Optimieren (II)

1. Allgemeines und Übersicht zur Modellierung des Optimierens

2. Parameteroptimierung *eindimensionaler* Systeme

2.1 Zielfunktion ist analytische bekannt
2.2 Zielfunktion liegt *nicht* analytisch vor
2.2.1 Unsicherheitsintervall
2.2.2 Simultane Suchmethoden
2.2.3 Sequentielle Suchmethoden
2.2.3.1 *Fibonacci*-Zahlen
2.2.3.2 *Fibonacci*-Suchmethode
2.2.3.3 Suchmethode des Goldenen Schnittes

zu 1.:

- Bei der Verwendung mathematischer Modelle geht man allgemein wie folgt vor:
  1. Festlegung der Grenzen des zu optimierenden Systems
  2. Auswahl einer Zielfunktion
  3. Ermittlung des Maximums oder Minimums der Zielfunktion in Abhängigkeit einer bzw. mehrerer Prozeßvariablen oder eines Funktionsverlaufs der Prozeßvariablen

- Schwierigkeiten:
  - Extremalwert der Zielfunktion kann außerhalb des erlaubten Variationsbereiches der Prozeßvariablen liegen
  - Variationsbereich kann beschränkt sein infolge der Eigenschaften von Reaktanden, infolge von Stoff- und Wärmetransportvorgängen im Reaktor oder infolge von Werkstoffproblemen → sog. Nebenbedingungen der Optimierung
  - mehrere Extrema
  - bei der Optimierung von Gesamtanlagen treten innerhalb einer großen Optimierungsschleife i. a. weitere Suboptimierungen einzelner Verfahrensstufen auf

zu 2: Parameteroptimierung eindimensionaler Systeme

Hier hängt die Zielfunktion nur von einer Prozeßvariablen ab und ist unimodal, d. h. sie besitzt nur ein Maximum oder ein Minimum.

zu 2.1: Zielfunktion ist analytisch bekannt

$y = f(x_1)$ oder y: Zielfunktion

$y = f(x_1)_{x_2, x_3 \ldots, x_n}$ $x_1, x_2 \ldots, x_n$: Prozeßvariable

Optimum der Zielfunktion y läßt sich nach $\perp$ od. $\left(\frac{\partial y}{\partial x_1}\right)_{x_2, x_3, \ldots} = 0$

$\frac{dy}{dx_1} = 0 \Rightarrow x_1^*$: Optimale Prozeßvariable

berechnen. Beispiel: Bestimmung der optimalen ~~Kesselzahl~~ Anzahl von CSTRs q* für minimale Investitionskosten (K_I) einer Kaskade, wenn Reaktion nach 1. Ordnung ($n=1$) abläuft und der Endumsatz U = 0,96 betragen soll. Die Investitionskosten K_I eines ~~Kessels~~ CSTR sollen proportional dem Kesselvolumen (V_R) hoch 2/3 sein: $V_R^{2/3} \sim K_I$

Opt. II

Wegen $\bar{t} = \frac{V_R}{\dot{V}}$ ist für eine Kaskade mit q Kessel:

$$K_I(q) = a\, q\, \bar{t}^{2/3} \dot{V}^{2/3} \quad \text{mit } a = 1\ \frac{€}{m^2} \qquad (a)$$

$Y \equiv K_I$
$X \equiv q$
$a = \frac{1}{1-U}$

$\dot{V}[m^3/s]$: Durchsatz

Außerdem gilt:

$$U = 1-\left(\frac{1}{1+k\bar{t}}\right)^q \Rightarrow \bar{t} = \frac{1}{k}\left[\left(\frac{1}{1-U}\right)^{1/q} - 1\right] \qquad (b)$$

$Y = a^{1/x}$
$Y' = a^{1/x} \ln a \left(\frac{-1}{x^2}\right)$

Eliminierung von $\bar{t}$ durch (b) liefert:

$$K_I\ (q) = \frac{\dot{V}^{2/3} a}{k^{2/3}}\, q \left[\left(\frac{1}{1-U}\right)^{1/q} - 1\right]^{2/3}$$

