Lars Schewe
Martin Schmidt

Optimierung von Versorgungsnetzen

Mathematische Modellierung und Lösungstechniken



Optimierung von Versorgungsnetzen

Lars Schewe · Martin Schmidt

Optimierung von Versorgungsnetzen

Mathematische Modellierung und Lösungstechniken



Lars Schewe Department Mathematik Lehrstuhl für Wirtschaftsmathematik Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg Erlangen, Deutschland Martin Schmidt Fachbereich IV – Mathematik Universität Trier Trier, Deutschland

ISBN 978-3-662-58538-2 ISBN 978-3-662-58539-9 (eBook) https://doi.org/10.1007/978-3-662-58539-9

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über http://dnb.d-nb.de abrufbar.

Springer Spektrum

© Springer-Verlag GmbH Deutschland, ein Teil von Springer Nature 2019

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsgesetz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung des Verlags. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von allgemein beschreibenden Bezeichnungen, Marken, Unternehmensnamen etc. in diesem Werk bedeutet nicht, dass diese frei durch jedermann benutzt werden dürfen. Die Berechtigung zur Benutzung unterliegt, auch ohne gesonderten Hinweis hierzu, den Regeln des Markenrechts. Die Rechte des jeweiligen Zeicheninhabers sind zu beachten.

Der Verlag, die Autoren und die Herausgeber gehen davon aus, dass die Angaben und Informationen in diesem Werk zum Zeitpunkt der Veröffentlichung vollständig und korrekt sind. Weder der Verlag, noch die Autoren oder die Herausgeber übernehmen, ausdrücklich oder implizit, Gewähr für den Inhalt des Werkes, etwaige Fehler oder Äußerungen. Der Verlag bleibt im Hinblick auf geografische Zuordnungen und Gebietsbezeichnungen in veröffentlichten Karten und Institutionsadressen neutral.

Verantwortlich im Verlag: Iris Ruhmann

Springer Spektrum ist ein Imprint der eingetragenen Gesellschaft Springer-Verlag GmbH, DE und ist ein Teil von Springer Nature

Die Anschrift der Gesellschaft ist: Heidelberger Platz 3, 14197 Berlin, Germany

Vorwort

Dieses Buch ist aus dem Skript zur Vorlesung "Optimierung von Versorgungsnetzen" entstanden, die wir im Wintersemester 2015/2016 und im Sommersemester 2017 an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg gehalten haben. Die Vorlesung richtete sich an ein breites Publikum – hauptsächlich aus der Mathematik aber auch aus den Wirtschaftswissenschaften oder der Informatik.

Die Inhalte dieses Buches sind Voraussetzung für weiterführende Themen, die Gegenstand aktueller Forschung sind. Daher ist das enthaltene Material eine Grundlage für weitere Erkundungen. Wenn Sie Vorschläge für Ergänzungen haben oder Sie Fehler oder Unklarheiten finden, freuen wir uns auf Ihre Rückmeldung.

An dieser Stelle möchten wir die Gelegenheit nutzen, um uns bei unseren Kolleginnen und Kollegen zu bedanken, die durch viele Diskussionen über die Themen des Buches einen erheblichen Einfluss auf die vorliegende Fassung haben. Viele dieser Diskussionen fanden im Rahmen des Forschungsprojektes "ForNe" und des DFG-Transregio 154 statt, deren Mitgliedern wir hiermit für diese Diskussionen danken möchten. Unser Dank gilt auch dem Energie Campus Nürnberg, an dem wir sowohl konzentriert an diesem Buch arbeiten konnten – an dem aber auch ein großer Teil der Forschung stattgefunden hat, für die die Themen dieses Buches die Grundlage bilden. Zum Schluss gilt unser Dank all unseren Koautorinnen und Koautoren: Ohne Euch hätten wir nicht genügend Einsicht in die hier diskutierten Themen, um darüber ein Buch zu schreiben.

Außerdem möchten wir uns beim Springer-Verlag und insbesondere bei Agnes Herrmann und Iris Ruhmann bedanken, die uns sicher und geduldig durch den Entstehungsprozess begleiteten.

VI

Bei der Überarbeitung und Korrektur der einzelnen Kapitel haben einige wissenschaftliche Mitarbeiter und studentische Hilfskräfte regelmäßig neue Ausdrucke zur Korrektur auf ihren Schreibtischen gehabt. An diesen Schreibtischen arbeiteten Kevin-Martin Aigner, Andreas Bärmann, Mohammad Changiz Naeen, Björn Geißler, Thomas Kleinert, Vanessa Krebs, Antonio Morsi, Johannes Thürauf und Dieter Weninger. Euch allen gilt unser besonderer Dank für eure Zeit und Mühe, die ihr investiert habt.

Erlangen im Herbst 2018 Lars Schewe Martin Schmidt

Inhaltsverzeichnis

1		eitung			
	Liter	atur			
2	Flüsse				
	2.1	Grundlegendes	1		
	2.2	Dualität	1		
	2.3	Die Sätze von Gale und Hoffman	1		
	2.4	Projekt: Min-Cost-Flow	2		
	Liter	atur	2		
3	Mehrgüterflüsse und Netzwerkdesign				
	3.1	Mehrgüterflüsse	2		
	3.2	Netzwerkdesign	3		
	3.3	Projekt: Netzwerkdesign	3		
	Literatur.				
4	Opti	Optimalitätsbedingungen für nichtlineare Optimierungsprobleme			
	4.1	Der Spezialfall konvexer Optimierungsprobleme	4		
	4.2	Sensitivitätsanalyse	5		
	Liter	atur	5.		
5	Peak-Load-Pricing				
	5.1	Herleitung der allgemeinen Problemstellung	5		
	5.2	Analyse der Eindeutigkeit von Lösungen	6		
	Liter	atur	7		
6	Lineare Komplementaritätsprobleme				
	6.1	Problemformulierungen	7		
	6.2	Grundlegende Regriffe	7.		

VIII Inhaltsverzeichnis

	6.3	Beispiel: Quadratische Optimierungsprobleme	76
	6.4	Gemischte LCPs	77
	6.5	Existenz und Eindeutigkeit	79
	Liter	atur	82
7	Der	deutsche Strommarkt	83
	7.1	Stromnetzmodelle.	84
	7.2	Nodalpreissysteme	86
	7.3	Redispatch	88
	7.4	Erzeugung vs. Netzausbau	92
	7.5	Projekt: Der deutsche Strommarkt	95
	Liter	atur	97
8	Poter	ntialgetriebene Flüsse	99
	8.1	Potentialfreie Netzwerkflussmodelle	100
	8.2	Potentialgetriebene Netzwerkflussmodelle	104
	8.3	Der Fall ohne Transportkosten: Preiszonen	107
	Liter	atur	111
9		ensionierung von Wassernetzen	113
,	9.1	Stationäre Modellierung.	113
	9.1	Eine Reformulierung zur Reduktion der Nichtlinearitäten	120
	9.3	Exkurs: Instationäre Modellierung	120
	9.4	Projekt: Optimale Dimensionierung von Wassernetzen	123
		atur	123
10		ischt-ganzzahlige nichtlineare Optimierungsprobleme (MINLPs)	125
	10.1	Konvexe MINLPs.	126
	10.2	Nichtkonvexe MINLPs	136
	Liter	atur	143
11	MIP	-Techniken für MINLPs	145
	11.1	Modellierung stückweise linearer Funktionen	145
	11.2	Stückweise lineare Relaxierungen	151
	Liter	atur	156
12	NLP	-Techniken für MINLPs	159
	12.1	Glättung von Nichtdifferenzierbarkeiten	160
	12.2	Kontinuierliche Reformulierung von Binärvariablen	163
	12.3	Reformulierungen von GDPs	167
	Liter	atur	170

Inhaltsverzeichnis	IX

13	Gasn	etzwerke	173
	13.1	Allgemeine Problembeschreibung	174
	13.2	Techniken zur Behandlung von Differentialgleichungen	192
	13.3	Projekt: Gasnetzoptimierung	196
	Literatur		197
Sac	hverze	eichnis	201



Einleitung 1

Zusammenfassung

In diesem Kapitel stellen wir verschiedene Beispiele für Versorgungsnetze vor. Dadurch geben wir einen Überblick für die unterschiedlichen Anwendungsmöglichkeiten der Techniken dieses Buches. Wir diskutieren typische Probleme, die wir in diesem Buch behandeln wollen und geben Beispiele für realistische Netze. Wir schließen dieses Kapitel mit einer Übersicht über den Rest des Buches ab.

Wir alle wollen Wasser trinken, Gas zum Kochen nutzen oder Strom zur Verfügung haben, um unsere Laptops und Smartphones zu laden. Wie funktioniert es aber eigentlich, dass Wasser aus dem Wasserhahn und Strom aus der Steckdose kommt? Hinter all diesen Dingen, die wir oft als selbstverständlich hinnehmen, stecken sehr komplexe Systeme dafür, wie diese Güter gehandelt werden und wie sie dann schlussendlich durch entsprechende Transportnetze zu uns gelangen. In diesem Buch

- 1. beschäftigen wir uns mit der mathematischen Modellierung der Transportvorgänge in sogenannten Versorgungsnetzen,
- 2. führen wir mathematischen Techniken ein, um die Märkte zu analysieren, auf denen Güter wie Strom und Gas gehandelt werden
- 3. und diskutieren wir mathematische Verfahren, die zur Lösung der entsprechenden Modelle genutzt werden können.

Das mathematische Werkzeug, das wir hierfür nutzen werden, ist die Optimierung. Das heißt konkret, dass wir mathematische Optimierungsmodelle formulieren und lösen. Dabei sind die Transportvorgänge in den betrachteten Versorgungsnetzen physikalischer Natur und die Handelsmechanismen folgen ökonomischen Prinzipien.

2 1 Einleitung

Versorgungsnetzwerke sind seit jeher ein zentraler Anwendungsbereich der mathematischen Modellierung und Optimierung. Als Thema eines Lehrbuchs sind sie besonders reizvoll: Einerseits müssen wir Modellierungstechniken lernen und mathematische Verfahren analysieren. Andererseits wenden wir diese direkt auf praktische Probleme an, zu denen jeder einen Bezug hat und deren Nutzen dadurch sofort sichtbar ist.

Die Versorgungsnetze, die wir in diesem Buch modellieren, sind

- Verkehrsnetze wie z.B. Straßen- oder Schienennetze.
- Telekommunikationsnetze
- und Energienetze wie Strom-, Wasser- oder Gastransportnetze.

Der Schwerpunkt wird dabei in diesem Buch sehr klar auf Energienetzen wie Strom- und Gasnetzen liegen. Die Planung und der Betrieb dieser Netze führt in den entsprechenden Industrien und Wirtschaftszweigen häufig zu Problemen, die mithilfe von Methoden der Optimierung gelöst werden können. Schauen wir uns einige Beispiele etwas genauer an.

Stromnetze Der Aus- sowie Umbau und der Betrieb des deutschen Stromnetzes ist ein Thema, das sowohl in der aktuellen politischen Diskussion als auch in der Wissenschaft eine sehr prominente Rolle einnimmt. Der Strommarkt besteht im Wesentlichen aus Produzenten, die Strom produzieren und Konsumenten, die Strom verbrauchen. Um den Strom von den Produzenten zu den Konsumenten zu transportieren, werden Stromleitungen verwendet, die das Stromnetz bilden. Um die Komplexität dieses Systems zu verdeutlichen ist in Abb. 1.1 das europäische Stromnetz dargestellt. Eine grundlegende Fragestellung ist hierbei die sogenannte Lastflussberechnung: Dabei sind alle Einspeisungen und Ausspeisungen für das Stromnetz gegeben und man ist an der kompletten Information über den daraus resultierenden physikalischen Zustand des Netzes interessiert. Wenn wir das Modell einfach halten, fragen wir im Wesentlichen nach der Verteilung des Stromflusses auf die Leitungen des Netzes. Lässt man die Ein- und Ausspeisungen variabel, so kann man sich die darauf aufbauende Frage stellen, wie viel Strom maximal durch ein gegebenes Netz transportiert werden kann. Diese Problemstellung führt unmittelbar zum klassischen Optimierungsproblem der Bestimmung maximaler Flüsse in einem Netzwerk. Was passiert aber z. B. wenn die Konsumenten mehr Strom nachfragen, als durch das bestehende Netz transportiert werden kann – wenn also beispielsweise für gegebene Erzeugung und gegebenen Verbrauch keine technisch-physikalisch zulässige Transportlösung existiert? In diesem Fall muss das Netz in der Regel ausgebaut werden, d.h. es werden neue Stromtrassen gebaut. Welche Stromlinien aber tatsächlich ausgebaut werden sollen, kann mithilfe der Methoden des Netzwerkdesigns beantwortet werden. Eine weitere exemplarische Frage ist die nach der optimalen Ausgestaltung der Marktmechanismen, nach denen Strom gehandelt wird. Hier ist zunächst zu klären, nach welchen Kriterien die Güte des Marktdesigns überhaupt bewertet werden soll.

1 Einleitung 3



Abb. 1.1 Schematische Darstellung des europäischen Höchstspannungsnetzes für Strom (Stand 2014). (Entnommen aus Kap. 2 von Egerer 2016; mit freundlicher Genehmigung von © Jonas Egerer 2016. All Rights Reserved)

Dieser Themenkomplex führt zu komplexen mathematischen Modellen der ökonomischen Wohlfahrtstheorie, die typischerweise in mehrstufige Optimierungsmodelle integriert werden.

Wassernetze Bei der Betrachtung von Wassernetzen kann man die Fragestellungen grundsätzlich in die Bereiche der Frisch- bzw. Trinkwassernetze sowie der Abwassernetze unterteilen. Bei Wassernetzen ist häufig die Frage zu beantworten, wie für eine

4 1 Einleitung

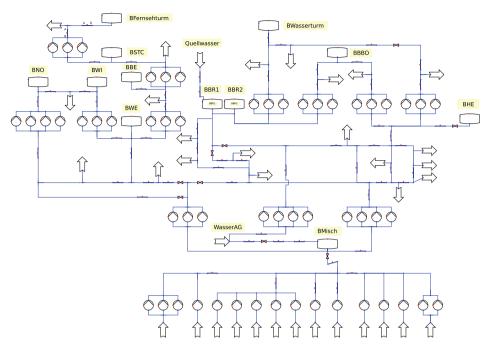


Abb. 1.2 Schematischer Aufbau eines kommunalen Wassernetzwerks. (Entnommen aus Kap. 4 von Martin et al. 2012; mit freundlicher Genehmigung von © Springer Nature 2012. All Rights Reserved)

gegebene Menge von neuen Wasserrohren, die ausgebaut werden sollen, die Größe der Rohre festgelegt wird. Eine schematische Darstellung eines kommunalen Wassernetzes finden Sie in Abb. 1.2. Diese Dimensionierung von Wassernetzen führt zu nichtlinearen und gemischt-ganzzahligen Optimierungsproblemen, deren Modellierung wir diskutieren und für die wir sowohl allgemeine als auch problemspezifische Lösungsverfahren vorstellen werden.

Gasnetze Erdgas ist insbesondere in Deutschland ein besonders wichtiger Energieträger. In Deutschland nimmt er eine besondere Rolle ein, da er im Zuge des Atomausstiegs und der Energiewende aufgrund seiner für einen fossilen Energieträger guten CO₂-Bilanz als "Brückenenergie" fungiert. Das wesentliche Ziel ist in diesem Kontext eine möglichst effiziente Nutzung dieser nicht-regenerativen Energieform. In Bezug auf Gastransportnetze soll hierfür das bestehende Netz möglichst gut ausgenutzt werden. Es soll also, falls möglich, auf Netzausbauten verzichtet werden. Für eine gegebene Menge von Ein- und Ausspeisungen von Erdgas stellt sich damit die Frage, wie das Gas durch das bestehende Netz möglichst energieeffizient von den Produzenten zu den Konsumenten transportiert werden kann. Abb. 1.3 zeigt schematisch ein realistisches Teilnetz des gesamten deutschen Erdgasnetzes.

1 Einleitung 5

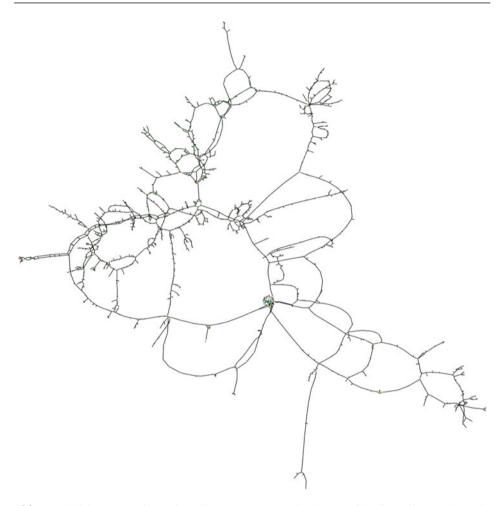


Abb. 1.3 Stilisierte Darstellung eines Gastransportnetzwerks, das ungefähr die Hälfte Westdeutschlands umfasst. (Entnommen aus Schmidt et al. 2017; lizensiert unter CC BY 4.0)

Verkehrsnetze Auch Verkehrsnetze bieten eine reichhaltige Fundgrube für Optimierungsprobleme. Ein klassisches Problem ist beispielsweise die Umlaufplanung. Gegeben sei hierbei ein Verkehrsnetz (z. B. der Nürnberger Straßenbahn oder des Chicagoer Straßennetzes aus Abb. 1.4) und entsprechende Nachfragen, d. h. die Information, wie viele Gäste von welcher Startstation zu welcher Zielstation fahren wollen. Wenn wir nun wissen, wie viele Fahrzeuge welchen Typs uns zur Verfügung stehen, können wir festlegen, welche Fahrzeuge welche Linien bedienen sollen.

6 1 Einleitung

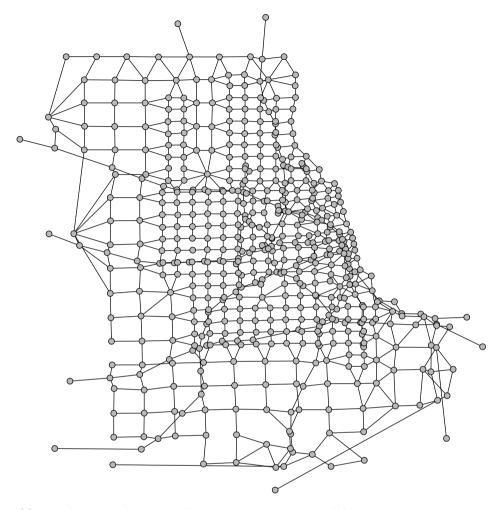


Abb. 1.4 Eine schematische Darstellung des Verkehrsnetzes von Chicago. (Daten entnommen aus Boyce et al. 1985; Eash et al. 1979)

Die verwendeten Modelle sind von unterschiedlicher Komplexität. Aus den Grundvorlesungen der Optimierung sind typischerweise lineare Flussprobleme wie das Max-Flowoder das Min-Cost-Flow-Problem bekannt. Diese Probleme sind verhältnismäßig einfach zu lösen. Für praxisrelevante Modelle von Versorgungsnetzen benötigt man aber typischerweise zwei weitere Zutaten, die sowohl die Analyse als auch das algorithmische Lösen der Modelle deutlich erschweren: Ganzzahligkeiten und Nichtlinearitäten. Ganzzahligkeiten treten immer dann auf, wenn Entscheidungen getroffenen werden müssen. Aktiviere ich den Verdichter in meinem Gasnetz, um den Gasdruck zu erhöhen, oder nicht? Öffne ich das Ventil in meinem Wassernetz oder nicht? Baue ich eine neue Stromtrasse oder nicht? Die

1 Einleitung 7

oben genannten linearen Probleme werden in Ergänzung mit Modellen für solche Fragen zu gemischt-ganzzahligen linearen Problemen (MILPs oder MIPs für "mixed-integer (linear) problems"). Probleme von diesem Typ sind schon deutlich schwerer zu lösen. Damit aber nicht genug – es treten nämlich an fast allen Stellen Nichtlinearitäten auf. Der Druckabfall in einem Gasrohr hängt nichtlinear vom Gasfluss durch das Rohr ab und die Kostenfunktion für Wasserrohre mit unterschiedlichen Durchmessern ist nichtlinear – um nur zwei Beispiele zu nennen. In Kombination mit den oben diskutierten Ganzzahligkeiten führt dies zu gemischt-ganzzahlig nichtlinearen Problemen (MINLPs für "mixed-integer nonlinear problems"). Diese Problemklasse ist zwar für die Anwendungen extrem wichtig (eben weil sie Ganzzahligkeiten und Nichtlinearitäten erlaubt), Modelle dieser Klasse sind aber auch aus genau diesem Grund sehr schwer zu lösen. Für diese Problemklasse werden wir daher einerseits besprechen, was "gute Modelle" sind, und andererseits moderne Lösungsmethoden diskutieren. Hier werden wir sowohl Branch-and-Bound, Outer Approximation und Spatial Branching besprechen, aber auch Techniken der stückweisen Linearisierung von Nichtlinearitäten oder NLP-Techniken zur Reformulierung von Ganzzahligkeiten diskutieren.

All diese Methoden reichen leider in der Praxis häufig immer noch nicht, um die mathematischen Modelle der Anwendungsprobleme auf realen Netzen zu lösen. In diesem Fall entwickelt man häufig problemspezifische Lösungsansätze, die genau auf die Struktur des zu lösenden Problems eingehen und diese ausnutzen. Auch hierfür werden wir einige Beispiele kennenlernen.

Wege durch dieses Buch

Wie können Sie dieses Buch lesen? Es gibt verschiedene Wege durch dieses Buch. Wir haben versucht, die Einstiegshürde so gering wie möglich zu halten und gehen nur davon aus, dass sie grundlegende Optimierungskenntnisse inklusive Dualität für lineare Optimierungsprobleme mitbringen. Einen sinnvollen Lese-Einstieg in das Buch bieten einerseits die grundlegenden Kap. 2 und 3 zu (Mehrgüter-)Flüssen sowie das Kap. 4 über notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung. Die allgemeinen Flusskapitel stellen vor allem die Grundlage für das Kap. 9 über Wassernetze und für Kap. 13 über Gasnetze dar. Für beide Kapitel bietet sich aber auch die vorherige Lektüre von Kap. 8 über allgemeine potentialgetriebene Flüsse an, das auf den Kap. 2 und 3 zu allgemeinen Flüssen aufbaut. Kap. 8 stellt außerdem das Bindeglied zwischen Physik und Ökonomie dar und benötigt aufgrund der ökonomischen Komponente insbesondere die Optimalitätsbedingungen erster Ordnung aus Kap. 4. Diese werden auch in Kap. 5 über sogenannte Peak-Load-Pricing Probleme genutzt, deren allgemeine Struktur wir bei der Diskussion des deutschen Strommarktes in Kap. 7 wiederfinden werden. Das Bindeglied zwischen mathematischer Theorie und ökonomischer Modellierung sind die linearen Komplementaritätsprobleme, die wir in Kap. 6 diskutieren und die ebenfalls in Kap. 7 über den deutschen Strommarkt verwendet werden.

8 1 Einleitung

Viele der diskutierten Anwendungsbereiche führen zu gemischt-ganzzahlig nichtlinearen Optimierungsproblemen. Allgemeine Grundlagen zu dieser Problemklasse führen wir in Kap. 10 ein, um dann spezielle gemischt-ganzzahlig lineare Techniken in Kap. 11 sowie nichtlineare Techniken in Kap. 12 zu besprechen.

Viel Spaß bei Ihrem Weg durch das Buch!

Literatur

- Boyce, D. E., Chon, K. S., Ferris, M. E., Lee, Y. J., Lin, K. T., & Eash, R. (1985). Implementation and evaluation of combined models of urban travel and location on a sketch planning network. Research report for the Chicago Area Transportation Study. Chicago.
- Eash, R., Chon, K., Lee, Y., & Boyce, D. (1979). Equilibrium traffic assignment on an aggregated highway network for sketch planning. *Transportation Research*, 13, 243–257.
- Egerer, J. (2016). Low-carbon transformation of the German and European electricity systems. Modeling market implications and infrastructure investments. Diss. Technische Universität Berlin. https://doi.org/10.14279/depositonce-5641.
- Martin, A., Klamroth, K., Lang, J., Leugering, G., Morsi, A., Oberlack, M., Ostrowski, M., & Rosen, R. (Hrsg.). (2012). International series of numerical mathematics (Bd. 162, S. xiv + 196). Basel: Birkhäuser & Springer Basel AG. https://doi.org/10.1007/978-3-0348-0436-3. ISBN 978-3-0348-0435-6.
- Schmidt, M., Aßmann, D., Burlacu, R., Humpola, J., Joormann, I., Kanelakis, N., Koch, T., Oucherif, D., Pfetsch, M. E., Schewe, L., & Schwarz, R. (2017). GasLib A library of gas network instances. *Data*, 2(4). https://doi.org/10.3390/data2040040. ISSN 2306-5729.



Flüsse 2

Zusammenfassung

Flüsse in Graphen sind die zentralen mathematischen Bestandteile aller Anwendungsprobleme in Versorgungsnetzwerken, die wir in diesem Buch diskutieren. In diesem Kapitel legen wir also den Grundstein für alles folgende, in dem wir die wesentlichen Begriffe einführen und Dualität von Flussproblemen diskutieren. Letzteres wird uns ebenfalls durch das gesamte Buch begleiten. Dabei betrachten wir zwei klassische Probleme: das Max-Flow-Problem und das Min-Cost-Flow-Problem. Zuletzt charakterisieren wir zulässige Ein- und Ausspeisungen für einfache Flussprobleme durch die Sätze von Gale und Hoffman.

Um die Betrachtung allgemeiner linearer Flussmodelle zu motivieren, diskutieren wir nochmal das bereits angerissene Beispiel der Stromnetze. Strom wird in Kraftwerken erzeugt und von Endkunden verbraucht. Um den Strom von den Produzenten zu den Konsumentinnen zu transportieren, ist Infrastruktur in Form von Stromtransportnetzen notwendig, die, neben anderen Elementen, hauptsächlich aus Stromlinien oder -trassen bestehen. Wir fassen diese Situation als einen, zunächst ungerichteten, Graphen G = (V, A) auf, indem wir die Kanten A mit den Stromlinien und die Knoten V mit den Produzenten, den Konsumentinnen und weiteren Kreuzungspunkten der Kanten identifizieren. Die Frage, wie Strom von den Produzenten zu den Konsumentinnen fließt, lässt sich demnach als Flussproblem in einem solchen Graphen betrachten.

Da auch alle weiteren Anwendungsprobleme, die wir in diesem Buch diskutieren, diese Grundstruktur aufweisen, ist es unerlässlich, fundierte Kenntnisse über Flüsse zu besitzen. In diesem Kapitel wiederholen wir daher die grundlegenden Definitionen und Sätze über Flüsse und sogenannte *b*-transshipments. Zusätzlich diskutieren wir die entsprechende Dualitätstheorie und führen alternative Formulierungen ein. Dabei beschränken wir uns hier

10 2 Flüsse

zunächst auf sogenannte Eingüterflüsse. Mehrgüterflüsse behandeln wir im Anschluss in einem separaten Kapitel.

2.1 Grundlegendes

Definition 2.1 (Fluss, zulässiger s-t-Fluss, Wert eines Flusses). Sei G = (V, A) ein gerichteter Graph. Ein $Fluss\ f$ ist eine Abbildung $f: A \to \mathbb{R}_{\geq 0}$. Es seien jetzt zusätzlich Kantenkapazitäten $c_a \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ und zwei Knoten s (die Quelle) und t (die Senke) mit $s \neq t$ gegeben. Dann heißt ein Fluss $zulässiger\ s$ -t-Fluss, falls

$$0 \le f_a \le c_a$$
 für alle $a \in A$

und

$$\sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a = \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a \quad \text{für alle } v \in V \setminus \{s, t\}$$

gilt. Dabei bezeichnen $\delta^{\text{in}}(v)$ und $\delta^{\text{out}}(v)$ die Mengen aller eingehenden und ausgehenden Kanten eines Knotens $v \in V$, d. h.

$$\delta^{\text{in}}(v) := \{ a \in A : \exists w \in V \text{ mit } a = (w, v) \},\$$

 $\delta^{\text{out}}(v) := \{ a \in A : \exists w \in V \text{ mit } a = (v, w) \}.$

Für Teilmengen $U \subset V$ schreiben wir analog

$$\delta^{\text{in}}(U) := \{ a = (w, v) \in A : w \in V \setminus U, v \in U \}, \\ \delta^{\text{out}}(U) := \{ a = (v, w) \in A : v \in U, w \in V \setminus U \}.$$

Ist f ein zulässiger s-t-Fluss, so bezeichnet

$$\operatorname{val}(f) := \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(s)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(s)} f_a$$

den Wert des Flusses.

Das Problem des Findens eines zulässigen *s-t-*Flusses mit maximalem Wert heißt *Maximal-Fluss-* oder *Max-Flow-Problem*.

Das Maximal-Fluss-Problem lässt sich wie folgt notieren:

$$\begin{split} \max_{f} \quad & \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(s)} f_{a} - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(s)} f_{a} \\ \text{s.t.} \quad & 0 \leq f_{a} \leq c_{a} \quad \text{für alle } a \in A, \\ & \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_{a} = \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_{a} \quad \text{für alle } v \in V \setminus \{s, t\}. \end{split}$$

Offensichtlich ist dies ein lineares Optimierungsproblem (LP) und damit lässt es sich auch mit den Techniken der linearen Optimierung, wie z.B. Dualität, behandeln.

Neben Flüssen interessieren uns auch sogenannte Schnitte.

Definition 2.2 (s-t-Schnitt, Kapazität eines Schnittes). Sei G = (V, A) ein gerichteter Graph und seien $s, t \in V$ ausgezeichnete Knoten in G. Dann heißt eine Kantenteilmenge $C \subseteq A$ ein s-t-Schnitt, wenn es eine Menge $U \subseteq V$ mit $s \in U$ und $t \in V \setminus U$ gibt, sodass $C = \delta^{\text{out}}(U)$ gilt. Die *Kapazität des Schnittes* definieren wir als

$$\operatorname{cap}(C) := \sum_{a \in C} c_a.$$

Das Problem des Findens eines minimalen Schnitts in einem gegebenen gerichteten Graphen *G* nennen wir *Min-Cut-*, oder genauer, *s-t-Min-Cut-Problem*.

Was haben jetzt aber Flüsse mit Schnitten zu tun? Es ist bekannt, dass das duale Problem (und zwar wirklich im Sinn der LP-Dualität) zum Maximal-Fluss-Problem das *s-t*-Min-Cut-Problem ist.

Satz 2.3 (Max-Flow-Min-Cut; Ford und Fulkerson 1962). Sei G = (V, A) ein gerichteter Graph mit Kapazitäten $c: A \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ und $s, t \in V$. Dann ist der maximale Wert eines s-t-Flusses f gleich der minimalen Kapazität eines s-t-Schnittes in G. Wenn zusätzlich c ganzzahlig ist, gibt es einen ganzzahligen Fluss, der das Maximum annimmt.

Ein Beispiel für Satz 2.3 ist in Abb. 2.1 gegeben. Wir können sofort überprüfen, dass die angegebene Lösung optimal ist, da der Fluss den Wert 7 und somit den gleichen Wert wie der Schnitt hat. Es gilt also cap(C) = val(f) = 7. Da aber der Wert des maximalen Flusses gleich der Kapazität des minimalen Schnitts ist, kann es keine bessere Lösung geben. Der Schnitt zertifiziert uns die Optimalität des Flusses und umgekehrt.

Der Satz ist auch der Grund, warum man das Min-Cut-Problem typischerweise durch das Lösen des zugehörigen Max-Flow-Problems löst. Hierfür existieren Polynomialzeit-Algorithmen (wie z.B. der Edmonds-Karp-Algorithmus oder der Push-Relabel-Algorithmus), d.h. sowohl das Max-Flow- als auch das Min-Cut-Problem sind in der Komplexitätsklasse P; vgl. Garey und Johnson (1990). Die Details finden sich beispielsweise in Korte und Vygen (2006), Ahuja et al. (1993) oder Schrijver (2003).

12 2 Flüsse

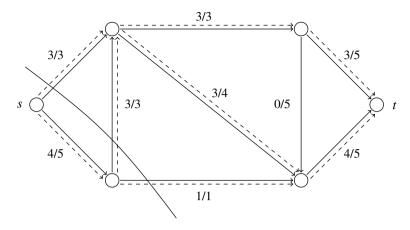


Abb. 2.1 Beispiel zum Max-Flow-Min-Cut-Satz 2.3. Sowohl der maximale Fluss (gestrichelt) als auch der minimale Schnitt haben den Wert 7

In Anwendungsproblemen ist man neben einem maximalen Fluss oder einem minimalen Schnitt häufig auch an Flüssen mit minimalen Kosten interessiert. Dies führt uns zum *Min-Cost-Flow-Problem*. Zur formalen Definition benötigen wir aber zunächst sogenannte *b*-transshipments:

Definition 2.4 (*b*-transshipment). Sei G = (V, A) ein gerichteter Graph und sei $b \in \mathbb{R}^V$. Dann heißt eine Abbildung $f : A \to \mathbb{R}$ ein *b-transshipment* wenn folgende Bedingung gilt:

$$\sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(v)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\mathrm{in}}(v)} f_a = b_v \quad \text{für alle} \quad v \in V.$$

Bemerkung 2.5

- Die Vorzeichenkonvention ist in der Literatur nicht einheitlich. Wir verwenden die Konvention, dass die entsprechenden Einträge in b für Quellen positiv und für Senken negativ sind.
- Man beachte außerdem, dass wir Flüsse als Abbildung von den Kanten des Graphen in die nichtnegativen reellen Zahlen definiert, wir aber bei b-transshipments auch negative Werte zulassen.
- 3. Ein *b*-transshipment mit b = 0 nennt man auch *Zirkulation*.

Definition 2.6 (Min-Cost-Flow-Problem). Es sei ein gerichteter Graph G=(V,A) mit Kantenkapazitäten $c_a\geq 0, a\in A$, und Kosten $w_a,a\in A$, sowie $b\in\mathbb{R}^V$ gegeben. Dann nennen wir

2.2 Dualität 13

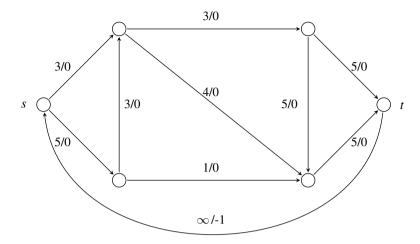


Abb. 2.2 Reformulierung des Beispiels aus Abb. 2.1 als Min-Cost-Flow-Problem. Die Kanten sind mit " c_a/w_a " beschriftet

$$\min_{f} \sum_{a \in A} w_a f_a \tag{2.1a}$$

s.t.
$$\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a = b_v \quad \text{für alle} \quad v \in V,$$
 (2.1b)

$$0 \le f_a \le c_a \quad \text{für alle} \quad a \in A \tag{2.1c}$$

Minimalkosten-Fluss- oder Min-Cost-Flow-Problem.

