

具有不等式路径约束的微分代数方程系统的动态优化

孙燕¹ 张弛¹ 路兴龙¹ 王靖戈² 付俊¹

摘要 针对具有不等式路径约束的微分代数方程 (Differential-algebraic equations, DAE) 系统的动态优化问题, 通常将 DAE 中的等式路径约束进行微分处理, 或者将其转化为点约束或不等式约束进行求解. 前者需要考虑初值条件的相容性或增加约束, 在变量间耦合度较高的情况下这种转化求解方法是不可行的; 后者将等式约束转化为其他类型的约束会增加约束条件, 增加了求解难度. 为了克服该缺点, 本文提出了结合后向差分法对 DAE 直接处理来求解上述动态优化问题的方法. 首先利用控制向量参数化方法将无限维的最优控制问题转化为有限维的最优控制问题, 再利用分点离散法用有限个内点约束去代替原不等式路径约束, 最后用序列二次规划 (Sequential quadratic programming, SQP) 法使得在有限步数的迭代下, 得到满足用户指定的路径约束违反容忍度下的 KKT (Karush Kuhn Tucker) 最优点. 理论上证明了该算法在有限步内收敛. 最后将所提出的方法应用在具有不等式路径约束的微分代数方程系统中进行仿真, 结果验证了该方法的有效性.

关键词 不等式路径约束, 微分代数方程, 后向差分法, 分点离散法, 动态优化

引用格式 孙燕, 张弛, 路兴龙, 王靖戈, 付俊. 具有不等式路径约束的微分代数方程系统的动态优化. 自动化学报, 2019, 45(5): 897–905

DOI 10.16383/j.aas.c180302

Dynamic Optimization of Differential-algebraic Equations With Inequality Path Constraints

SUN Yan¹ ZHANG Chi¹ LU Xing-Long¹ WANG Jing-Ge² FU Jun¹

Abstract For dynamic optimization of differential algebraic systems with inequality path constraints, the equality constraint in differential-algebraic equations (DAE) is often differentiated or transformed into point constraints or inequality constraints to solve. As for the former, the compatibility of initial conditions needs to be checked or more constraints are added, making the original optimization problem infeasible in some cases. For the latter, the way that equality constraint is converted to other types of constraints increases the difficulty of solving. In order to overcome the above problems, a new method is proposed to solve the above problem directly based on the backward differentiation formula. Firstly, the control vector parameterization is used to convert the optimal control problem of infinite dimensions into a finite dimensional one. Then, a set of interior-time points by using the pointwise discretization method are used to replace the original inequality path constraints. Finally, the sequential quadratic programming (SQP) is used to locate the Karush Kuhn Tucker (KKT) points within finite-stepped iterations. Proof is provided for the finite convergence of the algorithm. The dynamic optimization algorithm is applied to the differential algebraic equation systems with inequality path constraint, and simulation studies are carried out to verify the effectiveness of the proposed method for the differential algebraic systems with inequality path constraints.

Key words Inequality path constraint, differential-algebraic equations (DAE), backward differentiation formula, pointwise discretization, dynamic optimization

Citation Sun Yan, Zhang Chi, Lu Xing-Long, Wang Jing-Ge, Fu Jun. Dynamic optimization of differential-algebraic equations with inequality path constraints. *Acta Automatica Sinica*, 2019, 45(5): 897–905

动态优化是约束中含有微分或差分方程的一类

收稿日期 2018-05-14 录用日期 2018-10-06
Manuscript received May 14, 2018; accepted October 6, 2018
国家自然科学基金 (61473063, 61503041, 61590922) 和中央高校基本科研专项资金 (N150802001) 资助
Supported by Natural Science Foundations of China (61473063, 61503041, 61590922) and the Fundamental Research Funds for the Central Universities (N150802001)

本文责任编辑 何海波
Recommended by Associate Editor HE Hai-Bo
1. 东北大学流程工业综合自动化国家重点实验室 沈阳 110819
2. 东北大学信息科学与工程学院 沈阳 110819
1. State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern University, Shenyang 110819
2. Institute of Information Science and Engineering, Northeast-

ern University, Shenyang 110819
数学规划问题^[1-3], 其广泛存在于电力系统^[4-5]、石油化工^[6-7]、生物工程^[8-9]、清洁能源^[10-11] 等. 目前在化工过程中基于常微分方程模型的动态优化问题不仅涉及微分方程, 还包括代数方程约束, 这样的系统统称为微分代数系统. 此外, 实际的流程工业过程中, 需要某些状态变量或控制变量的函数在其全部运行过程中或部分运行时间内不能超过约束的设定值, 来保证工业过程的质量和安全性, 这就需要考虑具有不等式路径约束的动态优化问题.

ern University, Shenyang 110819

动态优化问题 (Dynamic optimization problem, DOP) 的数值求解算法通常分为直接法^[12-13]和间接法^[14-15]. 间接法通过求解原问题的最优性条件 (即必要条件), 间接地获得原问题的最优解. 但是对于相对复杂的问题, 比如包含不等式约束的最优控制问题, 由于状态变量或者控制变量在约束中存在, 求解极为困难^[16]. 此外, 复杂的非线性系统最优性条件很难被定义, 且两点边值问题的求解过程中收敛域可能很小^[17]. 直接法是通过将控制变量离散化, 即控制向量参数化^[18] (Control vector parameterization, CVP), 或控制与状态变量同时离散化, 即正交配置 (Orthogonal collocation, OC), 将无限维的最优控制问题转化为有限维的非线性最优优化问题. 由于 OC 方法的计算复杂度较高, 本文采用 CVP 方法.

针对具有不等式路径约束的微分代数方程 (Differential-algebraic equations, DAE) 系统的动态优化问题, 采用直接或间接法对其进行转化后, 仍需要对等式路径约束和不等式路径约束进行处理. 胡云卿等将等式路径约束进行微分^[19], 将原问题转化为具有不等式的常微分方程 (Ordinary differential equations, ODE) 动态优化问题, 再使用基于 ODE 的动态优化方法进行处理, 但是 DAE 到 ODE 的转化过程中需要考虑初值条件的相容性, 并且无法在理论上证明有关解的存在性和唯一性^[20], 此外, 当约束中变量的幂较高或者变量间耦合程度较高的情况下是不可行的. Pontryagin 等将等式路径约束转化为两点边值问题^[21] 进行求解, 该方法需要增加约束条件, 增加了求解难度. Fabien 将等式约束转化为终点约束^[22], 这样会导致问题的维数变得很大, 需要对转化后的问题进行降维处理. 所以间接地处理 DAE 中的等式路径约束会引起一系列的问题, 因此本文采用后向差分法 (Backward differentiation formula, BDF)^[23] 直接求解 DAE.

