# Zweistufige Stochastische Optimierung der Ressourcenverteilung in chemischen Batch-Prozessen

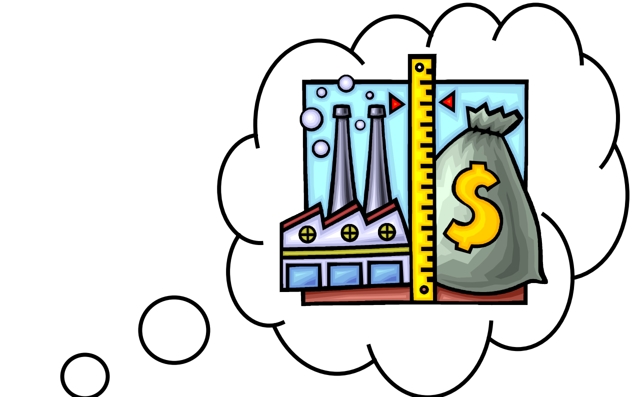
Jochen Till, Guido Sand und Sebastian Engell
Lehrstuhl für Anlagensteuerungstechnik
Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen
Universität Dortmund

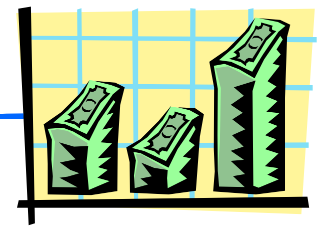
*DoMuS Kolloquium*
*Dortmund, 8. November 2004*

# Optimierung unter Unsicherheiten

- Optimierung
- Mathematische Programmierung
- Stochastische Programmierung
- Zweistufige Stochastische Programmierung

# Planung einer neuen Fabrik





Unsichere Nachfrage

Beobachtung (Realisierung)

Bauzeit: 1 Jahr

hoch (p=30%)

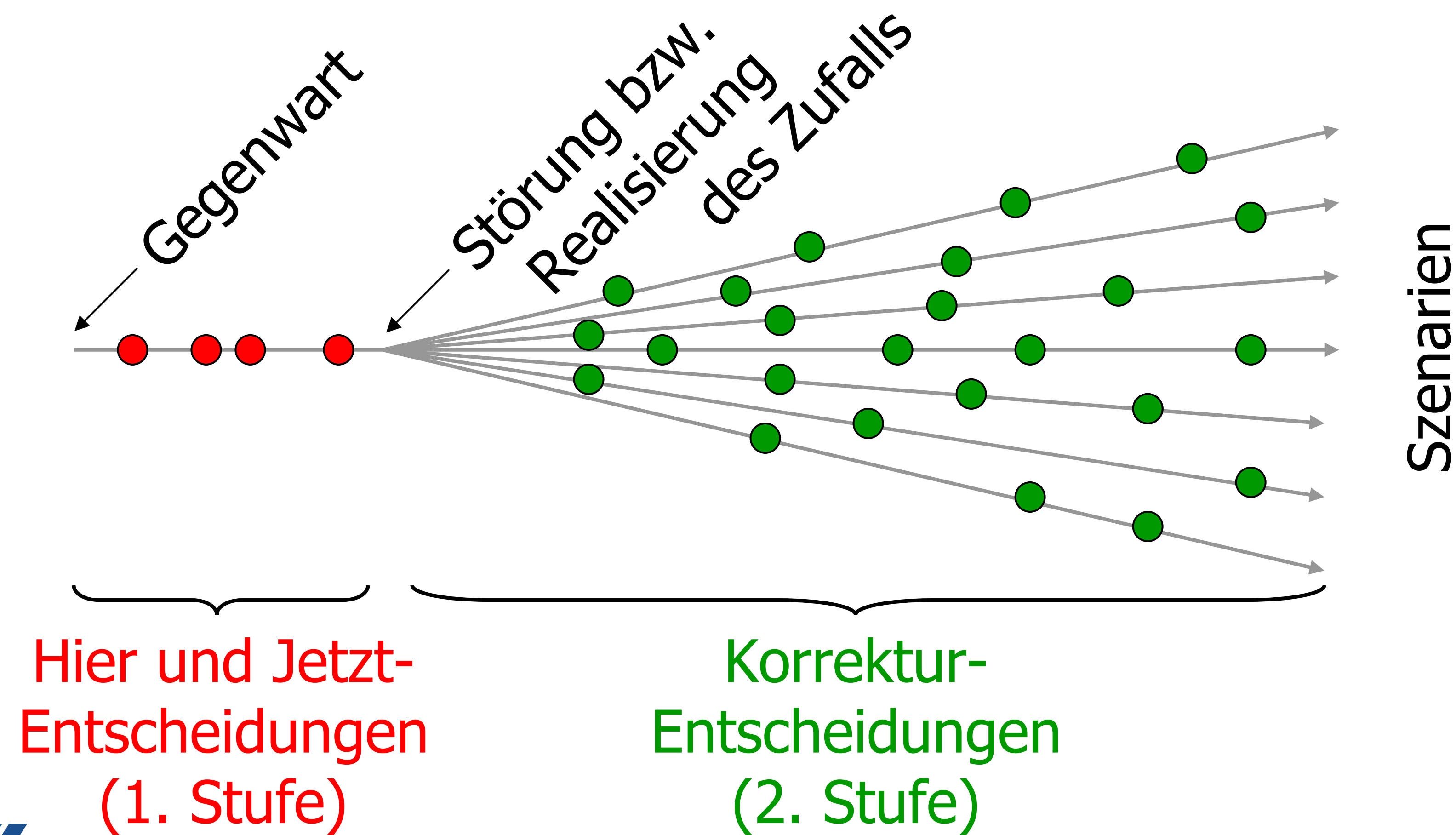
mittel (p=60%)