Bemerkung 2.7 Das Kürzeste-Wege- und das Max-Flow-Problem sind Spezialfälle des Min-Cost-Flow-Problems. Für eine Reformulierung des Max-Flow-Problems aus Abb. 2.1 siehe Abb. 2.2.

Auch für das Min-Cost-Flow-Problem existieren Polynomialzeit-Algorithmen wie beispielsweise der Kreislöschungsalgorithmus mit minimaler Durchschnittskreiswahl, vgl. Korte und Vygen (2006), Ahuja et al. (1993) oder Schrijver (2003).

2.2 Dualität

Das Ziel dieses Abschnitts ist es, dass Sie ein Gefühl für Dualität von klassischen Flussproblemen bekommen und sich eine gewisse Intuition bzgl. dualer Flüsse einstellt.

Zunächst betrachten wir Dualität für das Max-Flow-Problem. Dazu nehmen wir folgende Umformulierung vor: Wir gehen davon aus, dass in unserem Graphen der

14 2 Flüsse

betrachteten Max-Flow-Instanz der Knoten s keine eingehenden und der Knoten t keine ausgehenden Kanten hat. Dies dürfen wir o. B. d. A. annehmen. Zur Formulierung des zugehörigen linearen Problems fügen wir nun eine Kante (t,s) mit hinreichend großer Kapazität $(z.B.c_{(t,s)} = \sum_{a \in A} c_a)$ ein. Der resultierende Graph ist also G' = (V,A') mit $A' = A \cup \{(t,s)\}$. Auf diesem Graphen formulieren wir das Max-Flow-Problem als lineares Optimierungsproblem wie folgt:

$$\max_{f} f_{(t,s)}$$
s.t.
$$\sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a = 0 \quad \text{für alle } v \in V, \qquad [\alpha_v]$$

$$0 \le f_a \le c_a \quad \text{für alle } a \in A'. \qquad [\beta_a^+]$$

Wir haben somit das Max-Flow-Problem durch ein äquivalentes 0-transshipment, d. h. Finden einer Zirkulation, mit einer speziellen Zielfunktion ersetzt. Da wir nun das Duale des Problems betrachten wollen, führen wir Dualvariablen für die Nebenbedingungen ein. Dabei sind für alle $v \in V$ die α_v die dualen Variablen der Bilanzgleichungen des primalen Problems. Analog sind für alle $a \in A'$ die β_a^+ die dualen Variablen zu den oberen Kapazitätsschranken des primalen Problems. Um nicht immer ausführlich die Dualvariablen einführen zu müssen, werden wir, wie hier, im Folgenden immer die zugehörigen Dualvariablen direkt hinter den Nebenbedingungen in eckigen Klammern einführen. Das zu diesem Problem gehörende duale Problem lautet dann

$$\begin{aligned} & \min_{\alpha,\beta^+} & c^\top \beta^+ \\ & \text{s.t.} & \alpha_w - \alpha_v + \beta_a^+ \ge 0 \quad \text{für alle } (v,w) \in A, \\ & \alpha_s - \alpha_t + \beta_{(t,s)}^+ \ge 1, \\ & \beta^+ > 0. \end{aligned}$$

Wir machen zwei Beobachtungen. Wir können zum Vektor α einer zulässigen dualen Lösung immer einen Vektor $z\mathbf{1} \in \mathbb{R}^V, z \in \mathbb{R}$, hinzuaddieren ohne dass wir die duale Zulässigkeit verlieren oder sich der Zielfunktionswert ändert. Hierbei ist $\mathbf{1}$ der Vektor, in dem jede Komponente 1 ist. Außerdem sehen wir, dass wenn wir entlang eines s-t-Weges P die Ungleichungen für alle $a \in A$ aufsummieren, wir

$$\alpha_t - \alpha_s + \sum_{a \in P} \beta_a^+ \ge 0$$

erhalten. Zusätzliche Addition mit der t-s-Ungleichung ergibt schließlich

$$\beta_{(t,s)}^+ + \sum_{a \in P} \beta_a^+ \ge 1.$$

2.2 Dualität 15

Da wir aber $c^{\top}\beta^+$ minimieren wollen und $c \ge 0$ gilt, ist es nicht sinnvoll, irgendein β_a^+ auf einen Wert größer als 1 zu setzen. Wir können also aus jedem s-t-Schnitt $C = \delta^{\text{out}}(U)$ eine zulässige duale Lösung (α, β^+) wie folgt konstruieren:

$$\alpha_v = \begin{cases} 0, & v \notin U, \\ 1, & v \in U, \end{cases} \quad \beta_a^+ = \begin{cases} 0, & a \notin C, \\ 1, & a \in C, \end{cases} \quad \beta_{(t,s)}^+ = 0.$$

Der Zielfunktionswert der so konstruierten Lösung ist gerade cap(C). Mit dem schwachen Dualitätssatz der linearen Optimierung haben wir damit insbesondere gezeigt, dass $val(f) \le cap(C)$ gilt. Der vollständige Beweis von Satz 2.3 würde aber noch deutlich mehr Arbeit benötigen. Einen direkten Beweis (ohne Ausnutzung von LP-Dualität) findet man beispielsweise in Ahuja et al. (1993) oder Schrijver (2003).

Im restlichen Teil dieses Abschnitts betrachten wir Dualität für ein einfaches Min-Cost-Flow-Problem. Wir analysieren dazu ein drastisch vereinfachtes Modell einer Strombörse. Käufer und Verkäufer geben Gebote der Form (c, p) ab, was bedeutet, dass sie bereit sind, bis zu c Einheiten Strom zum Preis von höchstens (mindestens) p zu kaufen (verkaufen); vgl. Tab. 2.1.

Wie kann man nun sinnvoll entscheiden, wessen Gebote akzeptiert bzw. abgelehnt werden? Eine einfache Idee ist die Folgende: Sortiere die Kaufgebote in absteigender Reihenfolge gemäß Preis und die Verkaufsgebote in aufsteigender Reihenfolge; vgl. Tab. 2.2. Solange nun der Preis des ersten Kaufgebots mindestens so hoch wie der des ersten Verkaufsgebots ist, akzeptiere das Minimum der beiden zugehörigen Mengen (c) und gehe zum nächsten Gebot über. Setze dies solange fort wie der Preis des aktuellen Kaufgebots mindestens so hoch wie der des aktuellen Verkaufsgebots ist.

Tab 2 1	I Konf	und Var	kaufgebote
Tab. Z.	і Каш-	- una ver	кантдероте

Kaufgebote		Verkaufgebote	
Menge c	Preis p	Menge c	Preis p
5	20	8	11
10	40	1	17
7	15	20	9

Tab. 2.2 Nach Preis sortierte Kauf- und Verkaufgebote

Kaufgebote		Verkaufgebo	Verkaufgebote	
Menge c	Preis p	Menge c	Preis p	
10	40	20	9	
5	20	8	11	
7	15	1	17	

16 2 Flüsse

Das klingt intuitiv gut, aber ist es auch sinnvoll? Insbesondere haben wir auch noch nicht darüber gesprochen, wer wie viel Geld zahlen bzw. bekommen soll. Um das zu analysieren, stellen wir ein Minimal-Kosten-Fluss-Problem auf: Wir betrachten dazu einen Graphen mit zwei Knoten s und t. Für jedes Verkaufsgebot (c_i, p_i) führen wir nun eine Kante $a_i = (s, t)$ ein, wobei $c_{a_i} = c_i$ und $p_{a_i} = p_i$ gilt. Analog führen wir für jedes Kaufgebot (c_j, p_j) eine Kante $a_j = (t, s)$ ein, wobei $c_{a_j} = c_j$ und $p_{a_j} = -p_j$ gilt. Die Situation ist in Abb. 2.3 dargestellt. Wir setzen nun $b_s = b_t = 0$, d. h. wir suchen eine Zirkulation. Die entscheidende Beobachtung ist nun, dass das oben skizzierte Verfahren dem klassischen Kreislöschungsalgorithmus mit Minimaler-Durchschnittskreis-Regel angewandt auf das obige Minimal-Kosten-Fluss-Problem entspricht.

Das Min-Cost-Flow-Problem lässt sich wieder als LP schreiben:

$$\begin{split} & \min_{f} & \sum_{a \in A} p_a f_a \\ & \text{s.t.} & \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(t)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(t)} f_a = 0, \\ & 0 \leq f_a \leq c_a & \text{für alle } a \in A. \end{split}$$

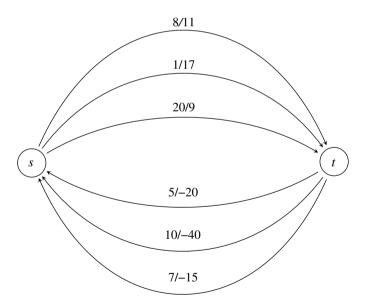


Abb. 2.3 Der Min-Cost-Flow-Graph des Strombörsen-Beispiels. Es gilt $b_s = b_t = 0$ und die Kanten sind mit " c_a/p_a " bzw. " $c_a/-p_a$ " beschriftet

Das duale LP lautet

$$\begin{aligned} \max_{\alpha,\beta^+} & \sum_{a \in A} c_a \beta_a^+ \\ \text{s.t.} & \alpha - \beta_a^+ \le p_a & \text{für alle } a = (s,t) \in A, \\ & \alpha + \beta_a^+ \ge -p_a & \text{für alle } a = (t,s) \in A, \\ & 0 \le \beta_a^+ & \text{für alle } a \in A, \end{aligned}$$

wobei α die duale Variable der Bilanzgleichung und die $\beta_a^+ \geq 0$ die dualen Variablen der oberen Kapazitätsschranken sind. Aus dem Satz vom komplementären Schlupf (vgl. Chvátal 1983) wissen wir, dass für ein primal-duales Paar von Optimallösungen $(f, (\alpha, \beta^+))$ zusätzlich

$$(\alpha - \beta_a^+ - p_a) f_a = 0$$
 für alle $a = (s, t) \in A$,
 $(\alpha + \beta_a^+ + p_a) f_a = 0$ für alle $a = (t, s) \in A$,
 $(c_a - f_a) \beta_a^+ = 0$ für alle $a \in A$

gilt. Was können wir aus diesen Gleichungen über die Struktur der Lösung lernen? Wir sehen, dass ein Verkaufsgebot (c_a, p_a) auf Kante a nur dann zum Zuge kommen kann, d. h. $f_a>0$ gilt, wenn $\alpha=p_a+\beta_a^+$ und somit insbesondere $\alpha\geq p_a$ gilt. Stärker noch: Wenn $\alpha>p_a$ gilt, muss sogar $f_a=c_a$ gelten. Analog sehen wir, dass für Kaufgebote $(c_a,-p_a)$ gilt, dass aus $f_a>0$ direkt $\alpha\leq -p_a=p_j$ für das zur Kante a gehörende Gebot j folgt und wenn $\alpha<-p_a=p_j$ gilt, sogar auch $f_a=c_a$ gilt.

Damit sehen wir Folgendes: Der Wert von α lässt sich als ein Preis interpretieren. Alle Käufer, die zum Zuge kommen, zahlen αf_a und alle Verkäufer bekommen αf_a . Die β_a^+ der Käufer entsprechen dem Betrag, den sie pro Flusseinheit gegenüber ihrem Gebot sparen. Die β_a^+ der Verkäufer entsprechen dem Betrag, den sie als Zusatzgewinn einstreichen. Der Wert der Zielfunktion des dualen Problems ist aufgrund der Komplementarität im Optimum gerade $\sum_{a \in A} f_a \beta_a^+$.

2.3 Die Sätze von Gale und Hoffman

Ziel dieses Abschnitts ist eine explizite Charakterisierung der rechten Seiten *b* für die unser Flussproblem zulässig ist. Diese werden wir direkt aus dem Max-Flow-Min-Cut-Satz (Satz 2.3) herleiten.

Die im Folgenden betrachteten Sätze von Gale und Hoffman treffen Aussagen über zwei klassische Spezialfälle. Dabei lernen wir auch typische Modellierungstechniken kennen, um Flussprobleme zu reformulieren. Zunächst betrachten wir den Satz von Gale: Hier nehmen wir an, dass die untere Kapazitätsschranke, wie bisher, 0 ist. Die Beweistechnik, die wir

18 Flüsse 2

hier verwenden, wird oft bei Flussproblemen mit einem Gut verwendet: Wir führen eine "Superquelle" und eine "Supersenke" ein.

Satz 2.8 (Gale 1957). Es existiert ein b-transshipment f mit 0 < f < c genau dann, wenn

- 1. $\sum_{v \in V} b_v = 0$, 2. $0 \le c$ und
- 3. $\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(U)}^{-} c_a \ge \sum_{v \in U} b_v$ für alle $U \subseteq V$

gilt. Darüber hinaus gilt, dass f ganzzahlig gewählt werden kann, wenn c und b ganzzahlig sind.

Beweis Es ist klar, dass die beiden ersten Bedingungen erfüllt sein müssen, damit es ein b-transshipment gibt. Nehmen wir also an, dass diese beiden Bedingungen gelten. Jetzt konstruieren wir einen Hilfsgraphen G' = (V', A') mit Kapazitäten c wie folgt: Setze $V' = V \cup \{s, t\}$, wobei s und t neue Knoten sind. Außerdem setze man

$$A' = A \cup \{(s, v) : b_v > 0\} \cup \{(v, t) : b_v < 0\}$$

und

$$c_a = \begin{cases} c_a, & \text{falls } a \in A, \\ b_v, & \text{falls } a = (s, v), \\ -b_v, & \text{falls } a = (v, t). \end{cases}$$

Sei jetzt

$$B := \sum_{v \in V : h_v > 0} b_v.$$

Wir suchen nun einen maximalen s-t-Fluss f' in G' mit Kapazitäten c. Wenn der Wert von f' gerade B ist, kann man nachrechnen, dass f' eingeschränkt auf die Kanten aus A ein b-transshipment ist. Wenn b und c ganzzahlig sind, kann f' ganzzahlig gewählt werden und somit auch die Einschränkung auf A. Wenn f' nicht existiert, muss es nach dem Max-Flow-Min-Cut-Satz eine Knotenmenge U' geben, die einen s-t-Schnitt einer Kapazität B'mit B' < B induziert, wobei $s \in U'$ und $t \in V' \setminus U'$ gilt. Wir betrachten jetzt $U = U' \setminus \{s\}$. Es gilt

$$0 > B' - B$$

$$= \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(U')} c_a - B$$

$$\begin{split} &= \sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} c_a + \sum_{v \notin U:(s,v) \in A'} b_v - \sum_{v \in U:(v,t) \in A'} b_v - B \\ &= \sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} c_a - \left(B - \sum_{v \notin U:(s,v) \in A'} b_v\right) - \sum_{v \in U:(v,t) \in A'} b_v \\ &= \sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} c_a - \sum_{v \in U:(s,v) \in A'} b_v - \sum_{v \in U:(v,t) \in A'} b_v \\ &= \sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} c_a - \sum_{v \in U} b_v, \end{split}$$

wobei wir in der vorletzten Gleichung

$$B = \sum_{v \notin U:(s,v) \in A'} b_v + \sum_{v \in U:(s,v) \in A'} b_v$$

genutzt haben. Somit existiert ein $U \subseteq V$, so dass Bedingung 3 verletzt ist, was zu zeigen war.

Der folgende Satz gibt nun die allgemeine Charakterisierung. Hier benötigen wir als Technik eine Konstruktion, die uns erlaubt die unteren Flussschranken zu entfernen.

Satz 2.9 Es gibt genau dann ein *b*-transshipment f mit $l \le f \le c$, wenn folgende Bedingungen gelten:

- 1. $\sum_{v \in V} b_v = 0$,
- 2. $l \leq c$ und
- 3. $\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(U)} c_a \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(U)} l_a \ge \sum_{v \in U} b_v$ für alle $U \subseteq V$.

Darüber hinaus kann f ganzzahlig gewählt werden, wenn b, l und c ganzzahlig sind.

Beweis Wir definieren c' und b' gemäß

$$c_a' = c_a - l_a$$

und

$$b'_{v} = b_{v} + \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} l_{a} - \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} l_{a}.$$

Aus Definition 2.4 folgt, dass f' genau dann ein b'-transshipment ist, wenn f'+l ein b-transshipment ist. Nun wenden wir den Satz von Gale auf unseren Graphen mit rechter Seite b' und Kapazitäten c' an. Wir sehen, dass $c' \ge 0$ äquivalent zu $l \le c$ ist und dass die erste Bedingung des Satzes von Gale immer erfüllt ist. Es bleibt zu zeigen, dass die dritte

20 2 Flüsse

Bedingung des Satzes von Gale äquivalent zur dritten Bedingung dieses Satzes ist. Sei also $U \subseteq V$. Dann gilt

$$\sum_{v \in U} b'_v = \sum_{v \in U} b_v + \sum_{v \in U} \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} l_a - \sum_{v \in U} \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} l_a$$
$$= \sum_{v \in U} b_v + \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(U)} l_a - \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(U)} l_a.$$

Ebenso gilt

$$\sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} c_a' = \sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} c_a - \sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} l_a$$

und somit ist die Bedingung

$$\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(U)} c'_a \ge \sum_{v \in U} b'_v$$

äquivalent zu

$$\sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} c_a - \sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} l_a \ge \sum_{v \in U} b_v + \sum_{a \in \delta^{\mathrm{in}}(U)} l_a - \sum_{a \in \delta^{\mathrm{out}}(U)} l_a.$$

П

Dies ist nach Umstellen äquivalent zur Behauptung.

Ein weiterer Spezialfall ist der Fall, dass wir eine Zirkulation suchen, d. h. dass b=0 gilt. Das ist dann der Satz von Hoffman.

Korollar 2.10 (Hoffman's circulation theorem). Es gibt genau dann eine Zirkulation f, welche $l \le f \le c$ erfüllt, wenn folgende Bedingungen gelten:

- 1. l < c und
- 2. $\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(U)} c_a \ge \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(U)} l_a$ für alle $U \subseteq V$.

Darüber hinaus kann f ganzzahlig gewählt werden, wenn l und c ganzzahlig sind.

Was haben wir jetzt davon? Wir können die zulässigen Angebots- und Nachfragemuster in einem Netz charakterisieren ohne den konkreten Fluss angeben zu müssen. Später werden wir sehen, dass dies zum Beispiel einen einfachen Beweis ermöglicht, dass sich bei simplen Energiemarktmodellen Preiszonen einstellen, die durch die Engpässe, d.h. durch gesättigte Kanten, im Netz bestimmt sind. Dieses Thema schauen wir uns genauer in Kap. 8 an.

2.4 Projekt: Min-Cost-Flow

Wir kommen nun zu einem sehr wichtigen Bestandteil dieses Buches: den Rechnerprojekten. Hier haben Sie die Möglichkeit, die behandelten Themen an konkreten Problemen auszuprobieren und so ein deutlich tieferes Verständnis zu erlangen. Insbesondere ein Gefühl dafür zu bekommen, welche Methoden sich gut "vom Blatt Papier in den Rechner übertragen" lassen, ist etwas, was sich mit diesen Projekten sehr gut trainieren lässt.

Die Programme, die Sie in diesen Projekten schreiben, lassen sich grob in vier Schichten teilen. Eine erste Schicht, die die Daten einliest und in eine sinnvolle interne Datenstruktur speichert. Eine zweite Schicht, die diese Datenstruktur nutzt und daraus ein Optimierungsproblem erzeugt. Diese Schicht wird typischerweise Modellierungsschicht genannt. Die dritte Schicht, die oft die Hauptarbeit übernimmt und das entstandene Optimierungsproblem löst, bezeichnen wir oft etwas salopp als "Löser". Zuletzt gibt es die vierte Schicht, die die Lösung ausliest, analysiert, graphisch darstellt, etc.

In den meisten Projekten werden nicht alle dieser Schichten vorhanden sein, da wir auf einzelne Teile einen stärkeren Fokus legen. In der Praxis treten aber immer alle Schichten auf. Wir werden hier unseren Fokus auf Schicht 2 und 3 legen. Wenn Sie aber die Methoden in der Praxis anwenden, werden Sie auch sehr viel Arbeit in Schicht 1 und 4 investieren müssen.

Das erste Projekt ist zum Aufwärmen gedacht, um Sie mithilfe einer einfachen Problemstellung an diesen Aufbau zu gewöhnen. Für dieses erste Projekt empfehlen wir Ihnen Python (https://www.python.org) als Programmiersprache, da Sie hier eine große Auswahl an Bibliotheken vorfinden, um die verschiedenen Aufgaben zu lösen und Sie Python auf jedem gebräuchlichen System verhältnismäßig unproblematisch installieren können. Für die erste Schicht empfehlen wir Ihnen, die Python-Bibliothek NetworkX (https://networkx.github.io) zu nutzen, da Sie dort eine reichhaltige Auswahl an Methoden zur Manipulation aber auch zur Visualisierung von Graphen zur Verfügung gestellt bekommen. Python und NetworkX sind kostenlos und unter sehr freizügigen Lizenzen erhältlich.

Als Löser empfehlen wir Ihnen Gurobi (http://www.gurobi.com), da es zu den schnellsten LP- und MIP-Lösern auf dem Markt zählt und Sie komfortable und schnelle Interfaces für die geläufigsten Programmiersprachen – wie z.B. Python – nutzen können. Dies erlaubt eine relative enge Verbindung der zweiten und dritten Schicht. Gurobi ist eine kommerzielle Software, bietet aber eine kostenlose akademische Lizenz an. Als Alternative empfehlen wir CLP (https://projects.coin-or.org/Clp) – ein guter LP-Löser, der unter einer Open-Source-Lizenz erhältlich ist.

Wenn Sie Gurobi oder CLP nicht verwenden können oder möchten, legen wir Ihnen die Python-Bibliothek Pyomo (http://www.pyomo.org) ans Herz, die es Ihnen ermöglicht, Löser-unabhängig Optimierungsmodelle zu spezifizieren und an verschiedene Löser zu übergeben.

22 2 Flüsse

Kommen wir nun zu Ihrer eigentlichen Aufgabe. Unter der URL

http://elib.zib.de/pub/mp-testdata/mincost/netg/

finden Sie eine Testbibliothek mit Min-Cost-Flow-Instanzen. Diese sind im sogenannten DIMACS-Format gegeben, wozu Sie eine Beschreibung ebenfalls unter dieser URL oder im dem Artikel von Klingman et al. (1974) finden.

Ihre Aufgabe ist es, die Daten einzulesen, die entsprechenden Min-Cost-Flow-Probleme als LP zu modellieren, mit einem Löser Ihrer Wahl zu lösen und die Laufzeiten und die Ergebnisse geeignet darzustellen.

Überlegen Sie sich, wie Sie die Zulässigkeit und Optimalität der erhaltenden Lösungen überprüfen können. Überlegen Sie sich außerdem, wie Sie sich am Ende davon überzeugen können, dass Ihr Programm wirklich funktioniert und am Ende auch tatsächlich das implementierte Modell stimmt.

Wenn Ihre Graphenbibliothek einen eigenen Algorithmus zum Lösen von Min-Cost-Flow-Problemen anbietet oder Sie verschiedene LP-Löser nutzen können, vergleichen Sie das Ergebnis des LP-Lösers mit anderen Implementierungen oder Verfahren. Ist z.B. eines der beiden Verfahren immer schneller? Falls ja, was könnte ein Grund dafür sein? Wenn nicht, können Sie eine Entscheidungshilfe geben, wann man welches Verfahren verwenden sollte?

Bei der Ausgabe der Lösung können Sie sich selbst überlegen, wie viel Arbeit Sie sich machen möchten. Sie sollten mindestens den Wert der Optimallösung und die Laufzeit Ihres Programms ausgeben. Wenn Sie hier mehr Arbeit investieren möchten, ist es interessant, sich den optimalen Fluss im Graphen zu visualisieren. Hier bietet Ihnen eine Bibliothek wie NetworkX reichhaltige Funktionen.

Zum Abschluss noch ein paar Anmerkungen zur Implementierung: Viele Graphenbibliotheken können das DIMACS-Format direkt einlesen; schauen Sie in die Anleitung. Unter

https://github.com/m-schmidt-math-opt/Optimierung-von-Versorgungsnetzwerken

stellen wir Ihnen eine Beispielimplementierung der ersten Schicht in Python unter Nutzung von NetworkX zur Verfügung. Diese können Sie als Vorlage für Ihre eigene Implementierung nutzen.

Aufgaben

Aufgabe 2.1 Transformieren Sie ein *b*-transshipment-Problem auf einem gerichteten Graphen G = (V, A) mit Flüssen $f : A \to \mathbb{R}$ in ein äquivalentes *b*-transshipment-Problem mit nichtnegativen Flüssen $f' : A \to \mathbb{R}_{>0}$.

Literatur 23

Aufgabe 2.2 Zeigen Sie, dass das Kürzeste-Wege-Problem ein Spezialfall des Min-Cost-Flow-Problems ist.

Aufgabe 2.3 Sei G = (V, A) ein gerichteter Graph und $c : A \to \mathbb{R}_{>0}$ Kantenkapazitäten. Betrachten Sie die Schnittfunktion $C : 2^V \to \mathbb{R}$, die jeder Knotenmenge, die Kapazität Ihres induzierten Schnitts zuordnet:

$$C(U) = \operatorname{cap}(\delta^{\operatorname{out}}(U))$$
 für alle $U \subseteq V$.

Zeigen Sie nun die folgende Aussage: Es gilt

$$C(U) + C(W) \ge C(U \cup W) + C(U \cap W)$$

für alle $U, W \subseteq V$.

Literatur

- Ahuja, R. K., Magnanti, T. L., & Orlin, J. B. (1993). *Network flows*. Upper Saddle River: Prentice-Hall. Chvátal, V. (1983). *Linear programming. Series of books in the mathematical sciences*. W. H. Freeman. ISBN 9780716715870.
- Ford, L. R., Jr., & Fulkerson, D. R. (1962). *Flows in networks*. Princeton: Princeton University Press. Gale, D. (1957). A theorem on flows in networks. *Pacific Journal of Mathematics*, 7, 1073–1082. ISSN 0030-8730.
- Garey, M. R., & David, S. J. (1990). Computers and intractability. A guide to the theory of NP-completeness. New York: W. H. Freeman. ISBN 0716710455.
- Klingman, D., Napier, A., & Stutz, J. (1974). NETGEN: A program for generating large scale capacitated assignment, transportation, and minimum cost flow network problems. *Management Science*, 20(5), 814–821. https://doi.org/10.1287/mnsc.20.5.814.
- Korte, B., & Vygen, J. (2006). *Combinatorial optimization. Theory and algorithms: Bd. 21. Algorithms and Combinatorics* (S. xvi + 597). Berlin: Springer. ISBN 978-3-540-25684-7.
- Schrijver, A. (2003). Combinatorial optimization. Polyhedra and Efficiency: Bd. A. Paths, flows, matchings (S. xxxviii + 647). Berlin: Springer. ISBN 3-540-44389-4.

Mehrgüterflüsse und Netzwerkdesign

3

Zusammenfassung

In diesem Kapitel diskutieren wir zwei Erweiterungen des Flussmodells aus dem vorherigen Kapitel. Einmal betrachten wir die Situation, in der mehrere Güter durch unser Netz fließen. Zum anderen fragen wir uns, wie wir Netzerweiterungen modellieren können. Mehrere Güter zu berücksichtigen ist essentiell, wenn wir beispielsweise Verkehrsnetze modellieren wollen. Dass die Nutzerinnen unterschiedliche Start- und Zielpunkte haben, ist zentral, um diese Netze korrekt abzubilden. Mehrere Güter treten auch bei Telekommunikationsnetzen auf, anhand derer wir Modelle für das Netzwerkdesignproblem diskutieren. Lösungen dieser Modelle beantworten die Frage, wie ich ein Netz kostenoptimal erweitern kann um damit gegebene Nachfragen zu befriedigen.

Es gibt viele Varianten, die Flussmodelle aus dem vorherigen Kapitel zu erweitern. Wir wählen hier zwei aus: Mehrgüterflüsse und Netzwerkdesign. Die erste Variante führt wieder zu einem linearen Problem, welches aber typischerweise so groß ist, dass sich spezielle Dekompositionstechniken lohnen. Die zweite Variante behandelt die Frage, wie man mit Netzen umgeht, deren Kapazität nicht ausreicht, um die vorhandenen Bedarfe zu decken. Wie soll ich dann die existierenden Kapazitäten erweitern? Die zwei Varianten hängen aber auch auf andere Weise zusammen. Eine einfache Variante, Netzwerkdesignprobleme zu modellieren, nutzt zunächst eine Umformulierung als Mehrgüterflussproblem. Das Netzwerkdesignproblem führt uns dann auch zu einer neuen Klasse von Optimierungsproblemen: gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme. Wir werden in diesem Kapitel noch keine Lösungsverfahren diskutieren; dies verschieben wir auf Kap. 10.

3.1 Mehrgüterflüsse

In vielen Fällen ist die Annahme, dass wir nur ein Gut transportieren, vollkommen ausreichend. Gerade bei Stromnetzen ist es egal, wie der Strom erzeugt wurde. Wichtig ist nur, wie viel und wo er erzeugt wurde. Gerade in Verkehrs- und Telekommunikationsanwendungen ist dies aber nicht der Fall. Hier ist unser Ziel, nicht nur die richtige Menge zu transportieren, sondern auch sicherzustellen, dass genügend Fluss von der richtigen Quelle zur richtigen Senke gelangt. Nichtsdestotrotz wird das Netz von allen genutzt. Diese Interaktion der verschiedenen Güter macht das Problem schwieriger als es der Fall mit nur einem Gut ist. Wir werden in diesem Kapitel zunächst die typischen Definitionen kennenlernen, um dann zu sehen, warum und wie Dekompositionstechniken zum Einsatz kommen können. Zuletzt schließen wir das Kapitel mit einem Beispiel aus dem Verkehrsbereich ab.

Wir beginnen mit der Definition eines Mehrgüterflusses.

Definition 3.1 (Mehrgüterfluss). Seien G = (V, A) und H = (V, C) gerichtete Graphen. Sei $c: A \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ und $b: C \to \mathbb{R}_{\geq 0}$. Dann heißt die Familie $(f^i)_{i \in C}$ mit $f^i: A \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ für alle $i \in C$ ein Mehrgüterfluss zum Angebot b, wenn gilt:

- 1. $0 \leq \sum_{i \in C} f_a^i \leq c_a$ und
- 2. für jedes Gut i = (s, t) gilt, dass f^i ein s-t-Fluss vom Wert b_i ist.

Bemerkung 3.2 Zur Klarheit nennen wir *G* meist das *Netzwerk* und *H* den *Angebotsgraphen*. Die Kanten des Angebotsgraphen nennen wir auch *Güter*.

Eine Beispielinstanz mit Netzwerk und Angebotsgraphen ist in Tab. 3.1 und Abb. 3.1 gegeben.

Es gibt noch zwei weitere übliche Methoden, die Güter zu spezifizieren: Wir können uns einfach eine Menge von Quelle-Ziel-Paaren vorgeben oder wir geben uns eine Matrix vor, die zu jedem Knotenpaar (v, w) den entsprechenden Wert b_{vw} enthält. Letztere Variante ist vor allem bei Verkehrsproblemen üblich. Die entsprechende Matrix ist dann als OD-Matrix bekannt, wobei OD für origin-destination steht.

Wie im Fall eines Gutes gibt es verschiedene Problemvarianten. Man kann zum Beispiel den Vektor *b* weglassen und versuchen, den Gesamtfluss zu maximieren. Wir werden hier aber das Problem, das analog zum Minimal-Kosten-Fluss-Problem ist, betrachten.

Tab. 3.1 Beispiel der Angebote für einen Mehrgüterfluss

Quelle	Senke	Menge
A	В	3
A	D	7
В	D	2

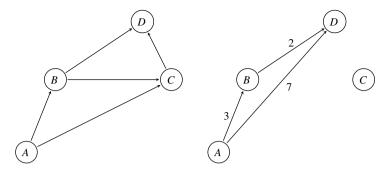


Abb. 3.1 Netzwerk (links) und Angebotsgraph (rechts) für das Mehrgüterfluss-Beispiel aus Tab. 3.1

Außerdem können wir auch wieder ungerichtete Varianten betrachten, wobei man ein wenig aufpassen muss: Ist es erlaubt, dass verschiedene Güter die gleiche Leitung in unterschiedliche Richtungen nutzen?

Die Standardmodellierung als lineares Optimierungsproblem lautet

$$\min \quad \sum_{i \in C} \sum_{a \in A} w_a^i f_a^i \tag{3.1a}$$

s.t.
$$\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a^i - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a^i = 0 \quad \text{für alle} \quad i = (s, t) \in C, \ v \neq s, \ v \neq t, \tag{3.1b}$$

$$\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(s)} f_a^i - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(s)} f_a^i = b^i \quad \text{für alle} \quad i = (s, t) \in C, \tag{3.1c}$$

$$\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(t)} f_a^i - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(t)} f_a^i = -b^i \quad \text{für alle} \quad i = (s, t) \in C, \tag{3.1d}$$

$$0 \le \sum_{i \in C} f_a^i \le c_a \quad \text{für alle} \quad a \in A. \tag{3.1e}$$

Diese Formulierung hat den Vorteil, dass sie einfach zu verstehen ist und auch sofort folgt, dass wir das Problem in Polynomialzeit lösen können. Die Bedingung, die den großen Unterschied zu den Problemen aus dem vorherigen Kapitel ausmacht, ist die Bedingung (3.1e). Sie koppelt die verschiedenen Güterflüsse miteinander und verhindert, dass das Problem einfach in |C|-viele Ein-Gut-Flussprobleme zerfällt. Wir verlieren durch diese Bedingung auch die Eigenschaft, dass wir aus ganzzahligen Daten immer sofort auf die Existenz einer ganzzahligen Lösung schließen können. Ebenso gibt es keine kombinatorischen Algorithmen, die das Problem lösen. Das heißt, um zu zeigen, dass das Problem in Polynomialzeit lösbar ist, muss man ausnutzen, dass allgemeine lineare Programme in Polynomialzeit lösbar sind. Die besten kombinatorischen Algorithmen liefern ε -optimale Resultate in einer Zeit, die polynomial in $1/\varepsilon$ und den Eingabedaten ist; für ein erstes Resultat siehe Garg und Könemann (2007).

3.1.1 Spaltenerzeugung

Trotz der polynomialen Größe ist das lineare Programm (3.1) für die Praxis oft zu groß: Wir benötigen |C||A| Flussvariablen und |C||V|-viele Flusserhaltungsgleichungen. Dies wird bei großen Netzen für viele Güter sehr unhandlich. Insbesondere ist häufig aus der Netztopologie ersichtlich, dass für ein Gut nur wenige Knoten und Kanten überhaupt plausible Kandidaten sind, in der Lösung aufzutauchen. Schon früh wurde daher überlegt, wie man diese linearen Programme besser in den Griff bekommen kann und dabei die Netzwerkstruktur ausnutzt.