Aus $\frac{dK_I}{dq} = 0$ folgt $\frac{2}{3}\left(\frac{1}{1-U}\right)^{1/q} \ln\frac{1}{1-U} = q\left[\left(\frac{1}{1-U}\right)^{1/q} - 1\right] \Rightarrow$ $\boxed{q^* = 4 \text{ für } U = 0{,}96}$

↳ Produktregel

zu 2.2: Zielfunktion liegt nicht analytisch vor

zu 2.2.1: Unsicherheitsintervall

Die Lage des Extremum wird durch möglichst wenig Versuche über einen optimalen Versuchsplan gesucht.

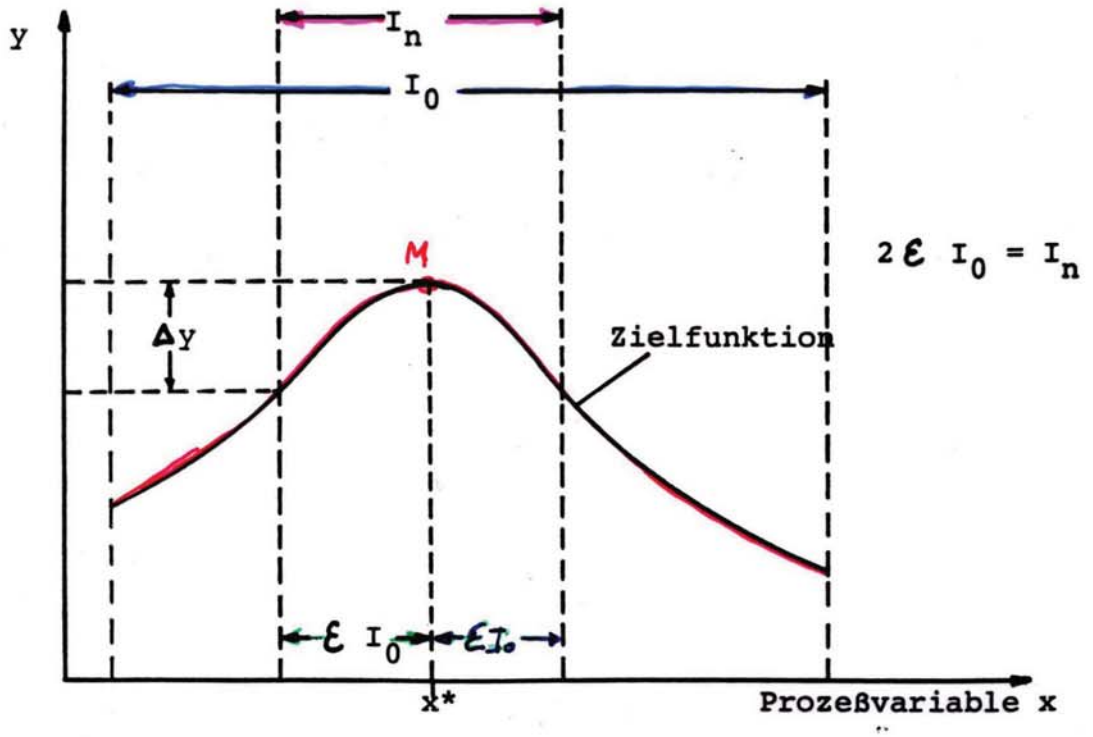

Abb. 1 Anfangsintervall I_o, Endintervall I_n, Auflösung εI_o und Unterscheidbarkeit Δy nach n Versuchen bei der experimentellen Ermittlung des Maximums einer Zielfunktion.

→ kann nicht beliebig klein sein

I_n: Unsicherheitsintervall (Ungewißheitsintervall) oder Endintervall soll möglichst klein sein!

Opt. II

zu 2.2.2: Simultane Suchmethode

Alle Experimente werden gleichzeitig durchgeführt, ohne Berücksichtigung vorangegangener Versuche.