对于不等式路径约束, 文献 [24] 采用多重打靶 (Multiple shooting, MS) 法, 将不等式路径约束转化为分段的点约束, 每次打靶均需要给出对应打靶分段内该点约束涉及的控制变量和各状态变量合理的范围, 各变量段间的连续还需要一个合适的系数保证, 不然很难得到理想的结果. 文献 [25] 对不等式路径约束的积极与否进行判断, 若不等式路径约束为积极约束, 则结合微分方程在 DAE 求解器中进行求解, 否则不考虑该不积极约束; 不等式路径约束为积极约束时, DAE 阶次可能很高, 所以该方法对 DAE 求解器要求较高. Jacobson 等提出的松弛变量法^[26], 通过增加松弛变量将不等式路径约束转化为相应的等式路径约束, 但是这种方法难以处理不等式路径约束数比控制变量数多的问题; Vassiliadis

等^[27] 通过离散化将约束项在问题时间约束段内选择有限个内点进行离散化, 通过惩罚函数法将约束违反的积分设为 0 来保证约束的无违反, 但是此方法可能会在 NLP 问题中引进较多的约束条件; Floudas 提出的凸函数近似法^[28] 主要应用于静态系统, Chachuat 等^[29] 将其改进应用在动态系统的最优控制上, 此方法求得的数值解虽然可以严格满足不等式路径约束, 但算法复杂度较高; Rehbock 等提出的精确罚函数法^[30] 能够成功求解具有不等式路径约束的复杂最优控制问题^[31], 该方法虽然在算法复杂度上有所改善但是不能严格满足不等式约束, 且约束违反程度不能确定; Liu 等^[32-33] 提出了一种新颖的光滑化精确惩罚函数法, 将不等式路径约束转化为一个光滑化惩罚项加到目标函数中, 将问题转变成一个无约束优化问题; 由于目标函数表达式会因不等式约束的违反程度随时间而改变, 所以如何获取问题转化后目标函数的梯度信息是一个难点. 2005 年 Chen 在之前的 CVP-OC 混合方法基础上进一步提出了有限收敛法^[34], 问题初始求解时不考虑不等式路径约束的最优控制问题, 将初始所得解做为初始解以此优化原问题, 这样可以使得优化过程得以优化. 然而该方法受限于带有不等式路径约束的 ODE 动态优化问题, 对于带有不等式路径约束的非 0 阶 DAE 动态系统的适用性有待探究.

因此, 本文针对具有不等式路径约束的 DAE 系统的动态优化问题, 采用只对控制变量进行参数化的 CVP 方法, 将无限维的 DOP 转化为有限维的 DOP, 仍然保留系统的动态特性. 通过分点离散化方法将不等式路径约束转化为有限的内点约束进行处理, 设计了在指定的路径约束违反容忍度下通过有限步迭代获得 KKT (Karush Kuhn Tucker) 最优点的算法. 然后利用 BDF 方法求解 DAE 方程组, 再采用序列二次规划法 (Sequential quadratic programming, SQP) 获得满足不等式路径约束的最优解. 最后将该算法应用在工业化工问题中, 仿真结果表明了该算法可以获得最优控制轨迹并有着良好的路径约束效果及收敛性.

本文的主要贡献如下:

- 1) 采用后向差分法直接求解 DAE, 避免将 DAE 化为 ODE 的过程中会产生的解的相容性、维数增加等前文所述问题.
- 2) 所采用的处理路径约束的方法不会改变目标函数的结构形式. 并且可以在指定路径约束违反的容忍度的条件下, 经过有限步迭代得到最优解.

本文结构如下: 第 1 节对具有不等式路径约束的 DAE 系统的最优控制问题进行描述. 第 2 节阐述本文所采用的求解动态优化问题和处理不等式路径约束的算法. 第 3 节将算法应用于工业化工问题.

最后对本文所做工作进行了总结并提出了对未来可以改进的方面进行了展望.

1 问题描述

本文考虑的具有不等式路径约束的 DAE 系统的最优控制问题, 根据 Biegler^[35] 给出的动态优化问题描述形式添加不等式路径约束条件, 记为 P1, 给出数学描述如下:

$$\min_{\mathbf{x}(t), \mathbf{v}(t)} J = \phi[\mathbf{x}(t_f), \mathbf{y}(t_f)] + \int_{t_0}^{t_f} \ell[\mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{v}(t)] dt \quad (1)$$

s. t.

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = f[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{v}(t)] \quad (2)$$

$$g[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{v}(t)] = 0 \quad (3)$$

$$h[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{v}(t)] \leq 0 \quad (4)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (5)$$

$$\mathbf{u}_l \leq \mathbf{v}(t) \leq \mathbf{u}_u \quad (6)$$

$$t_0 \leq t \leq t_f \quad (7)$$

其中, $\mathbf{x}(t) \in \mathbf{R}^{n_x}$ 是状态变量, $\mathbf{y}(t) \in \mathbf{R}^{n_y}$ 是代数变量, $\mathbf{v}(t) \in \mathbf{R}^{n_u}$ 是控制变量且上下边界约束分别为 \mathbf{u}_l 和 \mathbf{u}_u , 这些变量都是时间标量 $t \in [t_0, t_f]$ 的函数; 动态过程开始时刻 t_0 和结束时刻 t_f 都是固定的; 动态系统特性由常微分方程 (2) 组成; 其初始可行状态为 \mathbf{x}_0 ; 动态优化问题的最优解需要满足等式路径约束 (3)、不等式路径约束 (4); 目标函数式 (1) 由终值项 $\phi[\mathbf{x}(t_f), \mathbf{y}(t_f)]$ 和被积函数为 $\ell[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{v}(t)]$ 的积分项组成. 其中, 等式路径约束 (3) 和常微分方程 (2) 组成 DAE. 为不失一般性, 假设这里的 DAE 对各变量均有连续二阶偏导数, 且 index 为 1.