Die Idee, die von Ford und Fulkerson (1962) beschrieben wurde, ist eine andere Formulierung zu wählen; die sogenannte Wegformulierung. Wir betrachten zu jedem Gut $i=(s,t)\in C$ die Menge \mathcal{P}_i aller Wege von s nach t. Nun führen für jeden Weg $P\in\mathcal{P}_i$ eine Flussvariable f_P^i ein. Das entsprechende Optimierungsproblem sieht dann wie folgt aus:

$$\min \sum_{i \in C} \sum_{P \in \mathcal{P}_i} \left(\sum_{a \in P} w_a^i \right) f_P^i \tag{3.2a}$$

s.t.
$$\sum_{P \in \mathcal{P}_i} f_P^i = b_i \quad \text{für alle} \quad i \in C, \tag{3.2b}$$

$$\sum_{i \in C} \sum_{\substack{P \in \mathcal{P}_i:\\a \in P}} f_P^i \le c_a \quad \text{für alle} \quad a \in A, \tag{3.2c}$$

$$0 \le f_P^i$$
 für alle $i \in C, P \in \mathcal{P}_i$. (3.2d)

Es ist erstmal nicht offensichtlich, warum diese Formulierung in irgendeinem Sinn besser sein sollte. Die Anzahl der Variablen kann im schlimmsten Fall exponentiell in der Größe des Netzwerks sein. Somit ist dieses lineare Optimierungsproblem erstmal nicht handhabbar. Die Idee ist aber nun, zunächst nicht die vollständigen Mengen \mathcal{P}_i , sondern jeweils nur eine sehr kleine Teilmenge \mathcal{P}_i' von Wegen, zu betrachten. Das heißt, wir betrachten folgendes reduziertes primales Problem:

$$\min \sum_{i \in C} \sum_{P \in \mathcal{P}'_i} \left(\sum_{a \in P} w_a^i \right) f_P^i \tag{3.3a}$$

s.t.
$$\sum_{P \in \mathcal{P}'_i} f_P^i = b_i \quad \text{für alle} \quad i \in C, \quad [\alpha_i]$$
 (3.3b)

$$\sum_{i \in C} \sum_{\substack{P: P \in \mathcal{P}'_i, \\ a \in P}} f_P^i \le c_a \quad \text{für alle} \quad a \in A, \quad [-\beta_a]$$
 (3.3c)

$$0 \le f_P^i$$
 für alle $i \in C, P \in \mathcal{P}'_i$. (3.3d)

Wenn wir die Mengen \mathcal{P}_i' geeignet wählen, sind sie einerseits klein genug, so dass wir das Problem lösen können, und andererseits groß genug, um zu einem zulässigen reduzierten Problem (3.3) zu führen. In diesem Fall erhalten wir qua Konstruktion durch das Lösen des reduzierten Problems eine zulässige Lösung für unser Ausgangsproblem. Nun ist aber unklar, ob diese zulässige Lösung auch eine Optimallösung ist. Dazu müssen wir prüfen, ob unsere Lösung sich zu einem primal-dualen optimalen Paar ergänzen lässt. Betrachten wir also das duale Problem zu unserem Ausgangsproblem (3.2):

$$\max \sum_{i \in C} b_i \alpha_i - \sum_{a \in A} c_a \beta_a \tag{3.4a}$$

s.t.
$$\alpha_i - \sum_{a \in P} \beta_a \le \sum_{a \in P} w_a^i$$
 für alle $i \in C, P \in \mathcal{P}_i$, (3.4b)

$$0 \le \beta_a$$
 für alle $a \in A$. (3.4c)

Die wichtige Beobachtung hier ist nun, dass die Anzahl der Dualvariablen unabhängig von der Wegmenge ist. Die Anzahl der Variablen hängt nur von der Anzahl der Kanten im Netzwerk (β_a für $a \in A$) und der Anzahl der Güter (α_i für $i \in C$) ab. Wie kommen wir jetzt zu einer zulässigen Duallösung? Nun, unser reduziertes Problem (3.3) hat ja selbst ein Duales und da kennen wir eine Duallösung, da wir dieses reduzierte Problem zur Optimalität gelöst haben. Und da in beiden Problemen die gleichen Variablen auftauchen, ist diese Duallösung des reduzierten Problems, nennen wir sie (α' , β'), unser Kandidat. Was hindert diese Lösung zulässig in Problem (3.4) zu sein? Es könnte ein Gut i und einen Weg P geben, so dass Bedingung (3.4b) verletzt ist. Um so einen Weg zu finden bzw. seine Existenz auszuschließen, formen wir die Bedingung um. Für festes Gut i ist Bedingung (3.4b) äquivalent zu

$$\alpha_i' \leq \sum_{a \in P} \left(\beta_a' + w_a^i\right) \quad \text{für alle} \quad P \in \mathcal{P}_i.$$

Das wiederum lässt sich aber auch umschreiben als

$$\alpha_i' \le \min_{P \in \mathcal{P}_i} \left\{ \sum_{a \in P} \left(\beta_a' + w_a^i \right) \right\}.$$

Anders gesagt, um zu entscheiden, ob die Nebenbedingung verletzt ist, müssen wir nur den kürzesten Weg zwischen Quelle und Senke von Gut i berechnen, wobei wir als Kantengewichte $\beta'_a + w^i_a$ für jede Kante $a \in A$ wählen. Wenn für jedes Gut i die Länge des kürzesten Weges mindestens α'_i beträgt, ist unsere Duallösung zulässig und wir haben eine Optimallösung gefunden. Ansonsten haben wir auch gleich neue Wege gefunden, mit welchen wir unsere Wegmengen \mathcal{P}_i anreichern sollten. Somit ist auch klar, dass dieses Verfahren irgendwann terminieren muss, wenn wir immer alle verletzenden Wege hinzufügen.

Das hier skizzierte Verfahren ist unter dem Namen *Spaltenerzeugung* (engl. column generation) bekannt. Der Name erklärt sich daraus, dass wir jeweils neue Variablen im Primalen, d.h. aus Matrixsicht Spalten, hinzufügen. In unserem Fall sind diese durch das

Gut i und den Weg P indiziert. Das Problem, welches wir lösen müssen, um zu den neuen Spalten zu kommen, wird auch das Pricing-Problem bezeichnet.

Eine Sicht auf diese Konstruktion ist, sie als Erweiterung des primalen Simplex-Algorithmus zu betrachten. Dann sieht man, dass das Pricing-Problem dem Schritt entspricht, die eingehende Variable zu bestimmen. Die Idee, die hier zugrunde liegt, wurde später von Dantzig und Wolfe (1960) verallgemeinert und ist unter dem Name Dantzig-Wolfe-Dekomposition bekannt. Diese und andere Zugänge finden sich in verschiedenen Lehrbüchern der Optimierung wie zum Beispiel von Burkard und Zimmermann (2012) und Chvátal (1983).

3.1.2 Umlaufplanung

Ein typisches Beispiel für die Verwendung von Mehrgüterflüssen ist die *Umlaufplanung*. Ausgangssituation ist ein Fahrplan und eine Menge von verschiedenen Fahrzeugen, die eingesetzt werden können. Dabei ist uns der Fahrplan durch eine Menge von Fahrplanfahrten U gegeben, wobei jede Fahrt u einen Start- und einen Endzeitpunkt und gewisse Kosten w_u hat. Wir gehen davon aus, dass es verschiedene Typen von Fahrzeugen gibt, die wir mit T bezeichnen. Für jeden Typ $i \in T$ stehen maximal K_i Fahrzeuge zu Verfügung. Wir erlauben, dass gewisse Fahrten nur von gewissen Fahrzeugtypen ausgeführt werden können.

Zur Modellierung als Flussproblem konstruieren wir zunächst einen passenden Graph. Wir starten mit zwei Knoten s und t. Für jede Fahrt u führen wir zwei Knoten $u^{\rm start}$ und $u^{\rm end}$ und eine Kante $a_u = (u^{\rm start}, u^{\rm end})$ ein; diese Kante versehen wir mit Kapazität 1. Diese Kanten nennen wir Fahrtkanten. Nun verbinden wir die Quelle s mit jedem Startknoten $u^{\rm start}$ und jeden Endknoten $u^{\rm end}$ mit der Senke t. Die übrigen Kanten entstehen dadurch, dass wir für zwei Fahrten u und v den Knoten $u^{\rm end}$ mit $v^{\rm end}$ verbinden, wenn die Fahrt v im Anschluss an die Fahrt u durchgeführt werden kann. Diese Kanten nennen wir Umsetzkanten.

Als Beispiel betrachten wir dazu eine Instanz, die in Teilen in Tab. 3.2 gegeben ist. Die dort gegebenen Fahrten führen dann zu einem Graph *G*, der in Abb. 3.2 dargestellt ist.

Die Kosten wählen wir nun so, dass sie den Kosten für das Einsetzen, die Fahrten und das Umsetzen in Abhängigkeit vom Typ entsprechen. Wenn wir diesen Graphen nun als G = (V, A) bezeichnen, erhalten wir folgendes Modell in der Wegformulierung:

Tab. 3.2 Ausschnitt aus den Fahrten einer Umlaufsplanungsinstanz. Start und Ziel sind immer durch Knoten/Zeit-Paare gegeben

Fahrt	Start	Ziel
A	(<i>u</i> , 0)	(v, 2)
B	(u, 2)	(v, 4)
C	(v, 3)	(w,5)
D	(v, 5)	(w,7)
:	:	:

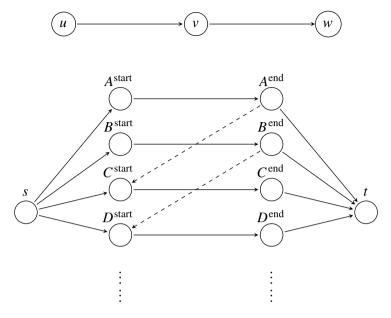


Abb. 3.2 Der Graph zur Instanz aus Tab. 3.2

$$\begin{aligned} & \min \quad \sum_{i \in T} \sum_{a \in A} w_a \, f_a^i \\ & \text{s.t.} \quad \sum_{i \in T} \sum_{\substack{a_u \in P: \\ P \in \mathcal{P}_i}} f_P^i = 1 \quad \text{für alle} \quad u \in U, \\ & \sum_{\substack{P \in \mathcal{P}_i \\ P \in \mathcal{P}_i}} f_P^i \leq K_i \quad \text{für alle} \quad i \in T, \\ & f_P^i \in \{0,1\} \quad \text{für alle} \quad i \in T, \ P \in \mathcal{P}_i. \end{aligned}$$

Dies ist ein Beispiel für Optimierungsprobleme wie sie in der Optimierung von Verkehrsnetzen auftreten. Ein weiteres Beispiel mit praktischer Relevanz ist die *Linienplanung*. Es wird dabei geplant, welche Haltestellen in einem Netz von welchen z. B. Buslinien angefahren werden. Hier werden auch in realen Netzen Optimierungstechniken verwendet (Borndörfer et al. 2012). Bei diesen Problemen sind auch Techniken wie Spaltenerzeugung entscheidend; siehe z. B. Borndörfer et al. (2007). Für mehr Beispiele aus dem Eisenbahnwesen sei auf den Sammelband Borndörfer et al. (2018) verwiesen.

3.2 Netzwerkdesign

Bis jetzt haben wir uns angesehen, wie wir einen bestimmten Fluss optimal in einem Netzwerk verteilen. Die nächste natürliche Frage ist: Was machen wir, wenn das Netz nicht für diesen zu realisierenden Transport reicht? In der Praxis investiert man dann in Ausbaumaßnahmen. Aber was ist der optimale Ausbau? In diesem Kapitel schauen wir uns das klassische Netzwerkdesignproblem an, wobei wir uns vor allem von den Problemen beim Entwerfen von Telekommunikationsnetzen leiten lassen. Wir werden hier nur ein Basismodell vorstellen, für eine Übersicht über detailliertere Modelle aus der Telekommunikation und spezialisierte Verfahren, siehe Pióro und Medhi (2004).

3.2.1 Ein erstes Modell

Wir beginnen mit einer ähnlichen Ausgangssituation wie im Mehrgüterflussproblem. Gegeben ist ein gerichteter Graph G=(V,A), Güter C und Kapazitäten $c:A\to\mathbb{R}_{\geq 0}$. Der Unterschied liegt in den Angeboten $b:C\times V\to\mathbb{R}$. Wir nehmen an, dass es mehr als eine Quelle oder Senke geben kann. Jetzt ist aber das Problem, so wie es bisher dargestellt ist, typischerweise nicht zulässig. Das heißt, wir wollen nun neue Kapazität auf den Kanten installieren, so dass es zulässig wird.

Wir erlauben nun den Ausbau der Kanten mit einzelnen sogenannten Modulen und nehmen hier der Einfachheit an, dass es nur eine Sorte Modul pro Kante gibt. In der Praxis gibt es typischerweise mehrere Sorten. Jedes Modul erhöht die Kapazität um $c^{\rm ext}$ und kostet $w^{\rm ext}$. Genauer müssten wir hier zwischen den Installationskosten und den Nutzungskosten unterscheiden. Wir betrachten hier aber nur die Installationskosten. Für die Anzahl der installierten Module auf jeder Kante $a \in A$ führen wir eine ganzzahlige Variablen y_a ein. Damit sieht ein einfaches gemischt-ganzzahliges Modell wie folgt aus:

$$\begin{aligned} & \underset{y,f}{\min} & \sum_{a \in A} w_a^{\text{ext}} y_a \\ & \text{s.t.} & \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a^i - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a^i = b_v^i & \text{für alle } i \in C, \ v \in V, \\ & \sum_{i \in C} f_a^i - c_a^{\text{ext}} y_a \leq c_a & \text{für alle } a \in A, \\ & y_a \in \mathbb{Z}_{\geq 0} & \text{für alle } a \in A, \\ & f_a^i \geq 0 & \text{für alle } i \in C, \ a \in A. \end{aligned}$$
 (3.5)

Nun sind wir wieder in der Situation, dass wir – wie in der Umlaufplanung im letzten Abschnitt – die Ganzzahligkeit von Variablen gefordert haben. Techniken zur Lösung solcher gemischt-ganzzahliger Probleme diskutieren wir in allgemeinerem Kontext in Kap. 10.

3.2.2 Spezialfälle

Oft treten in der Praxis Spezialfälle dieses Problems auf. Der Fall, dass zum Beispiel noch kein Netz vorhanden ist, ist der Fall, in dem $c_a = 0$ für alle $a \in A$ gilt. Ein weiterer klassischer Spezialfall, der auch theoretisch gut verstanden ist, ist der des sogenannten survivable network design. Hier diskutieren wir nur einige Spezialfälle. Eine ausführliche Diskussion findet sich zum Beispiel in Korte und Vygen (2006) oder dem Buch von Stoer (1992).

Wir betrachten einen ungerichteten Graphen G=(V,E) und einen zweiten Graphen, den Anforderungsgraphen, H=(V,C), der ebenfalls ungerichtet ist. Für jede Kante $e=(v,w)\in C$ sei eine Zahl $k_e\in \mathbb{N}$ gegeben, die die gewünschte Anzahl der disjunkten Wege zwischen v und w angibt. Dazu sind uns wieder Kosten $w_e\in \mathbb{R}_{\geq 0}$ pro Kante gegeben. Wir suchen nun einen Subgraphen von G, so dass alle Verbindungswünsche des Anforderungsgraphen erfüllt sind, der möglichst kostengünstig bezüglich w ist.

Um ein MIP-Modell zu erhalten, können wir direkt Modell (3.5) als Grundlage nehmen. Die Idee ist dabei, das Netzwerk G=(V,E) in einen gerichteten Graphen umzuwandeln, indem wir jede Kante $e=\{v,w\}\in E$ durch zwei gerichtete Kanten $a^+=(v,w)$ und $a^-=(w,v)$ ersetzen. Die neue Kantenmenge bezeichnen wir mit A. Wir führen Variablen z ein, die uns angeben, ob eine gerichtete Kante ausgebaut wurde und koppeln diese mit den Ausbauvariablen y auf dem ungerichteten Graphen. Jede Kante $i=\{s,t\}\in C$ im Angebotsgraphen, entspricht einem Gut. Für dieses konstruieren wir einen Angebotsvektor

$$b_{v}^{i} = \begin{cases} -1, & v = s, \\ 1, & v = t, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei wir die Zuweisung der beiden Endknoten zu *s* und *t* willkürlich wählen können. Mit dieser Notation erhalten wir das Modell

$$\begin{split} & \underset{y,f}{\min} & \sum_{e \in E} w_e y_e \\ & \text{s.t.} & \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a^i - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a^i = b_v^i \quad \text{für alle} \quad i \in C', \ v \in V, \\ & f_a^i \leq y_a \quad \text{für alle} \quad a \in A, \ i \in C, \\ & z_{a^+} \leq y_e \quad \text{für alle} \quad e \in E, \\ & z_{a^-} \leq y_e \quad \text{für alle} \quad e \in E, \\ & z_a \in \{0,1\} \quad \text{für alle} \quad a \in A, \\ & y_e \in \{0,1\} \quad \text{für alle} \quad e \in E, \\ & f_a^i \geq 0 \quad \text{für alle} \quad i \in C, \ a \in A. \end{split}$$

Betrachten wir ein paar Spezialfälle des Problems: Wenn unser Anforderungsgraph nur eine Kante e=(s,t) mit $k_e=1$ enthält, suchen wir einfach einen kürzesten s-t-Weg in G. Wenn unser Anforderungsgraph der vollständige Graph ist und $k_e=1$ gilt, dann suchen wir einen aufspannenden Baum mit minimalen Kosten. Diese beiden Probleme sind einfach, d. h. in Polynomialzeit lösbar.

Dahingegen ist folgender Spezialfall NP-schwer: Wir betrachten eine Menge von Knoten T. Unser Anforderungsgraph ist der vollständige Graph auf den Knoten aus T und für jede Kante des Anforderungsgraphen gilt $k_e = 1$. Dann erhalten wir das sogenannte *Steinerbaum-Problem*. Dieses ist NP-schwer und ebenfalls wohlstudiert. Hier kann man verschiedenste Techniken verwenden wie MIP-Ansätze, vgl. z. B. Koch und Martin (1998), oder spezialisierte kombinatorische Verfahren wie z. B. in Hougardy et al. (2017).

3.2.3 Weitere Variante: Unsicherheit

Da das Design eines Netzwerks typischerweise eine langfristige Planungsaufgabe ist, sind die Daten – z. B. die Nachfragedaten – oft unsicher. Daher ist die Basisvariante des obigen Modells in der Regel nicht ausreichend und für jede spezielle Anwendung werden verschiedene Varianten betrachtet. Für einen Überblick siehe zum Beispiel Schmidt (2014).

Zwei Varianten sind von besonderem Interesse, da sie oft auch in anderen Zusammenhängen auftreten. Wenn wir annehmen, dass die Nachfrage unsicher ist und wir im Notfall noch Kapazität nachkaufen können, können wir das Problem als ein zweistufiges Optimierungsproblem mit Rekurs formulieren. Detaillierte Informationen zu diesem Problemtyp kann beispielsweise in Birge und Louveaux (2011) nachgelesen werden. Wenn wir dahingegen erreichen wollen, dass das Netz noch unsere Transporte erfüllen kann, wenn eine beliebige Kante ausfällt (sogenannte n+1-Ausfallsicherheit), wird das Ganze zu einem robusten Optimierungsproblem. Genauer ist diese Anforderung ein Spezialfall des sogenannten Γ -Ansatzes, der in Bertsimas und Sim (2003, 2004) und Sim (2004) eingeführt wurde. Eine allgemeine Einführung in die robuste Optimierung findet man beispielsweise in dem Buch von Ben-Tal et al. (2009).

3.3 Projekt: Netzwerkdesign

In diesem Projekt sollen Sie Netzwerkdesignprobleme lösen. Als Testbibliothek mit Beispielinstanzen nehmen wir dieses Mal die SNDLib, die Instanzen enthält, die Telekommunikationsnetzwerke darstellen. Teilweise beruhen diese Daten auch auf realen Netzen. Sie finden die Daten unter http://sndlib.zib.de/ und dort unter "Problem instances".

Tab. 3.3	Instanzfilter für	
die SNDLib-Instanzen		

Demand model	Directed demands (D)
Link model	Bidirected links (B)
Link capacity model	Modular link capacities (M)
Fixed-charge model	No fixed-charge costs (N)
Routing model	Continuous (C)
Admissible path model	All paths (A)
Hop-limit model	No hop limits (N)
Survivability model	No survivability (N)

Die Daten sind bereits so aufgearbeitet, dass Sie direkt zu verschiedenen Varianten des Netzwerkdesignproblems gehören. Speziell liegt ein Fokus der Bibliothek auf Ausfallsicherheit, so dass man hier verschiedene Anforderungen betrachten kann. Wir schlagen vor, dass Sie eine sehr einfache Variante des Problems betrachten, die sehr nah an der Diskussion dieses Kapitels bleibt. Dazu sollten Sie den Instanzfilter auf der Webseite wie in Tab. 3.3 einstellen. Wenn Sie Genaueres zu den Modellvarianten wissen oder eine genaue Spezifikation des Formats haben möchten, finden Sie alle Details in dem zugehörigen Artikel von Orlowski et al. (2009).

Ihre Aufgabe ist es nun, ein Programm zu schreiben, das das entsprechende Problem als MIP modelliert, löst und die Ergebnisse geeignet darstellt. Auf der Webseite der SND-Lib finden Sie für viele Instanzen sowohl zulässige Lösungen als auch Schranken an den Optimalwert. Wie vergleichen sich Ihre Ergebnisse damit? Überlegen Sie sich auch, wie Sie sicherstellen können, dass Ihre Ergebnisse korrekt sind. Auch hier bietet sich wieder eine Visualisierung der Netzwerke an – entsprechende Koordinaten sind in den Instanzen gegeben.

Wir empfehlen Ihnen die gleiche Umgebung zu nutzen, die Sie im Projekt aus dem vorherigen Kapitel genutzt haben. Als MIP-Löser können Sie entweder wieder Gurobi oder die Open-Source-Alternative CBC (https://projects.coin-or.org/Cbc) verwenden. Wir stellen Ihnen unter

https://github.com/m-schmidt-math-opt/Optimierung-von-Versorgungsnetzwerken

als Inspiration einen Python-Code zum Einlesen des Formats zur Verfügung, den Sie als Vorlage für Ihre eigene Implementierung nutzen können.

Aufgaben

Aufgabe 3.1 Konstruieren Sie ein Beispiel für das Mehrgüterflussproblem mit ganzzahligen Kantenkapazitäten, das keinen ganzzahligen Optimalfluss zulässt.

Aufgabe 3.2 Betrachten Sie das Steinerbaumproblem, d. h. das Survivable-Networkdesign-Problem, bei dem die Anzahl der gewünschten disjunkten Wege konstant 1 und der Angebotsgraph ein vollständiger Graph ist. Zeigen Sie, dass für w>0 die Optimallösung immer ein Baum sein muss, was den Namen rechtfertigt.

Literatur

- Ben-Tal, A., El Ghaoui, L., & Nemirovski, A. (2009). *Robust optimization*. Princeton: Princeton University Press.
- Bertsimas, D., & Sim, M. (2003). Robust discrete optimization and network flows. *Mathematical Programming*, 98(1), 49–71. https://doi.org/10.1007/s10107-003-0396-4. ISSN: 1436–4646.
- Bertsimas, D., & Sim, M. (2004). The price of robustness. *Operations Research*, 52(1), 35–53. https://doi.org/10.1287/opre.1030.0065.
- Birge, J. R., & Louveaux, F. (2011). Introduction to stochastic programming. New York: Springer Science & Business Media. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-0237-4.
- Borndörfer, R., Friedow, I., & Karbstein, M. (2012). Optimierung des Linienplans 2010 in Potsdam. *Der Nahverkehr*, 30(4), 34–39.
- Borndörfer, R., Grötschel, M., & Pfetsch, M. (2007). A column-generation approach to line planning in public transport. *Transportation Science*, 41(1), 123–132. https://doi.org/10.1287/trsc.1060.0161.
- Borndörfer, R., Klug, T., Lamorgese, L., Mannino, C., Reuther, M., & Schlechte, T. (Hrsg.). (2018). Handbook of optimization in the railway industry (Bd. 268). https://doi.org/10.1007/978-3-319-72153-8. ISBN: 978-3-319-72152-1.
- Burkard, R. E., & Zimmermann, U. T. (2012). *Einführung in die Mathematische Optimierung*. Berlin: Springer Spektrum.
- Chvátal, V. (1983). *Linear programming*. Series of books in the mathematical sciences. New York: Freeman. ISBN: 9780716715870.
- Dantzig, G. B., & Wolfe, P. (1960). Decomposition principle for linear programs. *Operations Research*, 8(1), 101–111.
- Ford, L. R., & Fulkerson, D. R. (1962). Flows in networks. Princeton: Princeton University Press.
- Garg, N., & Könemann, J. (2007). Faster and simpler algorithms for multicommodity flow and other fractional packing problems. *SIAM Journal on Computing*, *37*(2), 630–652. https://doi.org/10.1137/S0097539704446232. ISSN: 0097-5397.
- Hougardy, S., Silvanus, J., & Vygen, J. (2017). Dijkstra meets Steiner: A fast exact goal-oriented Steiner tree algorithm. *Mathematical Programming Computation*, 9(2), 135–202. https://doi.org/10.1007/s12532-016-0110-1. ISSN: 1867-2949.
- Koch, T., & Martin, A. (1998). Solving Steiner tree problems in graphs to optimality. *Networks*, 32(3), 207–232. ISSN: 0028-3045. https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-0037(199810)32:3<207:: AID-NET5>3.0.CO;2-O.
- Korte, B., & Vygen, J. (2006). Combinatorial optimization (S. xvi+597). Third. Bd. 21. Algorithms and Combinatorics. Theory and algorithms. Berlin: Springer. ISBN: 978-3-540-25684-7.

Literatur 37

Orlowski, S., Wessäly, R., Pióro, M., & Tomaszewski, A. (2009). SNDlib 1.0-survivable network design library. *Networks*, 55(3), 276–286. https://doi.org/10.1002/net.20371.

- Pióro, M., & Medhi, D. (2004). Routing, flow, and capacity design in communication and computer networks. Amsterdam: Elsevier.
- Schmidt, D. R. (2014). Robust design of single-commodity networks. Diss. Universität zu Köln. http://kups.ub.uni-koeln.de/id/eprint/5872.
- Sim, M. (2004). Robust optimization. Diss. Massachusetts Institute of Technology.
- Stoer, M. (1992). *Design of survivable networks. Bd. 1531. Lecture Notes in Mathematics* (S. ii+205). Berlin: Springer. https://doi.org/10.1007/BFb0088963. ISBN: 3-540- 56271-0.

Optimalitätsbedingungen für nichtlineare Optimierungsprobleme

Zusammenfassung

Der Satz von Karush, Kuhn und Tucker über notwendige Bedingungen erster Ordnung ist einer der wichtigsten Sätze der Optimierung. In diesem Kapitel diskutieren wir diesen Satz, führen die dazu notwendigen Begriffe wie zum Beispiel Regularitätsbedingungen ein und illustrieren die KKT-Bedingungen anhand verschiedener Beispiele. Anschließend diskutieren wir die Anwendung des Satzes auf den Spezialfall konvexer Probleme und führen in das Thema der Sensitivitätsanalyse ein.

In diesem Kapitel wenden wir uns Bedingungen zu, die in Optimalstellen allgemeiner kontinuierlicher Optimierungsprobleme gelten müssen. Diese benötigen wir später beispielsweise bei der Diskussion von Gleichgewichten für die Modellierung des deutschen Strommarktes in Kap. 7. Dieses Kapitel hat vor allem den Zweck, zentrale Resultate zu sammeln, die wir später bei konkreten Problemstellungen aus dem Bereich der Versorgungsnetze anwenden werden. Wir werden allerdings nicht die komplette Theorie herleiten. Die entsprechenden Hintergrundinformationen und Beweise, die wir hier auslassen, können Sie beispielsweise in den Lehrbüchern von Bertsekas (2016), Geiger und Kanzow (2002) und Nocedal und Wright (2006) nachlesen. Wir beschäftigen uns im Folgenden mit den Optimalitätsbedingungen erster Ordnung für restringierte Optimierungsprobleme der allgemeinen Form

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) \tag{4.1a}$$

s.t.
$$c_i(x) = 0$$
 für alle $i \in \mathcal{E}$, (4.1b)

$$c_i(x) \ge 0$$
 für alle $i \in \mathcal{I}$, (4.1c)

wobei wir davon ausgehen, dass sowohl die Zielfunktion $f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ als auch die Gleichungs- und Ungleichungsnebenbedingungen $c_i: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, mindestens

[©] Springer-Verlag GmbH Deutschland, ein Teil von Springer Nature 2019 L. Schewe und M. Schmidt, *Optimierung von Versorgungsnetzen*, https://doi.org/10.1007/978-3-662-58539-9_4

einmal stetig differenzierbar sind. Die endlichen Mengen $\mathcal E$ und $\mathcal I$ sind die Indexmengen der Gleichungs- bzw. Ungleichungsnebenbedingungen. Insbesondere gelte $\mathcal E \cap \mathcal I = \emptyset$. Das zentrale Resultat wird der Satz von Karush, Kuhn und Tucker sein, der notwendige Bedingungen für das Vorliegen eines lokalen Optimums beschreibt.

Zunächst sammeln wir aber noch einige Begriffe ein.

Definition 4.1 (Zulässige Menge). Die Menge

$$\Omega := \left\{ x \in \mathbb{R}^n : c_i(x) = 0, i \in \mathcal{E}; \ c_i(x) \ge 0, i \in \mathcal{I} \right\} \subseteq \mathbb{R}^n$$

nennen wir die zulässige Menge von (4.1).

Die zulässige Menge Ω enthält also genau die Punkte, die alle Nebenbedingungen erfüllen. Mit Definition 4.1 können wir Problem (4.1) damit einfacher schreiben als

$$\min_{x \in \Omega} \quad f(x). \tag{4.2}$$

Definition 4.2 (Aktive Menge). Sei $x \in \Omega$ ein zulässiger Punkt. Die Menge

$$\mathcal{A}(x) := \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} : c_i(x) = 0\} \subseteq (\mathcal{E} \cup \mathcal{I})$$

nennen wir die aktive Menge von (4.2) im Punkt x.

Die aktive Menge besteht also aus genau den Indizes derjenigen Nebenbedingungen, die im gegebenen Punkt x mit Gleichheit erfüllt sind. Im Folgenden sind wir vor allem an der Beschreibung lokaler Optima von Problem (4.2) interessiert, die wir wie folgt definieren.

Definition 4.3 (Lokale und globale Lösungen). Ein Punkt $x^* \in \mathbb{R}^n$ ist eine *lokale Lösung* von Problem (4.2), falls $x^* \in \Omega$ ist und es eine offene Umgebung \mathcal{N} von x^* gibt mit $f(x) \geq f(x^*)$ für alle $x \in \mathcal{N} \cap \Omega$. Analog nennen wir einen Punkt $x^* \in \mathbb{R}^n$ eine *globale Lösung* von Problem (4.2), falls $x^* \in \Omega$ ist und $f(x^*) \leq f(x)$ für alle $x \in \Omega$ gilt.

In Abb. 4.1 ist eine konvexe und eine nichtkonvexe Funktion dargestellt. Man sieht schon am Bild direkt, was wir im Folgenden noch beweisen werden: Konvexe Funktionen haben die Eigenschaft, dass jedes lokale Minimum auch ein globales ist. Dies ist bei nichtkonvexen Funktionen nicht der Fall. Es ist außerdem häufig sehr viel einfacher, ein lokales Minimum einer Funktion zu bestimmen als ein globales Minimum. Daher ist man in der nichtlinearen Optimierung zunächst an der Bestimmung lokaler Optima interessiert. Der zentrale Satz über notwendige Bedingungen erster Ordnung ist der Satz von Karush, Kuhn und Tucker (KKT). Für diesen Satz benötigen wir noch sogenannte *Regularitätsbedingungen* oder *constraint qualifications*, die sicherstellen, dass der Linearisierungskegel in einem

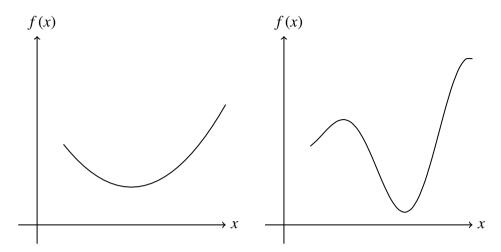


Abb. 4.1 Eine konvexe (links) und nichtkonvexe Funktion (rechts)

gewissen Zusammenhang mit dem Tangentialkegel steht. Diese Kegel werden wir hier nicht behandeln. Die Details sind Thema nichtlinearer Optimierungsvorlesungen und können z. B. in Nocedal und Wright (2006) oder Geiger und Kanzow (2002) nachgelesen werden. Im Folgenden werden wir den Begriff "constraint qualification" verwenden, um auszudrücken, dass die beiden oben genannten Kegel übereinstimmen.

Eine der wichtigsten Regularitätsbedingungen ist die sogenannte LICQ.

Definition 4.4 (LICQ). Es sei $x \in \Omega$ ein zulässiger Punkt und $\mathcal{A}(x)$ die zugehörige aktive Menge. Wir sagen, die *linear independence constraint qualification (LICQ)* gilt im Punkt x, falls die Menge der Gradienten

$$\{\nabla c_i(x): i \in \mathcal{A}(x)\} \subseteq \mathbb{R}^n$$

linear unabhängig ist.

Neben der LICQ gibt es einen ganzen Zoo an weiteren Regularitätsbedingungen für restringierte Optimierungsprobleme – eine gute Auswahl der wichtigsten Regularitätsbedingungen findet der interessierte Leser in dem Buch von Geiger und Kanzow (2002). Allerdings ist es unter LICQ relativ einfach, die notwendigen Bedingungen erster Ordnung zu beweisen. Ein weiterer Grund für die herausgehobene Bedeutung der LICQ ist, dass sie numerisch leicht zu überprüfen ist, da nur zu entscheiden ist, ob eine entsprechend konstruierte Matrix vollen Spaltenrang hat.

Zur Formulierung der notwendigen Bedingungen erster Ordnung benötigen wir zuletzt noch die sogenannte Lagrangefunktion des Problems (4.2).

Definition 4.5 (Lagrangefunktion). Die Funktion

$$\mathcal{L}(x,\lambda) = f(x) - \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i c_i(x)$$

nennen wir die *Lagrangefunktion* des Problems (4.2). Die λ_i , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, bezeichnen wir als *Lagrangemultiplikatoren* oder *duale Variablen*.

Satz 4.6 (KKT-Satz; Notwendige Bedingungen 1. Ordnung). Es sei x^* eine lokale Lösung von Problem (4.2) und die Funktionen f und c_i , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, seien stetig differenzierbar. Ferner gelte die LICQ in x^* . Dann existiert ein Vektor von Lagrangemultiplikatoren λ^* , so dass die folgenden Bedingungen im Punkt (x^*, λ^*) gelten:

$$\nabla_{x} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = 0, \tag{4.3a}$$

$$c_i(x^*) = 0$$
 für alle $i \in \mathcal{E}$, (4.3b)

$$c_i(x^*) \ge 0$$
 für alle $i \in \mathcal{I}$, (4.3c)

$$\lambda_i^* \ge 0$$
 für alle $i \in \mathcal{I}$, (4.3d)

$$\lambda_i^* c_i(x^*) = 0$$
 für alle $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$. (4.3e)

Beweis Siehe, z. B., Nocedal und Wright (2006, Kap. 12).