Bei der äquidistanten Suchmethode ist

die Anzahl n von Versuchen, die mindestens für die Optimum-suche erforderlich ist, berechenbar nach:

$$n \geqq 2 \underbrace{\frac{I_o}{I_n}}_{\text{Reduktionsverhältnis}} - 1 \quad \text{, mit dem Abstand } \frac{I_o}{n+1} \qquad (1)$$

Beispiel:

Ein Optimum wird zwischen 250°C und 800°C vermutet. Soll also das Anfangsintervall I_0 = 550°C auf ein Endintervall I_n = 10°C verkürzt werden, so sind folglich

$$\boxed{n} = 2 \cdot \frac{550°C}{10°C} - 1 = \boxed{109}$$ Versuche jeweils

im Abstand $\frac{I_o}{n+1}$ = 5°C auszuführen.

Umgekehrt läßt sich mit der Beziehung (1) das Endintervall I_n berechnen, wenn die maximale Versuchszahl n vorgegeben ist.

$$I_n \geqq \frac{2}{n+1} I_0 \qquad (2)$$

Beispiel:

für n=49 wird $I_n \geqq \frac{2 \; 550°C}{50} = 22°C$

n	$\frac{I_0}{n+1}$	I_n	$\varepsilon = \frac{1}{2}\frac{I_n}{I_0}$
—— 4	0.2	0.4	0.2
- - - 9	0.1	0.2	0.1