这些 DAE 系统具有更大的灵活性: 可以是线性的也可以是非线性的; 不等式路径约束 (4) 可以有多个, 若有多个不等式路径约束, 其处理方法同 (4).

该最优控制问题可以简单描述为: 在可行初始状态 (5) 条件下, 寻找最优的控制轨迹 $\mathbf{v}^*(t)$, 使得式 (2) 和式 (3) 描述的系统满足约束 (4), 且使得目标函数 (1) 的值最小.

2 主要结果

本文针对具有不等式路径约束的 DAE 系统的最优控制问题, 首先利用 CVP 技术将无限维的 DOP 转化为有限维的 DOP, 将原问题转化为仍保留系统动态特性的具有不等式路径约束的 DOP. 对于系统的动态方程, 采用 BDF 直接求解, 避免了将 DAE 转化为 ODE 或两点边值问题. 利用逐点离散

法处理不等式路径约束, 将不等式约束在违反处转化为有限的点约束, 在有限步的迭代下, 得到满足用户指定的路径约束违反容忍度的 KKT 最优解. 算法的主要结构如图 1 所示.

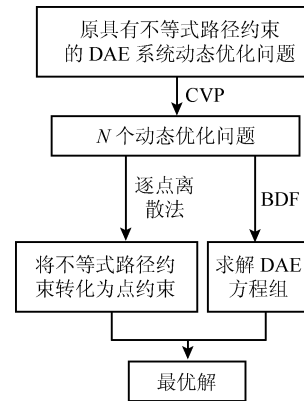


图 1 算法主要结构图

Fig.1 Structure diagram of the algorithm

本节首先简要介绍了控制向量参数化方法及其处理后得到的有限维的 DOP. 然后在逐点离散法中, 路径约束被转化为点约束的形式, 同时给出了不等式路径约束的 DAE 系统最优控制问题的具体求解算法. 并给出了分点离散法收敛性的证明.

2.1 控制向量参数化

CVP 是求解动态优化问题的一种重要策略. CVP 方法的核心思想^[36] 是: 利用基函数将控制变量进行参数化, 将原无限维最优控制问题转化为一个含有动态过程的有限维优化问题后, 再用传统的 DOP 求解方法进行求解. 即将控制向量 $\mathbf{v}(t)$ 被离散为 n 段而状态变量保持连续, 每个时间分段内用带参数的多项式 (如常数、线性或二次多项式). 关于控制变量参数化方法的收敛性, 文献 [37-38] 都进行了相应的证明.

首先不考虑不等式路径约束, 将动态优化问题的时间域 $[t_0, t_f]$ 划分为 N 个控制阶段,

$$t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_N \equiv t_f \quad (8)$$

在某一时间分段 $[t_{k-1}, t_k], k = 1, 2, \dots, N$ 内, 根据函数逼近理论, 控制变量可以表示为低阶多项式参数依赖的表达形式,

$$v_{jk}(t) \approx \bar{v}_{jk}(t) = \sum_{i=0}^M u_{ijk} \zeta_{ijk}^{(M)}(t), t_{k-1} \leq t \leq t_k \quad (9)$$

其中, j 表示原问题有 $1, 2, \dots, j, \dots, n_u$ 个控制变量, $\zeta_{ijk}^{(M)}(t)$ 为多项式基函数, M 为基函数阶数. 实际计算和应用中控制向量的参数化可以有多种参数依赖形式, 如图 2 所示常用的有分段常量逼近策略

(如图 2 实线)、分段线性逼近策略(如图 2 虚线)、分段二次多项式逼近策略(如图 2 点虚线)等. 由于计算机采用数字信号, 非常符合分段常量策略形式, 同时这种策略简便易行、生成参数数目较少. 因此本文采用分段常量逼近策略进行控制变量参数化, 即采用 $\zeta_{ij}^k(t) = 1$ 为基函数.

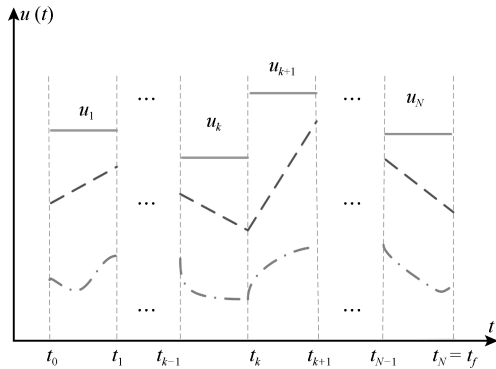


图 2 控制变量分段示例

Fig. 2 Illustration of control variable profiles

从而整个时间段内的控制变量可以表示为:

$$\mathbf{v}(t) \approx \sum_{k=1}^N \mathbf{u}_k X_{[t_{k-1}, t_k)}(t), \quad t \in [t_0, t_f] \quad (10)$$

其中, $X_{[t_{k-1}, t_k)}(t)$ 为开关函数, $k = 1, 2, \dots, N$, 具体形式如下:

$$X_{[t_{k-1}, t_k)}(t) = \begin{cases} 1, & \text{若 } t \in [t_{k-1}, t_k) \\ 0, & \text{若 } t \notin [t_{k-1}, t_k) \end{cases} \quad (11)$$

进而每一分段内, 控制变量可以表示为:

$$\mathbf{v}_j(t) \approx \mathbf{u}_{j_k} \quad t \in [t_{k-1}, t_k] \quad (12)$$

利用上述中 CVP 思想对原问题 (1) ~ (7) 进行处理, 得到如下有限维动态优化问题, 记为 P2:

$$\min_{\mathbf{x}(t), \mathbf{U}} J = \phi[\mathbf{x}(t_f), \mathbf{y}(t_f)] + \int_{t_0}^{t_f} \ell[\mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}] dt \quad (13)$$

s. t.

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = f[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}] \quad (14)$$

$$g[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}] = 0 \quad (15)$$

$$h[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}] \leq 0 \quad (16)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (17)$$

$$\mathbf{u}_l \leq \mathbf{u} \leq \mathbf{u}_u \quad (18)$$

$$t_0 \leq t \leq t_f \quad (19)$$

其中, $\mathbf{u} \in \mathbf{U}$ 是 $\mathbf{v}(t)$ 离散化后的有限维控制向量, 并且 $\mathbf{U} \in \mathbf{R}^N$ 是个非空 N 维向量. 其他变量的定义同问题 P1.