niedrig (p=10%)

Aktion

Korrektur

# Zweistufige Stochastische Integer Programmierung (2SIP)



# Problemstruktur 2SIP mit Ω Szenarien

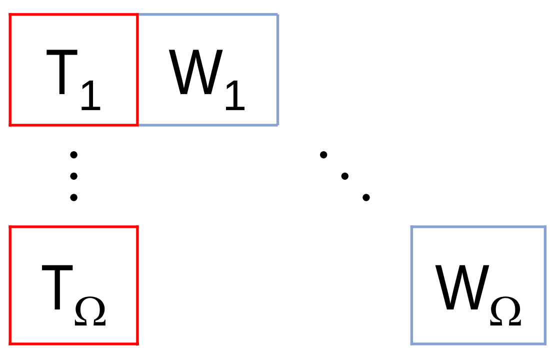
- Deterministisches Äquivalent (MILP)

$$z = \min_{x, y_1, \dots, y_\Omega} \left( c^T x + \sum_{\omega=1}^{\Omega} \pi_\omega \left( q_\omega^T y_\omega \right) \right)$$

$$s.t.\ T_\omega x + W_\omega y_\omega \leq h_\omega,$$

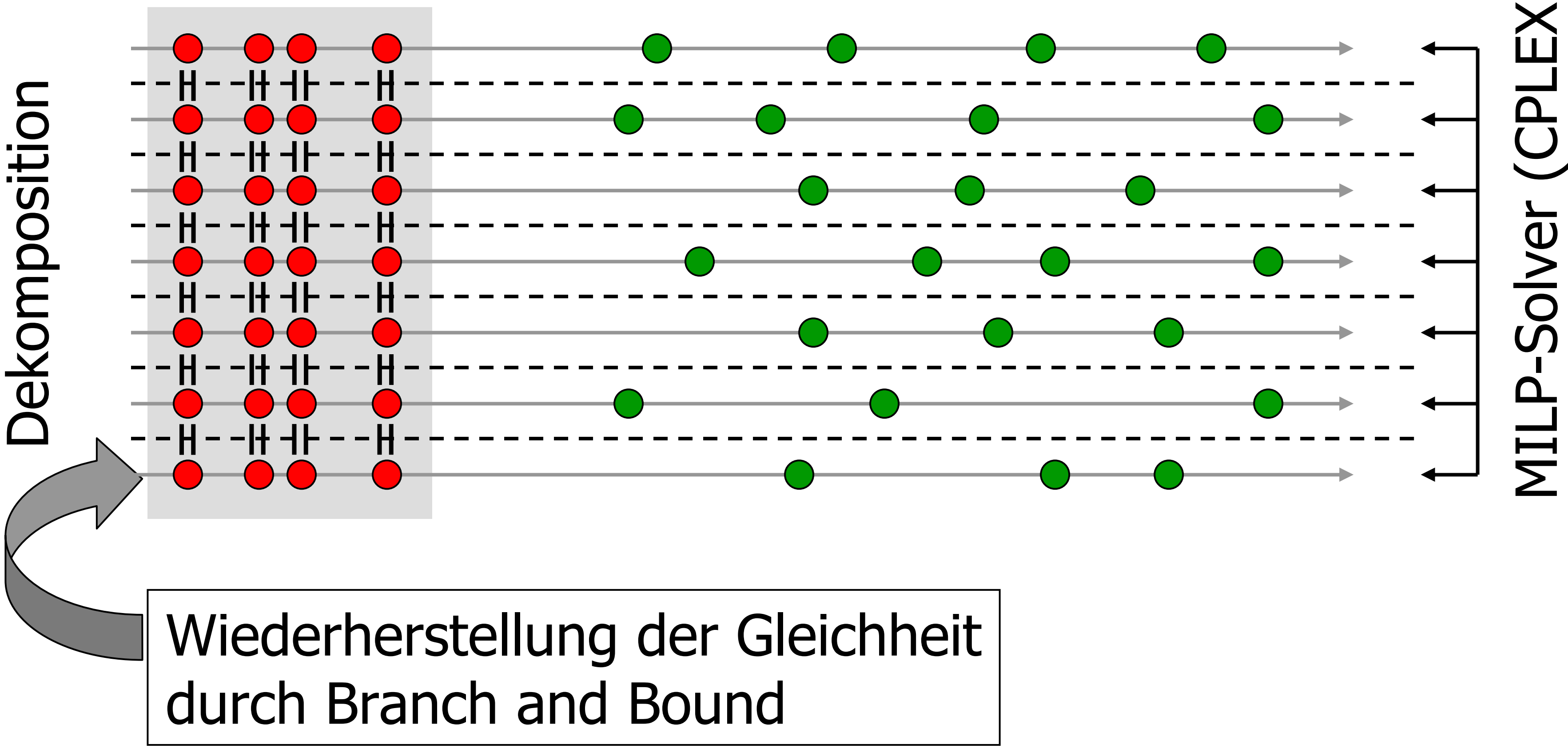
$$x \in X,\ y_\omega \in Y,\ \omega = 1, \dots, \Omega$$