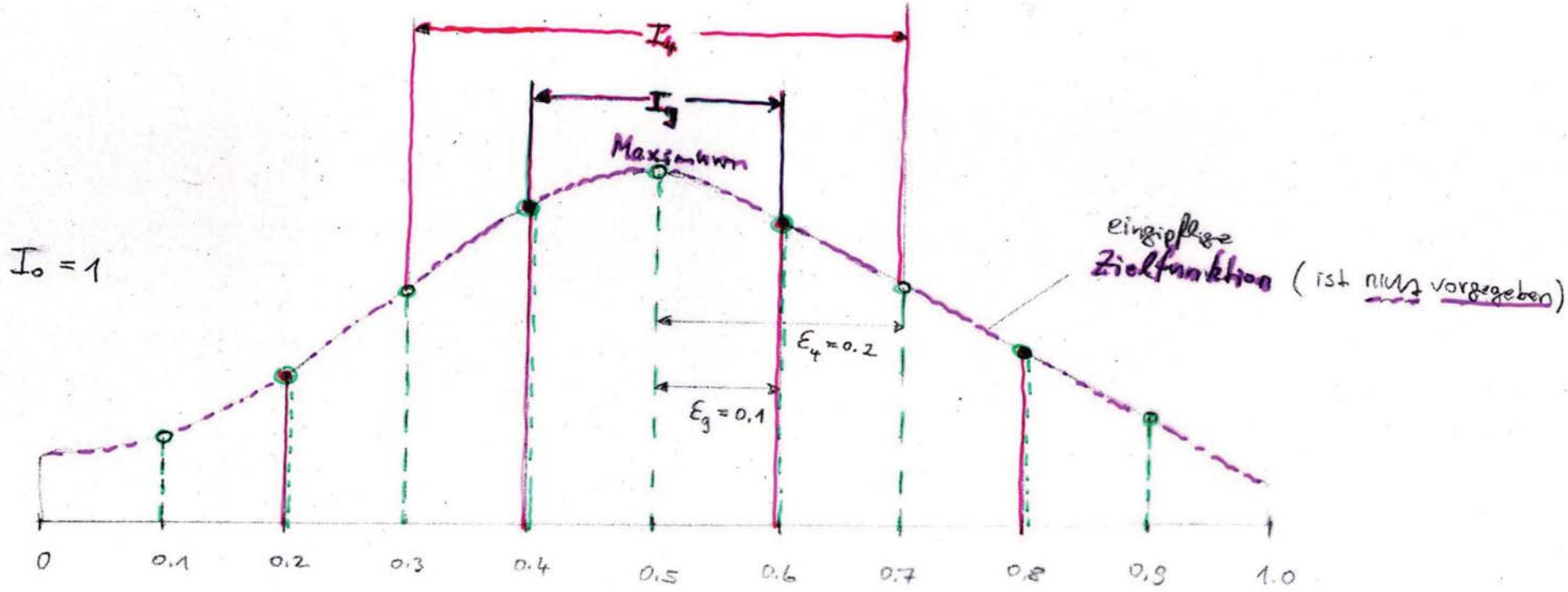

Abb. 2: Äquidistante Suchmethode für $n = 4, 9$ Versuche

	n	Abstand $\frac{I_0}{n+1}$	I_n	$\varepsilon = \frac{1}{2}\frac{I_n}{I_0}$
	4	0,200	0,40	0,200
·····	5	0,167	0,33	0,165
- - - -	7	0,125	0,25	0,125