Die Bedingungen (4.3) aus Satz 4.6 nennt man auch oft die *Karush–Kuhn–Tucker-Bedingungen* (oder kurz: *KKT-Bedingungen*). Bedingung (4.3a) nennt man *duale Zulässigkeit*, Bedingungen (4.3b) und (4.3c) nennt man *primale Zulässigkeit*, Bedingung (4.3d) nennt man *Nichtnegativitätsbedingung* und Bedingung (4.3e) nennt man *Komplementaritätsbedingung*. Warum die erste Bedingung den Namen "duale Zulässigkeit" trägt, werden wir uns in einem der folgenden Beispiele klar machen. Einen Punkt, der die Bedingungen (4.3) erfüllt, nennt man auch einen *KKT-Punkt*.

Unter der Voraussetzung, dass im betrachteten Punkt x^* die LICQ gilt, kann man außerdem zeigen, dass die Lagrangemultiplikatoren aus dem KKT-Satz eindeutig sind. Unter schwächeren Regularitätsbedingungen gilt dies nicht.

Aus der Komplementaritätsbedingung folgt, dass die Lagrangemultiplikatoren zu inaktiven Ungleichungsnebenbedingungen Null sein müssen. Damit können wir die duale Zulässigkeit schreiben als

$$0 = \nabla_{x} \mathcal{L}(x^*, \lambda^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{i \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* \nabla c_i(x^*). \tag{4.4}$$

Eine Illustration der Situation des KKT-Satzes ist in Abb. 4.2 dargestellt. Dort gehen wir von einer zulässigen Menge aus, die durch zwei Ungleichungsnebenbedingungen $c_i(x) \ge 0$, i = 1, 2, beschrieben ist. Der betrachtete Punkt ist x^* , an dem beide Ungleichungen aktiv sind, d.h. es gilt $A(x^*) = \{1, 2\}$. Die duale Zulässigkeit (4.4) hat dann folgende

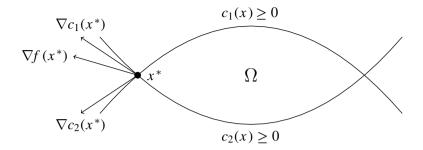


Abb. 4.2 Illustration des KKT-Satzes 4.6

geometrische Bedeutung. Der Gradient $\nabla f(x^*)$ ist eine konische Kombination der Gradienten der beiden aktiven Nebenbedingungen. Die dabei verwendeten Koeffizienten sind die beiden nichtnegativen Lagrangemultiplikatoren. Der Gradient der Zielfunktion liegt also in dem von den beiden Gradienten der Nebenbedingungen aufgespannten Kegel.

Wir verdeutlichen den KKT-Satz im Folgenden an einigen Beispielen.

Beispiel 4.7 (KKT-Bedingungen für lineare Optimierungsprobleme). Wir betrachten zunächst lineare Optimierungsprobleme der Form

$$\min_{x} c^{\top} x \quad \text{s.t.} \quad Ax = b, \ x \ge 0.$$

Die KKT-Bedingungen lauten dann

$$c - A^{\top} \lambda - s = 0,$$

 $Ax = b,$
 $x_i s_i = 0$ für alle $i = 1, ..., n,$
 $x, s > 0.$

Aufgrund der nichtlinearen Komplementaritätsbedingungen bilden die KKT-Bedingungen selbst für lineare Optimierungsprobleme ein nichtlineares System von Gleichungen und Ungleichungen. Ferner sehen wir, dass die erste KKT-Bedingung exakt der Zulässigkeit des entsprechenden dualen Problems

$$\max_{\lambda,s} b^{\top} \lambda \quad \text{s.t.} \quad A^{\top} \lambda + s = c, \ s \ge 0$$

entspricht, was den Namen der ersten KKT-Bedingung motiviert. Außerdem sieht man für ein primal-dual optimales Paar (x, λ, s) sofort, dass der Satz vom komplementären Schlupf (in der linearen Optimierung) ein Spezialfall des KKT-Satzes ist. Den Satz vom komplementären Schlupf findet man zum Beispiel in Chvátal (1983).

Beispiel 4.8 Als zweites Beispiel betrachten wir das zweidimensionale nichtlineare Optimierungsproblem

$$\min_{x_1, x_2} \quad \left(x_1 - \frac{3}{2}\right)^2 + \left(x_2 - \frac{1}{2}\right)^4$$
s.t. $c_1(x_1, x_2) := 1 - x_1 - x_2 \ge 0$, $c_2(x_1, x_2) := 1 - x_1 + x_2 \ge 0$, $c_3(x_1, x_2) := 1 + x_1 - x_2 \ge 0$, $c_4(x_1, x_2) := 1 + x_1 + x_2 \ge 0$.

Offensichtlich beschreibt dies eine zulässige Menge mit nicht differenzierbarem Rand mithilfe von unendlich oft differenzierbaren Nebenbedingungen c_i , $i=1,\ldots,4$. Grafisch kann man sich relativ leicht davon überzeugen, dass der optimale Zielfunktionswert in $x^*=(1,0)^{\top}$ angenommen wird; vgl. Abb.4.3. In diesem Punkt sind die erste und die zweite Nebenbedingung aktiv, d.h. $\mathcal{A}(x^*)=\{1,2\}$. Der Gradient

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} 2(x_1 - 3/2) \\ 4(x_2 - 1/2)^3 \end{pmatrix}$$

der Zielfunktion in x^* lautet

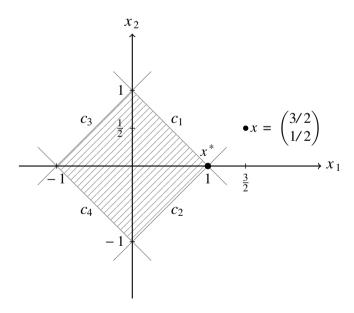


Abb. 4.3 Illustration der Nebenbedingungen und der zulässigen Menge des Problems aus Beispiel 4.8

$$\nabla f(x^*) = \begin{pmatrix} -1\\ -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

und die Gradienten der aktiven Nebenbedingungen lauten

$$\nabla c_1(x) = \nabla c_1(x^*) = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \nabla c_2(x) = \nabla c_2(x^*) = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Insbesondere sind diese beiden Gradienten als Vektoren im \mathbb{R}^2 linear unabhängig, d.h., LICQ gilt im Punkt x^* . Duale Zulässigkeit im Optimum ist also gegeben durch

$$\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \lambda_1^* \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda_2^* \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Man rechnet leicht nach, dass

$$\lambda^* = \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, 0, 0\right)^{\top}$$

gilt, wobei wir $\lambda_3^* = \lambda_4^* = 0$ direkt der Komplementaritätsbedingung entnehmen können.

Beispiel 4.9 (KKT-Bedingungen für das Min-Cost-Flow-Problem). Wir betrachten noch einmal das Min-Cost-Flow-Problem

$$\begin{split} & \min_{f} \quad \sum_{a \in A} w_a \, f_a \\ & \text{s.t.} \quad \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a = b_v \quad \text{für alle} \quad v \in V, \\ & 0 \leq f_a \leq c_a \quad \text{für alle} \quad a \in A \end{split}$$

aus Definition 2.6. Hierbei ist G = (V, A) ein gerichteter Graph mit gegebenen Kantenkapazitäten $c_a \ge 0$, $a \in A$, und Kantenkosten w_a , $a \in A$, sowie gegebenem $b \in \mathbb{R}^V$.

Als Übung werden wir jetzt die KKT-Bedingungen für dieses klassische Optimierungsproblem der Flusstheorie formulieren. Natürlich könnte man auch einfach die Bedingungen aus Beispiel 4.7 nutzen, da es sich bei dem Min-Cost-Flow-Problem ja auch um ein lineares Optimierungsproblem handelt. Zu Übungszwecken und zur Illustration der konkreten Struktur von Optimalitätsbedingungen von Flussproblemen gehen wir hier aber noch einmal Schritt für Schritt vor. Die Lagrangefunktion lautet

$$\mathcal{L}(f, \alpha, \beta^{-}, \beta^{+}) = \sum_{a \in A} w_a f_a - \sum_{v \in V} \alpha_v \left(\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a - b_v \right)$$
$$- \sum_{a \in A} \beta_a^{-} f_a - \sum_{a \in A} \beta_a^{+} (c_a - f_a).$$

Das heißt, der Vektor $\alpha=(\alpha_v)_{v\in V}\in\mathbb{R}^V$ ist der Vektor der dualen Variablen zu den primalen Nebenbedingungen

$$\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a = b_v \quad \text{für alle} \quad v \in V$$
 (4.5)

und die Vektoren $\beta^-, \beta^+ \geq 0 \in \mathbb{R}^A$ sind die dualen Variablen zu den Flussschranken

$$0 \le f_a$$
 bzw. $f_a \le c_a$ für alle $a \in A$. (4.6)

Zur Formulierung der dualen Zulässigkeitsbedingung (4.3a) benötigen wir die Ableitung der Lagrangefunktion nach den primalen Variablen, d. h. nach den Flüssen $f = (f_a)_{a \in A} \in \mathbb{R}^A$. Die dualen Zulässigkeitsbedingungen lauten also

$$0 = w_a + \alpha_w - \alpha_v - \beta_a^- + \beta_a^+$$
 für alle $a = (v, w) \in A$.

Sie entsprechen exakt den Nebenbedingungen des dualen Problems des Min-Cost-Flow-Problems. Primale Zulässigkeit ist gegeben durch die Bedingungen (4.5) sowie (4.6). Nichtnegativität β^- , $\beta^+ \geq 0$ und Komplementarität

$$\alpha_v \left(\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a - b_v \right) = 0 \text{ für alle } v \in V$$

und

$$\beta_a^- f_a = 0$$
, $\beta_a^+ (c_a - f_a) = 0$ für alle $a \in A$

komplettieren die KKT-Bedingungen für das Min-Cost-Flow-Problem.

Beispiel 4.10 Die Tatsache, dass die KKT-Bedingungen im Allgemeinen nicht hinreichend sind, verdeutlicht man sich am einfachsten an einem sehr simplen nicht-restringierten sowie nichtkonvexen Beispiel. Es gilt also $\mathcal{E} \cup \mathcal{I} = \emptyset$, d. h. es gibt keine Nebenbedingungen. Damit entfallen die primalen Zulässigkeitsbedingungen ebenso wie die Nichtnegativitäts- als auch die Komplementaritätsbedingung. Ferner lautet die duale Zulässigkeit

$$0 = \nabla_{x} \mathcal{L}(x^*) = \nabla f(x^*).$$

Dies entspricht der bekannten notwendigen Bedingung aus der nicht-restringierten Optimierung. Wählen wir jetzt beispielsweise die nichtkonvexe Zielfunktion $f(x) = x^3$, so sehen wir sofort, dass x = 0 zwar ein KKT-Punkt, aber kein lokales Minimum ist.

Bis hierher haben wir die für den Rest des Buches notwendigen Resultate zusammengesammelt und einige konkrete Beispiele für Optimalitätsbedingungen gesehen. Im nächsten Abschnitt werden wir uns konvexen Optimierungsproblemen zuwenden, die einerseits sehr häufig in der Praxis auftreten und die andererseits deutlich stärkere Aussagen zulassen, als wir sie in diesem Abschnitt erreicht haben.

4.1 Der Spezialfall konvexer Optimierungsprobleme

In diesem Abschnitt beweisen wir noch zwei Resultate für den Spezialfall konvexer Optimierungsprobleme. Hierzu betrachten wir das Optimierungsproblem

$$\min_{x \in \Omega} f(x), \tag{4.7}$$

wobei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ jetzt eine nichtleere und konvexe Menge und die Zielfunktion $f:\Omega\subseteq\mathbb{R}^n\to\mathbb{R}$ konvex auf Ω ist. Zur Erinnerung:

Definition 4.11 (Konvexe Menge, (strikt) konvexe Funktion). Eine Menge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt konvex, falls für alle $x, y \in \Omega$ auch $\lambda x + (1 - \lambda)y \in \Omega$ für alle $\lambda \in [0, 1]$ gilt. Eine Funktion $f: \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ (mit Ω konvex) heißt konvex, falls $f(\lambda x + (1 - \lambda)y) \leq \lambda f(x) + (1 - \lambda)f(y)$ für alle $x, y \in \Omega$ und alle $\lambda \in [0, 1]$ gilt. Wir nennen die Funktion f strikt konvex, wenn die letzte Ungleichung strikt erfüllt ist.

Satz 4.12 Jedes lokale Minimum des Optimierungsproblems (4.7) ist ein globales Minimum.

Beweis Sei x^* ein lokales Minimum von Problem (4.7). Angenommen, x^* ist kein globales Minimum. Dann existiert ein $z \in \Omega$ mit $f(z) < f(x^*)$. Wir definieren mit diesen beiden Punkten die Konvexkombination $y = \lambda x^* + (1-\lambda)z$ für $\lambda \in [0,1]$. Aufgrund der Konvexität von Ω ist auch $y \in \Omega$ und aus der Konvexität von f auf f folgt

$$f(y) = f(\lambda x^* + (1 - \lambda)z)$$

$$\leq \lambda f(x^*) + (1 - \lambda)f(z)$$

$$< \lambda f(x^*) + (1 - \lambda)f(x^*)$$

$$= f(x^*).$$

Man beachte, dass diese Ungleichung für alle $\lambda \in [0, 1]$ gilt. Man kann nun $\lambda \to 1$ betrachten und erhält damit Punkte y, die beliebig nahe bei x^* liegen. Damit ergibt sich aber aus der obigen strikten Ungleichung ein Widerspruch zur lokalen Optimalität von x^* .

Das folgende Lemma zeigt Eigenschaften der Nebenbedingungen c_i , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, auf, unter denen die zulässige Menge Ω konvex ist.

Lemma 4.13 Seien $c_{\mathcal{E}}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ und $c_{\mathcal{I}}: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^k$ gegeben und die zulässige Menge sei wie üblich definiert als

$$\Omega := \left\{ x \in \mathbb{R}^n : c_{\mathcal{E}}(x) = 0 \text{ und } c_{\mathcal{I}}(x) \ge 0 \right\}.$$

Sind alle Komponentenfunktionen $c_i, i \in \mathcal{E}$, affin und alle Komponentenfunktionen $c_i, i \in \mathcal{I}$, konkav, so ist Ω konvex.

Beweis Es seien $x, y \in \Omega$. Wir betrachten die Konvexkombination $z = \lambda x + (1 - \lambda)y$ und zeigen $z \in \Omega$. Es sei $c_i, i \in \mathcal{E}$, d. h., $c_i(x) = a_i^\top x - b_i$ mit $a_i \in \mathbb{R}^n$ und $b_i \in \mathbb{R}$. Dann gilt

$$c_i(z) = c_i(\lambda x + (1 - \lambda)y)$$

$$= a_i^{\top}(\lambda x + (1 - \lambda)y) - b_i$$

$$= \lambda a_i^{\top} x - \lambda a_i^{\top} y + a_i^{\top} y - b_i$$

$$= b_i - b_i = 0.$$

Die Konvexkombination z erfüllt also auch die affinen Gleichungsnebenbedingungen. Für die konkaven Ungleichungsnebenbedingungen c_i , $i \in \mathcal{I}$, gilt

$$c_i(z) = c_i(\lambda x + (1 - \lambda)y) > \lambda c_i(x) + (1 - \lambda)c_i(y) > 0.$$

Definition 4.14 (Konvexe Optimierungsprobleme). Ein Optimierungsproblem der Form

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} f(\mathbf{x}) \tag{4.8a}$$

s.t.
$$c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E},$$
 (4.8b)

$$c_i(x) > 0, \quad i \in \mathcal{I},$$
 (4.8c)

bei dem die Zielfunktion f konvex ist und die Nebenbedingungen die Voraussetzungen von Lemma 4.13 erfüllen, nennt man ein konvexes Optimierungsproblem.

Für den Rest dieses Abschnitts und in anderen Kapiteln benötigen wir noch eine klassische Charakterisierung der Konvexität einer Funktion für den Fall, dass die Funktion differenzierbar ist.

Lemma 4.15 Sei $f: \Omega \to \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion auf der konvexen Menge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. Dann ist f genau dann konvex auf Ω , wenn für alle $x, x^* \in \Omega$ die Ungleichung

$$\nabla f(x^*)^{\top} (x - x^*) < f(x) - f(x^*)$$

gilt.

Der nächste Satz zeigt schließlich, dass die KKT-Bedingungen im konvexen Fall nicht nur notwendig, sondern auch hinreichend sind.

Satz 4.16 Sei (x^*, λ^*) ein KKT-Punkt des konvexen Optimierungsproblems (4.8). Dann ist x^* ein lokales (und nach Satz 4.12 auch globales) Minimum von (4.8).

Beweis Sei $x \in \mathbb{R}^n$ ein beliebiger zulässiger Vektor für das konvexe Optimierungsproblem (4.8). Dann gilt aufgrund der Konvexität von f, der dualen Zulässigkeit (4.3a) von (x^*, λ^*) und der Tatsache, dass die c_i , $i \in \mathcal{E}$, affin sind die Ungleichung

$$f(x) \ge f(x^*) + \nabla f(x^*)^{\top} (x - x^*)$$

$$= f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i (x^*)^{\top} (x - x^*)$$

$$= f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{E}} \lambda_i^* \nabla c_i (x^*)^{\top} (x - x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i (x^*)^{\top} (x - x^*)$$

$$= f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \lambda_i^* \nabla c_i (x^*)^{\top} (x - x^*)$$

$$= f(x^*) + \sum_{i \in \mathcal{I} \cap \mathcal{A}(x^*)} \lambda_i^* \nabla c_i (x^*)^{\top} (x - x^*)$$

$$\ge f(x^*).$$

Die letzte Ungleichung folgt dabei aus

$$\nabla c_i(x^*)^{\top}(x-x^*) \ge c_i(x) - c_i(x^*) = c_i(x) \ge 0,$$

was wiederum aus der Konkavität der c_i , $i \in \mathcal{I}$, folgt.

Beispiel 4.17 (Konvex-quadratische Optimierungsprobleme). Eine der am häufigsten auftretenden Problemklassen der konvexen Optimierung ist die Klasse der *konvex-quadratischen Probleme* (oder kurz: *konvexe QPs*). Hierbei betrachtet man eine quadratische Zielfunktion der Form

$$f(x) = \frac{1}{2}x^{\top}Hx + g^{\top}x,$$

wobei $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische und positiv semi-definite Matrix ist. Die Nebenbedingungen sind ferner gegeben durch die Bedingungen

$$Ax = b$$
. $Cx > d$.

für Matrizen A, C und Vektoren b, d mit passenden Dimensionen. Die zulässige Menge ist also ein Polyeder und somit konvex und die Zielfunktion ist ebenfalls konvex, da für ihre zweite Ableitung

$$\nabla_{xx}^2 f(x) = H \ge 0$$

gilt. Einen Beweis für diese Charakterisierung von Konvexität mithilfe der Hessematrix findet man z.B. in Geiger und Kanzow (1999).

4.2 Sensitivitätsanalyse

Bisher haben wir gesehen, dass duale Variablen benötigt werden, um notwendige Bedingungen erster Ordnung für das Vorliegen eines lokalen Optimums zu formulieren. In diesem Abschnitt werden wir außerdem feststellen, dass diese dualen Werte auch Aussagen über die Sensitivität der optimalen Zielfunktionswerte $f(x^*)$ in Abhängigkeit der Nebenbedingungen zulassen.

Unter Sensitivität verstehen wir hier die Eigenschaft, dass sich der Zielfunktionswert eines Optimierungsproblems ändert – und wie stark er sich ändert – wenn wir eine leichte Störung der Nebenbedingungen durchführen.

Machen wir es etwas konkreter. Dazu betrachten wir wieder das allgemeine Problem

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x)$$
s.t. $c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E},$

$$c_i(x) \ge 0, \quad i \in \mathcal{I}.$$

Für das Folgende sei x^* eine lokale Lösung dieses Problems, f sowie die c_i , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, seien mindestens einmal stetig differenzierbar und die LICQ gelte in x^* . Wenn wir eine inaktive Nebenbedingung $i \notin \mathcal{A}(x^*)$ wählen, für die also $c_i(x^*) > 0$ gilt, so sollte die Lösung x^* sowie der zugehörige Zielfunktionswert $f(x^*)$ nicht davon abhängen, ob die Nebenbedingung im Problem vorhanden ist oder nicht: führen wir nämlich eine leichte Störung der i-ten Nebenbedingung durch, so bleibt die Nebenbedingung weiter inaktiv und x^* ist weiterhin eine lokale Lösung des Problems. Eine leichte Störung bedeutet hierbei, dass wir die rechte Seite der Nebenbedingung $c_i(x) \geq 0$ modifizieren. Aufgrund der Komplementaritätsbedingung (4.3e) gilt $\lambda_i^* = 0$ und somit gibt diese duale Variable genau die Sensitivität der Lösung auf Störungen der Nebenbedingung c_i wieder: Eine leichte Störung der Nebenbedingung hat keinen Einfluss auf den Zielfunktionswert.

Betrachten wir nun den Fall einer aktiven Nebenbedingung c_i , d.h. $c_i(x^*) = 0$. Wir führen wieder eine kleine Störung der Nebenbedingung durch und ersetzen $c_i(x^*) \geq 0$ durch die Relaxierung

$$c_i(x^*) \ge -\varepsilon \|\nabla c_i(x^*)\|.$$

Wir nehmen jetzt an, dass die Störung $\varepsilon > 0$ hinreichend klein ist, so dass die Lösung $x^*(\varepsilon)$ des gestörten Problems die gleiche aktive Menge wie x^* hat und die Lagrangemultiplikatoren nicht stark von dieser Störung beeinflusst sind. Da $c_i(x^*) = 0$ gilt und die gestörte Nebenbedingung aktiv ist, haben wir

$$-\varepsilon \|\nabla c_i(x^*)\| = c_i(x^*(\varepsilon)) - c_i(x^*) \approx (x^*(\varepsilon) - x^*)^\top \nabla c_i(x^*)$$

und

$$0 = c_i(x^*(\varepsilon)) - c_i(x^*) \approx (x^*(\varepsilon) - x^*)^\top \nabla c_i(x^*)$$

für alle $j \in \mathcal{A}(x^*)$ mit $j \neq i$. Unter Ausnutzung der dualen Zulässigkeitsbedingung (4.3a) erhalten wir dann für den Zielfunktionswert, dass

$$f(x^*(\varepsilon)) - f(x^*) \approx (x^*(\varepsilon) - x^*)^\top \nabla f(x^*)$$

$$= \sum_{j \in \mathcal{A}(x^*)} \lambda_j^* (x^*(\varepsilon) - x^*)^\top \nabla c_j(x^*)$$

$$\approx -\varepsilon \|\nabla c_i(x^*)\| \lambda_i^*$$

gilt. Division durch $\varepsilon > 0$ und Grenzübergang auf beiden Seiten liefert schließlich

$$\frac{\mathrm{d}f(x^*(\varepsilon))}{\mathrm{d}\varepsilon} = -\lambda_i^* \|\nabla c_i(x^*)\|.$$

Die letzte Gleichung lässt nun die folgenden Schlüsse im Rahmen einer Sensitivitätsanalyse zu:

- Ist der Lagrangemultiplikator $\lambda_i^* = 0$, so hat eine Störung der rechten Seite der Nebenbedingung c_i keinen Einfluss auf den optimalen Zielfunktionswert. Dies ist aufgrund der KKT-Komplementarität (4.3e) bei inaktiven Nebenbedingungen der Fall was auch zu erwarten ist.
- Verschwindet der Lagrangemultiplikator λ_i^* nicht, so ist sein Wert $\lambda_i^* > 0$ von Interesse. Ist dieser Wert groß, so ist zu erwarten, dass sich der Zielfunktionswert nach Störung der *i*-ten Nebenbedingung signifikant ändert. Ist der Wert $\lambda_i^* > 0$ klein, so hat eine Perturbation keinen wesentlichen Einfluss auf den optimalen Zielfunktionswert.

Mehr Informationen zu Sensitivitätsanalysen finden Sie in den Büchern von Nocedal und Wright (2006) und von Bertsekas (2016). Eine etwas detailliertere Diskussion von Sensitivitätsanalysen mit einem Fokus auf konvexe Probleme befindet sich in dem Buch von Boyd und Vandenberghe (2004).

Beispiel 4.18 Wir betrachten noch einmal das Min-Cost-Flow-Problem (2.1) und speziell die Ungleichungsnebenbedingungen

$$0 \le f_a \le c_a$$
 für ein $a \in A$.

Es seien wieder β_a^- und β_a^+ die dualen Variablen zu diesen beiden Ungleichungen. Angenommen, wir haben eine Lösung f^* gegeben, deren Zielfunktionswert

$$\varphi(f^*) = \sum_{a \in A} w_a f_a^*$$

ist. Wir nehmen weiter an, dass die Kante $a \in A$ gesättigt ist in dem Sinn, dass die entsprechende Kapazitätsnebenbedingung aktiv ist. Das heißt, es gilt

$$f_a^* = c_a$$
.

Außerdem sei der entsprechende Lagrangemultiplikator $(\beta_a^+)^* > 0$. Aus unseren vorherigen Überlegungen wissen wir, dass

$$\frac{\mathrm{d}\varphi(f^*(\varepsilon))}{\mathrm{d}\varepsilon} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\varepsilon} \sum_{a \in A} w_a f_a^*(\varepsilon) = -(\beta_a^+)^* \|\nabla(c_a - f_a^*)\| = -(\beta_a^+)^*$$

gilt, wenn wir die Nebenbedingung $f_a \le c_a$ durch $f_a \le c_a + \varepsilon$ ersetzen und ε hinreichend klein ist. Diese Ersetzung entspricht in der Realität z.B. der Investition in eine größere Leitungskapazität. Um zu entscheiden, ob diese Investition getätigt werden sollte, muss also "der Wert" $(\beta_a^+)^*$ dieser Investition mit den Investitionskosten verglichen werden.

Beispiel 4.19 Betrachten wir das letzte Beispiel noch etwas konkreter. Sei dazu der Graph G = (V, A) mit $V = \{v, w\}$ und $A = \{a_1 = (v, w), a_2 = (v, w)\}$ gegeben; vgl. Abb. 4.4. Die Produktionen und Nachfragen seien ferner durch $b = (b_v, b_w)^{\top} = (5, -5)^{\top}$, die Kantenkapazitäten durch $c = (c_{a_1}, c_{a_2})^{\top} = (3, 7)^{\top}$ und die Kosten durch $w = (w_{a_1}, w_{a_2})^{\top} = (10, 20)^{\top}$ gegeben. Das allgemeine Problem

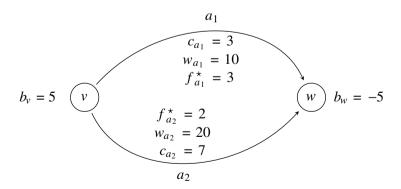


Abb. 4.4 Das 2-Knoten Netzwerk aus Beispiel 4.19

$$\begin{split} & \min_{f} \quad \sum_{a \in A} w_{a} f_{a} \\ & \text{s.t.} \quad \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_{a} - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_{a} = b_{v} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \\ & 0 \leq f_{a} \leq c_{a} \quad \text{für alle} \quad a \in A \end{split}$$

wird zu

$$\min_{f_{a_1}, f_{a_2}} \varphi(f_{a_1}, f_{a_2}) = 10 f_{a_1} + 20 f_{a_2}$$
s.t. $f_{a_1} + f_{a_2} = 5$, $[\alpha_v]$
 $-f_{a_1} - f_{a_2} = -5$, $[\alpha_w]$
 $0 \le f_{a_1} \le 3$, $[\beta_{a_1}^{\pm}]$
 $0 \le f_{a_2} \le 7$. $[\beta_{a_2}^{\pm}]$

Die Lagrangefunktion lautet

$$\mathcal{L} = 10f_{a_1} + 20f_{a_2} - \alpha_v(f_{a_1} + f_{a_2} - 5) - \alpha_w(-f_{a_1} - f_{a_2} + 5)$$
$$-\beta_{a_1}^- f_{a_1} - \beta_{a_1}^+ (3 - f_{a_1}) - \beta_{a_2}^- f_{a_2} - \beta_{a_2}^+ (7 - f_{a_2})$$

und duale Zulässigkeit ist durch

$$0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial f_{a_1}} = 10 - \alpha_v + \alpha_w - \beta_{a_1}^- + \beta_{a_1}^+,$$

$$0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial f_{a_2}} = 20 - \alpha_v + \alpha_w - \beta_{a_2}^- + \beta_{a_2}^+,$$

gegeben. Offensichtlich ist $f_{a_1}^*=3$, $f_{a_2}^*=2$ die globale Optimallösung mit Zielfunktionswert $\varphi^*=70$. Wir führen jetzt eine Sensitivitätsanalyse bzgl. der Kapazitätsschranken auf den beiden Kanten durch und berechnen die entsprechenden Dualvariablen. Da $f_{a_1}^*=3$ ist, ist die entsprechende Ungleichung aktiv und es folgt $(\beta_{a_1}^+)^*\geq 0$ und $(\beta_{a_1}^-)^*=0$. Bei der anderen Kante $(f_{a_2}^*=2)$ ist keine der beiden Ungleichungen aktiv und wir haben daher $(\beta_{a_2}^-)^*=(\beta_{a_2}^+)^*=0$. Die dualen Zulässigkeitsbedingungen vereinfachen sich im Optimum zu

$$0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial f_{a_1}} = 10 - \alpha_v^* + \alpha_w^* + (\beta_{a_1}^+)^*,$$

$$0 = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial f_{a_2}} = 20 - \alpha_v^* + \alpha_w^*$$

und aus

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial f_{a_2}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial f_{a_1}} = 0$$

folgt $(\beta_{a_1}^+)^* = 10$. Insgesamt haben wir

$$\frac{\partial \varphi(f^*(\varepsilon))}{\partial \varepsilon} = -(\beta_{a_1}^+)^* = -10.$$

Wenn wir jetzt die Kapazität auf der Kante a um ein kleines $\varepsilon>0$ erweitern, sollte sich unsere Zielfunktion um -10ε verändern. Sei jetzt also $c_a=3+\varepsilon$ mit $\varepsilon>0$ hinreichend klein. Die neue Optimallösung lautet dann offensichtlich $f_{a_1}^*(\varepsilon)=3+\varepsilon, f_{a_2}^*(\varepsilon)=2-\varepsilon$ und hat den Zielfunktionswert

$$\varphi(f_{a_1}^*(\varepsilon), f_{a_2}^*(\varepsilon)) = 10(3+\varepsilon) + 20(2-\varepsilon) = 70 - 10\varepsilon.$$

Für $\varepsilon=1$ erhalten wir beispielsweise $\varphi(f_{a_1}^*(1),f_{a_2}^*(1))=60$, d.h. genau 10 weniger als im Originalproblem.

Zuletzt beachte man noch, dass eine Erweiterung der Kapazität auf der anderen Kante a_2 keine Auswirkung hätte, da $(\beta_{a_2}^+)^* = 0$ gilt.

Eine weitere Sensitivitätsanalyse inklusive einer Herleitung einer ökonomischen Interpretation von Dualvariablen im linearen Fall finden Sie in Chvátal (1983).

Hiermit schließen wir das Kapitel über Optimalitätsbedingungen. Die behandelten Resultate werden uns noch sehr häufig begegnen. Direkt im nächsten Kapitel nutzen wir sie z.B. zur Herleitung der betrachteten Peak-Load-Pricing-Probleme. Anschließend sind in Kap. 6 lineare Komplementaritätsprobleme Thema, die eine Verallgemeinerung gewisser KKT-Bedingungen darstellen. Bei der Modellierung von Gleichgewichten für den deutschen Strommarkt in Kap. 7 sind Optimalitätsbedingungen ebenfalls von zentraler Bedeutung und zuletzt benutzen wir sie in Kap. 8, um den Zusammenhang von physikalischen Netzflüssen und Preisregeln in Netzwerkökonomien zu beleuchten.

Aufgaben

Aufgabe 4.1 Es sei x^* eine lokale Lösung des Problems (4.1) und es gelten die Voraussetzungen des KKT-Satzes. Insbesondere gelte die LICQ in x^* . Zeigen Sie, dass der Vektor der Lagrangemultiplikatoren aus dem KKT-Satz eindeutig bestimmt ist.

Aufgabe 4.2 Konstruieren Sie ein Optimierungsproblem, bei dem es einen zulässigen Punkt gibt, in dem die LICQ nicht gilt.

Aufgabe 4.3 Betrachten Sie das lineare Optimierungsproblem der Form

$$\min_{x} \quad c^{\top} x \quad \text{s.t.} \quad Ax \le b.$$

Literatur 55

Was müssen Sie für einen gegebenen zulässigen Punkt x^* prüfen, um zu verifizieren, dass die LICQ in x^* gilt?

Aufgabe 4.4 Es sei das nichtlineare Optimierungsproblem

$$\min_{x,y} \quad x^2 + 42y$$
s.t.
$$x^2 + y^2 \le 9,$$

$$y \ge x + 1$$

gegeben.

- 1. Veranschaulichen Sie sich die zulässige Menge geometrisch.
- 2. Wie lautet die Lagrangefunktion des Problems?
- 3. Wie lauten die KKT-Bedingungen des Problems?
- 4. Überlegen Sie sich geometrisch, was die optimale Lösung des Problems ist und rechnen Sie nach, dass diese Lösung ein KKT-Punkt ist.
- 5. Gegeben sei der KKT-Punkt aus dem vorherigen Aufgabenteil. Was können Sie über die Sensitivität der Lösung in Abhängigkeit der beiden Nebenbedingungen sagen?

Aufgabe 4.5 Beweisen Sie Lemma 4.15.

Aufgabe 4.6 Formulieren Sie die KKT-Bedingungen des Mehrgüterflussproblems (3.1).

Literatur

Bertsekas, D. P. (2016). Nonlinear programming. Belmont: Athena Scientific.

Boyd, S., & Vandenberghe, L. (2004). Convex optimization (S. xiv+716). Cambridge: Cambridge University Press. ISBN: 0-521-83378-7.

Chvátal, V. (1983). *Linear programming*. Series of books in the mathematical sciences. New York: Freeman. ISBN 9780716715870.

Geiger, C., & Kanzow, C. (1999). Numerische Verfahren zur Lösung unrestringierter Optimierungsaufgaben. Berlin: Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-642-58582-1.

Geiger, C. & Kanzow, C. (2002). *Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben*. Berlin: Springer. ISBN: 9783540427902.

Nocedal, J., & Wright, S. J. (2006). *Numerical optimization* (2. Aufl.). Berlin: Springer. https://doi.org/10.1007/978-0-387-40065-5.



