrete/continuous systems: Progress and challenges in the chemical process industries. *AIChE Symposium Series*, 93(316):102–114, 1997.
- [23] B. T. Baumrucker and L. T. Biegler. MPEC strategies for optimization of a class of hybrid dynamic systems. *J. Process Contr.*, 19:1248–1256, 2009.
- [24] B. T. Baumrucker, J. G. Renfro, and L. T. Biegler. MPEC problem formulations and solution strategies with chemical engineering applications. *Comp. Chem. Eng.*, 32:2903–2913, 2008.

- [25] R. E. Bellmann. On the theory of dynamic programming. *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 38:716–719, 1952.
- [26] R. E. Bellmann. *Dynamic Programming*. Princeton University Press, 1957.
- [27] A. Bemporad and M. Morari. Control of systems integrating logic, dynamics, and constraints. *Automatica*, 35:402–427, 1999.
- [28] B. W. Bequette. Nonlinear control of chemical processes: An overview. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 30:1391–1413, 1991.
- [29] M. Berreni and M. Wang. Modelling and dynamic optimization of thermal cracking of propane for ethylene manufacturing. *Comp. Chem. Eng.*, 35(12):2876–2885, 2011.
- [30] L. T. Biegler. An overview of simultaneous strategies for dynamic optimization. *Chem. Eng. Process.*, 46:1043–1053, 2007.
- [31] L. T. Biegler. *Nonlinear Programming: Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes*. SIAM and MOS, 2010.
- [32] L. T. Biegler, A. M. Cervantes, and A. Wächter. Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization. *Chem. Eng. Sci.*, 57:575–593, 2002.
- [33] L. T. Biegler and I. E. Grossmann. Retrospective on optimization. *Comp. Chem. Eng.*, 28(8):1169–1192, 2004.
- [34] L. G. Birta, T. I. Oren, and D. L. Kettenis. A robust procedure for discontinuity handling in continuous system simulation. *Trans. Soc. Comput. Sim.*, 2:189–205, 1985.
- [35] H. G. Bock. *Randwertproblemmethoden zur Parameteridentifizierung in Systemen nichtlinearer Differentialgleichungen*. Bonner Mathematische Schriften Nr. 183, 1987.
- [36] H. G. Bock and K. J. Plitt. A multiple shooting algorithm for direct solution of optimal control problems. In *Proc. 9th IFAC World Congress*, pages 243–247, Budapest, 1984. Pergamon Press.
- [37] J. F. Bonnans and A. Shapiro. *Perturbation Analysis of Optimization problems*. Springer Series in Operations Research. Springer, 2000.
- [38] M. Buss, O. von Stryk, R. Bulirsch, and G. Schmidt. Towards hybrid optimal control. *at-Automatisierungstechnik*, 48(9):448, 2000.
- [39] M. B. Carver. Efficient integration over discontinuities in ordinary differential simulations. *Math. Comp. Sim.*, 20:190–196, 1978.

- [40] J. J. Casares and J. R. Banga. Analysis and evaluation of a wastewater treatment plant model by stochastic optimization. *Appl. Math. Model.*, 13:420–424, 1989.
- [41] F. E. Cellier. Combined continuous/discrete system simulation languages: usefulness, experiences and future development. *SIGSIM Simul. Dig.*, 9:18–21, September 1977.
- [42] F. E. Cellier. *Combined Continuous/Discrete System Simulation Languages*, pages 201–220. 1979.
- [43] F. E. Cellier and E. Kofman. *Continuous System Simulation*. Springer Verlag, 2006.
- [44] C. Chatzidoukas, J. D. Perkins, E. N. Pistikopoulos, and C. Kiparis-sides. Optimal grade transition and selection of closed-loop controllers in a gasphase olefin polymerization fluidized bed reactor. *Chem. Eng. Sci.*, 58:3643–3658, 2003.
- [45] B. Chen, X. Chen, and C. Kanzow. A penalized Fischer-Burmeister NCP-function: Theoretical investigation and numerical results. Technical report, Department of Management and Systems, Washington State University, Pullman, 1997.
- [46] C. Chen and O. L. Mangasarian. A class of smoothing functions for nonlinear and mixed complementarity problems. *Comp. Opt. Appl.*, 5:97–138, 1996.
- [47] C. Y. Chen and B. Joseph. On-line optimization using a two-phase approach. An application study. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 26:1924–1930, 1987.
- [48] X. Chen. Smoothing methods for complementarity problems and their applications : A survey. *J. Oper. Res. Soc. Jpn.*, 43:32–47, 2000.
- [49] X. Chen. First order conditions for nonsmooth discretized constrained optimal control problems. *SIAM J. Control Optim.*, 42, 2004.
- [50] X. Chen and M. Florian. The nonlinear bilevel programming problem: Formulations, regularity and optimality conditions. *Optimization*, 32:193–209, 1995.
- [51] R. L. De la Fuente and A. Flores-Tlacuahuac. Integrated design and control using a simultaneous mixed-integer dynamic optimization approach. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 48:1933–1943, 2009.
- [52] T. De Luca, F. Facchinei, and C. Kanzow. A theoretical and numerical comparison of some semismooth algorithms for complementarity problems. *Comput. Optim. Appl.*, 16:173–205, 2000.
- [53] C. deBoor and R. Swartz. Collocation at Gaussian points. *SIAM J. Numer. Anal.*, 10:582–606, 1973.