$I_0 = 1$

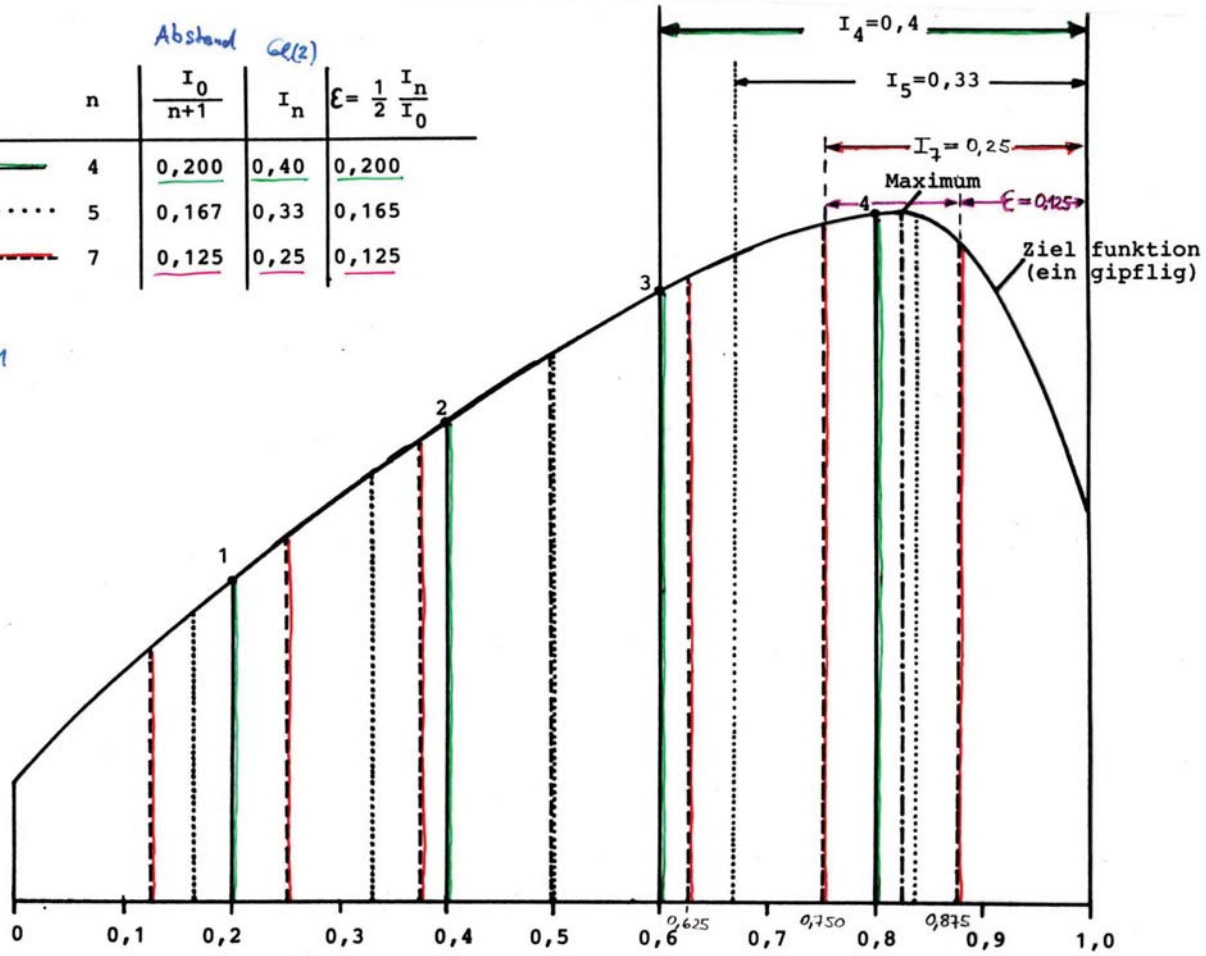

Abb. 2: Äquidistante Suchmethode für n = 4,5 und 7 Versuche.

Opt. II

Opt. II

zu 2.2.3: **Sequentielle Suchmethoden**

Die Versuche werden nacheinander durchgeführt, so daß Erfahrungen aus den vorangehenden Versuchen berücksichtigt werden können.

Die Zahl n der Versuche muß bekannt sein.

Nicht-äquidistante Suchmethode. Fibonacci (Leonardo von Pisa, 1202)
Kiefer (1953)

zu 2.2.3.1: **Fibonacci-Zahlen**

Eine beliebige Fibonacci-Zahl Fi_n ist stets die Summe zweier unmittelbar vorangehender Fibonacci-Zahlen Fi_{n-1} und Fi_{n-2}.

$$Fi_n = Fi_{n-1} + Fi_{n-2} \qquad \text{für } n=2,3 \ldots \qquad (3a)$$

mit den Anfangsbedingungen

$$Fi_0 = Fi_1 = 1 \qquad \text{für } n=0,1 \qquad (3b)$$

$$Fi_n^{(n)} = \frac{1}{\sqrt{5}} \left[\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{n+1} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^{n+1} \right] \qquad (4)$$

Tabelle 1: Fibonacci-Zahlen für n=0,1,...20

n	Fi_n	n	Fi_n
0	1	11	144
1	1	12	233
2	2	13	377
3	3	14	610
4	5	15	987
5	8	16	1597
6	13	17	2584
7	21	18	4181
8	34	19	6765
9	55	20	10946
10	89		

Herleitung von (4)

Die partikuläre Lösung von (3a) wird als

$$Fi_n = m^n \qquad (5) \qquad \text{angenommen.}$$

(5) in (3a) liefert

$$m^n = m^{n-1} + m^{n-2} \qquad : m^{n-2}$$

$$m^2 = m + 1 \quad \Rightarrow$$

$$m_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \quad (6a) \qquad m_2 = \frac{1-\sqrt{5}}{2} \quad (6b)$$

Durch Linearkombination von (6a) und (6b) erhält man die allgemeine Lösung von (3a):

$$Fi_n = a \cdot m_1^n + b \cdot m_2^n \qquad (7)$$

mit den Konstanten a und b, die aus folgenden Randbedingungen bestimmt werden:

$$n = 0: \; Fi_0 = 1 \;\Rightarrow\; a + b = 1 \qquad (8a)$$

$$n = 1: \; Fi_1 = 1 \;\Rightarrow\; a \cdot m_1 + b \cdot m_2 = 1 \qquad (8b)$$

Aus (8) folgt:

$$a = \frac{1+\sqrt{5}}{2\sqrt{5}} \quad \text{und} \quad b = -\frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}$$

Einsetzen von a und b in Gl.(7) liefert Gl.(4).

zu 2.2.3.2: Fibonacci-Suchmethode

Das Intervall ⟨a,b⟩ wird dimensionslos gemacht und auf ⟨0,1⟩ normiert.

Zahl n der Versuche sei vorgegeben. In Abb.3 ist die Methode für n=4 dargestellt.