对于参数化后的 DOP 问题可使用成熟的基于梯度的优化算法进行求解. 本文首先采用 BDF 直接对微分代数方程组进行求解, 进而得到带有有限维控制向量的目标函数, 再用 BFGS 迭代法计算拉格朗日函数的 Hessian 矩阵的正定拟牛顿近似值, 利用 SQP 算法便可得到最优的控制参数组合.

2.2 不等式路径约束处理

2.2.1 算法步骤

本文利用文献 [34] 中的分点离散法来处理不等式路径约束, 记分段点集合 $P_N = \{t_0, t_1, \dots, t_{N-1}, t_N \equiv t_f\}$, $t_{i-1} < t_i, i = 1, 2, \dots, N$. 对于 DOP 问题中的式 (13), 若某时间段上存在不等式路径约束的违反, 则在该段内将路径约束离散为有限多个点约束:

$$h[t_i, \mathbf{x}(t_i), \mathbf{y}(t_i), \mathbf{u}_i] \leq 0 \quad (20)$$

其中, $t_j, j = 1, 2, \dots, M$ 是时间域内 M 个违反时间段上的离散形式. 给出求解具有不等式路径约束的 DAE 系统最优控制问题求解具体算法如下:

初始化. 设置初始控制参数 $\mathbf{u}^{(0)}$ 、初始化不等式路径约束违反点集合 $T_*^{(0)} \subset T$; 有限且任意小的容忍度参数 $\eta > 0$; 分段参数 $N \in N^*$; 迭代次数 $p = 0$; 迭代精度 $\delta > 0$;

步骤 1. 先解决不带有不等式路径约束的 DOP 问题 P2, i. e. 解式 (13) ~ (15)、式 (17) ~ (19) 构成的动态优化问题;

步骤 2. 利用 BDF 法求解式 (14), (15) 和式 (17) 构成的 DAE 初值问题, 得到 $\mathbf{x}(t)$ 的值;

步骤 3. 在容忍度 η 下检查 $h(t) \leq \eta, t \in [t_0, t_f]$ 的违反情况. 将每个 CVP 分段中违反量最大的点对应的点约束加到 DOP 的约束中, 并且检查已有违反点的违反情况, 若不存在违反则去除该点, 更新 $T_*^{(p)}$;

步骤 4. 使用 BFGS 迭代法计算拉格朗日函数的 Hessian 矩阵的正定拟牛顿近似值获取关于参数向量 \mathbf{u} 的梯度信息;

步骤 5. 通过 SQP 方法, 求解 QP 子问题, 生成新的迭代步 $\hat{\mathbf{u}}_{k+1}^{(p)}$;

步骤 6. 若在容忍度 η 下 $h(t_i) \leq \eta$, 其中 $t_i \in T_*^{(p)}$, 且 $\|J(\hat{\mathbf{u}}_{k+1}^{(p)}) - J(\hat{\mathbf{u}}_k^{(p)})\| < \delta$, 则算法结束; 否则重新求解带现有点约束的 NLP 问题, $p = p + 1$, 继续步骤 2.

若问题 P2 中的不等式路径约束存在违反, 则会循环迭代求解带不同点约束的 DOP 问题, 通过 SQP 方法调整控制变量 \mathbf{u} , 使得点约束的违反程度有效降低, 直至收敛至容忍度 η 内. 不等式路径约束到点约束的转换是收敛的(详细内容参考第 2.2.2 节), 因此通过有限步迭代, 能找到满足指定容忍度

的 KKT 最优解.

2.2.2 收敛性证明

在原 DOP 问题经过 CVP 处理后的 N 个控制段上, 对于分点离散法的收敛性分析, 本文给出以下证明:

对于 DAE 问题 P1 的不等式路径约束 $h(t) = h[t, \mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)] \leq 0$ 均有以下假设:

假设 1. $h(t)$ 至少是一阶可导的.

假设 2. $h(t)$ 对于 t 是 Lipschitz 连续的, 即存在一个常数 K , 使得对所有 (t) 和 (\hat{t}) , 在域 $D = \{t_0 \leq t \leq t_f, |\mathbf{x}| \leq \infty, |\mathbf{u}| \leq \infty\}$ 上都有下式成立:

$$|h(t) - h(\hat{t})| \leq K |t - \hat{t}| \quad (21)$$

假设 3. 若 $h(t)$ 对于 t 不是 Lipschitz 连续的, 记不连续点集合为 P_{non} 且 $P_{non} \in P_M$, 则 $h(t)$ 满足假设 2, 其中 $t \notin P_{non}$.

定理 1. 若问题 P1 的任意一个不等式路径约束 $h(t) \leq 0$ 都满足上述假设, 则对于该 $h(t)$ 存在有限的点集 $P_M = \{\hat{t}_0, \hat{t}_1, \dots, \hat{t}_{N(\eta)} \equiv t_f\}$ 使得 $h(t) \leq \eta: \eta > 0, t \in [t_0, t_f]$.

证明. 原 DOP 问题经 CVP 处理后, 时间域 $T \in [t_0, t_f]$, $i = 0, 1, \dots, N-1$ 会被划分为 N 段相等或者不等的子时间段 $T_i = [t_i, t_{i+1}]$, $i = 0, 1, \dots, N-1$. 在每个子时间段 T_i 上求解 DAE 初值问题时, 该子时间段将被离散为 M 个小时时间分段 $\hat{T}_k = [\hat{t}_k, \hat{t}_{k+1}]$, $k = 0, 1, \dots, M-1$, 其中 $\hat{t}_0 = t_i$, $\hat{t}_M = t_{i+1}$. 对于任意一个小时时间分段 $[\hat{t}_k, \hat{t}_{k+1}]$, 取 $\hat{t} < \hat{t}_{k+1}$, $\hat{t} \in \hat{U}(\hat{t}_{k+1})$. 由 $h(t)$ 在 $[\hat{t}_k, \hat{t}]$ 上连续, 在 (\hat{t}_k, \hat{t}) 内可导, 那么在 (\hat{t}_k, \hat{t}) 内至少存在一点 $\xi(\hat{t}_k < \xi < \hat{t})$, 使等式 $h(\hat{t}) - h(\hat{t}_k) = h'(\xi)(\hat{t} - \hat{t}_k)$ 成立, 当 $|\hat{t}_{k+1} - \hat{t}_k| < \varepsilon$ 时, 对等式进一步处理有:

$$|h(\hat{t}) - h(\hat{t}_k)| = |h'(\xi)| \cdot |\hat{t} - \hat{t}_k| \leq K |\hat{t} - \hat{t}_k| \leq K |\hat{t}_{k+1} - \hat{t}_k| \leq \eta, \quad \hat{t} \in \hat{T}_i \quad (22)$$