Peak-Load-Pricing 5

Zusammenfassung

In diesem Kapitel betrachten wir das Peak-Load-Pricing-Problem als Modell für wohlfahrtsökonomische Optimierungsprobleme. Dabei diskutieren wir die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen und führen grundlegende Begriffe und Techniken für die Analyse solcher Modelle ein. Dabei greifen wir insbesondere auf die Optimalitätsbedingungen aus dem vorherigen Kapitel zurück und wenden sie für die hier diskutierten konvexen Optimierungsprobleme an. Die Ideen und Techniken, die wir in diesem Kapitel einführen, sind außerdem die Basis für unsere Diskussion des deutschen Strommarktes in Kap. 7.

Bevor wir in Kap. 7 zur Analyse des deutschen Strommarktes kommen, betrachten wir zunächst ein einfaches Modellproblem, anhand dessen wir einige Begriffe und Techniken für allgemeine wohlfahrtsökonomische Optimierungsprobleme studieren.

5.1 Herleitung der allgemeinen Problemstellung

Das hier diskutierte Modellproblem ist das sogenannte Peak-Load-Pricing-Problem. Wir betrachten einen Markt bestehend aus mehreren Produzentinnen und mehreren Konsumenten eines Guts. Wir nehmen an, dass das Gut nicht lagerbar ist, so wie es z. B. bei Strom der Fall ist. Das heißt, wenn x Einheiten des Guts in einem Zeitraum produziert werden, müssen diese x Einheiten auch vollständig in diesem Zeitraum von den Konsumenten verbraucht werden. Wir nehmen ferner an, dass die Konsumenten in den Zeiträumen unterschiedliche

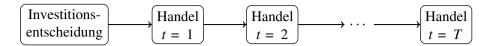


Abb. 5.1 Zeitablauf für das Peak-Load-Pricing-Problem

Bereitschaft haben, für das Gut zu zahlen und dass die Produzentinnen in ihre Produktionskapazität investieren können, um das Gut zu produzieren. Die Frage ist, wie viel die Produzentinnen investieren sollen und wie sich die Preise für die produzierten Güter in den einzelnen Zeiträumen ergeben. Eine Übersicht über den Zeitablauf ist in Abb. 5.1 dargestellt.

Formalisieren wir das Ganze: Wir betrachten eine Menge T von Zeiträumen, eine Menge K von Konsumenten und eine Menge N von Produzentinnen. Die Zahlungsbereitschaft eines Konsumenten $k \in K$ im Zeitraum $t \in T$ ist durch eine Funktion $p_{k,t}(x)$ – die sogenannte inverse Nachfragefunktion – gegeben. Diese Funktion drückt aus, zu welchem Preis man die nächste Einheit des Guts kaufen möchte, wenn man bereits x Einheiten gekauft hat. Wir treffen dabei eine wichtige Annahme. Wir gehen davon aus, dass die Funktionen $p_{k,t}(x)$ streng monoton fallend sind. Das heißt, je mehr man von einem Gut hat, um so weniger ist man bereit, für die nächste Einheit zu bezahlen. Außerdem seien die $p_{k,t}(x)$ differenzierbar. Später werden wir sogar annehmen, dass die Nachfragefunktionen affin sind. Jede Produzentin beschreiben wir durch ein Paar $(w^{\text{inv}}, w^{\text{var}})$. Die Zahl $w^{\text{inv}} > 0$ gibt an, wie viel eine Produzentin die Investition in eine Einheit ihrer Produktionskapazität kostet. Dabei gehen wir davon aus, dass jede Einheit der Kapazität die Produktion genau einer Einheit des Guts pro Zeitraum erlaubt. Die Zahl $w^{\text{var}} > 0$ gibt an, wie viel es eine Produzentin kostet, eine Einheit des Guts zu produzieren.

Für die Analyse treffen wir nun noch eine sehr weitreichende Annahme. Wir nehmen an, dass *vollständiger Wettbewerb* herrscht. Dies geht auf zwei Arten ein. Zum einen gehen wir davon aus, dass volle Transparenz herrscht und alle Akteure am Markt die Nachfragefunktionen und Kosten aller Akteure exakt kennen. Zum anderen gehen wir davon aus, dass alle Akteure Preisnehmer sind. Das heißt, sie gehen davon aus, dass sie mit ihrem Verhalten den Preis nicht direkt beeinflussen können.

Was muss nun gelten, damit es ein *Marktgleichgewicht* gibt? Wir nehmen an, dass es zu jedem Zeitpunkt $t \in T$ einen Preis π_t gibt, zu dem das Gut gekauft und verkauft wird. Betrachten wir nun die Ziele der einzelnen Akteure. Jeder Konsument k möchte seinen Nutzen maximieren, d. h., er möchte das Optimierungsproblem

$$\max_{d_k} \sum_{t \in T} \int_0^{d_{k,t}} p_{k,t}(x) dx - \sum_{t \in T} \pi_t d_{k,t}$$
 (5.1a)

s.t.
$$d_{k,t} \ge 0$$
 für alle $t \in T$ $[\gamma_{k,t}]$ (5.1b)

lösen, wobei $d_{k,t}$ die tatsächliche Nachfrage von Konsument k im Zeitraum t ist. Hier und im Folgenden verwenden wir die Notation, dass wir durch Weglassen der Indizes die

entsprechenden Vektoren bezeichnen. So ist in Problem (5.1) beispielsweise $d_k = (d_{k,t})_{t \in T}$ der Vektor aller Produktionen des Konsumenten k. Was bedeutet der Integralterm in der Zielfunktion? Dazu betrachten wir das Preis-Mengen-Diagramm in Abb. 5.2. Wir sehen hier, welche Menge der Konsument bereit ist, zu einem gewissen Preis zu kaufen. Die Kosten – Preis mal Menge – des Konsumenten sind dabei grau eingezeichnet. Der Nutzen ist aber größer. Die erste Einheit Strom hätte er ja schon zum Preis G gekauft. Seine Zahlungsbereitschaft ist also größer. Daher ist die Bruttokonsumentenrente die Fläche, die von den Punkten G, 0, B und A begrenzt wird. In unserem Fall ist die Nachfragefunktion linear, weshalb dieser Bereich einfach zu berechnen ist. Im Allgemeinen erlauben wir aber auch nichtlineare Funktionen. In allen Fällen ist aber diese Fläche durch den Integralterm in der Zielfunktion von Problem (5.1) gegeben. Daher können wir die Zielfunktion so interpretieren, dass sie die Fläche beschreibt, die von den Punkten A, G und C eingegrenzt wird.

Jede Produzentin $n \in N$ möchte das Optimierungsproblem

$$\max_{y_n, \bar{y}_n} \sum_{t \in T} \pi_t y_{n,t} - \sum_{t \in T} w_n^{\text{var}} y_{n,t} - w_n^{\text{inv}} \bar{y}_n$$
s.t. $0 \le y_{n,t} \le \bar{y}_n$ für alle $t \in T$ $[\beta_{n,t}^{\pm}]$

lösen, wobei \bar{y}_n die Investition der Produzentin n und $y_{n,t}$ die Produktion der Produzentin n im Zeitraum t bezeichnet. Die Zielfunktion ist dabei wie folgt zu interpretieren. Jede Produzentin möchte durch die produzierte und verkaufte Menge (erste Summe) ihren Gewinn maximieren und muss davon sowohl ihre kurzfristigen Produktionskosten (zweite Summe) als auch ihre langfristigen Investitionskosten (dritte Summe) abziehen.

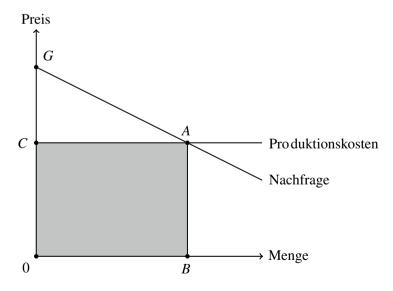


Abb. 5.2 Illustration der Konsumentenzielfunktion in Problem (5.1)

Diese beiden Optimierungsprobleme modellieren die Feststellung, dass sich niemand mit einer Lösung zufrieden gibt, wenn sie durch eigene Aktionen verbessert werden kann. Damit wir aber ein Marktgleichgewicht erreichen, müssen die Lösungen der Spieler zusammenpassen. Dies ist in unserem Fall dadurch gegeben, dass wir zu jedem Zeitpunkt $t \in T$ die sogenannte *Markträumung* fordern:

$$\sum_{n \in N} y_{n,t} - \sum_{k \in K} d_{k,t} = 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T.$$

Wie finden wir nun ein Marktgleichgewicht? Hierfür nutzen wir die Theorie aus Kap. 4. Sowohl die Optimierungsprobleme der Konsumenten als auch die der Produzentinnen sind konvexe Optimierungsprobleme. Somit können wir jedes der Probleme äquivalent durch seine KKT-Bedingungen ersetzen. Wenn wir alle diese Bedingungen zusammenwerfen erhalten wir

$$\begin{aligned} p_{k,t}(d_{k,t}) - \pi_t + \gamma_{k,t} &= 0 \quad \text{für alle} \quad k \in K, t \in T, \\ -w_n^{\text{var}} + \pi_t + \beta_{n,t}^- - \beta_{n,t}^+ &= 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ -w_n^{\text{inv}} + \sum_{t \in T} \beta_{n,t}^+ &= 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, \\ \sum_{n \in N} y_{n,t} - \sum_{k \in K} d_{k,t} &= 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T, \\ y_{n,t} - \bar{y}_n &\leq 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ y_{n,t} &\geq 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ d_{k,t} &\geq 0 \quad \text{für alle} \quad k \in K, t \in T, \\ \beta_{n,t}^- y_{n,t} &= 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ \beta_{n,t}^+ \left(y_{n,t} - \bar{y}_n\right) &= 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ \gamma_{k,t} d_{k,t} &= 0 \quad \text{für alle} \quad k \in K, t \in T. \end{aligned}$$

Dieses Problem ist kein Optimierungsproblem. Diese spezielle Struktur taucht aber in Theorie und Praxis so oft auf, dass sie einen speziellen Namen verdient: Wir nennen Probleme dieses Typs *Komplementaritätsprobleme*. Sie sind so wichtig, dass wir Ihnen das nächste Kapitel widmen. Nun sehen wir aber, dass dieses Komplementaritätsproblem äquivalent zu *einem* Optimierungsproblem ist:

$$\max_{d,y,\bar{y}} \sum_{t \in T} \sum_{k \in K} \int_{0}^{d_{k,t}} p_{k,t}(x) dx - \sum_{t \in T} \sum_{n \in N} w_n^{\text{var}} y_{n,t} - \sum_{n \in N} w_n^{\text{inv}} \bar{y}_n$$
 (5.2a)

s.t.
$$\sum_{n \in N} y_{n,t} - \sum_{k \in K} d_{k,t} = 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T,$$
 (5.2b)

$$0 \le y_{n,t} \le \bar{y}_n \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \tag{5.2c}$$

$$0 \le d_{k,t}$$
 für alle $k \in K, t \in T$. (5.2d)

Die Zielfunktion dieses Problems beschreibt die *Gesamtwohlfahrt*. Man kann dieses Optimierungsproblem als das Problem eines allwissenden Planers interpretieren. Dieser organisiert die Akteure im System so, dass das Ergebnis in Summe für alle am Besten ist. In unserem Fall fällt nach unseren Annahmen das Komplementaritätsproblem, welches dem Markt entspricht, mit dem Wohlfahrtsoptimierungsproblem (5.2) zusammen. Dies passiert auch in allgemeineren Situationen. Die Sätze, die Aussagen hierüber treffen sind als *Hauptsätze der Wohlfahrtsökonomie* bekannt. Der interessierte Leser kann z. B. in dem Buch von Mas-Colell et al. (1995, Kap. 16) mehr über diese Sätze erfahren. Da aber im Allgemeinen die Annahmen, die für die Gültigkeit dieser Sätze notwendig sind, nicht gelten, ist das Problem (5.2) normalerweise nicht das Ergebnis des Marktes. In vielen Fällen ist es aber ein sinnvoller Ausgangspunkt für die Analyse und der Maßstab, an dem sich andere Lösungen messen lassen müssen.

5.2 Analyse der Eindeutigkeit von Lösungen

Was bedeutet es aber, dass wir dieses Problem analysieren wollen? Wir können es lösen, da es, so wie wir es formuliert haben, ein konvexes Optimierungsproblem ist. Typischerweise sind die Nachfragefunktionen affin, d. h. durch die zwei Zahlen für die Steigung und den y-Achsenabschnitt gegeben. In diesem Fall ist das Problem sogar nur ein konvex-quadratisches Problem, das wir mit Standardsoftware wie z. B. Gurobi oder CPLEX lösen können.

Was aber aus Sicht der ökonomischen Theorie interessiert, sind andere Fragen: Unter welchen Bedingungen ist die Lösung eindeutig? Kann man die Optimallösungen charakterisieren und daraus vielleicht Regeln für die Konstruktion einer Optimallösung herleiten? Konkreter: Wer zahlt wie viel und – in unserem Fall – wie verteilen sich die Investitionskosten? Wird überhaupt (genug) investiert und, wenn ja, welche Produzentinnen sind daran interessiert? Bei der Beantwortung dieser Fragen werden uns die dualen Zulässigkeits- und Komplementaritätsbedingungen helfen. Die folgende Diskussion orientiert sich an entsprechenden Beweisen für ein allgemeineres Problem in den Artikeln Grimm et al. (2017), Krebs et al. (2018), Krebs und Schmidt (2018). Die dort analysierten Probleme sind aber komplizierter, so dass wir hier etwas leichtere Arbeit vor uns haben.

Zuerst halten wir die folgende Notation fest: Wir sagen eine Produzentin n dominiert eine andere Produzentin n', wenn $w_n^{\text{inv}} \leq w_{n'}^{\text{inv}}$ und $w_n^{\text{var}} \leq w_{n'}^{\text{var}}$ gilt.

Lemma 5.1 Seien n und n' verschiedene Produzentinnen derart, dass die Produzentin n die Produzentin n' dominiert. Dann gibt es eine Optimallösung, in der $\bar{y}_{n'} = 0$ gilt.

Daraus folgt sofort die nächste Beobachtung: Es reicht den Fall zu betrachten, dass sich die Produzentinnen wie folgt sortieren lassen:

$$w_1^{\text{inv}} > w_2^{\text{inv}} > \dots > w_{|N|}^{\text{inv}},$$
 (5.3a)

$$w_1^{\text{var}} < w_2^{\text{var}} < \dots < w_{|N|}^{\text{var}}.$$
 (5.3b)

Wir nehmen jetzt für den Rest des Kapitels an, dass die Produzentinnen derart sortiert sind.

Wir können das Problem nun auf zwei Arten analysieren. Einmal können wir das Gleichgewichtsproblem selbst betrachten oder das äquivalente Optimierungsproblem. Je nach Fragestellung ist einmal die eine, einmal die andere Variante zielführender.

Zur Referenz schreiben wir die dualen Zulässigkeits- und Komplementaritätsbedingungen des Optimierungsproblems (5.2) auf.

$$\begin{aligned} p_{k,t}(d_{k,t}) - \alpha_t + \gamma_{k,t} &= 0 \quad \text{für alle} \quad k \in K, t \in T, \\ -w_n^{\text{var}} + \alpha_t + \beta_{n,t}^- - \beta_{n,t}^+ &= 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ -w_n^{\text{inv}} + \sum_{t \in T} \beta_{n,t}^+ &= 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, \\ \beta_{n,t}^- y_{n,t} &= 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ \beta_{n,t}^+ \left(y_{n,t} - \bar{y}_n \right) &= 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ \gamma_{k,t} d_{k,t} &= 0 \quad \text{für alle} \quad k \in K, t \in T. \end{aligned}$$

Was lernen wir aus diesen Bedingungen? Wir sehen zum Beispiel, wie die Mengen vom Preis abhängen.

Lemma 5.2 Sei eine Optimallösung von (5.2) gegeben. Dann gibt es für jeden Zeitpunkt $t \in T$, in dem produziert wird, einen Preis p_t , so dass gilt:

- 1. Für alle Konsumenten $k \in K$ mit $d_{k,t} > 0$ gilt $p_t = p_{k,t}(d_{k,t})$,
- 2. für alle Produzentinnen $n \in N$ mit $y_{n,t} > 0$ gilt $w_n^{\text{var}} \leq p_t$ und
- 3. für alle Produzentinnen $n \in N$ mit $w_n^{\text{var}} < p_t$ gilt $y_{n,t} = \bar{y}_n$.

Wir wollen uns jetzt ansehen, unter welchen Bedingungen die Lösung eindeutig ist. Um hier weiter zu kommen, hilft die folgende Dekomposition des Problems. Wir definieren die Funktion $\theta(\bar{y})$ wie folgt:

$$\begin{split} \theta(\bar{y}) &:= \max_{d,y} \quad \sum_{t \in T} \sum_{k \in K} \int_0^{d_{k,t}} p_{k,t}(x) \mathrm{d}x - \sum_{t \in T} \sum_{n \in N} w_n^{\mathrm{var}} y_{n,t} \\ \text{s.t.} \quad \sum_{k \in K} d_{k,t} &= \sum_{n \in N} y_{n,t} \quad \text{für alle} \quad t \in T, \\ 0 &\leq y_{n,t} \leq \bar{y}_n \quad \text{für alle} \quad n \in N, t \in T, \\ 0 &\leq d_{k,t} \quad \text{für alle} \quad k \in K, t \in T. \end{split}$$

Dieses θ definierende Optimierungsproblem bezeichnen wir als *Subproblem*. Das Interessante hieran ist, dass wir sehen, dass dieses Subproblem selbst wieder zerfällt, da nun die einzelnen Zeitschritte unabhängig voneinander sind. Das heißt, es gilt $\theta(\bar{y}) = \sum_{t \in T} \theta_t(\bar{y})$, wobei

$$\theta_t(\bar{y}) := \max_{d_t, y_t} \sum_{k \in K} \int_0^{d_{k,t}} p_{k,t}(x) dx - \sum_{n \in N} w_n^{\text{var}} y_{n,t}$$
 (5.4a)

s.t.
$$\sum_{n \in N} y_{n,t} - \sum_{k \in K} d_{k,t} = 0,$$
 (5.4b)

$$0 \le y_{n,t} \le \bar{y}_n$$
 für alle $n \in N$, (5.4c)

$$0 \le d_{k,t}$$
 für alle $k \in K$ (5.4d)

gilt. Somit wird unser Ursprungsproblem zu dem nicht-restringierten Problem

$$\max_{\bar{y}} \quad \sum_{t \in T} \theta_t(\bar{y}) - \sum_{n \in N} w^{\text{inv}} \bar{y}_n. \tag{5.5}$$

Dieses Problem bezeichnen wir als *Masterproblem*. Die Idee ist nun zuerst zu untersuchen, unter welchen Bedingungen das Subproblem für alle \bar{y} eindeutig lösbar ist, um dann zu prüfen, ob auch das Masterproblem eine eindeutige Lösung hat. Dabei beschränken wir uns im Folgenden der Einfachheit halber auf den "inneren Fall" $\bar{y}_n > 0$ für alle n.

Wir betrachten also zunächst das Subproblem und können auch hierzu ein äquivalentes Gleichgewichtsproblem formulieren, indem wir die einzelnen Spielerprobleme geeignet einschränken. Damit erhalten wir die folgenden Probleme für den Konsumenten k und die Produzentin n:

$$\max_{d_{k,t} \ge 0} \quad \int_0^{d_{k,t}} p_{k,t}(x) \mathrm{d}x - \pi_t d_{k,t}$$

und

$$\max_{y_{n,t}} \pi_t y_{n,t} - w_n^{\text{var}} y_{n,t}$$
s.t. $0 \le y_{n,t} \le \bar{y}_n$.

Damit können wir erste Schritte zur Eindeutigkeit des Subproblems machen.

Lemma 5.3

- 1. Für jeden Marktpreis π_t fragt jeder Konsument eine eindeutige Menge $d_{k,t}$ nach.
- 2. Wenn der Marktpreis verschieden von den variablen Kosten ist, d.h. $\pi_t \neq w_n^{\text{var}}$, ist die Produktion der Produzentin n eindeutig.
- 3. Der Gleichgewichtspreis ist eindeutig.

Beweis

1. Die Zielfunktion des Konsumentenproblems ist strikt konkav und das Problem ist für alle Preise zulässig. Daher existiert die Optimallösung und ist eindeutig.

2. Die Behauptung folgt aus folgender Feststellung. Für ein optimales $y_{n,t}$ gilt

$$y_{n,t} \in \begin{cases} \{\bar{y}_n\}, & w_n^{\text{var}} < \pi_t, \\ [0, \bar{y}_n], & w_n^{\text{var}} = \pi_t, \\ \{0\}, & w_n^{\text{var}} > \pi_t. \end{cases}$$

Diese Feststellung sieht man ein, wenn man die Zielfunktion umschreibt als $(\pi_t - w_n^{\text{var}})y_{n,t}$. Aus dieser Darstellung folgt, dass die Lösung des Problems vom Vorzeichen von $\pi_t - w_n^{\text{var}}$ abhängt. Der interessante Fall ist, wenn $\pi_t = w_n^{\text{var}}$ gilt, da es dann der Produzentin egal ist, wie viel sie produziert – sie verdient nie etwas. Ansonsten wollen die Produzentinnen entweder so viel oder so wenig wie möglich produzieren.

 Zu jedem Preis gibt es eindeutige Nachfragen. Betrachte nun die mengenwertige Funktion

$$Y(\pi) := \left\{ \sum_{n \in N} y_n : 0 \le y_n \le \bar{y}_n \quad \text{für alle} \quad n \in N;$$

$$y_n = 0 \quad \text{für alle} \quad n \text{ mit } w_n^{\text{var}} > \pi;$$

$$y_n = \bar{y}_n \quad \text{für alle} \quad n \text{ mit } w_n^{\text{var}} < \pi \right\}$$

der möglichen Nachfragen. Die Gesamtnachfrage ist streng monoton fallend (solange sie größer als Null ist) und die mögliche Minimal- und Maximalproduktion ist monoton steigend. Man sieht dann, dass es nur einen Preis geben kann, bei dem die dazugehörige Nachfrage im Produktionsintervall liegt.

Aus diesem Lemma folgt jetzt direkt die Eindeutigkeit des Subproblems, wenn wir paarweise verschiedene variable Kosten annehmen.

Lemma 5.4 Das Subproblem (5.4) hat für alle \bar{y} eine eindeutige Lösung.

Für die spätere Diskussion ist es einfacher, wenn wir das Problem auf einen Konsumenten reduzieren. Hier nutzen wir wieder aus, dass wir zu jedem Preis eine eindeutige Nachfrage jedes Konsumenten haben. Diese Nachfragen aggregieren wir und können dann eine Umkehrfunktion bilden. Dies führt uns zu folgendem Lemma.

Lemma 5.5 Für alle $t \in T$ gibt es eine Funktion $P_t : \mathbb{R}_{\geq 0} \to \mathbb{R}$, so dass

$$\theta_t(\bar{y}) = \max_{D_t, y_t} \quad \int_0^{D_t} P_t(x) dx - \sum_{n \in N} w_n^{\text{var}} y_{n,t}$$
s.t.
$$\sum_{n \in N} y_{n,t} - D_t = 0,$$

$$0 \le y_{n,t} \le \bar{y}_n \quad \text{für alle} \quad n \in N$$

gilt. Des Weiteren gibt es genau einen Vektor $(d_{k,t})_{k \in K}$ mit $D_t = \sum_{k \in K} d_{k,t}$, so dass das Optimum im Subproblem angenommen wird.

Beweis Sei $t \in T$. Dann folgt aus Lemma 5.3, dass es für jeden Konsumenten k zu jedem Preis π eine eindeutige Nachfrage $d_{k,t}$ gibt. Daher können wir diese als eine Funktion $d_{k,t}(\pi)$ auffassen. Setze nun

$$D_t(\pi) = \sum_{k \in K} d_{k,t}(\pi).$$

Die Funktion $D_t(\pi)$ ist monoton, aber nicht streng monoton, fallend. Betrachte nun

$$\pi_t^* = \min\{\pi : D_t(\pi) = 0\}.$$

Dann ist D_t eingeschränkt auf das Intervall $[-\infty, \pi_t^*]$ streng monoton fallend. Definiere nun P_t als die Umkehrfunktion von D_t auf diesem Intervall und es folgt die Behauptung. \square

Die dualen Zulässigkeits- und Komplementaritätsbedingungen des Problems aus dem letzten Lemma lauten

$$P_t(D_t) - \alpha_t = 0, (5.6a)$$

$$-w_n^{\text{var}} + \alpha_t + \beta_{n,t}^- - \beta_{n,t}^+ = 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N,$$
 (5.6b)

$$y_{n,t}\beta_{n,t}^{-} = 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N, \tag{5.6c}$$

$$(y_{n,t} - \bar{y}_{n,t}) \beta_{n,t}^+ = 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N.$$
 (5.6d)

Damit sehen wir auch, welche Produzentinnen in einem Szenario uninteressant sind. Wir können a priori feststellen, ob in einem Szenario überhaupt produziert wird, indem wir prüfen, ob es eine Produzentin gibt, die produzieren soll.

Lemma 5.6 Wenn $P_t(0) \le w_n^{\text{var}}$ für eine Produzentin $n \in N$ gilt, gilt $y_{n,t} = 0$.

Wenn wir die Sortierung (5.3) von oben betrachten, sehen wir sofort, dass ein Szenario uninteressant ist, wenn $P_t(0) \le w_1^{\text{var}}$ gilt. Eine Produzentin n können wir also vollständig ignorieren, wenn $P_t(0) \le w_n^{\text{var}}$ in allen Szenarien $t \in T$ gilt.

Für später notieren wir uns auch ein Resultat zu den Dualvariablen.

Lemma 5.7 Für jedes \bar{y} ist in einer Optimallösung die Differenz $\beta_n^+ - \beta_n^-$ eindeutig. Wenn zusätzlich $\bar{y}_n > 0$ gilt, so sind auch die einzelnen β_n^- und β_n^+ eindeutig.

Es bleibt das Masterproblem zu analysieren. Eine Möglichkeit, dieses Problem anzugehen, besteht darin, folgendes Lemma auszunutzen.

Lemma 5.8 Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ eine konvexe Menge und $f: \Omega \to \mathbb{R}$ eine konvexe Funktion. Dann gilt: Wenn f strikt konvex ist, nimmt f höchstens einmal ein Minimum auf Ω an.

Somit gilt für kompakte Ω und stetige sowie strikt konvexe f, dass es genau ein Optimum gibt. In unserem Fall ist zwar Ω nicht kompakt, sondern nur abgeschlossen, aber man kann sich überlegen, dass die Zielfunktion nicht unbeschränkt ist, woraus wiederum folgt, dass es mindestens eine Optimallösung gibt. Somit reicht es zu zeigen, dass die Funktion

$$\sum_{t \in T} \theta_t(\bar{y}) - \sum_{n \in N} w^{\text{inv}} \bar{y}_n$$

strikt konkav in \bar{y} ist. Dazu müssen wir die zweite Ableitung dieser Funktion betrachten. Die zweite Ableitung der Kostenterme verschwindet. Daher reicht es die zweite Ableitung der θ_t zu analysieren. Wie können wir aber

$$\frac{\partial}{\partial \bar{\mathbf{v}}_n \partial \bar{\mathbf{v}}_m} \theta_t$$

berechnen? Die erste Ableitung ist schnell bestimmt wenn wir uns der Sensitivitätsanalyse aus Abschn. 4.2 bedienen.

Lemma 5.9 Es gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} \theta_t = \beta_{n,t}^+.$$

Nun müssen wir überlegen, wie wir $\beta_{n,t}^+$ ableiten. Folgendes Lemma hilft uns dabei.

Lemma 5.10 Sei $\bar{y}_n > 0$, dann gilt

$$\beta_{n,t}^{+} = \begin{cases} P_t(D_t) - w_n^{\text{var}}, & y_{n,t} = \bar{y}_n, \\ 0, & y_{n,t} < \bar{y}_n. \end{cases}$$

Im zweiten Fall ist klar, dass die Ableitung von $\beta_{n,t}^+$ verschwindet. Es bleibt der erste Fall zu analysieren. Dazu leiten wir nun D_t ab.

Lemma 5.11 Es gelte strikte Komplementarität für das Subproblem für t sowie $\bar{y} > 0$. Sei nun n^* der Produzent mit maximalem w^{var} , so dass $y_{n^*} > 0$ gilt. Dann tritt genau einer der beiden folgenden Fälle ein:

1. Wenn $y_{n^*} < \bar{y}_{n^*}$, gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} D_t = 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N.$$

2. Wenn $y_{n^*} = \bar{y}_{n^*}$, gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} D_t = \begin{cases} 1, & n \le n^*, \\ 0, & n > n^*. \end{cases}$$

Beweis Elimination von α in (5.6) liefert:

$$\sum_{n \in N} y_{n,t} - D_t = 0$$

$$-w_n^{\text{var}} + P_t(D_t) + \beta_{n,t}^- - \beta_{n,t}^+ = 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N,$$

$$y_{n,t}\beta_{n,t}^- = 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N,$$

$$\left(\bar{y}_{n,t} - y_{n,t}\right)\beta_{n,t}^+ = 0 \quad \text{für alle} \quad n \in N.$$

Um die gesuchte Ableitung zu bestimmen, nutzen wir den Satz über implizite Funktionen (siehe z. B. Heuser 2008). Wenn wir die Variablen in der Reihenfolge $x = (D, y, \beta^-, \beta^+)$ sortieren, erhalten wir folgende Jakobimatrix des Systems, eingeschränkt auf die Variablen des Subproblems (der Lesbarkeit wegen verzichten wir hier den Zeitindex t):

$$J_{x} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & \dots & 1 & & & & & \\ P'(D) & & & 1 & & -1 & & & \\ \vdots & & & \ddots & & & \ddots & & \\ P'(D) & & & 1 & & -1 & & -1 \\ & \beta_{1}^{-} & & y_{1} & & & & & \\ & & \ddots & & \ddots & & & & \\ & & & \beta_{|N|}^{-} & & y_{|N|} & & & & \\ & & & \beta_{|N|}^{+} & & y_{|N|} & & & \\ & & -\beta_{1}^{+} & & & (\bar{y}_{1} - y_{1}) & & & \\ & & & \ddots & & & \ddots & \\ & & & -\beta_{|N|}^{+} & & & (\bar{y}_{|N|} - |N|) \end{bmatrix}$$

Diese Matrix hat unter unseren Annahmen vollen Rang. Sei nun $n \in N$. Dann gilt für den Vektor v_n der partiellen Ableitungen der Variablen des Subproblems nach \bar{y}_n

$$J_x v_n = -J_{\bar{v}_n}$$

wobei $J_{\bar{y}_n}$ die Jakobimatrix des Systems eingeschränkt auf \bar{y}_n ist. Für $J_{\bar{y}_n}$ gilt

$$J_{\bar{y}_n} = (0, \dots, 0, \beta_n^+, 0)^\top.$$

Daraus können wir folgende Einsichten erzielen: Wenn $\beta_n^+ = 0$ gilt, muss auch $v_n = 0$ gelten. Wenn wir die Gleichungen skalar schreiben erhalten wir

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} D - \sum_{n' \in N} \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} y_{n'} = 0,$$

$$P'(D) \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} D + \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} \beta_{n'}^- - \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} \beta_{n'}^+ = 0 \quad \text{für alle} \quad n' \in N,$$

$$\beta_{n'}^- \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} y_{n'} + y_{n'} \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} \beta_{n'}^- = 0 \quad \text{für alle} \quad n' \in N,$$

$$-\beta_{n'}^+ \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} y_{n'} + (\bar{y}_{n'} - y_{n'}) \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} \beta_{n'}^+ = 0 \quad \text{für alle} \quad n' \in N \setminus \{n\},$$

$$-\beta_n^+ \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} y_n + (\bar{y}_n - y_n) \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} \beta_n^+ = -\beta_n^+.$$

Aus diesen Gleichungen können wir Folgendes schließen:

1. Für alle $n' > n^*$ gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} y_{n'} = 0.$$

2. Für alle $n' < n^*$ mit $n' \neq n$ gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} y_{n'} = 0.$$

3. Wenn $n \neq n^*$ und $y_{n^*} = \bar{y}_{n^*}$, dann gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} y_{n^*} = 0.$$

4. Wenn $y_{n^*} < \bar{y}_{n^*}$, dann gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} \beta_{n^*}^+ = \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} \beta_{n^*}^- = \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} D = 0.$$

5. Wenn $y_{n^*} = \bar{y}_{n^*}$, dann gilt

$$\frac{\partial}{\partial \bar{y}_n} D = \begin{cases} 0, & n > n^*, \\ 1, & n \le n^*. \end{cases}$$

Insgesamt haben wir nun die Struktur der Hessematrix von θ_t bestimmt.

Lemma 5.12 Es gelte strikte Komplementarität im Szenario t und es sei n^* die Produzentin mit maximalem w^{var} , so dass $y_{n^*} > 0$ gilt. Dann gilt für die Hessematrix H von θ_t :

$$H = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A \in \mathbb{R}^{n^* \times n^*}.$$

Dabei sind alle Einträge von A identisch und es gilt

$$A_{m,n} = \begin{cases} 0, & y_{n^*} < \bar{y}_{n^*}, \\ P'_t(D_t), & y_{n^*} = \bar{y}_{n^*}. \end{cases}$$

Beweis Es gilt

$$H_{m,n} = \frac{\partial}{\partial \bar{y}_n \partial \bar{y}_m} \theta_t = \frac{\partial}{\partial \bar{y}_m} \beta_n^+.$$

Dann folgt aus Lemma 5.10, dass für alle $n > n^*$ gelten muss, dass $H_{m,n} = 0$ gilt. Daher kann nur A von Null verschiedene Einträge enthalten. Wieder aus Lemma 5.10 folgt für $n < n^*$ die Gleichung

$$H_{m,n} = \frac{\partial}{\partial \bar{y}_m} \beta_n^+ = \frac{\partial}{\partial \bar{y}_m} \left(P_t(D_t) - w_n^{\text{var}} \right) = P_t'(D_t) \frac{\partial}{\partial \bar{y}_m} D_t.$$

Dann folgt die Behauptung aus Lemma 5.11.

Die Hessematrix von θ selbst ist nun einfach die Summe der Hessematrizen der θ_t . Damit also die Hessematrix von θ negativ definit wird, muss jeder Hauptminor dieser ebenfalls negativ definit sein. Um dies sicherzustellen, benötigen wir eine Annahme. Für jede Produzentin n gibt es einen Zeitraum t, in dem $n = n^*$ und $y_n = \bar{y}_n$ gilt.

Satz 5.13 Unter den obigen Annahmen gilt, dass die Lösung von Problem (5.2) eindeutig ist.