- Charakteristische Matrix-Struktur

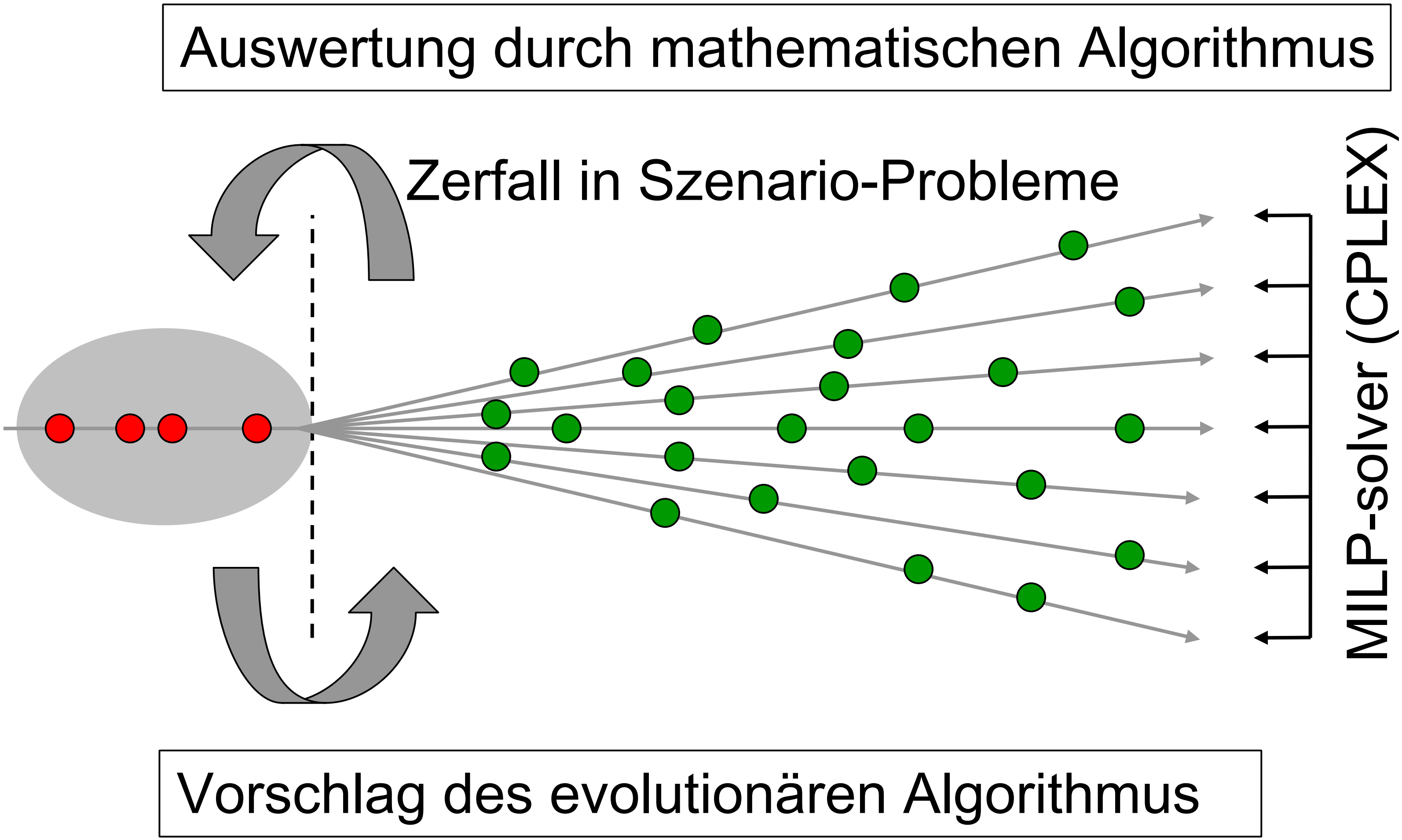


# Duale Szenario-Dekomposition (Caroe und Schultz, 1999)

## Äquivalente Darstellung



# Prinzip der Stufen-Dekomposition beim hybriden EA/MILP Algorithmus

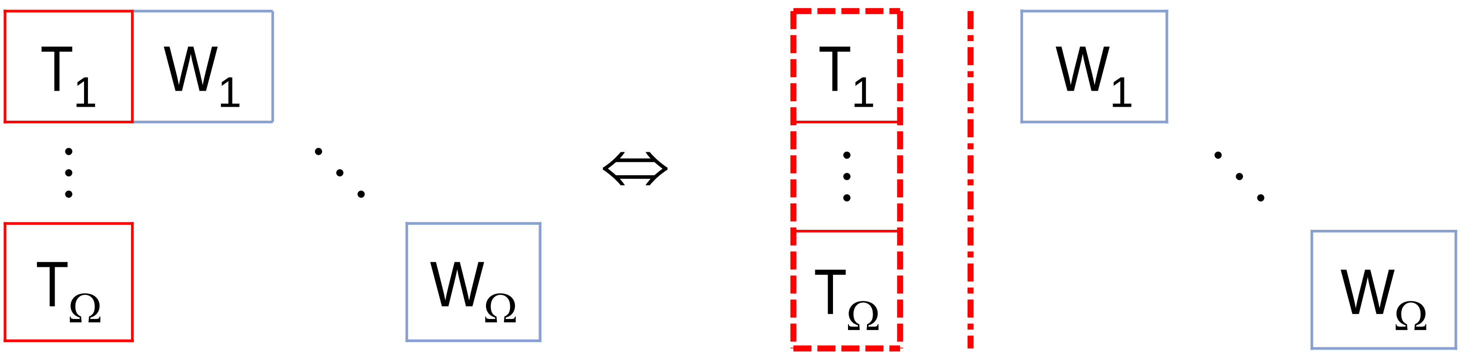


# Stufen Dekomposition EA/MILP

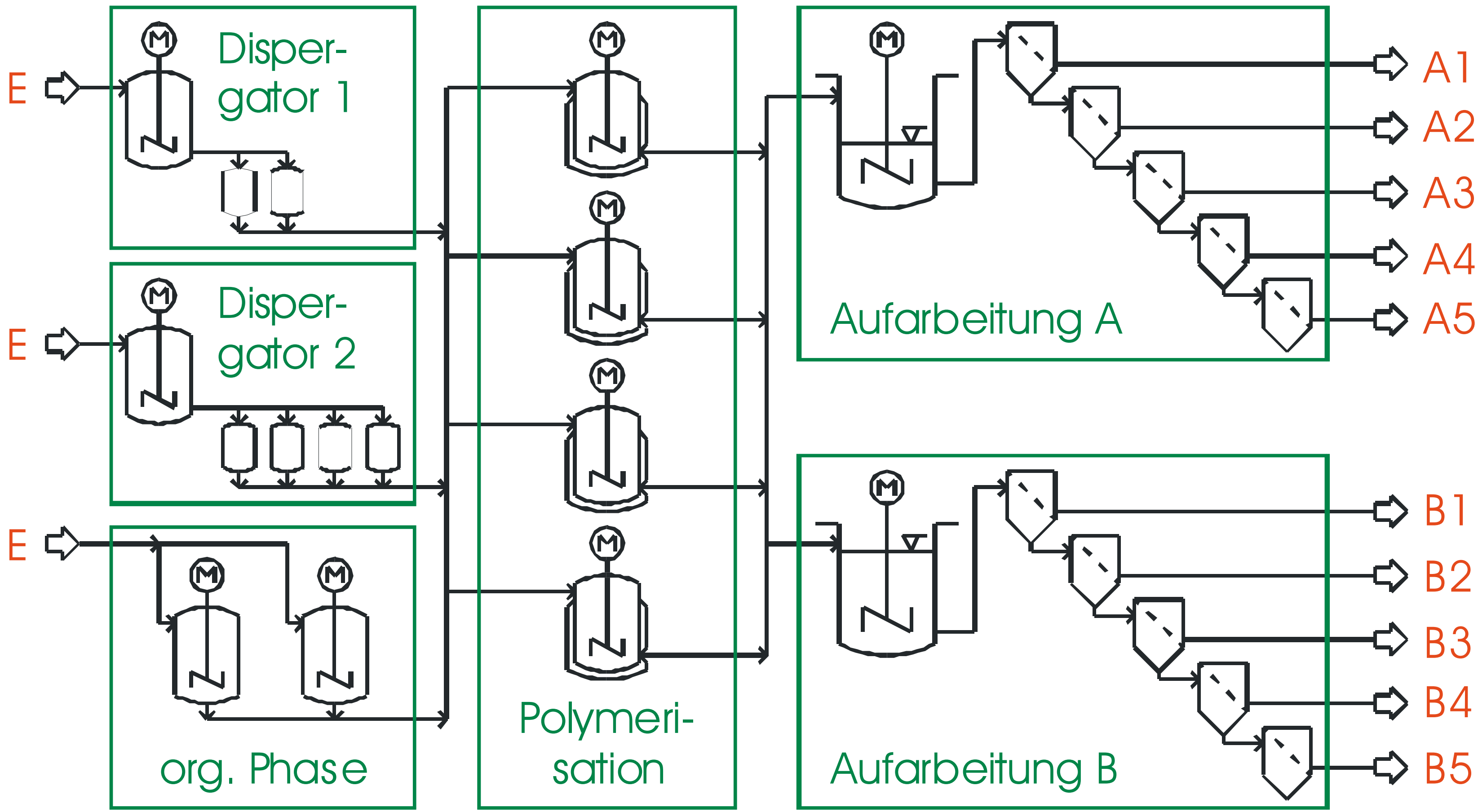
- Evaluationsfunktion des Master EA

$$z(x) = \left\{ \begin{array}{l} c^T x + \sum_{\omega=1}^{\Omega} \pi_\omega \min\limits_{y_1,\ldots,y_\Omega} \left( q_\omega^T y_\omega \right) s.t.\ T_\omega x + W_\omega y_\omega \leq h_\omega, \\ x \in X,\ y_\omega \in Y,\ \omega = 1,\ldots,\Omega \end{array} \right\}$$