去绝对值进行移项, 即

$$h(\hat{t}_k) - \eta \leq h(\hat{t}) \leq h(\hat{t}_k) + \eta, \quad \hat{t} \in \hat{T}_i \quad (23)$$

又 $h(\hat{t}_k) \leq 0$, 则由上式可得到:

$$h(\hat{t}) \leq h(\hat{t}_k) + \eta \leq \eta, \quad \hat{t} \in \hat{T}_i \quad (24)$$

综上, 在整个时间域 $[t_0, t_f]$ 上的每个子时间段 \hat{T}_i , $i = 0, 1, \dots, N(\eta) - 1$ 上都有上式成立, 因此有

$$h(t) \leq \eta, \quad t \in [t_0, t_f] \quad (25)$$

其中, $N(\eta)$ 是 η 的函数, η 是式 (22) 满足的条件. 对于有限的 η , $N(\eta)$ 也是有限的.

对于问题 P2 的每一个不等式路径约束均可此类证明. \square

3 仿真研究

本节采用两个 DAE 系统的最优控制问题对提出的算法进行仿真研究. 仿真环境为: Intel i7-4790, 3.6 GHz CPU 和 DDMM1/1 600 MHZ 8 GB 内存. 在仿真中求解 DAE 方程组求解精度设为 10^{-6} ; 使用 SQP 方法解 NLP 问题, 求解精度设为 10^{-4} ; 内点约束的收敛容忍度为 $\eta = 10^{-6}$.

3.1 催化剂混合问题

由 Guun 等提出的催化剂混合问题^[39], 一直以来被研究者研究用于动态优化问题的研究^[40-41]. 问题可描述为: 在长度为 l_f 的管式反应器中, 两种物质 A、B 在管内发生反应. 反应式为 $A \leftrightarrow B \rightarrow C$. 其中 B 是副产物, C 是目标产物, 反应速率随催化剂沿着管长的混合率而变化. 为了得到更多的目标产物 C, 该动态优化控制问题的求解目标是获得催化剂最佳配比方案. 其数学模型如下式所示:

$$\max_{u(l)} J = x_3(l_f)$$

s. t.

$$\begin{aligned} \dot{x}_1(l) &= u(l)[10x_2(l) - x_1(l)] \\ \dot{x}_2(l) &= u(l)[x_1(l) - 10x_2(l)] - [1 - u(l)]x_2(l) \\ 1 - x_1(l) - x_2(l) - x_3(l) &= 0 \\ x_2(l) &\leq 0.075 \end{aligned} \quad (26)$$

其中, 状态变量 $x_1(l)$ 、 $x_2(l)$ 、 $x_3(l)$ 分别表示为 A、B、C 的摩尔分率, 初始状态为 $x_1(0) = 1$, $x_2(0) = 0$, $x_3(0) = 0$; 控制变量 $u(l)$ 表示催化剂沿管长的混合率, 满足的约束为 $0 \leq u(l) \leq 1$; l 在这里表示管长. 这里取 $l_0 = 0$, $l_f = 12$, 仿真中取 $u_0 = 0.17$.

根据本文给出的具有不等式路径约束的 DAE 系统最优控制问题的求解算法, 若不等式在 $[l_0, l_f]$ 上存在违反, 则将其转化为内点约束 $x_2(l_i) - 0.075 \leq \eta$. 图 3 和图 4 是控制变量取为 $N = 24$ 时得到的控制轨迹和状态轨迹. 图 5 为 $x_2(l)$ 的状态轨迹. 可以看出在整个长度域 $l \in [l_0, l_f]$ 内都满足不等式路径约束, 说明本文提出的方法在路径约束处理方面有着很好的效果.

仿真中分别取 $N = 24, 29, 34$, 得到问题最优目标函数和求解时间如表 1. 由表 1 中可以看出, 本文方法求解的时间与文献 [18] 相比, 省时至少 20%, 精确度方面会因为参数有所浮动, 但是目标函数最差在 $N = 29$ 时, 本文所得目标函数也已经达到文献 [18] 的 99.97%.