- [54] M. Diehl, H. G. Bock, J. P. Schlöder, R. Findeisen, Z. Nagy, and F. Allgöwer. Real-time optimization and nonlinear model predictive control of processes governed by differential-algebraic equations. *J. Proc. Contr.*, 12:577–585, 2002.
- [55] B. N. Do, A. A. Ferri, and O. A. Bachau. Efficient simulation of a dynamic system with LuGre friction. *J. Comput. Nonlin. Dyn.*, 2:281–289, 2007.
- [56] M. Dowell and P. Jarratt. A modified regula falsi method for computing the root of an equation. *BIT*, 11:168–174, 1971.
- [57] J. W. Eaton and J. B. Rawlings. Model-predictive control of chemical processes. *Chem. Eng. Sci.*, 47, 1992.
- [58] E. Eich-Söllner and C. Führer. *Numerical Methods in Multibody Dynamics*. Teubner, Stuttgart, 1998.
- [59] J. M. Esposito and V. Kumar. A state event detection algorithm for numerically simulating hybrid systems with singularities. *ACM T. Model. Comp. S.*, 17:1–22, 2007.
- [60] A. F. Filippov. *Differential equations with discontinuous righthand sides*. Kluwer Academic Publisher, 1988.
- [61] B. A. Finlayson. *The Method of Weighted Residuals and Variational Principles*. Academic Press, 1972.
- [62] A. Fischer. A spezial newton-type optimization method. *Optimization*, 24:269–284, 1992.
- [63] R. Fletcher and S. Leyffer. Solving mixed integer nonlinear programs by outer approximation. *Math. Program.*, 66:327, 1994.
- [64] R. Fletcher and S. Leyffer. Numerical experience with solving MPECs as NLPs. Technical report, Department of Mathematics and Computer Science, University of Dundee, Dundee, 2002.
- [65] R. Fletcher, S. Leyffer, D. Ralph, and S. Scholtes. Local convergence of SQP methods for mathematical programs with equilibrium constraints. *SIAM J. Optimization*, 17:259–286, 2006.
- [66] A. Flores-Tlacuahuac and L. T. Biegler. Simultaneous mixed-integer dynamic optimization for integrated design and control. *Comp. Chem. Eng.*, 31:588–600, 2007.
- [67] C. A. Floudas. *Nonlinear and Mixed-Integer Optimization: Fundamentals and Applications*. Oxford Univ. Press, New York, 1995.