- Dekomposition in entkoppelte Sub-Probleme



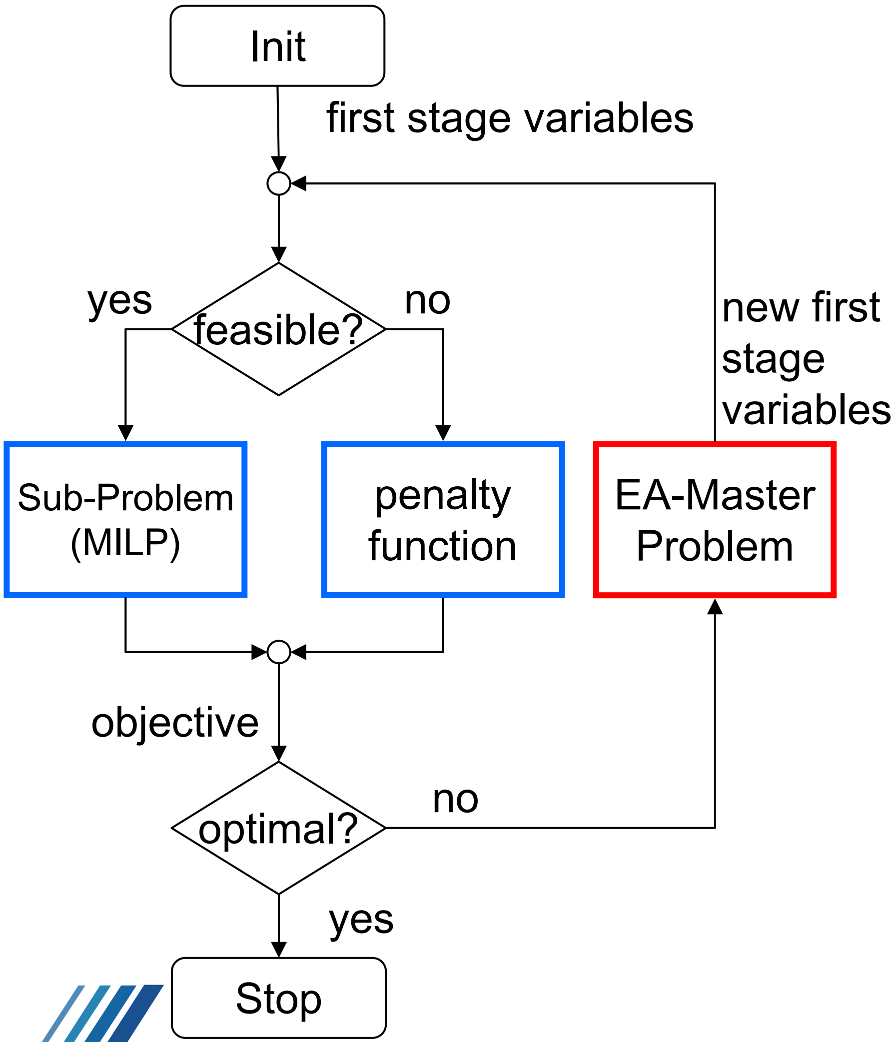
# Mehrproduktanlage: EPS-Prozess



# Quantitative Daten zum Planungsmodell der EPS-Anlage

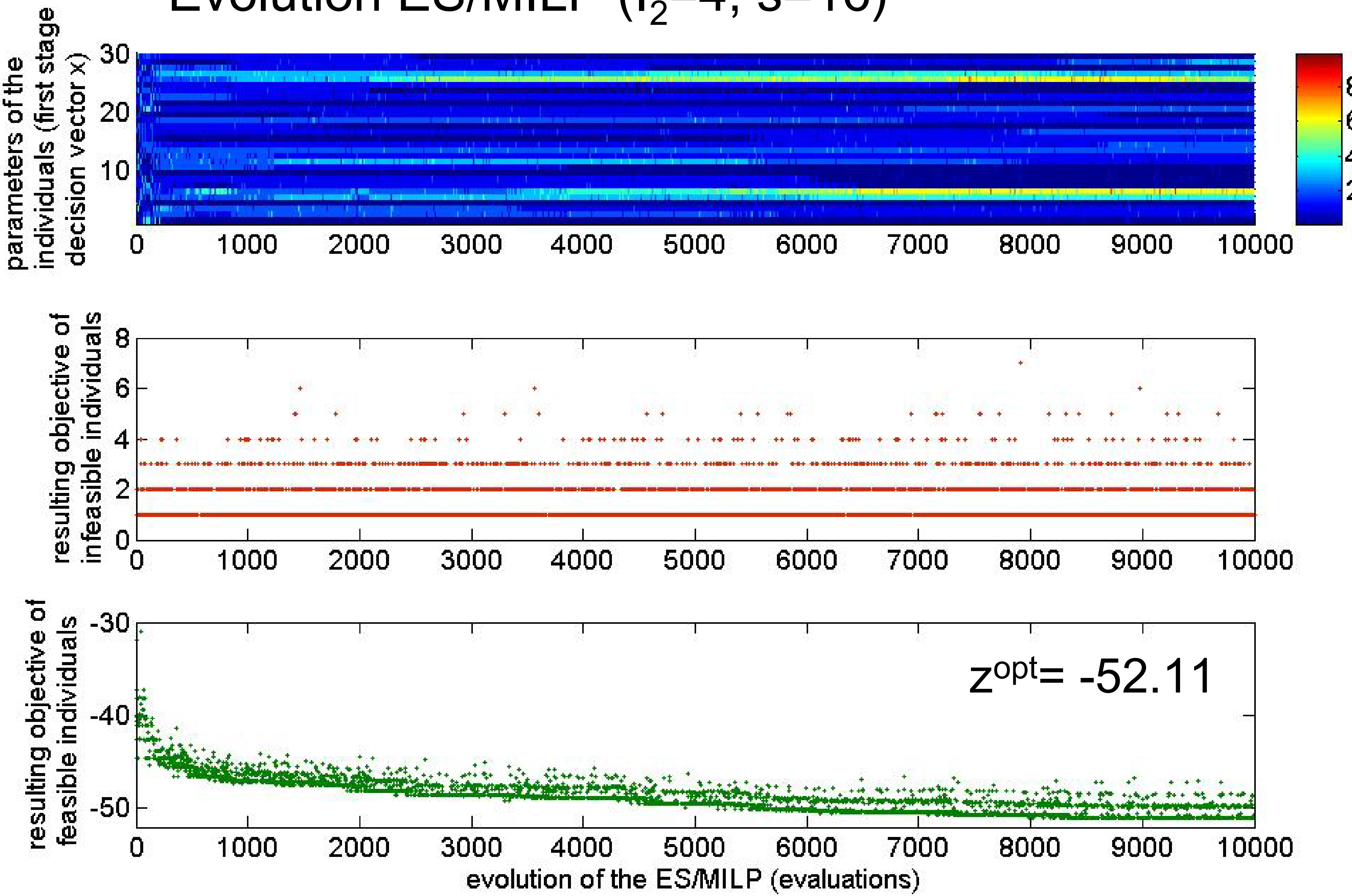
- Erststufe
  - 3 Intervalle a 2 Tage
  - 10 Rezepte pro Intervall (2 Stoffe x 5 Rezepte)
  - Entscheidung: Auswahl der Rezepte
  - $x_i \in X, \quad X \in \Im \in [0;12], \quad i = \{1,\ldots,30\}$
- Zweitstufe
  - 4 Intervalle
  - 16 Szenarien (Bedarf)
- Problemdimension
  - Monolith. 2SIP: 5601 kont. / 1568 int. / 4083 NB.
  - Sub-Problem: 381 kont. / 68 int. / 228 NB.