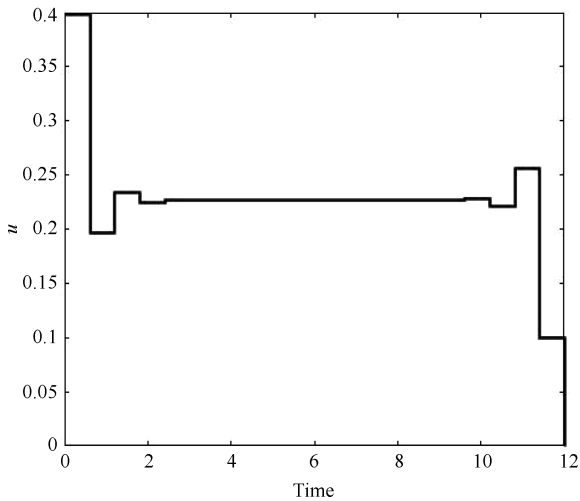


图 3 控制曲线
Fig. 3 Control profile

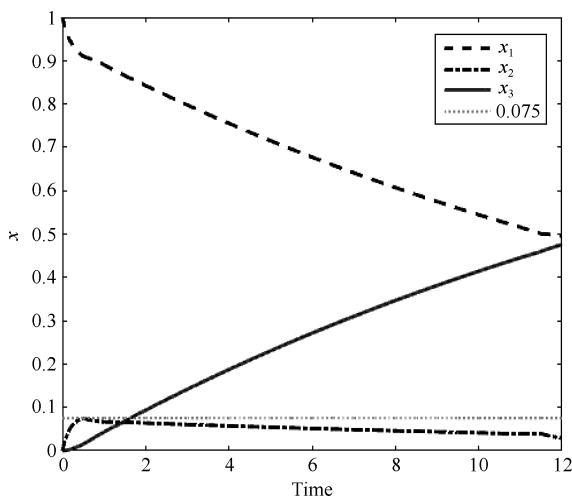


图 4 路径约束下的状态曲线
Fig. 4 The status curve with path constraint

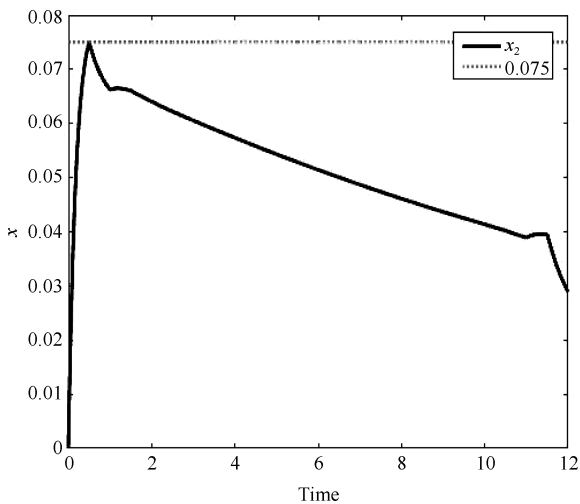


图 5 路径约束下 x_2 的状态曲线
Fig. 5 The status curve of x_2 with path constraint

表 1 催化剂混合问题测试结果

Table 1 Results of catalyst mixing problem

测试对象	分段数 N	目标函数 J	计算时间 (s)
本文方法	24	0.4754609	111.2188
	29	0.4759645	190.1719
	34	0.4763620	348.0000
文献 [18] 方法	24	0.4755665	138.9219
	29	0.4761231	290.1563
	34	0.4765138	460.9375

3.2 青霉素分批补料发酵

在文献 [42] 中描述的一个青霉素分批补料发酵问题 (Fed-batch penicillin fermentation), 该问题具有很强的非线性和奇异性. 该动态优化问题描述如下:

$$\min_{S(t)} J = \int_{t_0}^{t_f} (-\theta X(t)V(t) + 0.0103P(t)V(t) + 0.0744\mu(t)X(t) + 0.00102X(t)V(t) + 6913.58)dt$$

$$\text{s. t. } \dot{X}(t) = \mu(t)X(t) - \frac{FX(t)}{V(t)}$$

$$\dot{P}(t) = \theta X(t) - 0.01P(t) - \frac{FP(t)}{V(t)}$$

$$\dot{V}(t) = F$$

$$\mu(t) = \frac{0.11S}{S + 0.006X(t)}$$

$$\theta = \frac{0.004}{1 + \frac{0.0001}{S} + \frac{S}{0.1}}$$

$$X(t) \leq 41$$

其中, 目标函数 J 是总收益. X 是生物量浓度 (g/L), P 是现有青霉素产物数量 (每升活性), 具体增长率 μ , 具体产品形成速率 θ 和反应堆的体积 V (L) 都是系统的状态变量. 底物浓度 S (g/L) 是控制变量. 进料流量 F 为 1666.67 L/h. 该模型初始状态为 $[X(0), P(0), V(0), \mu(0)] = [1, 0, 250000, 0]$. 起始时刻 $[t_0, t_f] = [0, 150]$. 控制变量 $S \in [0.001, 0.5]$.

采用文献 [18] 中处理不等式路径约束的方法与本文方法对比, 仿真中取 $N = 12, 14, 16$ 分别得到最优目标函数和求解时间如表 2 所示. 由表 2 中可以看出, 本文方法求解的时间约为文献 [18] 的十分之一, 精确度方面会因为参数有所浮动, 但是目标函数最差在 $N = 12$ 时, 本文所得目标函数也已经达到文献 [18] 的 99.3%.

仿真时设置 $u_0 = 0.5$. 取控制变量 $N = 12$ 时, 图 6 为得到的控制轨迹, 图 7 是状态轨迹, 其中状态

变量 $X(t) \leq 41$. 从图中可以看出本文所提方法的有效性.

表 2 青霉素分批补料发酵问题测试结果

Table 2 Results of fed-batch penicillin fermentation

测试对象	分段数 N	目标函数 J	计算时间 (s)
本文方法	12	1 108 269	187.5313
	14	1 121 255	301.5781
	16	1 115 655	315.1250
文献 [18] 方法	12	1 113 700	1 496.0
	14	1 102 600	2 578.9
	16	1 102 400	4 109.8

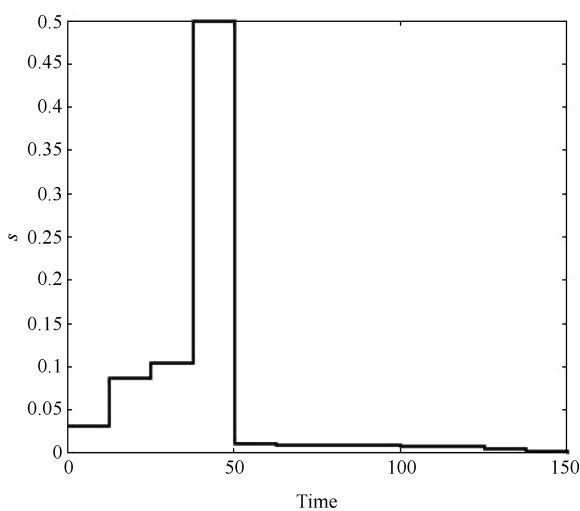


图 6 控制曲线

Fig. 6 Control profile

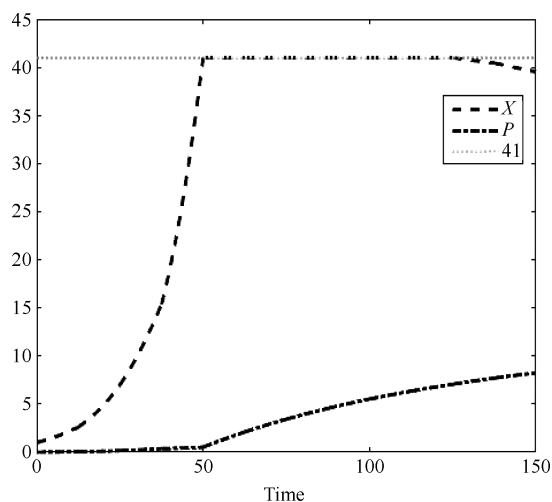


图 7 路径约束下的状态曲线

Fig. 7 The status curve with path constraint

综上所述两个仿真实验, 本文方法允许路径约束违反在用户指定范围之内, 在问题允许存在误差或者

实际上确实存在误差的情况下, 以一定的准确度换取求解速度, 满足应用需求.