- [68] M. Förg. *Mehrkörpersysteme mit mengenwertigen Kraftgesetzen - Theorie und Numerik*, volume 20 of *Fortschrittberichte VDI*. VDI Verlag, 1994.
- [69] C. Führer. *Differential-algebraische Gleichungssysteme in mechanischen Mehrkörpersystemen*. PhD thesis, Technische Universität München, 1988.
- [70] M. Fukushima, Z. Q. Luo, and J. S. Pang. A globally convergent sequential quadratic programming algorithm for mathematical programming problems with linear complementarity constraints. *Comput. Optim. Appl.*, 10:5–34, 1998.
- [71] J. Gauvin. A necessary and sufficient regularity condition to have bounded multipliers. *Math. Prog.*, 12:136–138, 1977.
- [72] C. W. Gear and O. Osterby. Solving ordinary differential equations with discontinuities: Report UIUCDCS. Technical report, 1980.
- [73] A. M. Geoffrion. Generalized Benders decomposition. *J. Optimiz. Theory App.*, 10:237, 1972.
- [74] R. Goebel, R. G. Sanfelice, and A. R. Teel. Hybrid dynamical systems. *IEEE Control Syst. Mag.*, pages 28–93, 2009.
- [75] R. Goulcher and J. J. Casares. The solution of steady-state chemical engineering optimization problems using a random search technique. *Comp. Chem. Eng.*, pages 33–36, 1978.
- [76] C. Grossmann and H. Kleinmichel. *Verfahren der nichtlinearen Optimierung*. Teubner, 1979.
- [77] I. E. Grossmann. Review of nonlinear mixed-integer and disjunctive programming techniques. *Optim. Eng.*, 3:227, 2002.
- [78] I. E. Grossmann and M. Morari. Operability, resiliency and flexibility process design objectives for a changing world. In A. W. Westerberg and H. H. Chien, editors, *2th International Conference on Foundations of computer-aided process design*, 1984.
- [79] E. Hairer, S. P. Norsett, and G. Wanner. *Solving Ordinary Differential Equations I. Nonstiff Problems*. Springer Verlag, 1993.
- [80] P. Hamann and V. Mehrmann. Numerical solution of hybrid systems of differential-algebraic equations. *Comput. Method. Appl. M.*, 197:693–705, 2008.
- [81] J. L. Hay and A. W. J. Griffin. Simulation of discontinuous dynamical systems. In *9th IMAC Conference on Simulation of Systems*, pages 79–97, Italy, 1979.

- [82] Y. C. Ho. *Discrete-Event Dynamic Systems: Analyzing Complexity and Performance in the Modern World*. IEEE Press, 1994.
- [83] W. Hong, S. Wang, P. Li, G. Wozny, and L. T. Biegler. A quasi-sequential approach to large-scale dynamic optimization problems. *AIChE Journal*, 52:255–268, 2006.
- [84] J. N. Hooker and M. A. Osorio. Mixed logical/linear programming. *Discrete App. Math.*, 96:96–97, 1999.
- [85] X. M. Hu and D. Ralph. Convergence of a penalty method for mathematical programming with complementarity constraints. *J. Optimiz. Theory App.*, 123:365–390, 2004.
- [86] S. Jang, B. Joseph, and H. Mukai. Control of constrained multivariable nonlinear process using a two-phase approach. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 26:2106–2114, 1987.
- [87] H. Jiang and D. Ralph. Smooth SQP methods for mathematical programs with nonlinear complementarity constraints. *SIAM J. Optim.*, 10, 1999.
- [88] G. S. Joglekar and G. V. Reklaitis. A simulator for batch- and semicontinuous processes. *Comp. Chem. Eng.*, 8:315–327, 1984.
- [89] J. Kallrath. Mixed integer optimization in the chemical process industry. *Transactions of IChemE*, 78:809–822, 2000.
- [90] C. Kanzow. Some noninterior continuation methods for linear complementarity problems. *SIAM J. Matrix Anal. A.*, 17:851–868, 1996.
- [91] A. Kardani, J. P. Dussault, and A. Benchakroun. A new regularization scheme for mathematical programs with complementarity constraints. *J. Phys. Chem. A*, 20:78–103, 2009.
- [92] R. Karuppiah and I. E. Grossmann. Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes. *Comp. Chem. Eng.*, 30(4):650–673, 2006.
- [93] J. Kennedy and R. Eberhart. Particle swarm optimization. In *Neural Networks, 1995. Proceedings., IEEE*, volume 4, pages 1942–1948, August 2002.
- [94] K. J. Kim and U. M. Diwekar. Integrated solvent selection and recycling for continuous processes. *Ind. Eng. Chem. Res.*, 41(18):4479–4488, 2002.
- [95] J. Kyparisis. On uniqueness of Kuhn-Tucker multipliers in nonlinear programming. *Math. Prog.*, 32:242–246, 1985.