# Der hybride EA/MILP Algorithmus




- EA für stark beschränkten Lösungsraum von *x*
  - mögl. Lösungen: ~ $10^{30}$
  - zulässige Lösungen: ~$10^{15}$
  - Strafmetrik bei Unzulässigkei
- CPU-Zeiten
  - Penalty: $10^{-2}$ sec.
  - Sub-Probleme: Sekunden
- Getestete Standard EAs
  - Genetische Algorithmus
  - Evolutionsstrategie

# Evolution ES/MILP ($I_2$=4; s=16)



# Zusammenfassung und Ausblick

- Zweistufige Stochastische Programmierung
- Dekomposition (EA/MILP)
- Belegungsplanung eines industriellen Beispiels
- *Lösungszeiten um Größenordnungen unter der eines monolithischem 2SIP*

- Hochspezifischer EA (Entscheidungsbaum)
- Genauigkeit der Sub-Probleme
- Mehrziel-Optimierung: Kosten und Risiko

# Bemerkungen

- Aktuelle Literatur

  - Sand, G.; Engell, S.: *Modelling and solving real-time scheduling problems by stochastic integer programming.* Computers and Chemical Engineering 28 (2004), 1087-1103.
  - Till, J.; Sand, G.; Engell, S.; Emmerich, M.; Schönemann, L.: *A hybrid algorithm for solving two-stage stochastic integer problems by combining evolutionary algorithms and mathematical programming methods.* Proc. European Symposium on Computer Aided Process Engineering (ESCAPE) 15, 29.05.- 01.06. 2005, Barcelona, Spain

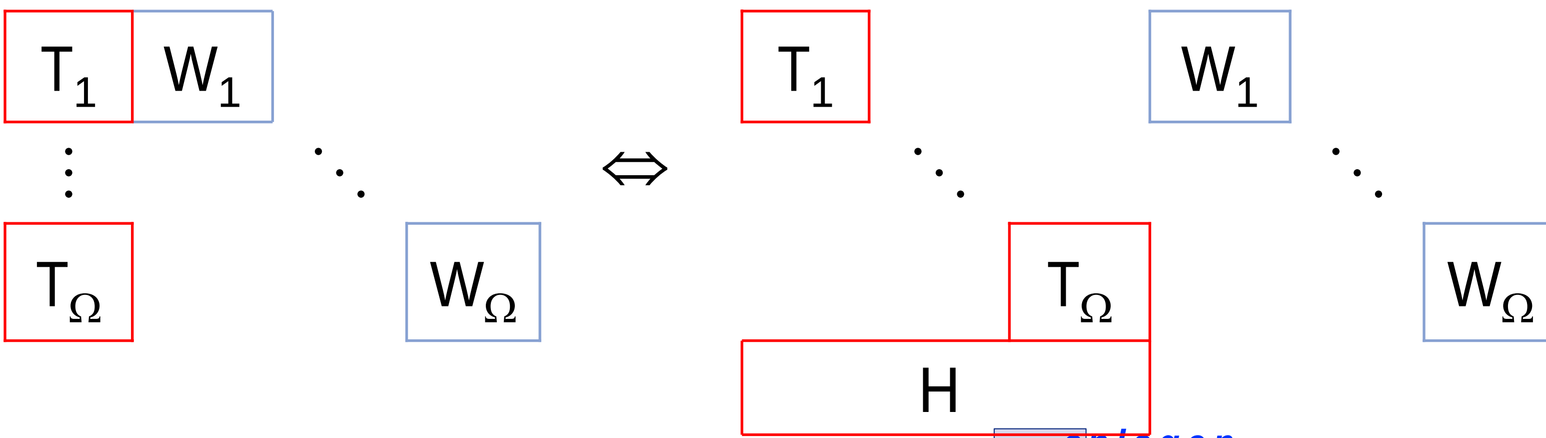
- Danksagung

  - Die Arbeiten werden durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen des Sonderforschungsbereiches 531 “Computational Intelligence”, Teilprojekt C10, gefördert.

# Duale Szenario-Dekomposition (Caroe und Schultz, 1999)

$$z = \min_{x_1,\dots,x_\Omega, y_1,\dots,y_\Omega} \left\{ \begin{array}{l} \sum_{\omega=1}^{\Omega} \pi_\omega \left( c^T x_\omega + q_\omega^T y_\omega \right) \; s.t. \; T_\omega x_\omega + W_\omega y_\omega \le h_\omega, \\ x_\omega \in X, y_\omega \in Y, \omega = 1,\dots,\Omega \\ H: x_\omega = x_{\omega+1}, \omega = 1,\dots,\Omega-1 \end{array} \right\}$$

- H: Nicht-Antizipativitäts-Bedingungen



# Duale Szenario-Dekomposition (Caroe und Schultz, 1999)

- Weglassen von H durch Relaxation bzw. Lagrange Dualproblem D(λ)

$$D(\lambda) = \min_{\substack{x_1,\dots,x_\Omega, \\ y_1,\dots,y_\Omega}} \left\{ \begin{array}{l} \sum_{\omega=1}^{\Omega} \pi_\omega \left( c^T x_\omega + q_\omega^T y_\omega \right) + \lambda^T \left( H_\omega x_\omega \right) s.t.\, T_\omega x_\omega + W_\omega y_\omega \leq h_\omega, \\ x_\omega \in X,\, y_\omega \in Y,\, \omega = 1,\dots,\Omega \end{array} \right\}$$