4 结论

本文针对带有不等式路径约束的 DAE 系统的动态优化问题, 提出了一种直接求解该类型问题的框架, 首先, 通过 CVP 将无限维的动态优化问题转化为有限维的动态优化问题; 然后, 利用分点离散方法, 设计了一个可以在一定容忍度下满足路径约束的算法, 并在理论上论证了该算法可以在有限步数的迭代下收敛; 最后, 利用催化剂混合问题和压力限定批量反应堆问题仿真研究验证了本文所提方法的有效性.

本文对控制变量进行的是等分离散化, 但对局部变化较大的控制信号, 等分离散化不能准确地反应真实的控制信号. 因此本文下一步的工作将根据控制信号曲线自适应地进行 CVP 离散化.

References

- Chen Mei-Rong, Guo Yi-Nan, Gong Dun-Wei, Yang Zhen. A novel dynamic multi-objective robust evolutionary optimization method. *Acta Automatica Sinica*, 2017, **43**(11): 2014–2032
(陈美蓉, 郭一楠, 巩敦卫, 杨振. 一类新型动态多目标鲁棒进化优化方法. *自动化学报*, 2017, **43**(11): 2014–2032)
- Chen Long, Liu Quan-Li, Wang Lin-Qing, Zhao Jun, Wang Wei. Data-driven prediction on performance indicators in process industry: a survey. *Acta Automatica Sinica*, 2017, **43**(6): 944–954
(陈龙, 刘全利, 王霖青, 赵璿, 王伟. 基于数据的流程工业生产过程指标预测方法综述. *自动化学报*, 2017, **43**(6): 944–954)
- Ding Jin-Liang, Yang Cui-E, Chen Li-Peng, Chai Tian-You. Dynamic multi-objective optimization algorithm based on reference point prediction. *Acta Automatica Sinica*, 2017, **43**(2): 313–320
(丁进良, 杨翠娥, 陈立鹏, 柴天佑. 基于参考点预测的动态多目标优化算法. *自动化学报*, 2017, **43**(2): 313–320)
- Bienstock D. Optimal control of cascading power grid failures. In: *Proceedings of the 2010 IEEE Conference on Decision and Control and European Control Conference*, New York, USA: IEEE, 2010. 2166–2173
- Chomat M, Schreier L, Bendl J. Optimal control of input rectifier in voltage-Source inverter supplied from unbalanced power grid. In: *Proceedings of the 2006 IEEE International Symposium on Industrial Electronics*, New York, USA: IEEE, 2006. 1042–1045
- Liu P, Li G, Liu X. Fast engineering optimization: a novel highly effective control parameterization approach for industrial dynamic processes. *ISA Transactions*, 2015, **58**: 248–254
- Jie X, Huang Y, Lou H H. A probability distribution estimation based method for dynamic optimization. *AIChE Journal*, 2010, **53**(7): 1805–1816
- Hirmajer T, Balsa-Canto E, Banga J R. DOTcvpSB, a software toolbox for dynamic optimization in systems biology. *BMC Bioinformatics*, 2009, **10**(1): 199