Beweis Sei $H \in \mathbb{R}^{N \times N}$ die Hessematrix von θ und H_t die Hessematrix von θ_t für alle $t \in T$. Wir dürfen ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass es für alle $t \in T$ ein $n^*(t)$ gibt, so dass $n^*(t)$ die Produzentin mit maximalem w^{var} ist, so dass $y_{n^*(t),t} > 0$ gilt und für diese Produzentin zusätzlich gilt, dass $y_{n^*(t),t} = \bar{y}_{n^*(t)}$. Wir dürfen dies annehmen, da alle anderen Hessematrizen verschwinden. Wir setzen nun

$$T_n = \{t : n \le n^*(t)\}.$$

Dann folgt aus unseren Annahmen, dass $T_m \subseteq T_n$, wenn m > n gilt. Somit gilt

$$H_{m,n} = \sum_{t \in T_M} P'_t(D_t) \quad \text{mit} \quad M = \max\{m, n\}.$$

Wir wenden nun Gauß-Elimination auf die Matrix H an. Dabei ziehen wir im k-ten Schritt Zeile N-k+1 von allen Zeilen 1 bis N-k ab. Damit haben wir H in eine obere Dreiecksmatrix überführt. Die Diagonaleinträge sind gegeben durch

$$H_{n,n} = \sum_{t \in T: n=n^*(t)} P'_t(D_t).$$

Da alle diese Einträge negativ sind, ist die Matrix negativ definit und somit θ strikt konkav.

Weitere Analysen für Peak-Load-Pricing-Probleme finden sich in den beiden Publikationen Boiteux (1949) und Steiner (1957) sowie in dem Überblicksartikel Crew et al. (1995).

Aufgaben

Aufgabe 5.1 Beweisen Sie Lemma 5.1.

Aufgabe 5.2 Beweisen Sie Lemma 5.2.

Aufgabe 5.3 Beweisen Sie Lemma 5.7.

Aufgabe 5.4 Beweisen Sie Lemma 5.10.

Literatur

Boiteux, M. (1949). De la tarification des pointes de demande. Revue générale de l'électricité, 58(8), 321–340.

Crew, M. A., Fernando, C. S., & Kleindorfer, P. R. (1995). The theory of peak-load pricing: A survey. *Journal of Regulatory Economics*, 8(3), 215–248. https://doi.org/10.1007/BF01070807. ISSN: 0922-680X.

Grimm, V., Schewe, L., Schmidt, M., & Zöttl, G. (2017). Uniqueness of market equilibrium on a network: A peak-load pricing approach. *European Journal of Operational Research*, 261(3), 971–983. https://doi.org/10.1016/j.ejor.2017.03.036. ISSN: 0377-2217.

Heuser, H. (2008). Lehrbuch der Analysis. Teil 2. Wiesbaden: Vieweg+Teubner.

Krebs, V., Schewe, L., & Schmidt, M. (2018). Uniqueness and multiplicity of market equilibria on DC power flow networks. *European Journal of Operational Research*, 271(1), 165–178. https://doi.org/10.1016/j.ejor.2018.05.016. ISSN: 0377-2217. Literatur 71

Krebs, V., & Schmidt, M. (2018). Uniqueness of market equilibria on networks with transport costs. *Operations Research Perspectives*, *5*, 169–173. https://doi.org/10.1016/j.orp.2018.05.002. ISSN: 2214-7160.

- Mas-Colell, A., Whinston, M. D., & Green, J. R. (1995). *Microeconomic theory*. New York: Oxford University Press.
- Steiner, P. O. (1957). Peak loads and efficient pricing. *The Quarterly Journal of Economics*, 71(4), 585–610. JSTOR: 1885712.

Lineare Komplementaritätsprobleme

Zusammenfassung

Lineare Komplementaritätsprobleme sind eine Klasse von Gleichungs- und Ungleichungssystemen. Sie erlauben einen vereinheitlichenden Blick auf lineare und quadratische Optimierungsprobleme und sind insbesondere von Bedeutung bei der Modellierung von Gleichgewichten – beispielsweise für Gas- oder Strommärkte. In diesem Kapitel führen wir die wichtigsten Begriffe ein, diskutieren den Zusammenhang zu quadratischen Optimierungsproblemen und beweisen einen zentralen Satz über die eindeutige Lösbarkeit bestimmter linearer Komplementaritätsprobleme.

Lineare Komplementaritätsprobleme bilden eine für viele Anwendungen wichtige Brücke zwischen Gleichgewichtsproblemen und Optimierungsproblemen. Diesen Zusammenhang werden wir insbesondere bei der Modellierung des deutschen Strommarktes in Kap. 7 ausnutzen. Durch ihren Zusammenhang zu den Optimalitätsbedingungen aus Kap. 4 stellen sie außerdem eine Verallgemeinerung von linearen und quadratischen Optimierungsproblemen dar, so wie wir ihn auch schon im letzten Kap. 5 über Peak-Load-Pricing-Probleme ausgenutzt haben.

6.1 Problemformulierungen

Das lineare Komplementaritätsproblem besteht darin, einen endlich-dimensionalen Vektor zu finden, der ein speziell strukturiertes System von Gleichungen und Ungleichungen erfüllt. Konkreter: Es seien $q \in \mathbb{R}^n$ und $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gegeben. Dann besteht das *lineare Komplementaritätsproblem* (kurz: LCP für "linear complementarity problem") darin, einen Vektor $z \in \mathbb{R}^n$ zu finden, der das System

$$z \ge 0, \tag{6.1a}$$

$$q + Mz \ge 0, (6.1b)$$

$$z^{\top}(q + Mz) = 0 \tag{6.1c}$$

löst oder zu zeigen, dass kein solcher Vektor existiert. Wir bezeichnen das obige LCP (6.1) auch mit dem Paar (q, M).

Das lineare Komplementaritätsproblem (6.1) ist ein Spezialfall des allgemeineren *nicht-linearen Komplementaritätsproblems* (kurz: NCP). Das NCP besteht darin, einen Vektor $z \in \mathbb{R}^n$ zu finden, der das System

$$z \ge 0$$
, $f(z) \ge 0$, $z^{\top} f(z) = 0$

erfüllt. Hier ist f eine möglicherweise nichtlineare Abbildung vom \mathbb{R}^n in sich selbst. Für f(z) = q + Mz erhält man wieder das LCP (q, M).

Das nichtlineare Komplementaritätsproblem ist ein verallgemeinertes Framework sowohl für die nichtlineare Optimierung als auch für viele Gleichgewichtsprobleme. So lassen sich beispielsweise die Optimalitätsbedingungen von quadratischen Optimierungsproblemen mit linearen Ungleichungsnebenbedingungen als LCP schreiben.

Lineare Komplementaritätsprobleme tauchen das erste Mal in den 1940er Jahren in der Literatur auf, gerieten dann aber zunehmend in Vergessenheit. Erst seit den 1960er Jahren sind sie wieder Gegenstand bis heute anhaltender intensiver Forschung. Mehr geschichtliche Informationen findet man in Abschn. 1.7 des Buches von Cottle et al. (2009). Im Kontext der Versorgungsnetze sind sie insbesondere wichtig bei der Modellierung von Märkten wie beispielsweise dem Strom- oder Gasmarkt. Eine Vielzahl solcher Modellierungen findet man in Gabriel et al. (2012) und Hobbs (2001).

6.2 Grundlegende Begriffe

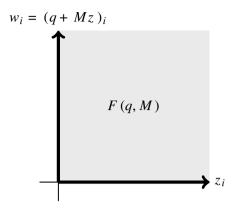
Wir sammeln jetzt kurz die wichtigsten Begriffe rund um LCPs sein.

Definition 6.1 (Zulässige Punkte, zulässiges LCP, zulässige Menge). Einen Vektor $z \in \mathbb{R}^n$, der die Ungleichungen (6.1a) und (6.1b) erfüllt, nennt man *zulässig*. Das LCP (q, M) heißt *zulässig*, wenn ein zulässiger Vektor z existiert. Die Menge

$$\mathcal{F}(q, M) := \{ z \in \mathbb{R}^n : z \text{ erfüllt } (6.1a) \text{ und } (6.1b) \}$$

nennen wir entsprechend die zulässige Menge des LCPs (q, M); vgl. Abb. 6.1.

Abb. 6.1 Zulässige Menge und Lösungsmenge eines LCPs



Es ist häufig praktisch, den Hilfsvektor

$$w = q + Mz (6.2)$$

einzuführen. Damit gilt, dass ein zulässiger Vektor z des LCPs (q, M) die Bedingung (6.1c) genau dann erfüllt, wenn

$$z_i w_i = 0 \quad \text{für alle} \quad i = 1, \dots, n \tag{6.3}$$

gilt. In diesem Fall kann also Bedingung (6.1c) durch (6.2) und (6.3) ersetzt werden.

Definition 6.2 (Komplementaritätspaar, Lösung). Die Variablen z_i und w_i nennt man auch *Komplementaritätspaar*. Einen Vektor z, der (6.3) erfüllt, nennt man *komplementär*. Eine *Lösung* des LCPs ist demnach ein zulässiger und komplementärer Vektor. Die Menge aller Lösungen bezeichnet man mit S(q, M).

Zwei elementare Fragen zu einem gegebenen LCP sind,

- 1. ob eine Lösung existiert und,
- 2. falls eine Lösung existiert, ob die Lösung eindeutig ist.

Der einfachste Fall, in dem die erste Frage positiv beantwortet werden kann, ist der Fall $q \ge 0$. In diesem Fall ist der Vektor z = 0 eine Lösung. Kompliziertere Fälle in für uns interessanten Anwendungen diskutieren wir in den folgenden Abschnitten und Kapiteln.

6.3 Beispiel: Quadratische Optimierungsprobleme

Historisch gesehen wurden LCPs zunächst als vereinheitlichende Formulierung für lineare und quadratische Optimierungsprobleme sowie für Matrixspiele (Cottle et al. 2009; Lemke und Howson 1964) studiert. Den Zusammenhang zwischen QPs und LCPs, der insbesondere entscheidend für unsere späteren Modellierungen und Analysen des deutschen Strommarktes in Kap. 7 sein wird, diskutieren wir jetzt im Detail.

Dazu betrachten wir zunächst den einfacheren Fall eines QPs, das nur spezielle Variablenschranken – nämlich Nichtnegativitätsbedingungen – als Ungleichungen hat. Das heißt, wir betrachten

$$\min_{z} \quad q^{\top} z + \frac{1}{2} z^{\top} M z \tag{6.4a}$$

s.t.
$$z > 0$$
. (6.4b)

Die Lagrangefunktion dieses Problems lautet

$$\mathcal{L}(z, w) = q^{\mathsf{T}} z + \frac{1}{2} z^{\mathsf{T}} M z - w^{\mathsf{T}} z$$

und duale Zulässigkeit ist demnach gegeben durch

$$q + Mz - w = 0.$$

Mit den Nichtnegativitätsbedingungen $z, w \ge 0$ und der Komplementaritätsbedingung $w^\top z = 0$ lauten die KKT-Bedingungen also

$$q + Mz = w,$$

 $z, w \ge 0,$
 $z_i w_i = 0$ für alle $i = 1, ..., n.$

Dieses System ist ein LCP in der Form mit Nutzung des Hilfsvektors w=q+Mz. Eliminiert man w>0, so erhält man das System

$$z \ge 0,$$

$$q + Mz \ge 0,$$

$$z^{\top}(q + Mz) = 0,$$

was exakt unserer ursprünglichen Definition eines LCPs entspricht.

Für den konvexen Fall wissen wir aufgrund von Satz 4.16, dass die Lösungen des QPs durch die KKT-Bedingungen charakterisiert sind. Im Fall einer positiv semi-definiten Matrix M ist das QP (6.4) damit äquivalent zum LCP (q, M). Für allgemeines M ist das LCP (q, M) äquivalent zum Finden von KKT-Punkten des Problems (6.4).

6.4 Gemischte LCPs 77

Wir gehen jetzt noch einen Schritt weiter und betrachten das allgemeinere quadratische Optimierungsproblem

$$\min_{x} c^{\top} x + \frac{1}{2} x^{\top} Q x \tag{6.5a}$$

s.t.
$$Ax > b$$
, (6.5b)

$$x > 0. ag{6.5c}$$

Hierbei ist Q wieder symmetrisch und die restlichen Daten sind Matrizen und Vektoren mit passenden Dimensionen. Aus Abschn. 4.1 wissen wir, dass für eine lokale Lösung x von (6.5) Vektoren y, u existieren mit

$$u = c + Qx - A^{\top}y \ge 0,$$

$$x \ge 0,$$

$$x^{\top}u = 0,$$

$$v = -b + Ax \ge 0,$$

$$y \ge 0,$$

$$y^{\top}v = 0.$$

Diese Bedingungen definieren das LCP (q, M) mit

$$q := \begin{pmatrix} c \\ -b \end{pmatrix}, \quad M := \begin{bmatrix} Q & -A^{\top} \\ A & 0 \end{bmatrix}.$$

Für den Fall von positiv semi-definitem $\mathcal Q$ stehen also die QP-Lösungen wieder in 1:1-Korrespondenz mit den LCP-Lösungen.

6.4 Gemischte LCPs

Eine wichtige Verallgemeinerung der bisher betrachteten LCPs sind sogenannte *gemischte LCPs* (kurz: MLCPs für "mixed LCPs"). Gegeben seien zwei Matrizen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{m \times m}$ sowie die weiteren Matrizen $C \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $D \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und Vektoren $a \in \mathbb{R}^n$ und $b \in \mathbb{R}^m$. Das *gemischte lineare Komplementaritätsproblem* besteht dann im Finden zweier Vektoren $u \in \mathbb{R}^n$ und $v \in \mathbb{R}^m$, die das System

$$a + Au + Cv = 0, (6.6a)$$

$$b + Du + Bv > 0$$
, (6.6b)

$$v \ge 0,\tag{6.6c}$$

$$v^{\top}(b + Du + Bv) = 0 \tag{6.6d}$$

erfüllen. Gemischte LCPs sind also eine Mischung aus einem LCP und einem linearen Gleichungssystem. Man beachte, dass der Vektor u keinen Vorzeichenbeschränkungen unterliegt. Falls A nicht singulär ist, können wir das lineare Gleichungssystem in (6.6a) auflösen und erhalten

$$u = -A^{-1}(a + Cv).$$

Ersetzt man nun jedes Auftreten von u in (6.6), sieht man ein, dass man das gemischte LCP (6.6) durch das Standard-LCP (q, M) mit

$$q = b - DA^{-1}a$$
, $M = B - DA^{-1}C$

ersetzen kann. Unter der Annahme, dass *A* invertierbar ist, besteht demnach kein theoretischer Unterschied zwischen gemischten LCPs und LCPs. Im allgemeineren Fall einer nicht invertierbaren Matrix *A* sind gemischte LCPs und LCPs aber echt unterschiedliche Problemklassen.

Gemischte LCPs sind für die Praxis wichtig, da sie die Brücke zu allgemeinen QPs mit Gleichungsbeschränkungen sind. Wir betrachten dazu das QP

$$\min_{x} c^{\top}x + \frac{1}{2}x^{\top}Qx$$
s.t. $Ax \ge b$,
$$Cx = d$$
,

wobei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische Matrix sowie $c \in \mathbb{R}^n$, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$, $C \in \mathbb{R}^{\ell \times n}$ und $d \in \mathbb{R}^{\ell}$ sind. Die KKT-Bedingungen für dieses OP lauten

$$0 = c + Qx - C^{T}z - A^{T}y,$$

$$0 = -d + Cx,$$

$$v = -b + Ax \ge 0,$$

$$y \ge 0,$$

$$y^{T}v = 0.$$

Dies ist offensichtlich ein gemischtes LCP mit freien Variablen x und z sowie nichtnegativen Variablen y. Wie immer gehören die nichtnegativen dualen Variablen y zu den Ungleichungsnebenbedingungen $Ax \ge b$ und die freien dualen Variablen z gehören zu den Gleichungen Cx = d.

Nachdem wir jetzt (gemischte) LCPs kennengelernt und uns den Zusammenhang zu quadratischen Optimierungsproblemen klargemacht haben, wenden wir uns nun der Frage von Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen zu.

6.5 Existenz und Eindeutigkeit

In diesem Abschnitt wollen wir einen kurzen Einblick in die Existenz- und Eindeutigkeitstheorie für LCPs erhalten. Dabei wird das OP

$$\min_{z} \ z^{\top}(q+Mz) \tag{6.7a}$$

$$s.t. \quad q + Mz \ge 0, \tag{6.7b}$$

$$z > 0 \tag{6.7c}$$

sehr wichtig sein. Man beachte, dass die Matrix M hier nicht symmetrisch sein muss. Der Zusammenhang zwischen dem QP (6.7) und LCPs ist wie folgt: Jede Lösung z^* von (6.7) mit optimalem Zielfunktionswert 0 ist eine Lösung des LCPs (q, M) und jede Lösung des LCPs (q, M) ist eine global optimale Lösung von (6.7).

Wir beweisen jetzt ein zentrales Lemma der LCP-Theorie. Für uns ist es insbesondere auch von didaktischer Bedeutung, da der Beweis den sehr direkten Zusammenhang zwischen quadratischen Optimierungsproblemen, deren KKT-Bedingungen und LCPs illustriert.

Lemma 6.3 Wenn das LCP (q, M) zulässig ist, dann hat das QP (6.7) eine optimale Lösung z^* . Außerdem existiert ein Vektor u^* mit

$$q + (M + M^{\top})z^* - M^{\top}u^* \ge 0,$$
 (6.8a)

$$(z^*)^{\top} (q + (M + M^{\top})z^* - M^{\top}u^*) = 0,$$
 (6.8b)

$$u^* > 0,$$
 (6.8c)

$$(u^*)^{\top}(q + Mz^*) = 0 (6.8d)$$

und es gilt

$$(z^* - u^*)_i (M^\top (z^* - u^*))_i \le 0$$
 für alle $i = 1, ..., n$. (6.9)

Beweis Da das LCP (q, M) zulässig ist, ist auch das QP (6.7) zulässig. Da die Zielfunktion des QPs (6.7) auf der zulässigen Menge nach unten (durch 0) beschränkt ist, liefert der Satz von Frank-Wolfe (1956) die Existenz einer optimalem Lösung z^* . Also gibt es ein u^* , so dass die KKT-Bedingungen (6.8) des QPs (6.7) erfüllt sind. Es bleiben die Ungleichungen (6.9) zu zeigen. Aus (6.8b) und der Zulässigkeit von z^* für das LCP (q, M) folgt

$$z_i^* (M^\top (z^* - u^*))_i \le 0.$$

Außerdem liefert komponentenweise Multiplikation von (6.8a) mit u_i^* und Ausnutzung der komponentenweisen Komplementarität $u_i^*(q + Mz^*)_i = 0$, dass

$$-u_i^*(M^\top(z^*-u^*))_i \leq 0$$

gilt. Addition der beiden hergeleiteten Ungleichungen liefert schließlich (6.9).

Die Bedingung (6.9) ist von zentraler Bedeutung für die Theorie der linearen Komplementaritätsprobleme. Anschaulich gesprochen bedeutet die Ungleichung, dass die Matrix M^{\top} das Vorzeichen des Vektors $z^* - u^*$ umdreht. Interessanterweise kann man zeigen, dass ein LCP (q, M) genau dann eine eindeutige Lösung hat für alle Vektoren $q \in \mathbb{R}^n$, wenn M nur das Vorzeichen des Nullvektors – aber von keinem anderen Vektor – umdreht. Solche Matrizen werden P-Matrizen genannt.

Eine vollständige Behandlung von *P*-Matrizen würde den Rahmen dieses Buches sprengen. Exemplarisch wollen wir uns aber mit einer wichtigen Teilklasse von *P*-Matrizen, nämlich mit den positiv definiten Matrizen, beschäftigen.

Satz 6.4 Es sei M eine positiv semi-definite Matrix. Dann ist das LCP (q, M) lösbar, wenn es zulässig ist.

Einen Beweis dieses Satzes findet man beispielsweise in Abschn. 3.1 des Buches von Cottle et al. (2009).

Wir können sogar noch mehr sagen, wenn die Matrix *M* positiv definit ist. Dazu führen wir noch eine neue Matrixklasse ein.

Definition 6.5 (S-Matrix) Eine quadratische Matrix M, für die ein Vektor $z \ge 0$ existiert mit Mz > 0, nennt man S-Matrix.

Das "S" steht dabei für Stiemke. Unter Verwendung eines passenden Alternativsatzes kann man sich leicht überlegen, dass positiv definite Matrizen Stiemke-Matrizen sind.

Lemma 6.6 Eine Matrix $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist genau dann eine S-Matrix, wenn das LCP (q, M) für alle $q \in \mathbb{R}^n$ zulässig ist.

Beweis Es sei ein beliebiges LCP (q, M) gegeben, wobei M eine S-Matrix ist. Es sei $z \ge 0$ ein Vektor mit Mz > 0. Dann gilt auch $\lambda z \ge 0$ und

$$M(\lambda z) = \lambda Mz \ge -q$$

für hinreichend großes $\lambda \in \mathbb{R}$. Also ist λz zulässig für das LCP (q, M).

Aufgaben 81

Andererseits sei das LCP (q, M) zulässig für beliebiges q. Man nehme ein beliebiges q < 0. Jede zulässige Lösung z erfüllt dann $Mz \ge -q > 0, z \ge 0$. Also ist M eine S-Matrix.

Jetzt können wir unser gewünschtes Eindeutigkeitsresultat beweisen.

Satz 6.7 Es sei $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ positiv definit. Dann hat das LCP (q, M) eine eindeutige Lösung für alle $q \in \mathbb{R}^n$.

Beweis Mit dem, was wir bisher gezeigt haben, müssen wir nur noch die Eindeutigkeit beweisen. Sei dazu $q \in \mathbb{R}^n$ beliebig. Jede Lösung des LCPs (q, M) ist eine optimale Lösung des QPs (6.7). Da M positiv definit ist, ist die Zielfunktion des QPs strikt konvex. Damit hat das QP (6.7) und somit auch das LCP (q, M) eine eindeutige Lösung.

Mit dem letzten Satz haben wir ein exemplarisches Existenz- und Eindeutigkeitsresultat für die Klasse der positiv definiten Matrizen bewiesen. Neben der Existenz- und Eindeutigkeitstheorie ist die Entwicklung von Algorithmen für lineare Komplementaritätsprobleme ein wichtiges Forschungsgebiet. Eine Vielzahl von Algorithmen ist in dem Buch von Cottle et al. (2009) diskutiert. Eines der wichtigsten Verfahren in diesem Kontext ist der Lemke-Algorithmus für den man eine gute Einführung in dem deutschsprachigen Lehrbuch von Schäfer (2008) finden kann.

Lineare Komplementaritätsprobleme werden wir direkt im folgenden Kapitel benutzen, wenn wir den deutschen Strommarkt modellieren. Für mehr Details zur LCP-Modellierung von Strommärkten sei die interessierte Leserin auf Hobbs (2001) verwiesen. Für weitere allgemeine Theorie für LCPs und die verwandten Problemklassen der Variationsungleichungen empfehlen wir das Buch von Facchinei und Pang (2007).

Aufgaben

Aufgabe 6.1 Schreiben Sie die KKT-Bedingungen des linearen Optimierungsproblems aus Beispiel 4.7 als gemischtes LCP.

Aufgabe 6.2 Zeigen Sie, dass positiv definite Matrizen Stiemke-Matrizen sind und nutzen Sie dabei den Alternativsatz von Ville, den Sie z. B. in Kap. 2 des Buches von Cottle et al. (2009) finden können.

Aufgabe 6.3 Zeigen sie, dass strikt konvexe Optimierungsprobleme, d. h. Minimierungsprobleme mit konvexer zulässiger Menge und strikt konvexer Zielfunktion, eine eindeutige Lösung haben, wenn sie zulässig sind.

Aufgabe 6.4 Aus Satz 6.7 wissen wir, dass LCPs mit positiv definitem M eindeutig lösbar sind für alle $q \in \mathbb{R}^n$. Der Satz gilt tatsächlich nicht, wenn M nur positiv semi-definit ist. Konstruieren Sie ein Gegenbeispiel.

Literatur

- Cottle, R., Pang, J., & Stone, R. (2009). *The linear complementarity problem*. Society for Industrial und Applied Mathematics. https://doi.org/10.1137/1.9780898719000.
- Facchinei, F., & Pang, J.-S. (2007). Finite-dimensional variational inequalities and complementarity problems. Springer Science & Business Media. https://doi.org/10.1007/b97543.
- Frank, M., & Wolfe, P. (1956). An algorithm for quadratic programming. *Naval Research Logistics Quarterly*, 3(1–2), 95–110. https://doi.org/10.1002/nav.3800030109.
- Gabriel, S. A., Conejo, A. J., David Fuller, J., Hobbs, B. F., & Ruiz, C. (2012). *Complementarity modeling in energy markets* (Bd. 180). New York: Springer Science & Business Media.
- Hobbs, B. E. (2001). Linear complementarity models of Nash-Cournot competition in bilateral and POOLCO power markets. *IEEE Transactions on Power Systems*, 16(2), 194–202. ISSN: 0885-8950. https://doi.org/10.1109/59.918286.
- Lemke, C., & Howson, J., Jr. (1964). Equilibrium points of bimatrix games. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 12(2), 413–423. https://doi.org/10.1137/0112033.
- Schäfer, U. (2008). *Das lineare Komplementaritätsproblem. Eine Einführung*. Berlin: Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-540-79735-7.



Der deutsche Strommarkt

Zusammenfassung

In diesem Kapitel leiten wir ein vereinfachtes Modell des deutschen Strommarktes her und vergleichen es mit einem vereinfachten Modell von Strommärkten, wie sie in Teilen der USA organisiert sind. Dabei formulieren wir die auftretenden Probleme zunächst als Komplementaritätssysteme, um dann ihre Äquivalenz zu bestimmten Optimierungsproblemen zu zeigen. Der deutsche Strommarkt zeichnet sich dabei dadurch aus, dass auf der Handelsebene die physikalischen Restriktionen des Transportnetzes außer Acht gelassen werden. Erst in einem zweiten Schritt, dem sogenannten Redispatch, werden diese dann betrachtet und das Marktergebnis gegebenenfalls modifiziert. Dies vergleichen wir mit einem sogenannten Nodalpreissystem, welches direkt während des Handels die physikalischen Netzgegebenheiten berücksichtigt.

Im vorletzten Kap. 5 haben wir uns mit dem sogenannten Peak-Load-Pricing-Problem beschäftigt. Wenn wir jetzt das letzte Kapitel Revue passieren lassen, können wir unser Vorgehen abstrakter formulieren. Wir haben das Problem zunächst als Komplementaritätssystem modelliert, indem wir die Optimalitätsbedingungen erster Ordnung der einzelnen Spielerprobleme genutzt haben. Außerdem haben wir vollständigen Wettbewerb angenommen. Dann konnten wir das resultierende Komplementaritätssystem wieder als ein äquivalentes Optimierungsproblem (5.2) umschreiben:

$$\begin{split} \max_{d,y,\bar{y}} \quad & \sum_{t \in T} \sum_{k \in K} \int_0^{d_{k,t}} p_{k,t}(x) \mathrm{d}x - \sum_{t \in T} \sum_{n \in N} w_n^{\mathrm{var}} y_{n,t} - \sum_{n \in N} w_n^{\mathrm{inv}} \bar{y}_n \\ \mathrm{s.t.} \quad & \sum_{n \in N} y_{n,t} - \sum_{k \in K} d_{k,t} = 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T, \\ & 0 \leq y_{n,t} \leq \bar{y}_n \quad \text{für alle} \quad n \in N, \ t \in T, \\ & 0 \leq d_{k,t} \quad \text{für alle} \quad k \in K, \ t \in T. \end{split}$$

[©] Springer-Verlag GmbH Deutschland, ein Teil von Springer Nature 2019 L. Schewe und M. Schmidt, *Optimierung von Versorgungsnetzen*, https://doi.org/10.1007/978-3-662-58539-9_7

Dieses Modell bildet den Ausgangspunkt für unsere Modellierung des deutschen Strommarktes. Der tatsächliche Mechanismus ist aber, wie wir im Folgenden sehen werden, etwas komplizierter als Modell (5.2).

Der Strom für Deutschland – aber auch für Frankreich, Österreich und die Schweiz – wird in Leipzig an der European Energy Exchange (EEX) am sogenannten EPEX-Spotmarkt für Strom (EEX Power Spot) gehandelt. Neben Strom werden dort außerdem beispielsweise CO₂-Emissionsrechte gehandelt. Wir betrachten hier den Auktionshandel am Day-Ahead-Markt, an dem der Strom für den nächsten Tag gehandelt wird.

Am Spotmarkt handeln die Stromproduzentinnen und -konsumenten. Diese Marktakteure sind regional platziert und wir werden im Folgenden sehen, dass es von Bedeutung ist, ob eine Produzentin z.B. im Norden oder im Süden Deutschlands ihr Kraftwerk installiert hat. Der Grund, weshalb ein solcher Effekt durch die Betrachtung von Modell (5.2) nicht beobachtet werden kann, ist, dass dieses Modell das zugrunde liegende Stromtransportnetz außer Acht lässt.

Wir werden uns zwei Varianten ansehen, wie man das Netz in das Modell einbetten kann. Eine der Varianten ist die Basis für Modelle, die z.B. in den USA verwendet werden, und die andere Variante wird in Deutschland verwendet.

7.1 Stromnetzmodelle

Ein Stromnetz modellieren wir als einen gerichteten Graphen G=(V,L), wobei die Knoten $v\in V$ die Stellen im Netz bezeichnen, an denen sich Konsumenten und Produzentinnen befinden und die Kanten $l\in L$ die Stromlinien modellieren. Wir treffen ferner die vereinfachende Annahme, dass an einem Knoten $v\in V$ des Netzes genau ein Konsument und eine Produzentin sitzt. Identifizieren wir jetzt Produzentinnen und Konsumenten mit den Knoten des obigen Graphens, so wird Modell (5.2) zu

$$\max_{d,y,\bar{y}} \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_{0}^{d_{v,t}} p_{v,t}(x) dx - \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_{v}^{\text{var}} y_{v,t} - \sum_{v \in V} w_{v}^{\text{inv}} \bar{y}_{v}$$
(7.1a)

s.t.
$$\sum_{v \in V} y_{v,t} - \sum_{v \in V} d_{v,t} = 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T,$$
 (7.1b)

$$0 \le y_{v,t} \le \bar{y}_v \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \tag{7.1c}$$

$$0 \le d_{v,t} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \tag{7.1d}$$

wobei die $t \in T$ jetzt aufeinanderfolgende Day-Ahead-Märkte beschreiben.

Dieses Modell beschreibt in vereinfachter Weise das tatsächliche Geschehen am deutschen Spotmarkt unter der ökonomischen Annahme eines vollständigen Wettbewerbs. Dies ist insbesondere deshalb der Fall, da der deutsche Strommarkt an der EEX in Leipzig explizit das bestehende Stromnetz außer Acht lässt. In Problem (7.1) befinden sich nämlich keinerlei

7.1 Stromnetzmodelle 85

Gleichungen oder Ungleichungen, die beschreiben, wie Strom durch das Stromnetz fließt und welche Restriktionen sich daraus für die produzierten und konsumierten Strommengen ergeben.

Ein detailliertes Modell des Stromflusses würde auf dem sogenannten AC-Modell (alternating current; Wechselstrom) basieren; siehe z. B. Cain et al. (2012) für einen historischen Überblick von AC-Modell-Formulierungen und den Artikel Kocuk et al. (2017) für einen sehr aktuellen Literaturüberblick. Dies führt aber aufgrund seiner Nichtlinearität und Nichtkonvexität zu Modellen, die für den Zweck ökonomischer Analysen häufig zu komplex sind. Anstelle des AC-Modells verwendet man daher für ökonomische Analysen häufig ein verlustfreies DC-Modell (direct current; Gleichstrom). Mehr Details zu dem Modell und seiner Herleitung findet man u. a. in Kirschen und Strbac (2004), Van den Bergh et al. (2014) und Wood et al. (2014). Da dieses Modell linear und daher wesentlich besser handhabbar ist, wird es häufig im Kontext von ökonomischen Analysen für Strommärkte und -netze verwendet (Ehrenmann und Neuhoff 2002; Jing-Yuan und Smeers 1999). Es gibt allerdings auch ökonomisch motivierte Gleichgewichtsmodelle, die außerdem Verluste im DC-Modell betrachten. Beispiele hierfür sind die Artikel Aussel et al. (2016) und Aussel et al. (2013).

Das DC-Modell benötigt zwei Arten von Variablen:

- 1. Variablen $f_{l,t}, t \in T$, für den Stromfluss auf den Stromlinien $l \in L$ und
- 2. Variablen $\theta_{v,t}$, $t \in T$, für die Phasenwinkel auf den Knoten $v \in V$ des Netzes.

Die Flussvariablen $f_{l,t}$, $l \in L$, $t \in T$, sind jeweils durch die Kapazität $c_l > 0$ der entsprechenden Linie $l \in L$ nach unten und oben beschränkt:

$$-c_l \le f_{l,t} \le c_l \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T. \tag{7.2}$$

Bei den Phasenwinkeln handelt es sich um freie Variablen $\theta_{v,t} \in \mathbb{R}$, $v \in V$, $t \in T$. Mit dem Blindleitwert B_l der Kante $l \in L$ ist der Zusammenhang zwischen Stromfluss und Phasenwinkeln im verlustfreien DC-Modell wie folgt gegeben:

$$f_{l,t} = B_l(\theta_{v,t} - \theta_{w,t}) \quad \text{für alle} \quad l = (v, w) \in L, \ t \in T.$$
 (7.3)

Der Zusammenhang zwischen dem DC-Flussmodell (7.3) sowie der Produktion $y_{v,t}$ und dem Verbrauch $d_{v,t}$ ist schließlich über das erste Kirchhoffsche Gesetz hergestellt:

$$y_{v,t} + \sum_{l \in \delta^{\text{in}}(v)} f_{l,t} = d_{v,t} + \sum_{l \in \delta^{\text{out}}(v)} f_{l,t} \text{ für alle } v \in V, t \in T.$$
 (7.4)

Eine äquivalente Variante dieses Modells entsteht, wenn wir die Variablen θ aus dem Modell herausprojizieren. Man kann zeigen, dass es dann eine Matrix P (die sogenannte PTDF-Matrix; siehe z.B. Van den Bergh et al. 2014; Wood et al. 2014) gibt, die direkt eine Verbindung zwischen Angebot und Nachfrage sowie den Flüssen im Netz herstellt:

$$P(y_t - d_t) = f_t$$
 für alle $t \in T$.

Diese Matrix kann dann genutzt werden, um die Flüsse aus dem Modell zu entfernen, so dass nur noch Ungleichungen der Form

$$-c < P(y_t - d_t) < c$$
 für alle $t \in T$

verbleiben. Im Folgenden werden wir aber die Formulierung (7.3) unter Verwendung der Phasenwinkel nutzen.