- [96] C. D. Laird, L. T. Biegler, and B. G. van Bloemen Waanders. A mixed integer approach for obtaining unique solutions in source inversion of drinking water networks. *J. Water Res. Pl. ASCE*, 132(4):242–251, 2006.
- [97] C. K. Lee. *Global Optimization of Hybrid Systems*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 2006.
- [98] S. Leyffer. Mathematical programs with complementarity constraints. *SIAG/OPTViews-and-News*, 14:15–18, 2003.
- [99] D. Li and M. Fukushima. Smoothing Newton and quasi-Newton methods for mixed complementarity problems. *Comput. Optim. Appl.*, 17:203–230, 2000.
- [100] P. Li. *Entwicklung optimaler Führungsstrategien für Batch-Destillationsprozesse*. Number 560 in Reihe 3, Verfahrenstechnik. VDI Verlag, 1998.
- [101] P. Li. Prozessoptimierung: Methoden, Anwendungen und Herausforderungen. *Chem. Ing. Tech.*, 79:1567–1580, 2007.
- [102] P. Li, M. Flender, K. Löwe, G. Wozny, and G. Fieg. Dynamische Optimierung thermischer Trennverfahren in der Fettchemie. *Fett/Lipid*, 100:528–534, 1998.
- [103] N. Lynch, R. Segala, and F. Vaandrager. Hybrid I/O automata. *Inform. Comput.*, 185:105–157, 2003.
- [104] C. D. Maranas. Optimal molecular design under property prediction uncertainty. *AIChE Journal*, 43(5):1250–1264, 1997.
- [105] V. Mehrmann and L. Wunderlich. Hybrid systems of differential-algebraic equations - analysis and numerical solution. *J. Process Contr.*, 19(8):1218–1228, 2009.
- [106] I. Mynttinen, A. Hoffmann, E. Runge, and P. Li. Reformulation strategies for optimization of hybrid dynamic systems. 2012. submitted.
- [107] I. Mynttinen and P. Li. Reformulation methods for a hybrid parameter estimation problem. In *55th International Scientific Colloquium*, pages 273–278, 2010.
- [108] I. Mynttinen and P. Li. A reformulation scheme for parameter estimation of hybrid systems. In *21st European Symposium on Computer-Aided Process Engineering*, pages 778–782, 2011.
- [109] I. Mynttinen and P. Li. Modellierung und Optimierung dynamischer Hybridsysteme. *Chem. Ing. Tech.*, 2012. in press.
- [110] I. Mynttinen and P. Li. A stop-and-restart approach to hybrid dynamic optimization problems. In *22st European Symposium on Computer-Aided Process Engineering*, pages 822–827, 2012.

- [111] I. Mynttinen, E. Runge, and P. Li. *Simulation, Parameter Estimation and Optimization of an Industrial-Scale Evaporation System*, volume 197 of *Advances in Intelligent Systems and Computing*. Springer, 2013.
- [112] K. Nakamura and A. Fusaoka. On transfinite hybrid automata. *Proceeding: 8th International Workshop, HSCC 2005*, pages 495–510, 2005.
- [113] R. Nath and Z. Alzein. On-line dynamic optimization of olefins plants. *Comp. Chem. Eng.*, 24(2-7):533–538, 2000.
- [114] G. L. Nemhauser and L. A. Wolsey. *Integer and combinatorial optimization*. Wiley, New York, 1999.
- [115] J. Nocedal and S. J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer Series in Operations Research. Springer, 2000.
- [116] J. Oldenburg, W. Marquardt, D. Heinz, and D. B. Leineweber. Mixed-logic dynamic optimization applied to batch distillation process design. *AIChE Journal*, 49:2900–2917, 2003.
- [117] M. Otter. *Objektorientierte Modellierung mechatronischer Systeme am Beispiel geregelter Roboter*. PhD thesis, Ruhr-Universität Bochum, 1994.
- [118] C. C. Pantelides, D. Gritsis, K. R. Morison, and R. W. H. Sargent. The mathematical modeling of transient system using differential-algebraic equations. *Comp. Chem. Eng.*, 12:449–454, 1988.
- [119] V. S. Pappala and I. Erlich. A new approach for solving the unit commitment problem by adaptive particle swarm optimization. In *Power and Energy Society General Meeting, 2008 IEEE*, pages 1–6, jul. 2008.
- [120] V. S. Pappala, I. Erlich, K. Rohrig, and J. Dobschinski. A stochastic model for the optimal operation of a wind-thermal power system. *IEEE T. Power Syst.*, 24:940–950, 2009.
- [121] T. Park and P. I. Barton. State event location in differential-algebraic models. *ACM T. Model. Comp. S.*, 6:137–165, 1996.
- [122] A. Pfeiffer. *Numerische Sensitivitätsanalyse unstetiger multidisziplinärer Modelle mit Anwendung in der gradientenbasierten Optimierung*. Number 20 in Fortschrittsberichte VDI, Reihe 20. VDI Verlag, 2008.
- [123] A. Pfeiffer and M. Arnold. Sensitivity analysis of discontinuous multidisciplinary models: Two examples. In *Non-smooth Problems in Vehicle Systems Dynamics*, pages 239–251. Springer, Berlin, Heidelberg, 2010.