- 9 Bredies K, Lorenz D A, Maass P. An optimal control problem in medical image processing. In: Proceedings of the IFIP-TC7 Conference, Turin, Italy: DBLP, 2005: 249–259
- 10 Barve H A, Banavar R N. Energy-optimal control of a particle in a dielectrophoretic system. In: Proceedings of the 2010 IEEE Conference on Decision & Control. New York, USA: IEEE, 2010: 3353–3358
- 11 Barve H A, Banavar R N. Energy-optimal control of a particle in a dielectrophoretic system. In: Proceedings of the 2010 IEEE Conference on Decision & Control. New York, USA: IEEE, 2010: 3353–3358
- 12 Sun Yong, Zhang Mao-Rui, Liang Xiao-Ling. Improved Gauss pseudospectral method for solving nonlinear optimal control problem with complex constraints. *Acta Automatica Sinica*, 2013, **39**(5): 672–678
(孙勇, 张卯瑞, 梁晓玲. 求解含复杂约束非线性最优控制问题的改进 Gauss 伪谱法. *自动化学报*, 2013, **39**(5): 672–678)
- 13 Biegler L T. An overview of simultaneous strategies for dynamic optimization. *Chemical Engineering & Processing Process Intensification*, 2007, **46**(11): 1043–1053
- 14 Biegler L T. Nonlinear programming: concepts, algorithms, and applications to chemical processes. *Society for Industrial and Applied Mathematics*, 2010.
- 15 Peng Hai-Jun, Gao Qiang, Wu Zhi-Gang, Zhong Wan-Xie. A mixed variable variational method for optimal control problems with applications in aerospace control. *Acta Automatica Sinica*, 2011, **37**(10): 1248–1255
(彭海军, 高强, 吴志刚, 钟万龢. 求解最优控制问题的混合变量变分方法及其航天控制应用. *自动化学报*, 2011, **37**(10): 1248–1255)
- 16 Chachuat B, Mitsos A, Barton P I. Optimal design and steady-state operation of micro power generation employing fuel cells. *Chemical Engineering Science*, 2005, **60**(16): 4535–4556
- 17 Betts J T, Huffman W P. Application of sparse nonlinear programming to trajectory optimization. *Journal of Guidance Control Dynamics*, 1992, **15**(1): 198–206
- 18 Fu J, Faust J M M, Chachuat B, Mitsos A. Local optimization of dynamic programs with guaranteed satisfaction of path constraints. *Automatica*, 2015, **62**(C): 184–192
- 19 Hu Yun-Qing, Liu Xing-Gao, Xue An-Ke. A penalty method for solving inequality path constrained optimal control problems. *Acta Automatica Sinica*, 2013, **29**(12): 1996–2001
(胡云卿, 刘兴高, 薛安克. 带不等式路径约束最优控制问题的惩罚函数法. *自动化学报*, 2013, **39**(12): 1996–2001)
- 20 Qian Ji-Xin, Song Chun-Yue, Wang Ke-Xin, Cheng Yang. *Nonlinear Predictive Control*, Beijing: Science Press, 2015.
(钱积新, 宋春跃, 王可心, 陈扬. 非线性预测控制, 北京: 科学出版社, 2015.)
- 21 Pontryagin L S, Boltyanskii V G, Gamkrelidze R V, Mishchenko E F. *The mathematical theory of optimal processes*. Interscience, 1962.
- 22 Fabien B C. A technique for the direct optimization of dynamic systems described by differential-algebraic equations. *Optimal Control Applications & Methods*, 2007, **29**(6): 445–466
- 23 Brenan K E, Campbell S L, Petzold L R. *Numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations*. North-Holland, 1989.
- 24 Styczen K, Drag P. A modified multipoint shooting feasible-SQP method for optimal control of DAE systems. In: Proceedings of Computer Science and Information Systems, New York, USA: IEEE, 2011. 477–484
- 25 Feehery W F, Barton P I. Dynamic simulation and optimization with inequality path constraints. *Computers & Chemical Engineering*, 1996, **20**(3): 169–176
- 26 Jacobson D, Lele M. A transformation technique for optimal control problems with a state variable inequality constraint. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 1969, **14**(5): 457–464
- 27 Vassiliadis V S, Sargent R W H, Pantelides C C. Solution of a class of multistage dynamic optimization problems. 2. problems with path constraints. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1994, **10**(9): 2122–2133
- 28 Floudas C A, Stein O. The adaptive convexification algorithm: a feasible point method for semi-infinite programming. *SIAM Journal on Optimization*, 2008, **18**(4): 1187–1208
- 29 Chachuat B. Nonlinear and dynamic optimization: from theory to practice. *Automatic Control Laboratory EPFL*, 2007, **107**(Spring): 192–193
- 30 Rehbock V, Teo K L, Jennings L S, Lee C S. An exact penalty function approach to all-time-step constrained discrete-time optimal control problems. *Applied Mathematics & Computation*, 1992, **49**(2–3): 215–230
- 31 Loxton R C, Teo K L, Rehbock V, Yiu K F C. Optimal control problems with a continuous inequality constraint on the state and the control. *Automatica*, 2009, **45**(10): 2250–2257
- 32 Liu X, Hu Y, Feng J, Liu K. A novel penalty approach for nonlinear dynamic optimization problems with inequality path constraints. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 2014, **59**(10): 2863–2867
- 33 Liu P, Li X, Liu X, Hu Y. An improved smoothing technique-based control vector parameterization method for optimal control problems with inequality path constraints. *Optimal Control Applications & Methods*, 2016, **38**(4): 586–600
- 34 Chen T W C, Vassiliadis V S. Inequality path constraints in optimal control: a finite iteration ϵ -convergent scheme based on pointwise discretization. *Journal of Process Control*, 2005, **15**(3): 353–362
- 35 Biegler L T. An overview of simultaneous strategies for dynamic optimization. *Chemical Engineering & Processing Process Intensification*, 2007, **46**(11): 1043–1053
- 36 Vassiliadis V. Computational solution of dynamic optimization problems with general differential-algebraic constraints by. *Journal of Guidance Control & Dynamics*, 1993, **15**(2): 457–460
- 37 Teo K L, Goh C J, Wong K H. A unified computational approach to optimal control problems. *Longman Scientific and Technical*, 1991: 2763–2774
- 38 Martin R, Teo K L. Optimal control of drug administration in cancer chemotherapy. *World Scientific*, 1994.
- 39 Gunn D J, Thomas W J. Mass transport and chemical reaction in multifunctional catalyst systems. *Chemical Engineering Science*, 1965, **20**(2): 89–100

- 40 Hirmajer T, Fikar M, Balsa-Canto E, Banga J R. DOTcvp: dynamic optimization toolbox with control vector parameterization approach. 2008.
- 41 Irizarry R. A generalized framework for solving dynamic optimization problems using the artificial chemical process paradigm: applications to particulate processes and discrete dynamic systems. *Chemical Engineering Science*, 2005, **60**(21): 5663–5681
- 42 Huang Y J, Reklaitis G V, Venkatasubramanian V. Model decomposition based method for solving general dynamic optimization problems. *Computers & Chemical Engineering*, 2002, **26**(6): 863–873



孙 燕 东北大学流程工业综合自动化国家重点实验室硕士研究生. 主要研究方向为动态优化, 不等式路径约束.

E-mail: suny618@foxmail.com
(**SUN Yan** Master student at the State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern University. Her research

interest covers dynamic optimization and inequality path constraint.)



张 弛 东北大学流程工业综合自动化国家重点实验室博士研究生. 主要研究方向为切换系统的动态优化, 全局优化.

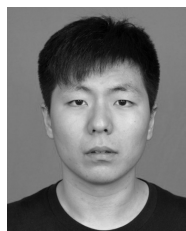
E-mail: deville136@hotmail.com
(**ZHANG Chi** Ph.D. candidate at the State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern University. His research

interest covers dynamic optimization of switched systems and global optimization.)



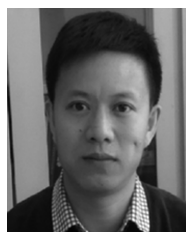
路兴龙 东北大学流程工业综合自动化国家重点实验室博士研究生. 主要研究方向为自适应动态规划, 非线性控制理论, 故障检测与诊断.

E-mail: xinglonglu@stumail.neu.edu.cn
(**LU Xing-Long** Ph.D. candidate at the State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern University. His research interest covers adaptive dynamic programming, nonlinear control theory, and fault detection and diagnosis.)



王靖戈 东北大学硕士研究生. 主要研究方向为多智能体系统一致性问题, 切换网络, 事件驱动控制策略, 非凸受限.

E-mail: wangjingge@hotmail.com
(**WANG Jing-Ge** Master student at Northeastern University. His research interest covers multi-agent systems, event-triggered mechanism, and nonconvex constraints.)



付 俊 东北大学流程工业综合自动化国家重点实验室教授. 主要研究方向为动态优化, 切换系统, 非线性控制. 本文通信作者.

E-mail: junfu@mail.neu.edu.cn
(**FU Jun** Professor at the State Key Laboratory of Synthetical Automation for Process Industries, Northeastern

University. His research interest covers dynamic optimization, switching system, and nonlinear control. Corresponding author of this paper.)