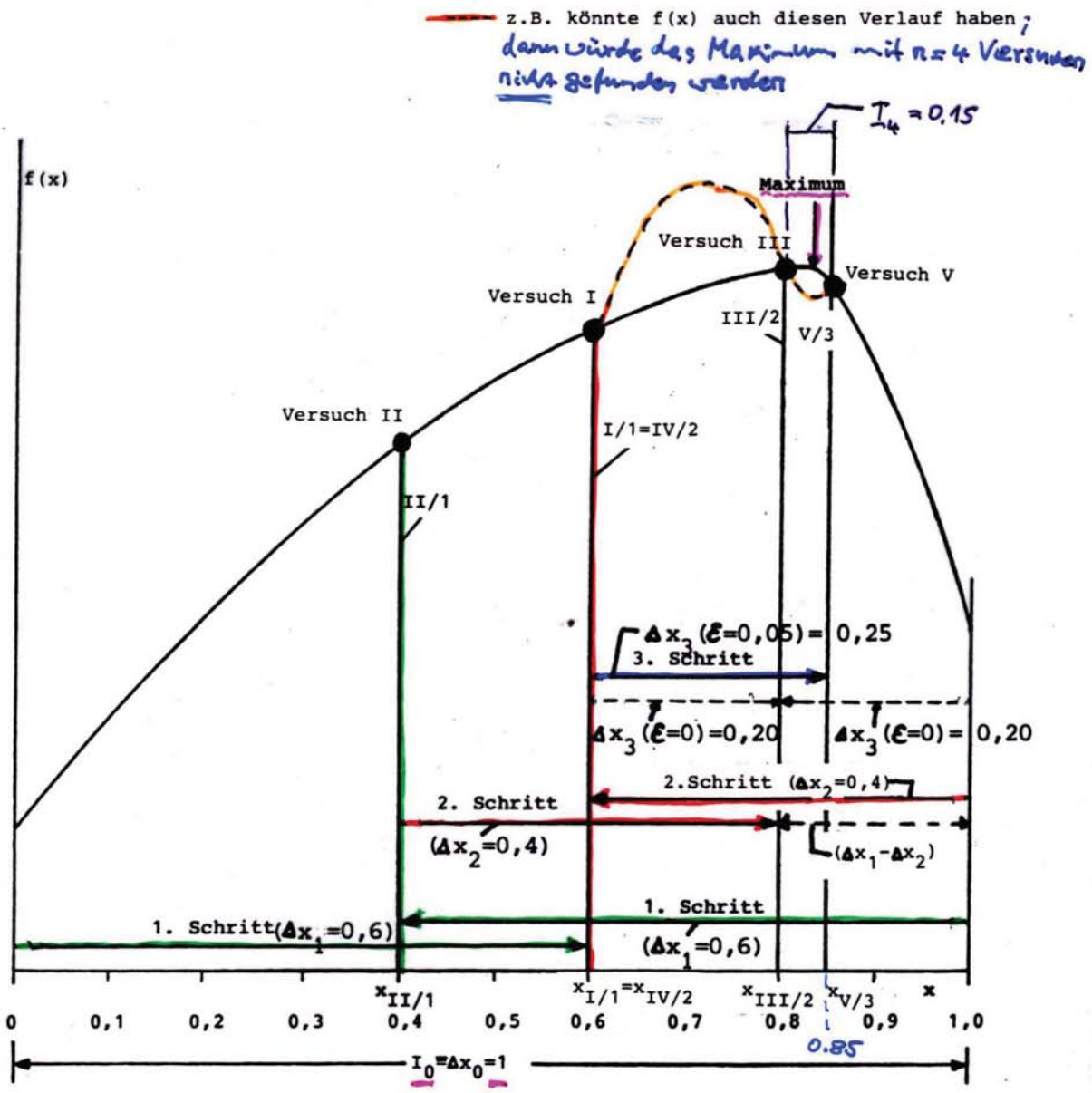

Abb. 3 : Fibonacci-Suchmethode für n=4 Versuche (I,II,III,V),
$\varepsilon=0.05$; $I_n=0.15 \cdot I_0$; $I_0=1$
↳ Gl. (13)