- Wiederherstellen von H durch Branch and Bound auf x
  - Lösung von Ω unabhängige Sub-Problemen (Szenarien) liefert heuristisch eine zur zulässigen Lösung x: obere Schranke
  - Lösung des Dualproblems: $Z_{LD}$=max D(λ) liefert untere Schranke
  - Dualproblems ist nicht-glattes Optimierungsproblem
- Zulässige Lösung in kurzer Zeit
- Danach wird die meiste Zeit wird zum Generieren von Schranken verwendet

# Evolutionäre Algorithmen (EAs)

- Allgemeiner EA

```
t:=0
initialize Population P(t=0)
evaluate Population P(t=0)
while termination criteria
   not fulfilled do
        recombine P(t)
        mutate P(t)
        evaluate P(t)
        select P(t+1)
        t:=t+1
end while
```

- Integer Evolutionsstratgie (Rudolph, 1994)
  - Repräsentation: Integer-String (30), [0;12]
  - Zulässige initiale Population durch Constraint Propagation
  - $\mu$ =10 Eltern in P(t)
  - Geometrische Mutation der Objektparameter, Schrittweite ($\sigma_{init}$=10%)
  - Diskrete Rekombination und Mutation der von $\sigma$
  - $\lambda$ =70 Nachkommen
  - ($\mu$+ $\lambda$)-Selektion, Höchstalter $\kappa$ = 5

# Anhang 1: Problemgrößen

Table 1. The test problems and their model dimension size.

| *test problem* | *model type* | *2nd stage intervals* | *Ω demand scenarios* | *continuous variables* | *integer variables* | *constraints* |
|---|---|---|---|---|---|---|
| ***EPS-I*** | MONOLITHIC 2SIP | 7 | 128 | 64,001 | 17,920 | 45,539 |
| | single scenario MILP | 7 | 1 | 531 | 110 | 327 |
| ***EPS-II*** | MONOLITHIC 2SIP | 4 | 16 | 5601 | 1,568 | 4,083 |
| | single scenario MILP | 4 | 1 | 381 | 68 | 228 |

# Anhang 2: Ergebnisse EA/MILP

Table 2. Best objective function values after a specified CPU user time.

| | *CPU-time* | *0.5h* | *1h* | *2h* | *3h* | *4h* | R-2SIP | PI-2SIP |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| ***EPS-I*** | 2SIP CPLEX *obj* | +59.75* | +59.75* | +59.75* | +59.75* | +59.75* | -92.48 | -81.92 |
| | GA/MILP *obj* | -74.68 | -74.71 | -74.71 | -75.64 | -75.64 | -- | -- |
| | *(evaluations)* | (25) | (39) | (141) | (252) | (336) | | |
| | **ES/MILP *OBJ*** | -76.24 | -76.24 | -76.52 | -76.52 | -76.63 | -- | -- |
| | ***(EVALUATIONS)*** | (33) | (88) | (181) | (254) | (314) | | |
| ***EPS-II*** | 2SIP CPLEX *obj* | -46.75 | -46.75 | -48.14 | -48.14 | -48.14 | -62.22 | -52.11 |
| | GA/MILP *obj* | -45.82 | -47.28 | -48.12 | -48.12 | -48.12 | -- | -- |
| | *(evaluations)* | (1098) | (2159) | (4437) | (6587) | (8722) | | |
| | **ES/MILP *OBJ*** | -47.41 | -47.56 | -49.5 | -50.41 | -51.03 | -- | -- |
| | ***(EVALUATIONS)*** | (878) | (1720) | (4769) | (6787) | (8911) | | |

* Trivial solution, all integers are equal to zero.

# Anhang: Weiterführende Literatur


- Beyer, H.-G.; Schwefel, H.-P.: Evolution strategies - A comprehensive introduction, Natural Computing, 1, 3-52, 2002.
- Birge, J. F.; Louveaux, F.: Introduction to stochastic programming. Springer, New York, 1997.
- Carøe, C.C.; Schultz, R.: Dual decomposition in stochastic integer programming. Operations Research Letters 24 (1999), 37-45.
- CPLEX: Using the CPLEX callable library. ILOG Inc., Mountain View, CA, 2002.
- Deb, K.: Multi-Objective Optimization using Evolutionary Algorithms. Wiley, Chichester, 2001.
- Emmerich, M.; Hosenberg, R.: TEA - A Toolbox for the Design of Parallel Evolutionary Algorithms in C++, Tech. Report, CI-106/01, DFG-SFB 531 , University of Dortmund, 2000.
- Goldberg, David E.: Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning. Addison-Wesley, Reading, Mass., 1998.
- Rudolph, G.: An Evolutionary Algorithm for Integer Programming. In: Davidor, Y.; Schwefel, H.-P.; Männer, R. (Hrsg.) : Parallel problem Solving from Nature - PPSN III Lecture Notes in Computer Science., Springer, Berlin, 1994, 193-197.
- Sahinidis, N. V.: Optimization under uncertainty: state-of-the-art and opportunities. Computers and Chemical Engineering 28 (2004), 971-983.