Ein Modell auf Basis des verlustfreien DC-Modells ist ein typischer Modellierungskompromiss. Man könnte auch nur das erste Kirchhoffsche Gesetz (7.4) fordern – das ist aber oft eine Vereinfachung zu viel. Ein solches Modell wird aber verwendet, wenn man sehr stark vom physischen Netz abstrahiert wie z. B. beim Cross-Border-Handel. Auf der anderen Seite handelt es sich auch bei dem verlustfreien DC-Modell um eine Approximation des AC-Modells.

7.2 Nodalpreissysteme

Ein Weg, das Netz in den Markt zu integrieren, ist es, einen Netzbetreiber in unser Marktmodell einzuführen, der für den Transport zuständig ist. Das führt dazu, dass wir an jedem Knoten des Netzes einen eigenen Preis für den Strom erhalten. In diesem Fall lauten die Spielerprobleme für die Konsumenten und Produzenten

$$\max_{d_v} \sum_{t \in T} \int_0^{d_{v,t}} p_{v,t}(x) dx - \sum_{t \in T} \pi_{v,t} d_{v,t}$$
s.t. $d_{v,t} \ge 0$ für alle $t \in T$ $[\gamma_{v,t}]$

und

$$\begin{aligned} & \max_{y_v, \bar{y}_v} & & \sum_{t \in T} \pi_{v,t} y_{v,t} - \sum_{t \in T} w_v^{\text{var}} y_{v,t} - w_v^{\text{inv}} \bar{y}_v \\ & \text{s.t.} & & 0 \leq y_{v,t} \leq \bar{y}_v & \text{für alle} & & t \in T. & [\beta_{v,t}^{\pm}] \end{aligned}$$

Dies sind noch die gleichen Probleme wie beim "reinen" Spotmarkt. Die Änderung besteht jetzt darin, dass wir auch den Netzbetreiber modellieren. Der Netzbetreiber (kurz TSO für "transmission system operator") möchte hier folgendes Problem lösen:

$$\begin{split} \max_{f,\theta} \quad & \sum_{t \in T} \sum_{l = (v,w) \in L} (\pi_{w,t} - \pi_{v,t}) \, f_{l,t} \\ \text{s.t.} \quad & f_{l,t} = B_l(\theta_{v,t} - \theta_{w,t}) \quad \text{für alle} \quad l = (v,w) \in L, \ t \in T, \quad [\delta_{l,t}] \\ & - c_l \leq f_{l,t} \leq c_l \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T. \quad [\varepsilon_{l,t}^{\pm}] \end{split}$$

Was bedeutet das? Die Idee ist, dass der TSO versucht, den Strom so zu transportieren, dass er zum einen die physikalischen Bedingungen einhält, zum anderen aber versucht, seinen Gewinn zu maximieren. Dabei nehmen wir an, dass die Einnahmen des TSOs pro Leitung jeweils die transportierte Menge mal der Preisdifferenz an den anliegenden Knoten ist.

Die Bedingungen, die nun alle Modelle koppeln, sind die Bedingungen, die aus dem ersten Kirchhoffschen Gesetz folgen:

$$y_{v,t} + \sum_{l \in \delta^{\text{in}}(v)} f_{l,t} = d_{v,t} + \sum_{l \in \delta^{\text{out}}(v)} f_{l,t}$$
 für alle $v \in V$, $t \in T$.

Wenn wir nun, wie im vorletzten Kapitel, die KKT-Bedingungen zusammen sammeln, sehen wir wieder, dass wir ein integriertes Modell formulieren können, das sowohl den Handel als auch den Transport modelliert. Beginnen wir wieder mit den Konsumenten- und Produzentinnenproblemen; hier ändert sich nichts gegenüber dem Peak-Load-Pricing-Problem. Das Konsumentensystem ist gegeben durch

$$p_{v,t}(d_{v,t}) - \pi_{v,t} + \gamma_{v,t} = 0$$
 für alle $v \in V$, $t \in T$, $\gamma_{v,t}, d_{v,t} \ge 0$ für alle $v \in V$, $t \in T$, $\gamma_{v,t}d_{v,t} = 0$ für alle $v \in V$, $t \in T$.

Das Produzentensystem lautet

$$\begin{split} -w_v^{\text{var}} + \pi_{v,t} + \beta_{v,t}^- - \beta_{v,t}^+ &= 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \\ -w_v^{\text{inv}} + \sum_{t \in T} \beta_{v,t}^+ &= 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \\ 0 &\leq y_{v,t} \leq \bar{y}_v \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \\ \beta_{v,t}^-, \beta_{v,t}^+ &\geq 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \\ \beta_{v,t}^-, y_{v,t}^- &= 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \\ \beta_{v,t}^+, \left(y_{v,t} - \bar{y}_v\right) &= 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T. \end{split}$$

Es bleibt das TSO-System. Wir erhalten

$$\begin{split} f_{l,t} - B_l(\theta_{v,t} - \theta_{w,t}) &= 0 \quad \text{für alle} \quad l = (v,w) \in L, \ t \in T, \\ -c_l &\leq f_{l,t} \leq c_l \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T, \\ p_{w,t} - p_{v,t} + \delta_{l,t} + \varepsilon_{l,t}^- - \varepsilon_{l,t}^+ &= 0 \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T, \end{split}$$

$$\begin{split} \sum_{l \in \delta^{\text{in}}(v)} \delta_{l,t} - \sum_{l \in \delta^{\text{out}}(v)} \delta_{l,t} &= 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \\ \varepsilon_{l,t}^-(f_{l,t} + c_l) &= 0 \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T, \\ \varepsilon_{l,t}^+(f_{l,t} - c_l) &= 0 \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T. \end{split}$$

Zusammen mit den Markträumungsbedingungen für jeden Knoten erhalten wir ein gemischtes Komplementaritätssystem, das wieder äquivalent ist zu einem Optimierungsproblem:

$$\max_{d,y,\bar{y},f,\theta} \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_{0}^{d_{v,t}} p_{v,t}(x) dx - \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_{v}^{\text{var}} y_{v,t} - \sum_{v \in V} w_{v}^{\text{inv}} \bar{y}_{v}$$
(7.5a)

s.t.
$$0 \le y_{v,t} \le \bar{y}_v$$
 für alle $v \in V, t \in T,$ (7.5b)

$$0 \le d_{v,t} \quad \text{für alle} \quad v \in V, t \in T, \tag{7.5c}$$

$$-c_l \le f_{l,t} \le c_l, \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T, \tag{7.5d}$$

$$f_{l,t} = B_l(\theta_{v,t} - \theta_{w,t}) \quad \text{für alle} \quad l = (v, w) \in L, \ t \in T, \tag{7.5e}$$

$$y_{v,t} + \sum_{l \in \delta^{\text{in}}(v)} f_{l,t} = d_{v,t} + \sum_{l \in \delta^{\text{out}}(v)} f_{l,t} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T.$$
 (7.5f)

Man beachte, dass aus (7.5f) die Bedingung

$$\sum_{v \in V} y_{v,t} - \sum_{v \in V} d_{v,t} = 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T$$

des Spotmarkt-Modells (7.1) folgt und es sich bei dem Spotmarktmodell (7.1) demnach um eine Relaxierung von (7.5) handelt. Daraus folgt direkt, dass (7.5) keinen besseren Zielfunktionswert als (7.1) haben kann.

7.3 Redispatch

Modell (7.5) ist nicht für eine Modellierung des deutschen Strommarktes geeignet, da der Spotmarkt in Deutschland die Netzrestriktionen vollständig ignoriert. Dies heißt insbesondere, dass das Ergebnis des Handels gemäß (7.1) nicht zulässig bzgl. (7.2), (7.3) und (7.4) sein muss. Tritt dieser Fall ein, so müssen die gehandelten Mengen – d. h. die Produktion und der Verbrauch – derart modifiziert werden, dass die resultierenden Mengen auch tatsächlich transportiert werden können. Das heißt, die resultierenden Mengen müssen zulässig bzgl. (7.2), (7.3) und (7.4) sein. Das Verfahren der Modifikation der Mengen nennt sich Redispatch. Es gibt viele Gründe, warum der Markt in Deutschland über einen die Netzbedingungen vollständig ignorierenden Mechanismus organisiert ist. Unter anderem ist im Vergleich zu einem das Netz berücksichtigenden Mechanismus die Organisation

7.3 Redispatch 89

des Spotmarktes selbst vereinfacht und andererseits folgt aus dieser Organisation, dass es einen deutschlandweit einheitlichen Preis für Strom gibt. Letzteres lässt sich leicht aus den entsprechenden KKT-Bedingungen eines sinnvoll gewählten Spotmarktmodells folgern. Im Allgemeinen gibt es verschiedene Techniken, einen Redispatch zu organisieren und das Verfahren variiert von Land zu Land. Wir befassen uns hier mit dem in Deutschland praktizierten kostenbasierten Redispatch, den wir beispielhaft anhand von Abb. 7.1 beschreiben. Angenommen, wir haben ein Zwei-Knoten-Netz $G = (\{v, w\}, \{l\})$ mit einer Linie l = (v, w). In diesem Netz ist an Knoten v eine Produzentin und an Knoten w ein Konsument platziert, die über die Stromlinie l mit Kapazität $c_l = D$ verbunden sind. Wir nehmen ferner an, dass der Spotmarkt (der die Linienkapazität außer Acht lässt) ein Marktgleichgewicht (B, C) ergibt, das dem Schnittpunkt A der variablen Produktionskosten C mit der Nachfragekurve des Konsumenten bei der Menge B entspricht. Nach Abschluss des Spotmarkt-Handels ist aber direkt ersichtlich, dass die gehandelte Menge B > D nicht transportiert werden kann. Um diese Unzulässigkeit aufzulösen könnte der Netzbetreiber jetzt beispielsweise das Kraftwerk am Knoten v kontaktieren und veranlassen, dass es statt der Menge B nur noch die transportierbare Menge D produziert. Damit hat die Produzentin aber nicht mehr die Kosten BC sondern nur noch DC. Die Produzentin zahlt daher ihre Produktionskostendifferenz (B - D)C an den Netzbetreiber, der wiederum die Fläche DBAF an den Konsumenten zahlt, der dem verlorenen Nutzen des Konsumenten entspricht im Vergleich zu der Situation mit Nachfrage B. Aufgrund dessen, dass die Nachfragefunktion streng monoton fallend ist folgt, dass bei diesem Verfahren immer Kosten für den Netzbetreiber entstehen. Die Vorgabe im Rahmen des kostenbasierten Redispatch ist es, diese Kosten – d. h. die Fläche *EAF* – zu minimieren.

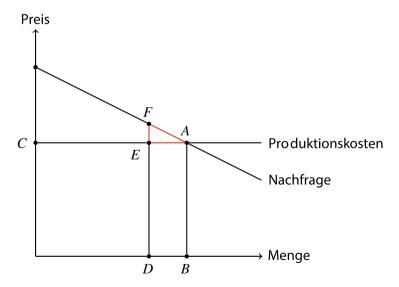


Abb. 7.1 Kostenbasierter Redispatch. (Entnommen aus Grimm et al. (2016); mit freundlicher Genehmigung von © Elsevier AG 2016. All Rights Reserved)

Im Folgenden beschreiben wir das formale Modell des kostenbasierten Redispatch. Seien dazu alle mit "spot" indizierten Größen diejenigen Größen, die aus dem Spotmarkt resultieren und alle mit "redi" bezeichneten diejenigen, die aus dem Redispatch resultieren. Die Veränderung durch den Redispatch sei mit Δ -Variablen beschrieben. Für die Nachfrage gilt also beispielsweise

$$d_{v,t}^{\text{redi}} = d_{v,t}^{\text{spot}} + \Delta d_{v,t}$$
 für alle $v \in V, t \in T$.

Die Kosten des Redispatch lassen sich dann mittels

$$\varphi^{\text{redi}} := \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_{d_{v,t}^{\text{redi}}}^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x) dx + \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_v^{\text{var}} \Delta y_{v,t}$$

beschreiben, wobei die entsprechenden Größen den folgenden Nebenbedingungen genügen müssen:

$$-c_l \le f_{l,t}^{\text{redi}} \le c_l \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T,$$
 (7.6a)

$$-c_{l} \leq f_{l,t}^{\text{redi}} \leq c_{l} \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T,$$

$$f_{(v,w),t}^{\text{redi}} = B_{l}(\theta_{v,t}^{\text{redi}} - \theta_{w,t}^{\text{redi}}) \quad \text{für alle} \quad (v,w) \in L, \ t \in T,$$

$$(7.6a)$$

$$y_{v,t}^{\text{redi}} + \sum_{l \in \delta^{\text{in}}(v)} f_{l,t}^{\text{redi}} = d_{v,t}^{\text{redi}} + \sum_{l \in \delta^{\text{out}}(v)} f_{l,t}^{\text{redi}} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T,$$
 (7.6c)

$$y_{v,t}^{\text{redi}} \le \bar{y}_v^{\text{spot}}$$
 für alle $v \in V, t \in T,$ (7.6d)

$$d_{v,t}^{\text{redi}} = d_{v,t}^{\text{spot}} + \Delta d_{v,t} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T,$$
 (7.6e)

$$y_{v,t}^{\text{redi}} = y_{v,t}^{\text{spot}} + \Delta y_{v,t} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T,$$
 (7.6f)

$$d_{v,t}^{\text{redi}} \ge 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T,$$
 (7.6g)

$$y_{v,t}^{\text{redi}} \ge 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T.$$
 (7.6h)

Insgesamt lautet das Redispatch-Problem also

min
$$\varphi^{\text{redi}}$$
 s.t. (7.6) (7.7)

und das Spotmarkt-Problem liest sich in der aktuellen Notation wie folgt:

$$\max \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_{0}^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x) dx - \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_{v}^{\text{var}} y_{v,t}^{\text{spot}} - \sum_{v \in V} w_{v}^{\text{inv}} \bar{y}_{v}^{\text{spot}}$$
(7.8a)

s.t.
$$\sum_{v \in V} y_{v,t}^{\text{spot}} - \sum_{v \in V} d_{v,t}^{\text{spot}} = 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T,$$
 (7.8b)

$$0 \le y_{v,t}^{\text{spot}} \le \bar{y}_v^{\text{spot}} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \tag{7.8c}$$

$$0 \le d_{v,t}^{\text{spot}} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T. \tag{7.8d}$$

7.3 Redispatch 91

Wir klassifizieren jetzt sowohl das Spotmarkt-Modell (7.8) als auch das Redispatch-Modell (7.7) unter der Annahme, dass die Nachfragefunktionen $p_{v,t}$ linear und streng monoton fallend sind für alle $v \in V$ und $t \in T$. Wir schreiben daher im Folgenden

$$p_{v,t}(x) = a_{v,t} + b_{v,t}x,$$

wobei $a_{v,t} > 0$ und $b_{v,t} < 0$ gilt. Zunächst ist klar, dass beide Modelle ausschließlich lineare Gleichungs- und Ungleichungsnebenbedingungen haben. Betrachten wir als nächstes die Zielfunktion

$$\varphi^{\text{spot}} := \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_0^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x) dx - \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_v^{\text{var}} y_{v,t}^{\text{spot}} - \sum_{v \in V} w_v^{\text{inv}} \bar{y}_v^{\text{spot}}$$

von (7.8). Da sie separabel für alle $t \in T$ und alle $v \in V$ ist, reicht es, jeweils einen Term zu betrachten. Die Produktions- und Investitionsterme sind offensichtlich linear und der Nachfrageterm

$$\int_{0}^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x) dx = a_{v,t} d_{v,t}^{\text{spot}} + \frac{1}{2} b_{v,t} (d_{v,t}^{\text{spot}})^{2}$$

ist quadratisch. Da $p_{v,t}(x)$ streng monoton fallend ist, ist

$$\int_0^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x)$$

eine konkave Funktion. Das Spotmarkt-Problem ist also ein konkav-quadratisches Maximierungsproblem über einer polyedrischen zulässigen Menge. In Kap. 5 haben wir gesehen, dass dieses Problem unter gewissen Annahmen eine eindeutige Lösung hat.

Für das Redispatch-Modell (7.7) sehen wir, dass die Produktionsterme wieder linear sind. Außerdem ist

$$\int_{d_{v,t}^{\text{redi}}}^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x) \mathrm{d}x$$

quadratisch und konvex in der Redispatch-Variable $d_{v,t}^{\text{redi}}$ – es handelt sich bei dem Redispatch-Problem also um ein konvex-quadratisches Optimierungsproblem.

Wie stehen diese beiden Probleme im Verhältnis zueinander? Wir stellen die folgenden Eigenschaften fest:

- Das Spotmarkt-Problem hängt ausschließlich von Spotmarkt-Variablen, d. h. insbesondere *nicht* von den Redispatch-Variablen, ab.
- Das Redispatch-Modell hängt sowohl von den Redispatch-Variablen als auch von den Spotmarkt-Variablen ab.

Wir sehen also, dass wir zunächst das Spotmarkt-Problem und dann das Redispatch-Problem lösen können, wobei wir beim Redispatch die Spotmarkt-Variablen auf die Lösungen des Spotmarkt-Problems fixieren. Man beachte, dass dieses Vorgehen nur aufgrund der Eindeutigkeit der Lösung des Spotmarkt-Problems sinnvoll ist.

Abschließend lässt sich die Wohlfahrt nach Redispatch als

$$\begin{split} \varphi &\coloneqq \varphi^{\text{spot}} - \varphi^{\text{redi}} \\ &= \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_{0}^{d_{v,t}^{\text{redi}}} p_{v,t}(x) \mathrm{d}x - \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_{v,t}^{\text{var}} y_{v,t}^{\text{redi}} - \sum_{v \in V} w_{v,t}^{\text{inv}} \bar{y}_{v}^{\text{spot}} \end{split}$$

formulieren und ex post berechnen.

Die mathematische Modellierung des deutschen Strommarktes ist ein sehr aktuelles Forschungsthema und viele der in diesem Kontext betrachteten Probleme sind sehr anspruchsvoll. Die interessierte Leserin findet in den Artikeln Grimm et al. (2016, 2017, 2018) und Kleinert und Schmidt (2018) und der darin diskutierten Literatur weitere Informationen.

7.4 Erzeugung vs. Netzausbau

Bis hierhin haben wir gelernt, wie der Day-Ahead-Handel auf dem deutschen Spotmarkt und der ggf. resultierende kostenbasierte Redispatch funktioniert. Für viele Fragestellungen in diesem Kontext wollen wir aber noch weitere Aspekte in die Modellierung dieses Marktes integrieren. Beispielsweise wird in der aktuellen politischen Debatte in Deutschland häufig der Ausbau von Nord-Süd-Trassen in Abwägung zu zusätzlicher Erzeugungskapazität im Süden diskutiert. Ein mögliches Modell zur Diskussion dieser Fragestellung diskutieren wir in diesem Abschnitt. Die Details können Sie in Grimm et al. (2016) nachlesen, wo sowohl die Modellierung als auch Lösungsmethoden zu finden sind.

Der zeitliche Ablauf des zu betrachtenden Problems ist wie folgt gegeben:

- 1. Der Netzbetreiber investiert in Leitungsausbau.
- 2. Die privaten Firmen investieren in Erzeugungskapazität.
- 3. Die privaten Firmen handeln auf |T| aufeinanderfolgenden Spotmärkten und der Netzbetreiber führt wenn nötig einen entsprechenden kostenbasierten Redispatch durch.

In der ersten Stufe schränken wir dabei den möglichen Netzausbau auf eine Menge von Stromlinien $L^{\text{new}} \subseteq V \times V$ ein.

Außerdem nehmen wir jetzt noch einen weiteren Aspekt mit in die Modellierung auf, den wir bisher der Einfachheit halber ignoriert haben. Sowohl der Redispatch als auch der Netzausbau führt zu Kosten für den Netzbetreiber, die dieser über die Erhebung von Netzgebühren einnimmt. Da wir einen regulierten Netzbetreiber betrachten, treffen wir die

Annahme, dass für die Ausgaben

$$E = \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_{d_{v,t}^{\text{redi}}}^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x) dx + \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_v^{\text{var}} \Delta y_{v,t} + \sum_{l \in L^{\text{new}}} w_l^{\text{inv}} z_l$$

und die Einnahmen R die Nebenbedingung

$$E = R$$

gelten muss. Die Binärvariable $z_l \in \{0,1\}$ modelliert dabei, ob eine Linie $l \in L^{\text{new}}$ ausgebaut wird oder nicht und $w_l^{\text{inv}} > 0$ beschreibt die entsprechenden Linienkosten. Für die Einnahmen über eine Netzgebühr ϕ gibt es unterschiedliche Varianten, die sich aktuell in der politischen Diskussion befinden. Zum einen kann die Netzgebühr auf die Konsumenten erhoben werden, was zur *energiebasierten* Gebühr

$$R^{\text{eb}} = \phi^{\text{eb}} \sum_{v \in V} \sum_{t \in T} d_{v,t}^{\text{spot}}$$

führt. Zum anderen können die Kosten des Netzbetreibers aber auch auf die Produzenten umgelegt werden:

$$R^{\mathrm{kb}} = \phi^{\mathrm{kb}} \sum_{v \in V} \bar{y}_v.$$

Diese Varianten nennt man kapazitätsbasierte Gebühr.

Wir formulieren jetzt zunächst für jede Stufe das entsprechende Modell und klären, wer der Akteur auf der jeweiligen Stufe ist.

Stufe 1: Optimaler Linienausbau Der Akteur der ersten Stufe ist der Netzbetreiber. Wir nehmen an, dass er vollständig reguliert ist – das heißt, er maximiert die Gesamtwohlfahrt nach kostenbasiertem Redispatch,

$$\varphi_1 := \sum_{v \in V} \sum_{t \in T} \int_0^{d_{v,t}^{\text{redi}}} p_{v,t}(x) dx - \sum_{l \in L^{\text{new}}} w_l^{\text{inv}} z_l$$

$$- \sum_{v \in V} w_v^{\text{inv}} \bar{y}_v - \sum_{v \in V} \sum_{t \in T} w_v^{\text{var}} y_{v,t}^{\text{redi}}.$$

Das Problem auf der ersten Stufe lautet also

$$\max \quad \varphi_1 \quad \text{s.t.} \quad E = R, \quad z_l \in \{0,1\} \quad \text{für alle} \quad l \in L^{\text{new}}.$$

Stufe 2: Erzeugungsinvestition und Spotmarkt-Handel Das Spotmarkt-Modell (7.8) bleibt nahezu unverändert. Da die Akteure dieser Stufe die Produzentinnen und Konsumenten sind, müssen wir aber noch die Netzgebühren in die Zielfunktion integrieren:

$$\begin{aligned} & \max \quad \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_{0}^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x) \mathrm{d}x - \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_{v}^{\text{var}} y_{v,t}^{\text{spot}} - \sum_{v \in V} w_{v}^{\text{inv}} \bar{y}_{v}^{\text{spot}} - R \\ & \text{s.t.} \quad \sum_{v \in V} y_{v,t}^{\text{spot}} - \sum_{v \in V} d_{v,t}^{\text{spot}} = 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T, \\ & 0 \leq y_{v,t}^{\text{spot}} \leq \bar{y}_{v}^{\text{spot}} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T, \\ & 0 \leq d_{v,t}^{\text{spot}} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T. \end{aligned}$$

Stufe 3: Kostenbasierter Redispatch Auch das Redispatch-Modell ändert sich leicht, da wir jetzt etwaige Ausbauten in unserem Netzmodell beachten müssen. Die Teilmenge

$$-c_l \le f_{l,t}^{\text{redi}} \le c_l \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T, \tag{7.9a}$$

$$-c_{l} \leq f_{l,t}^{\text{redi}} \leq c_{l} \quad \text{für alle} \quad l \in L, \ t \in T,$$

$$f_{(v,w),t}^{\text{redi}} = B_{l}(\theta_{v,t}^{\text{redi}} - \theta_{w,t}^{\text{redi}}) \quad \text{für alle} \quad (v,w) \in L, \ t \in T,$$

$$(7.9a)$$

$$y_{v,t}^{\text{redi}} \le \bar{y}_v^{\text{spot}}$$
 für alle $v \in V, t \in T,$ (7.9c)

$$d_{v,t}^{\text{redi}} = d_{v,t}^{\text{spot}} + \Delta d_{v,t} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T,$$
 (7.9d)

$$y_{v,t}^{\text{redi}} = y_{v,t}^{\text{spot}} + \Delta y_{v,t} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T,$$
 (7.9e)

$$d_{v,t}^{\text{redi}} \ge 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T,$$
 (7.9f)

$$y_{v,t}^{\text{redi}} \ge 0 \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ t \in T,$$
 (7.9g)

der Nebenbedingungen aus (7.6) bleiben unverändert. Hinzu kommen die Nebenbedingungen bzgl. der potentiellen Netzausbauten $l = (v, w) \in L^{\text{new}}$ auf der ersten Stufe

$$-c_l z_l \le f_{l,t}^{\text{redi}} \le c_l z_l \quad \text{für alle} \quad l \in L^{\text{new}}, \ t \in T, \tag{7.10a}$$

$$-M_l(1-z_l) \le f_{l,t}^{\text{redi}} - B_l(\theta_{v,t}^{\text{redi}} - \theta_{w,t}^{\text{redi}}) \quad \text{für alle} \quad l \in L^{\text{new}}, \ t \in T,$$
 (7.10b)

$$-c_{l}z_{l} \leq f_{l,t}^{\text{redi}} \leq c_{l}z_{l} \quad \text{für alle} \quad l \in L^{\text{new}}, \ t \in T,$$

$$-M_{l}(1-z_{l}) \leq f_{l,t}^{\text{redi}} - B_{l}(\theta_{v,t}^{\text{redi}} - \theta_{w,t}^{\text{redi}}) \quad \text{für alle} \quad l \in L^{\text{new}}, \ t \in T,$$

$$f_{l,t}^{\text{redi}} - B_{l}(\theta_{v,t}^{\text{redi}} - \theta_{w,t}^{\text{redi}}) \leq M_{l}(1-z_{l}) \quad \text{für alle} \quad l \in L^{\text{new}}, \ t \in T,$$

$$(7.10a)$$

sowie die modifizierte Variante des ersten Kirchhoffschen Gesetzes:

$$y_{v,t}^{\text{redi}} + \sum_{l \in \delta_{L'}^{\text{in}}(v)} f_{l,t}^{\text{redi}} = d_{v,t}^{\text{redi}} + \sum_{l \in \delta_{L'}^{\text{out}}(v)} f_{l,t}^{\text{redi}} \text{ für alle } v \in V, t \in T.$$
 (7.11)

Hierbei sind die Mengen der ein- bzw. ausgehenden Kanten $\delta_{L'}^{\text{in}}(v)$ und $\delta_{L'}^{\text{out}}(v)$ auf den "ausgebauten Graphen" $G' = (V, L \cup L^{\text{new}})$ bezogen. Man beachte, dass (7.10) ein gemischt-ganzzahliges System von Nebenbedingungen ist und die Komplexität des Redispatch-Modells somit deutlich gestiegen ist. Die Bedingungen (7.10b) und (7.10c) sind sogenannte big-M-Nebenbedingungen, in denen $M_l > 0$ hinreichend groß gewählt werden muss, so dass

$$f_{l,t}^{\text{redi}} = B_l(\theta_{v,t}^{\text{redi}} - \theta_{w,t}^{\text{redi}})$$

für alle $l \in L^{\text{new}}$ mit $z_l = 1$ gilt und der Fluss $f_{l,t}^{\text{redi}}$ von der Phasenwinkeldifferenz $\theta_{v,t}^{\text{redi}} - \theta_{w,t}^{\text{redi}}$ entkoppelt ist, falls $z_l = 0$ gilt.

Die Kosten des Redispatch lassen sich mittels

$$\varphi^{\text{redi}} := \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \int_{d_{v,t}^{\text{redi}}}^{d_{v,t}^{\text{spot}}} p_{v,t}(x) dx + \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} w_v^{\text{var}} \Delta y_{v,t}$$

beschreiben, womit wir insgesamt das folgende Redispatch-Problem haben:

min
$$\varphi^{\text{redi}}$$
 s.t. (7.9), (7.10), (7.11).

Analysieren wir jetzt die Abhängigkeiten der drei Stufen, so stellen wir fest, dass alle Stufen miteinander gekoppelt sind. Eine Dekomposition und ein entsprechendes sequentielles Lösen wie bei dem Marktmodell ohne Netzausbau ist hier also nicht mehr möglich. Vielmehr sind wir jetzt mit einem sogenannten *mehrstufigen Optimierungsproblem* konfrontiert. Diesen Typ von Optimierungsproblemen werden wir in diesem Buch nicht weiter behandeln. Eine hervorragende Einführung findet man aber beispielsweise in dem Buch von Dempe (2002).

7.5 Projekt: Der deutsche Strommarkt

In diesem Projekt implementieren Sie das Modell des deutschen Strommarktes aus diesem Kapitel und analysieren die Ergebnisse. Um das Modell besser an die realen Gegebenheiten anzupassen, betrachten wir folgende Variante. Wir erlauben mehrere Akteure an einem Knoten, um beispielsweise verschiedene Kraftwerkstypen abzubilden. Dies ist notwendig, da wir oft stark vereinfachte Netze betrachten, bei denen ein Knoten im Netz einer ganzen Region wie z. B. einem Bundesland entspricht.

Da die Daten für dieses Projekt etwas komplexer als die der vorherigen Projekte sind, haben wir unser eigenes XML-basiertes Datenformat entwickelt. Sie finden die Daten unter

https://github.com/m-schmidt-math-opt/Optimierung-von-Versorgungsnetzwerken.

Sie benötigen für diese Aufgabe einen Löser für konvexe QPs. Sie können hierfür wieder Gurobi nutzen. Als freie Alternative steht Ihnen beispielsweise lpopt (https://projects.coinor.org/Ipopt) unter GAMS oder auch Pyomo zur Verfügung. Weitere Informationen zu dieser Open-Source-Implementierung finden Sie in Wächter und Biegler (2005, 2006).

Beginnen Sie mit der Implementierung des Spotmarktmodells

$$\begin{aligned} & \max \quad \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \sum_{c \in \mathcal{C}_v} \int_0^{d_{c,t}^{\text{spot}}} p_{c,t}(x) \mathrm{d}x - \sum_{t \in T} \sum_{v \in V} \sum_{g \in \mathcal{G}_v^{\text{ex}} \cup \mathcal{G}_v^{\text{new}}} w_g^{\text{var}} y_{g,t}^{\text{spot}} \\ & - \sum_{v \in V} \sum_{g \in \mathcal{G}_v^{\text{new}} \cup \mathcal{G}_v^{\text{ex}}} w_g^{\text{inv}} \bar{y}_g^{\text{spot}} \\ & \text{s.t.} \quad \sum_{v \in V} \sum_{g \in \mathcal{G}_v^{\text{new}} \cup \mathcal{G}_v^{\text{ex}}} y_{g,t}^{\text{spot}} - \sum_{v \in V} \sum_{c \in \mathcal{C}_v} d_{c,t}^{\text{spot}} = 0 \quad \text{für alle} \quad t \in T, \\ & 0 \leq y_{g,t}^{\text{spot}} \leq \tau_t \bar{y}_g^{\text{spot}} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ g \in \mathcal{G}_v^{\text{new}}, \ t \in T, \\ & 0 \leq y_{g,t}^{\text{spot}} \leq \tau_t \bar{y}_g^{+} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ g \in \mathcal{G}_v^{\text{ex}}, \ t \in T, \\ & 0 \leq d_{v,t}^{\text{spot}} \quad \text{für alle} \quad v \in V, \ c \in \mathcal{C}_v, \ t \in T. \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnet V wieder die Menge der Knoten des Netzes und für einen Knoten $v \in V$ bezeichnet C_v die Menge der Konsumenten an diesem Knoten. Die Menge $\mathcal{G}_v^{\text{ex}}$ beinhaltet alle bereits existierenden Erzeuger am Knoten v und die Menge $\mathcal{G}_v^{\text{new}}$ bezeichnet die Menge der potentiell ausbaubaren Erzeuger an diesem Knoten. Zuletzt bezeichnet τ_t die Länge des Szenarios $t \in T$. Die restlichen Bezeichner sind an die in diesem Kapitel genutzte Notation angelehnt und sollten aus dem Kontext klar sein.

Die Daten für dieses Modell sind jeweils in mehrere Dateien unterteilt. Die net-Datei beschreibt das Netz, die egn-Datei beschreibt – falls vorhanden – die bestehenden Erzeuger, die cgn-Datei beschreibt die potentiell ausbaubaren Erzeuger und die dem-Datei beschreibt die Nachfragefunktionen der Konsumenten.

Implementieren Sie dann die zu obigem Spotmarkt-Modell korrespondierende Erweiterung des Redispatch-Modells (7.7). Achten Sie dabei darauf, dass sie zunächst das Spotmarkt-Modell lösen müssen, so dass die mit "spot" indizierten Größen des Redispatch-Modells auf die Werte der Optimallösung des Spotmarkt-Modells fixiert werden können.

Die Netze, die wir Ihnen unter der oben genannten URL zur Verfügung stellen, beinhalten auch sogenannte Ausbaukandidaten (in der cdl-Datei), d. h. zusätzliche Linien, die bei einem entsprechenden Netzwerkdesign-Modell ausgebaut werden können. Suchen Sie sich einige dieser Kandidaten für ein Netz Ihrer Wahl aus, integrieren Sie sie in ihr Redispatch-Modell und untersuchen Sie, wie sehr sich die Gesamtwohlfahrt durch "Ausbau" dieser Linie ändert. Vergrößert oder verringert sich die Wohlfahrt? Falls sich die Wohlfahrt vergrößert, in welchem Verhältnis steht die Wohlfahrtsdifferenz zu den Ausbaukosten für die entsprechende Linie?

Literatur 97

Aufgaben

Aufgabe 7.1 Beweisen Sie die Aussage, dass das Problem (7.5) äquivalent zu dem Komplementaritätssystem ist, welches aus der Zusammenfassung der KKT-Systeme der Akteure und den Markträumungsbedingungen besteht.