- [124] Q. T. Pham. Using fuzzy logic to tune an evolutionary algorithm for dynamic optimization of chemical processes. *Comp. Chem. Eng.*, 37:136–142, 2012.
- [125] E. N. Pistikopoulos and I. E. Grossmann. Optimal retrofit design for improving flexibility in nonlinear systems. II. Optimal level of flexibility. *Comp. Chem. Eng.*, 13:1087, 1989.
- [126] L. S. Pontryagin, V. Boltyanskii, R. Gramkrelidze, and E. Mischenko. *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. Interscience Publishers, New York, 1962.
- [127] H. Praehofer. *System Theoretic Foundations for Combined Discrete-Continuous System Simulation*. PhD thesis, Johannes Kepler University of Linz, 1991.
- [128] A. Prata, J. Oldenburg, A. Kroll, and W. Marquardt. Integrated scheduling and dynamic optimization of grade transitions for a continuous polymerization reactor. *Comp. Chem. Eng.*, 32(3):463–476, 2008.
- [129] S. Pross and B. Bachmann. An advanced environment for hybrid modeling of biological systems based on Modelica. *J. Integrative Bioinformatics*, 8(1), 2011.
- [130] A. Raghunathan and L. T. Biegler. An interior point method for mathematical programs with complementarity constraints. *SIAM J. Optimiz.*, 15:720–750, 2005.
- [131] A. Raghunathan, J. R. Perez-Correa, E. Agosin, and L. T. Biegler. Parameter estimation in metabolic flux balance models for batch fermentation - formulation and solution using differential variational inequalities. *Ann. Oper. Res.*, 148:251–270, 2006.
- [132] D. Ralph and S. J. Wright. Some properties of regularization and penalization schemes for MPECs. *Optim. Method. Softw.*, 19:527–556, 2004.
- [133] R. Raman and I. E. Grossmann. Modelling and computational techniques for logic based integer programming. *Comp. Chem. Eng.*, 18(7):563, 1994.
- [134] J. B. Rawlings. Tutorial overview of model predictive control. *IEEE Contr. Syst. Mag.*, 20:38–52, 2000.
- [135] V. Sakizlis, J. D. Perkins, and E. N. Pistikopoulos. Recent advances in optimization-based simultaneous process and control design. *Comp. Chem. Eng.*, 28:2069–2086, 2004.
- [136] H. Scheel and S. Scholtes. Mathematical programs with complementarity constraints: Stationarity, optimality, and sensitivity. *Math. Oper. Res.*, 25(1):1–22, 2000.
- [137] K. Schittkowski. *Numerical Data Fitting in Dynamical Systems*. Kluwer Academic Press, 2002.