1.Schritt: Versuche I,II ($\Delta x_1=0.6$)

2.Schritt: Versuche III,IV≡I ($\Delta x_2=0.4$)

3.Schritt: Versuch V (wenn $\varepsilon=0,05$) ($\Delta x_3=0.25$)

1. Schritt

Von den Enden des Intervalls $\langle 0,1 \rangle$ werden die jeweils gleichen Abstände

$$\Delta x_1 = \frac{Fi_{n-1}}{Fi_n} \Delta x_0 \qquad ; \Delta x_1 = \frac{3}{5} = 0{,}6 \quad \text{für } n=4 \qquad (9)$$

abgetragen. Dies führt zu den Versuchspunkten I, II die bei

$$x_{I/1} = \boxed{\Delta x_1} = \boxed{\frac{Fi_{n-1}}{Fi_n}} = 0{,}6 \text{ und bei}$$

$$x_{II/1} = 1 - \Delta x_1 = 1 - \frac{Fi_{n-1}}{Fi_n} \overset{\text{Gl.(3a)}}{=} \frac{Fi_{n-2}}{Fi_n} \quad ; X_{II/1} = \frac{2}{5} = 0{,}4 \quad \text{für } n=4$$

liegen. An den Stellen $x_{I/1}$ und $x_{II/1}$ werden die Ergebnisse der beiden Versuche I u. II, d.h. die Zielfunktionen $f_{I/1}(x_{I/1})$ und $f_{II/1}(x_{II/1})$ verglichen. Für $f_I > f_{II}$ kann man das Intervall $\langle 0, x_{II/1} \rangle$ eliminieren.

2. Schritt

Im verbleibenden Intervall $\langle x_{II/1}, 1 \rangle$ wird analog verfahren. Die Abstände von den neuen Intervallenden sind jetzt:

$$\boxed{\Delta x_2} = \frac{Fi_{n-2}}{Fi_{n-1}} \Delta x_1 \underset{\text{Gl.(9)}}{=} \boxed{\frac{Fi_{n-2}}{Fi_n}} \quad ; \Delta x_2 = \frac{2}{5} = 0{,}4 \quad \text{für } n=4 \qquad (10)$$

und führen zu zwei weiteren Versuchspunkten III, IV bei:

$$x_{III/2} = 1 - (\Delta x_1 - \Delta x_2) \underset{\text{Gln.(9),(10)}}{=} 1 - \left(\frac{Fi_{n-1}}{Fi_n} - \frac{Fi_{n-2}}{Fi_n}\right) \overset{\text{Gl.(3a)}}{=} 2\,\frac{Fi_{n-2}}{Fi_n} = 0{,}8$$

$$x_{IV/2} = 1 - \Delta x_2 \underset{\text{Gl.(10)}}{=} 1 - \frac{Fi_{n-2}}{Fi_n} = \frac{Fi_n - Fi_{n-2}}{Fi_n} \underset{\text{Gl.(3a)}}{=} \frac{Fi_{n-1}}{Fi_n} = x_{I/1} = 0{,}6$$

Es ist also nur der Funktionswert $f_{III/2}(x_{III/2})$ neu zu ermitteln, d.h. Versuch III durchzuführen. Für $f_{III/2} > f_{IV/2}$ kann das Maximum nur noch zwischen $\langle x_{IV/2}, 1 \rangle$ liegen.

3. Schritt (für n=4 letzter Schritt)

Allgemein gilt für den $\boxed{p.}$ Schritt aus (9),(10):

$$\boxed{\Delta x_p} \underset{\text{analog Gl.(10)}}{=} \boxed{\frac{Fi_{n-p}}{Fi_n}} \qquad (11)$$

oder für p=3

$$\Delta x_3 = \frac{Fi_{n-3}}{Fi_n} \; ; \qquad \Delta x_3 = \frac{1}{5} = 0{,}2$$

$\Delta x_{n-1} = \frac{Fi_{n-(n-1)}}{Fi_n} = \frac{1}{Fi_n}$ Opt. II

Die Abstände im letzten Schritt p=n-1 werden nicht nach (11) sondern nach:

$\frac{I_0}{I_n} \ll \frac{n+1}{2}$ $\quad \Delta x_{n-1} = \frac{1}{Fi_n} + \varepsilon \quad ; \quad x_{V/3} = \frac{Fi_{n-1}+1}{Fi_n} + \varepsilon \; (= x_{I/1} + \Delta x_3)$

ermittelt. Also $\Delta x_3 = 1/5 + 0{,}05 = 0{,}25$ für n=4, $\varepsilon = 0{,}05$ bezüglich des Intervalls $\langle x_{IV/2}, 1 \rangle$. Für $f_{III/2} > f_{V/3}$ liegt Maximum in $\langle III/2, V/3 \rangle$.

Bei der Fibonacci-Suchmethode läßt sich die erforderliche Zahl n der Versuche aus

$$\frac{I_0}{I_n} = \frac{Fi_{n+1}}{\varepsilon Fi_{n-1} + 1} \qquad (13)$$

berechnen. Dieser Zusammenhang ist in Abb. 4 (für $\varepsilon = 0$) graphisch dargestellt, der aus den Gln. (4) und (13) folgt:

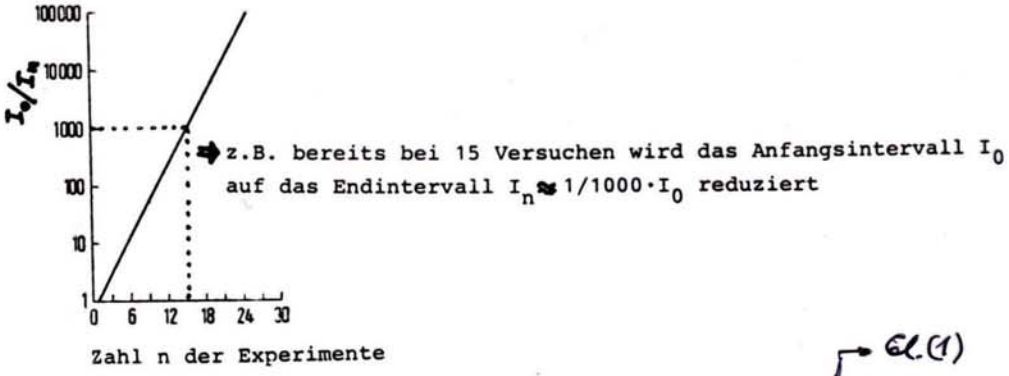

Abb. 4: Abhängigkeit des Reduktionsverhältnisses I_0/I_n von der Zahl der Experimente bei der Fibonacci-Suchmethode

Gl. (1)

$\frac{I_0}{I_n} \leq \frac{n+1}{2}$

statt n = 109 Vers.

Beispiel (aus Abschnitt 2.2.2):

Für $I_0/I_n = 550°C/10°C = 55$ genügen bereits n=8 Versuche, wie sich auch aus (13) (für $\varepsilon = 0$) ergibt, da $55 = Fi_{n+1} = Fi_9$ ist.

$\varepsilon = 0$, in Gl. (13)

$I_0/I_n = Fi_n(n)$

1.2.3.3 Suchmethode des goldenen Schnittes (nicht äquidistante Suchmethode

Wenn Zahl n der Versuchspunkte nicht festlegbar ist. Hierbei wird sukzessive jedes übriggebliebene Intervall um den Faktor $\frac{\sqrt{5}-1}{2} < 1$ (Goldener Schnitt) oder um einen anderen konstanten Faktor, z.B. 1/2 (Intervall-Halbierungsmethode) verkürzt, d.h. multipliziert.

Häufig führt dann zur Ermittlung des Optimums eine Kombination mit der Fibonacci-Methode zum Ziel.