- [138] S. Scholtes. Convergence properties of regularization schemes for mathematical programs with complementarity constraints. *SIAM J. Optimiz.*, 1(4):918–936, 2001.
- [139] C. A. Schweiger and C. A. Floudas. *Interaction of design and control: Optimization with dynamic models*. Kluwer Academic Publishers, 1998.
- [140] L. F. Shampine, I. Gladwell, and R. W. Brankin. Reliable solution of special event location problems for ODEs. Technical Report 138, 1987.
- [141] C. Sonntag and O. Stursberg. Safety verification of a discretely controlled evaporation system. In *Technical Report, HYCON*, pages 1–20, 2005.
- [142] C. Sonntag, O. Stursberg, and S. Engell. Dynamic optimization of an industrial evaporator using graph search with embedded nonlinear programming. *2nd IFAC Conference on Analysis and Design of Hybrid Systems*, pages 211–216, 2006.
- [143] C. Sonntag, W. Su, O. Stursberg, and S. Engell. Optimized start-up control of an industrial-scale evaporation system with hybrid dynamics. *Contr. Eng. Prac.*, 16:976–990, 2008.
- [144] S. Steffensen and M. Ulbrich. A new relaxation scheme for mathematical programs with equilibrium constraints. *SIAM J. Optim.*, 20:2504–2539, 2010.
- [145] O. Stein, J. Oldenburg, and W. Marquardt. Continuous reformulations of discrete-continuous optimization problems. *Comput. Chem. Eng.*, 28:1951–1966, 2004.
- [146] D. E. Stewart and M. Anitescu. Optimal control of systems with discontinuous differential equations. *Numer. Math.*, 114:653–695, 2010.
- [147] D. E. Stewart and J. C. Trinkle. An implicit time-stepping scheme for rigid body dynamics with inelastic collision and Coulomb friction. *Int. J. Numer. Meth. Eng.*, 39:2637–2691, 1996.
- [148] J. Tamimi. *Development of Efficient Algorithms for Model Predictive Control of Fast Systems*, volume 923 of 3. VDI Verlag, 2011.
- [149] J. Tamimi and P. Li. A combined approach to nonlinear model predictive control of fast systems. *J. Process Contr.*, 20(9):1092 – 1102, 2010.
- [150] L. Tavernini. Differential automata and their discrete simulators. *Nonlinear Anal. Theor.*, 11(6):665–683, 1987.
- [151] K. L. Teo, V. Rehbock, and L. S. Jennings. A new computational algorithm for functional inequality constrained optimization problems. *Automatica*, 29:789–792, 1993.

- [152] J. Till, S. Engell, S. Panek, and O. Stursberg. Applied hybrid system optimization: An empirical investigation of complexity. *Control Eng. Pract.*, 12:1291–1303, 2004.
- [153] S. Trenn. *Distributional Differential Algebraic Equations*. PhD thesis, Universitätsverlag Ilmenau, 2009.
- [154] P. Tseng. Growth behaviour of a class of merit functions for the nonlinear complementarity problem. *J. Optimiz. Theory App.*, 89:17–37, 1996.
- [155] V. Vassiliadis. *Computational Solution of Dynamic Optimization Problems with general differential-algebraic constraints*. PhD thesis, Imperial College, London, 1993.
- [156] J. Viswanathan and I. E. Grossmann. A combined penalty function and outer-approximation method for MINLP optimization. *Comp. Chem. Eng.*, 14(7):769, 1990.
- [157] A. Wächter and L. T. Biegler. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Math. Prog.*, 106(1):25–57, 2006.
- [158] L. Wang, P. Li, G. Wozny, and S. Q. Wang. A startup model for batch distillation simulation from a cold state. *Comp. Chem. Eng.*, 27:1485–1497, 2003.
- [159] M. Wendt, R. Königseder, P. Li, and G. O. Wozny. Theoretical and experimental studies on startup strategies for a heat-integrated distillation column system. *Chem. Eng. Res. Des.*, 81:153–161, 2003.
- [160] H. S. Witsenhausen. A class of hybrid-state continuous-time dynamic systems. *IEEE T. Automat. Contr.*, 11.
- [161] G. Wozny and P. Li. Planning and optimization of dynamic plant operation. *Appl. Therm. Eng.*, 20(15-16):1393–1407, 2000.
- [162] L. Wunderlich. *Analysis and Numerical Solution of Structured and Switched Differential-Algebraic Systems*. PhD thesis, Technische Universität Berlin, 2008.
- [163] I. Zang. A smoothing-out technique for min-max optimization. *Math. Program.*, 19:61–71, 1980.
- [164] B. P. Zeigler. *Theory of Modeling and Simulation*. Wiley Interscience, 1976.
- [165] B. P. Zeigler, H. Praehofer, and T. G. Kim. *Theory of Modeling and Simulation: Integrating Discrete-Event Continuous Complex Dynamic Systems*. Academic Press, 2000.

- [166] B. Zhang, D. Chen, and W. Zhao. Iterative ant-colony algorithm and its application to dynamic optimization of chemical process. *Comp. Chem. Eng.*, 29(10):2078–2086, 2005.