Literatur

- Aussel, D., Correa, R., & Marechal, M. (2013). Electricity spot market with transmission losses. *Journal of Industrial & Management Optimization*, 9(2), 275–290. https://doi.org/10.3934/jimo. 2013.9.275.
- Aussel, D., Červinka, M., & Marechal, M. (2016). Deregulated electricity markets with thermal losses and production bounds: Models and optimality conditions. *RAIRO-Operations Research*, 50(1), 19–38. https://doi.org/10.1051/ro/2015009.
- Cain, M. B., O'Neill, R. P., & Anya, C. (2012). History of optimal power flow and formulations. *Federal Energy Regulatory Commission*, S. 1–36.
- Dempe, S. (2002). Foundations of bilevel programming. New York: Springer. https://doi.org/10.1007/b101970.
- Ehrenmann, A., & Neuhoff, K. (2009). A comparison of electricity market designs in networks. *Operations Research*, 57(2), 274–286. https://doi.org/10.1287/opre.1080.0624.
- Grimm, V., Martin, A., Schmidt, M., Weibelzahl, M., & Zöttl, G. (2016). Transmission and generation investment in electricity markets: The effects of market splitting and network fee regimes. *European Journal of Operational Research*, 254(2), 493–509. https://doi.org/10.1016/j.ejor.2016.03.044.
- Grimm, V., Kleinert, T., Liers, F., Schmidt, M., & Zöttl, G. (2017). Optimal price zones of electricity markets: A mixed-integer multilevel model and global solution approaches. *Optimization Methods and Software*. https://doi.org/10.1080/10556788.2017.1401069 (Vorveröffentlichung).
- Grimm, V., Schewe, L., Schmidt, M., & Zöttl, G. (2018). A multilevel model of the European entry-exit gas market. *Mathematical Methods of Operations Research*. https://doi.org/10.1007/s00186-018-0647-z.
- Jing-Yuan, W., & Smeers, Y. (1999). Spatial oligopolistic electricity models with cournot generators and regulated transmission prices. *Operations Research*, 47(1), 102–112. https://doi.org/10.1287/ opre.47.1.102.
- Kirschen, D., & Strbac, G. (2004). Transmission networks and electricity markets. *Fundamentals of Power System Economics*, 141–204, Wiley. https://doi.org/10.1002/0470020598. Print ISBN: 9780470845721; Online ISBN: 9780470020593.
- Kleinert, T., & Schmidt, M. (2018). Global optimization of multilevel electricity market models including network design and graph partitioning. Techn. Ber. FAU Erlangen-Nürnberg. http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2018/02/6460.html (Eingereicht).
- Kocuk, B., Dey, S. S., & Andy Sun, X. (2017). Matrix minor reformulation and SOCP-based spatial branch-and-cut method for the AC optimal power flow problem. https://arxiv.org/abs/1703.03050.
- Van den Bergh, K., Delarue, E., & D'haeseleer, W. (2014). *DC power flow in unit commitment models*. Techn. Ber. TME Working Paper-Energy und Environment.
- Wächter, A., & Biegler, L. T. (2005). Line search filter methods for nonlinear programming: Motivation and global convergence. *SIAM Journal on Optimization*, *16*(1), 1–31. https://doi.org/10.1137/S1052623403426556. ISSN: 1052-6234.

Wächter, A., & Biegler, L. T. (2006). On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming*, *106*(1), 25–57. https://doi.org/10.1007/s10107-004-0559-y. ISSN: 0025-5610.

Wood, A. J., Wollenberg, B. F., & Sheblé, G. B. (2014). *Power generation, operation, and control*. New Jersey: Wiley.

Potentialgetriebene Flüsse

Zusammenfassung

Potentialgetriebene Flüsse sind eine Erweiterung der klassischen Flüsse. Klassische Flüsse haben die Eigenschaft, dass sie sich an Knoten des Netzes beliebig aufteilen können auf die adjazenten Kanten. Dies ist bei potentialgetriebenen Flüssen nicht möglich, da sie auf jeder Kante gewisse physikalische Gesetze erfüllen müssen, die sie an sogenannte Potentiale auf den Knoten koppeln. In diesem Kapitel betrachten wir sowohl potentialfreie als auch potentialgetriebene Flüsse und leiten den Zusammenhang von ökonomischen Größen (wie Preisen auf Knoten mit Angebot und Nachfrage) und den physikalischen Gesetzen her. Zuletzt analysieren wir noch den Fall von Netzen ohne Transportkosten, für den wir die spezifische Struktur von sogenannten Preiszonen herleiten.

Die meisten industrialisierten Länder haben in den vergangenen Jahrzehnten ihre Energiesektoren liberalisiert. Daher findet der Handel der entsprechenden Mengen heute in der Regel auf Märkten statt. Nach diesem Handel muss aber noch der Transport der gehandelten Mengen durch das Netz (z. B. das Strom- oder Gasnetz) gewährleistet werden. Die entsprechenden Netzwerke haben, im Gegensatz zu den liberalisierten Märkten, immer noch den Charakter eines natürlichen Monopols. Dies ist der Grund, warum die Netzbetreiber nach wie vor reguliert sind.

Wir interessieren uns im Folgenden dafür, wie Regulierungsregeln für die Bepreisung von Netzzugang bzw. -nutzung gestaltet werden können, wobei die Bepreisung in sinnvoller Form die Transport- und Ausbaukosten des Netzbetreibers widerspiegeln sollen. Insbesondere wollen wir die Frage beantworten, welchen Einfluss die konkrete Modellierung der Physik auf die Bepreisung hat, wobei wir uns hier auf stationäre, d.h zeitunabhängige, Energieflüsse beschränken. Typischerweise modelliert man solche Flüsse in Energienetzen (wie z.B. bei Strom, Gas und Wasser) als sogenannte *potentialgetriebene Flüsse*. Das heißt,

dass der Fluss auf einer Kante des Graphen nicht unabhängig von anderen (physikalischen) Größen ist, sondern dass es einen Zusammenhang zwischen dem Fluss auf den Kanten und den sogenannten Potentialen auf den Knoten des Netzes gibt. Diese Potentiale sind z.B.

- die Phasenwinkel in DC-Modellen für Stromnetze (vgl. Kap. 7),
- Gasdrücke in Gasnetzen (vgl. Kap. 13), oder
- Druckhöhen in Wassernetzen (vgl. Kap. 9).

Das heißt insbesondere, dass wir eine Sorte potentialgetriebener Flüsse bereits kennengelernt haben – nämlich die verlustfreien DC-Flüsse in Kap. 7. In diesem Kapitel erweitern wir die dort diskutierten (und insbesondere linearen) Modelle und analysieren den Zusammenhang von physikalischen Flussmodellen und netzökonomischen Größen wie z.B. Knotenpreisen. Damit hat dieses Kapitel außerdem eine Brückenfunktion zwischen den linearen Flussmodellen der vorherigen Kapitel und der nichtlinearen Flüsse der folgenden Kapitel. Das Kapitel richtet sich in weiten Teilen nach dem Artikel von Schewe und Schmidt (2018). Detaillierte Informationen und insbesondere weitere Literatur findet man dort oder in den neueren Artikeln Groß et al. (2019) und Robinius et al. (2018) zu potentialgetriebenen Flüssen.

8.1 Potentialfreie Netzwerkflussmodelle

Wir betrachten zunächst sinnvolle Bepreisungen im Kontext einfacher, potentialfreier Flussprobleme, d. h. im Kontext von klassischen linearen Flussmodellen wie sie in Kap. 2 eingeführt wurden.

Dazu betrachten wir das folgende Modell. Das Energietransportnetz sei, wie immer, als gerichteter Graph G=(V,A) mit Knotenmenge V und Kantenmenge A modelliert. Wir nehmen ferner an, dass die betrachteten Graphen zusammenhängend sind. Knoten bezeichnen wir mit $v,w\in V$. Sie gehören zu Punkten im Energienetz, an denen Angebot $s_v\geq 0$ und Nachfrage $d_v\geq 0$ existiert. Angebotskosten sind modelliert als strikt konvexe Funktionen $w_{\text{var},v}=w_{\text{var},v}(s_v)$. Diese Kosten sind nichtnegativ und streng monoton steigend, d. h. es gilt $w_{\text{var},v}\geq 0$ und $w'_{\text{var},v}>0$. Nachfrage ist wieder modelliert mittels inverser Nachfragefunktionen $p_v=p_v(d_v)$, die die folgenden Bedingungen erfüllen: Ihr y-Achsenabschnitt ist positiv, d. h. $p_v(0)>0$, und sie sind streng monoton fallend, d. h. $p_v'<0$; vgl. dazu auch Abb. 7.1.

Die Flüsse auf den Kanten $a \in A$ bezeichnen wir mit f_a . Wie bisher können sie positiv oder negativ sein, womit man mit der Orientierung der Kanten $a = (v, w) \in A$ im Graphen die Flussrichtung modelliert: Positiver Fluss $f_a > 0$ zeigt Fluss von v nach w an, wohingegen negativer Fluss $f_a < 0$ zu einem Fluss $|f_a|$ von w nach v gehört. In unseren einfachen potentialfreien Netzwerkflussmodellen sind die Flüsse auf den Kanten beschränkt durch die

Kantenkapazität $c_a \ge 0$, d.h. $-c_a \le f_a \le c_a$ für alle $a \in A$. Vorinstallierte Kantenkapazität $c_a^- \ge 0$ beschränkt dabei diese Kantenkapazität nach unten, d.h. $c_a^- \le c_a$ für alle $a \in A$.

Das zuerst studierte Modell lautet

$$\max_{d,s,c,f} \varphi(d,s,c,f) \tag{8.1a}$$

s.t.
$$\sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a + s_v = \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a + d_v \text{ für alle } v \in V, \quad [\alpha_v]$$
 (8.1b)

$$-c_a \le f_a \le c_a$$
 für alle $a \in A$, $[\beta_a^{\pm}]$ (8.1c)

$$0 \le s_v$$
 für alle $v \in V$, $[\gamma_v^-]$ (8.1d)

$$c_a^- \le c_a$$
 für alle $a \in A$, $[\delta_a^-]$ (8.1e)

wobei die Zielfunktion wie folgt definiert ist:

$$\varphi(d, s, c, f) := \sum_{v \in V} \int_0^{d_v} p_v(x) \, \mathrm{d}x - \sum_{v \in V} w_{\text{var}, v}(s_v) \\
- \sum_{a \in A} w_{\text{inv}, a}(c_a - c_a^-) - \sum_{a \in A} w_{\text{var}, a}(f_a). \tag{8.2}$$

Die entsprechenden dualen Variablen, die wir noch benötigen werden, sind in Problem (8.1) in eckigen Klammern angegeben.

Die Investitionskosten in Kantenkapazitäten $w_{\text{inv},a} = w_{\text{inv},a}(c_a)$ seien konvex, nichtnegativ und streng monoton steigend, d. h. es gilt $w_{\text{inv},a} \geq 0$ und $w'_{\text{inv},a} > 0$. Außerdem seien die Transportkosten auf den Kanten $w_{\text{var},a} = w_{\text{var},a}(f_a)$ konvex und erfüllen die Annahmen $w_{\text{var},a} \geq 0$ und $w'_{\text{var},a}(f_a)f_a \geq 0$.

In diesem Modell maximieren wir die Gesamtwohlfahrt, die als Differenz der Bruttokonsumentenrente (erste Summe in (8.2)), der Angebotskosten (zweite Summe) und der Kosten der Netzbetreiber (die beiden letzten Summen) formuliert ist. Die Nebenbedingungen (8.1b) sind die bekannten Flusserhaltungsregeln auf den Knoten des Netzes und die Bedingungen (8.1c) beschränken den Fluss auf den Kanten durch ihre Kapazität. Außerdem haben wir untere Schranken an das Angebot und an die Kantenkapazitäten (Bedingungen (8.1d) und (8.1e)). Zuletzt treffen wir die Annahme, dass die Nachfrage d_v an allen Knoten $v \in V$ des Netzes immer nichtnegativ ist und wir die entsprechenden Nebenbedingungen $d_v \geq 0$, $v \in V$, nicht explizit formulieren müssen. Dies ist eine Standardannahme in ökonomischen Modellen; vgl. beispielsweise das Buch von Gabriel et al. (2012).

Duale Zulässigkeit für das Problem (8.1) ist gegeben durch

$$p_v(d_v) - \alpha_v = 0 \quad \text{für alle } v \in V, \tag{8.3a}$$

$$-w'_{\text{var},v}(s_v) + \alpha_v + \gamma_v^- = 0 \quad \text{für alle } v \in V, \tag{8.3b}$$

$$-w'_{\text{var},a}(f_a) + \alpha_w - \alpha_v + \beta_a^- - \beta_a^+ = 0$$
 für alle $a = (v, w) \in A$, (8.3c)

$$-w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) + \beta_a^+ + \beta_a^- + \delta_a^- = 0 \quad \text{für alle } a \in A.$$
 (8.3d)

Man beachte ferner, dass die KKT-Bedingungen nach Satz 4.16 sowohl notwendig als auch hinreichend sind, da es sich bei (8.1) um ein konkaves Maximierungsproblem handelt.

Wir analysieren jetzt die Preise und Kosten, die sich in einem Optimum des Modells einstellen. Der lokale Marktpreis ist wie folgt charakterisiert:

Lemma 8.1 Der Preis am Knoten $v \in V$ ist gegeben durch

$$\alpha_v = p_v(d_v) \le w'_{\text{var},v}(s_v).$$

Falls Knoten v produziert ($s_v > 0$) gilt Gleichheit und die Preise sind strikt positiv:

$$p_v(d_v) = w'_{\text{var }v}(s_v) > 0 \quad \text{für alle } v \in V \text{ mit } s_v > 0.$$
 (8.4)

Das heißt, die Preise an den Knoten entsprechen exakt den variablen Angebotskosten.

Die Beweise der Lemmas und Sätze in diesem Kapitel sind allesamt Übungsaufgaben, mit denen sich sehr gut die Arbeit mit KKT-Bedingungen trainieren lässt.

Da
$$w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) > 0$$
 gilt haben wir ferner

$$\beta_a^- > 0$$
, $\beta_a^+ > 0$ oder $\delta_a^- > 0$ für alle $a \in A$,

was unter Ausnutzung von KKT-Komplementarität direkt zu

$$c_a = \max\{c_a^-, |f_a|\}$$
 für alle $a \in A$

führt. Das heißt, dass wir entweder keinen Kapazitätsausbau vornehmen oder dass eine der beiden Flussschranken aktiv ist. Mit anderen Worten: Investition in Kapazitätsausbau ist so gering wie möglich und so groß wie nötig, um die Gesamtwohlfahrt zu maximieren.

Als letztes zeigen wir, dass einerseits die Flussrichtung auf der Kante $a = (v, w) \in A$ bestimmt ist durch die Preisdifferenz der Knoten v und w und das andererseits der Betrag der Preisdifferenz gleich der Summe der variablen Transportkosten und der Kosten für Kapazitätsinvestition ist.

Satz 8.2 Es sei $a = (v, w) \in A$ eine Kante mit $|f_a| > c_a^-$. Dann gilt

$$\operatorname{sign}(p_w(d_w) - p_v(d_v)) = \operatorname{sign}(f_a)$$

und

$$|p_w(d_w) - p_v(d_v)| = w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) + |w'_{\text{var},a}(f_a)|.$$

Bemerkung 8.3 Die Dualvariable β_a^{\pm} der Kapazität c_a ist gleich der Ableitung der Kapazitätskosten; vgl. Bedingung (8.3d).

Das Modell (8.1) wird häufig dazu führen, dass der Netzbetreiber Verluste macht. Möchte man dies (aufgrund seiner regulierten Rolle) vermeiden, benötigt man eine sogenannte Gewinnschwellen-Bedingung

$$\sum_{v \in V} p_v(d_v) d_v - \sum_{v \in V} w'_{\text{var},v}(s_v) s_v - \sum_{a \in A} w_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) - \sum_{a \in A} w_{\text{var},a}(f_a) \ge 0,$$

die besagt, dass die Ausgaben des Netzbetreibers nie größer sein dürfen als seine Einnahmen. Die zugehörige duale Variable sei $\eta \geq 0$ und die modifizierten dualen Zulässigkeitsbedingungen lauten jetzt

$$(1 + \eta) p_v(d_v) - \alpha_v + \eta p'_v(d_v) d_v = 0$$
 für alle $v \in V$, (8.5a)

$$-(1+\eta)w'_{\text{var }v}(s_v) + \alpha_v + \gamma_v^- - \eta w''_{\text{var }v}(s_v)s_v = 0 \quad \text{für alle } v \in V,$$
 (8.5b)

$$-(1+\eta)w'_{\text{var},a}(f_a) + \alpha_w - \alpha_v + \beta_a^- - \beta_a^+ = 0$$
 für alle $a = (v, w) \in A$, (8.5c)

$$-(1+\eta)w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) + \beta_a^+ + \beta_a^- + \delta_a^- = 0 \quad \text{für alle } a \in A.$$
 (8.5d)

Wir betrachten die beiden Fälle, in denen die Gewinnschwellen-Bedingung bindet bzw. nicht bindet. Falls sie nicht bindet, gilt aufgrund von KKT-Komplementarität $\eta=0$ und die Bedingungen erster Ordnung (8.5) sind identisch mit den Bedingungen (8.3) für das Problem ohne Gewinnschwellen-Bedingung.

Interessanter ist der Fall, dass diese Bedingung bindet. Aufsummieren von (8.5a) und (8.5b) ergibt

$$p_{v}(d_{v}) - w'_{\text{var},v}(s_{v}) = \frac{\eta}{1+\eta} \left(\frac{w'_{\text{var},v}(s_{v})}{E_{v}^{s}} - \frac{p_{v}(d_{v})}{E_{v}^{d}} \right) - \frac{\gamma_{v}^{-}}{1+\eta}$$

für alle $v \in V$ anstelle von $p_v(d_v) - w'_{\text{var},v}(s_v) = -\gamma_v$; vgl. (8.4). Hierbei bezeichnen

$$E_v^s := \frac{w'_{\text{var},v}(s_v)}{w''_{\text{var},v}(s_v)s_v}, \quad E_v^d := \frac{p_v(d_v)}{p'_v(d_v)d_v}$$

für s_v , $d_v > 0$ die sogenannten Angebots- und Nachfrageelastizitäten. Detailliertere Informationen zu diesen ökonomischen Größen findet man z. B. in dem Buch von Mosler et al. (2018).

Unser Resultat aus Satz 8.2 ohne Gewinnschwellen-Bedingung wird schließlich zu folgendem Resultat.

Satz 8.4 Es sei $a = (v, w) \in A$ eine Kanten mit $|f_a| > c_a^-$. Dann gilt

$$\begin{split} |p_w(d_w) - p_v(d_v)| &= w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) + |w'_{\text{var},a}(f_a)| \\ &+ \text{sign}(f_a) \frac{\eta}{1 + \eta} \left(\frac{p_v(d_v)}{E_v^d} - \frac{p_w(d_w)}{E_w^d} \right). \end{split}$$

Was heißt das? Die Preise in diesem Modell weichen von den Preisen des Modells ohne Gewinnschwellen-Bedingung ab und die Differenz ist gegeben durch die inversen Elastizitätsterme. Schließlich folgt aus (8.5d) die Beziehung

$$w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) = \frac{\beta_a^+ + \beta_a^- + \delta_a^-}{1 + \eta}$$

anstelle der Gleichung

$$w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) = \beta_a^+ + \beta_a^- + \delta_a^-$$

im Fall ohne Gewinnschwellen-Bedingung.

8.2 Potentialgetriebene Netzwerkflussmodelle

Wir betrachten jetzt physikalisch realistischere Modelle für den Fluss in Energienetzen. Dazu führen wir neben den schon betrachteten Flüssen auf Kanten sogenannte Potentiale ℓ_v auf den Knoten $v \in V$ ein; siehe Abb. 8.1. Flüsse und Potentiale sind dann durch die folgende (sehr allgemeine) Modellierung miteinander gekoppelt:

$$\ell_w = \ell_v - W_a(c_a)g(f_a) \quad \text{für alle } a = (v, w) \in A. \tag{8.6}$$

Dabei ist g eine im Allgemeinen nichtlineare *Flussfunktion* und W_a ist die sogenannte *Potentialverlustfunktion*, die von der Kapazität der Kante abhängt. Für den Rest dieses Abschnitts treffen wir die folgenden Annahmen: W_a ist positiv und streng monoton fallend, d. h. $W_a > 0$ und $W'_a < 0$. Die Flussfunktion ist streng monoton steigend, d. h. g' > 0 und hat dasselbe Vorzeichen wie der Fluss selbst, d. h. $sign(g(f_a)) = sign(f_a)$.

$$a = (v, w)$$

$$V$$
Potential l_v

$$Fluss f_a$$

$$l_w = l_v - W_a(c_a)g(f_a)$$
Potential l_w

Abb. 8.1 Variablen und Nebenbedingung eines potentialgetriebenen Fluss-Modells für eine Kante

Zur Illustration dieses sehr allgemeinen Modells betrachten wir schon einmal die Physik des Gasflusses, mit der wir uns in Kap. 13 noch näher beschäftigen werden. In sogenannten stationären Fällen ist der Fluss f_a auf der Kante $a \in A$ der Massenfluss (in kg s⁻¹). Dieser Massenfluss ist durch Differentialgleichungen an die Drücke am Anfang und am Ende des Rohres (d. h. auf den Knoten v und w der Kante a = (v, w)) gebunden. Unter vereinfachenden physikalischen Annahmen kann man die entsprechende Differentialgleichung exakt lösen und erhält den Zusammenhang

$$p_w^2 = p_v^2 - \left(\frac{4}{\pi}\right)^2 \frac{\lambda_a \kappa_a}{D_a^5} |q_a| q_a. \tag{8.7}$$

Hierbei bezeichnet p_v den Gasdruck (in Pa) auf dem Knoten $v \in V$, λ_a modelliert die Reibung an der rauen Rohrinnenwand, D_a ist der Durchmesser des Rohres (in m) und $\kappa_a > 0$ beinhaltet eine Reihe weiterer technischer Parameter des Rohres. Der Durchmesser D_a des Rohres ist der wesentliche Designparameter bei Gasrohren und beschreibt "die Kapazität" des Rohres. Viele weitere Details über die technischen Eigenschaften sowie die mathematische Modellierung von Gasnetzen können Sie in beispielsweise im Kapitel von Fügenschuh et al. (2015) des Buches Koch et al. (2015) nachlesen – oder einfach in Kap. 13 weiter hinten in diesem Buch.

In obiger Notation entsprechen die Potentiale gerade den Druckquadraten,

$$\ell_v = p_v^2$$
 für alle $v \in V$,

und die Fluss- sowie Potentialverlustfunktionen sind gegeben durch

$$g(q_a) = |q_a|q_a, \quad W_a(D_a) = \left(\frac{4}{\pi}\right)^2 \frac{\lambda_a \kappa_a}{D_a^5}.$$

Wir werden später in Kap. 9 sehen, dass auch einfache Modellierungen des Zusammenhangs von Wasserfluss und Druckhöhen in Wassernetzwerken in die allgemeine Form von Gl. (8.6) passen.

Die "direkte" Erweiterung des potentialfreien Modells (8.1) lautet

$$\max_{d,s,c,q,\ell} \varphi(d,s,c,q) \tag{8.8a}$$

s.t.
$$\sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} f_a + s_v = \sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} f_a + d_v \quad \text{für alle } v \in V \quad [\alpha_v], \tag{8.8b}$$

$$\ell_w = \ell_v - W_a(c_a)g(f_a)$$
 für alle $a = (v, w) \in A$ $[\varepsilon_a],$ (8.8c)

$$\ell_v^- \le \ell_v \le \ell_v^+ \quad \text{für alle } v \in V \quad [\zeta_v^{\pm}],$$
 (8.8d)

$$c_a^- \le c_a$$
 für alle $a \in A$ $[\delta_a^-],$ (8.8e)

$$0 \le s_v \quad \text{für alle } v \in V \quad [\gamma_v^-], \tag{8.8f}$$

wobei $c_a^- > 0$ für alle $a \in A$ gilt, um mögliche Probleme bei der Wohldefiniertheit von $W_a(c_a)$ auszuschließen; vgl. Gl. (8.7).

Im Gegensatz zu den bisher betrachteten linearen Flussmodellen haben wir jetzt zusätzliche, im Allgemeinen nichtlineare, Gl. (8.8c) für die Potentialverluste, die die Potentiale auf den Knoten mit den Flüssen auf den Kanten koppeln. Außerdem sind die Knotenpotentiale nach oben und unten beschränkt durch (8.8d). Dies ist die typische Situation in der Praxis. So sind z. B. Gasdrücke an den Knoten v, w normalerweise beschränkt durch den Maximaldruck, mit dem das verbindende Rohr a=(v,w) betrieben werden kann. Man beachte, dass die Potentialverlustgleichungen zusammen mit den Potentialschranken auf den Knoten Schranken für die Flüsse auf den Kanten implizieren. Dies ist der Grund warum wir in diesem Abschnitt keine expliziten Flussschranken formulieren. Die wesentliche Ausbauvariable ist die Kantenkapazität c_a , die die Potentialverluste durch den Faktor $W_a(c_a)$ bestimmen.

Wir analysieren jetzt wieder die Optimalitätsbedingungen erster Ordnung. Da die von jetzt an betrachteten Probleme nichtkonvexe nichtlineare Optimierungsprobleme sind, sind die KKT-Bedingungen nicht mehr hinreichend sondern nur noch notwendig. Trotzdem erlauben sie die Analyse von Preis- und Kostenstrukturen in (global) optimalen Lösungen des Problems (8.8).

Die dualen Zulässigkeitsbedingungen lauten

$$p_v(d_v) - \alpha_v = 0 \quad \text{für alle } v \in V, \tag{8.9a}$$

$$-w'_{\text{var},v}(s_v) + \alpha_v + \gamma_v^- = 0 \quad \text{für alle } v \in V, \tag{8.9b}$$

$$-w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-) + \varepsilon_a W'_a(c_a)g(f_a) + \delta_a^- = 0 \quad \text{für alle } a \in A,$$

$$(8.9c)$$

$$-w'_{\text{var},a}(f_a) + \alpha_w - \alpha_v + \varepsilon_a W_a(c_a)g'(f_a) = 0 \quad \text{für alle } a = (v, w) \in A, \tag{8.9d}$$

$$\sum_{a=(w,v)\in A} \varepsilon_a - \sum_{a=(v,w)\in A} \varepsilon_a + \zeta_v^- - \zeta_v^+ = 0 \quad \text{für alle } v \in V.$$

$$(8.9e)$$

An dieser Stelle passiert etwas Spannendes. Ein genauerer Blick auf die Bedingungen (8.9e) offenbart, dass es sich bei den dualen Variablen ε_a um Flüsse handelt. Genauer gesagt haben wir ein duales b-transshipment mit rechter Seite $\zeta_v^+ - \zeta_v^-$. In dem Fall, dass keine Potentialschranken binden, wird aus diesem Flussproblem eine Zirkulation, da dann $\zeta_v^+ = \zeta_v^- = 0$ gilt. Wie im linearen Fall implizieren die beiden ersten Bedingungen (8.9a) und (8.9b) das Preisgleichgewicht

$$\alpha_v = p_v(d_v) = w'_{\text{var},v}(s_v) > 0$$
 für alle $v \in V$ mit $s_v > 0$.

Außerdem folgt aus (8.9d), dass

$$p_w(d_w) - p_v(d_v) = w'_{\text{var }a}(f_a) - \varepsilon_a W_a(c_a)g'(f_a)$$
 für alle $a = (v, w) \in A$

gilt. Damit lässt sich der folgende Satz zeigen.

Satz 8.5 Es sei $a = (v, w) \in A$. Falls $c_a^- < c_a$ und $f_a \neq 0$ gilt, folgt

$$\varepsilon_a = \frac{1}{W_a'(c_a)g(f_a)}w_{\text{inv},a}'(c_a - c_a^-)$$

und

$$p_w(d_w) - p_v(d_v) = w'_{\text{var},a}(f_a) - \frac{W_a(c_a)g'(f_a)}{W'_a(c_a)g(f_a)}w'_{\text{inv},a}(c_a - c_a^-).$$

Aus diesem Satz können wir direkt folgern, dass die Flussrichtung auf einer Kante durch das Vorzeichen der Preisdifferenz gegeben ist, falls die untere Kapazitätsschranke nicht bindet und nicht nichts fließt.

Korollar 8.6 Für jede Kante $a = (v, w) \in A$ gilt mindestens eine der folgenden Aussagen:

- 1. $f_a = 0$,
- 2. $c_a = c_a^-$,
- 3. $\operatorname{sign}(p_w(d_w) p_v(d_v)) = -\operatorname{sign}(\varepsilon_a) = \operatorname{sign}(f_a)$.

Man beachte, dass die Bepreisungsregel für potentialgetriebe Flüsse aus Satz 8.5 – im Vergleich zur Bepreisungsregel aus Satz 8.2 für lineare Modelle – einen zusätzlichen nichtlinearen Skalierungsfaktor für die Kapazitätsinvestition enthält. Dieser Faktor lautet

$$\frac{W_a(c_a)g'(f_a)}{W'_a(c_a)g(f_a)}$$

und kann als der Wert einer Kapazitätserweiterung relativ zu der aktuellen Flusssituation interpretiert werden. Im Vergleich zu den linearen Modellen des letzten Abschnitts sieht man also hier, dass die ökonomischen Größen wie z.B. Preisdifferenzen sehr viel stärker von der konkreten Flusssituation abhängen.

8.3 Der Fall ohne Transportkosten: Preiszonen

In diesem Abschnitt analysieren wir die Preisstrukturen in einer Variante des Modells, in der wir die Transportkosten auf den Kanten des Netzes vernachlässigen. Dies ist ein in der Praxis sehr häufig auftretender Fall. So traten beispielsweise in Abschn. 7.2 über das Nodalpreissystem im Strom keinerlei Transportkosten auf. Wir wollen diesen Fall aber auch noch kurz anhand von Gasnetzen motivieren, die wir uns später in Kap. 13 noch genauer ansehen werden. In diesen Netzen sind die Transportkosten im Wesentlichen durch die Kosten des Betriebs sogenannter Verdichter gegeben, die den Gasdruck erhöhen. In einem

großen Teil des Netzes befinden sich aber "nur" Rohre, durch die das Gas druckgetrieben fließt. In diesen Teilnetzen entstehen daher keine Transportkosten. Für diese sogenannten passiven Teilnetze gelten die Aussagen, die wir in diesem Abschnitt herleiten werden.

Zur Vereinfachung der Notation gehen wir zu einem ungerichteten Graphen G=(V,E) mit Kanten $e\in E$ über, da wir die Kantenorientierung in diesem Abschnitt nicht benötigen. Auf diesem Graphen nutzen wir wieder die schon bekannte Notation für den von einer Teilmenge $U\subseteq V$ induzierten Schnitt:

$$\delta(U) = \{e \in E : e = \{v, w\}, v \in U, w \notin U\}.$$

Die wesentliche Idee dieses Abschnitts ist es, die alternative Formulierung für Flussprobleme zu nutzen, die aus den Sätzen von Gale und Hoffman in Abschn. 2.3 folgt. Dies führt zu folgender Formulierung, in der alle Flussvariablen auf den Kanten des Graphens eliminiert sind:

$$\max_{d,s,c} \psi(d,s,c) \tag{8.10a}$$

s.t.
$$-\sum_{e \in \delta(U)} c_e \le \sum_{v \in U} (s_v - d_v)$$
 für alle $U \subseteq V$, $[\alpha_U^{\pm}]$ (8.10b)

$$\sum_{v \in U} (s_v - d_v) \le \sum_{e \in \delta(U)} c_e \quad \text{für alle } U \subseteq V, \quad [\alpha_U^{\pm}]$$
 (8.10c)

$$c_e^- \le c_e$$
 für alle $e \in E$, $[\delta_e^-]$ (8.10d)

$$0 \le s_v \quad \text{für alle } v \in V, \quad [\gamma_v^-] \tag{8.10e}$$

$$\sum_{v \in V} s_v - \sum_{v \in V} d_v = 0. \quad [\lambda]$$
 (8.10f)

Dabei bezeichnet

$$\psi(d, s, c) := \sum_{v \in V} \int_0^{d_v} p_v(x) \, \mathrm{d}x - \sum_{v \in V} w_{\text{var}, v}(s_v) - \sum_{e \in E} w_{\text{inv}, e}(c_e - c_e^-)$$

die Zielfunktion, die bis auf die fehlenden Transportkosten auf den Kanten der alten Zielfunktion φ entspricht. Man kann sich leicht überlegen, dass es reicht, sich in (8.10b) und (8.10c) auf die Teilmengen $U\subseteq V$ zu beschränken, die zu zusammenhängenden Teilgraphen von G gehören.

Die zugehörige duale Zulässigkeit lautet

$$\begin{split} p_v(d_v) - \sum_{U:v \in U} \alpha_U^- + \sum_{U:v \in U} \alpha_U^+ - \lambda &= 0 \quad \text{für alle } v \in V, \\ -w'_{\text{var},v}(s_v) + \sum_{U:v \in U} \alpha_U^- - \sum_{U:v \in U} \alpha_U^+ + \gamma_v^- + \lambda &= 0 \quad \text{für alle } v \in V, \end{split}$$

$$-w_{\mathrm{inv},e}'(c_e-c_e^-) + \sum_{U:e \in \delta(U)} \alpha_U^- + \sum_{U:e \in \delta(U)} \alpha_U^+ + \delta_e^- = 0 \quad \text{für alle } e \in E.$$

Addieren der beiden ersten Bedingungen liefert wieder, dass

$$p_v(d_v) = w'_{\text{var }v}(s_v)$$

für die Knoten $v \in V$ gilt, die produzieren, d. h. für die $s_v > 0$ gilt.

Außerdem können die Knotenpreise jetzt wie folgt interpretiert werden: Jede Knotenmenge U, die einen zusammenhängenden Teilgraphen induziert hat einen Preis der von Null verschieden ist genau dann, wenn die Kapazitätsschranken für den induzierten Schnitt binden. Solche Knotenteilmengen nennen wir im Folgenden Preiszonen oder kurz Zonen. Der Preis an einem Knoten ist dann genau die Summe der Preise aller Zonen, in denen der Knoten liegt. Man sieht außerdem, dass (im generischen Fall) alle Knoten mit demselben Zonen Preis zu der gleichen zusammenhängenden Komponente des Zonen gehören.

Es ergibt daher Sinn, diese Preiszonen formal zu definieren.

Definition 8.7 Es sei z eine Lösung des Problems (8.10). Wir sagen die Partition $\mathcal{Z} = \{Z_i\}_{i=1}^I$ partitioniert die Knotenmenge V in *Preiszonen*, falls für alle $Z \in \mathcal{Z}$ gilt, dass die Preise $p_v(d_v)$ gleich sind für alle Knoten $v \in Z$. Wir schreiben auch $\mathcal{Z}(z)$, um die Abhängigkeit von der Lösung z zu betonen.

Die wesentliche Idee ist es jetzt, Preiszonen mit den aktiven Nebenbedingungen der alternativen Gale-Hoffman-Formulierung in Verbindung zu setzen. Dazu benötigen wir zunächst eine weitere Definition.

Definition 8.8 Es sei z eine Lösung von Problem (8.1). Wir nennen die Partition $\mathcal{Z} = \{Z_i\}_{i=1}^I$ der Knotenmenge V flussinduziert, falls folgendes gilt: Jede Zone Z_i ist eine zusammenhängende Komponente des Graphen $\tilde{G}(z) = (V, E \setminus E^{\text{sat}})$, wobei

$$E^{\text{sat}} := \left\{ e \in E : \exists U \subseteq V \text{ mit } e \in \delta(U) \text{ und } \sum_{e \in \delta(U)} c_e = \left| \sum_{v \in U} s_v - \sum_{v \in U} d_v \right| \right\}$$

gilt.

Mit diesen Begriffen sind wir jetzt in der Lage, eine alternative Version des Problems (8.10) zu formulieren:

Satz 8.9 Es sei $z^* := (d^*, s^*, c^*)$ eine optimale Lösung des Problems (8.10) und \mathcal{Z} sei die flussinduzierte Partition. Dann gilt

$$\psi(z^*) = \max_{d,s} \ \psi(d,s,c^*)$$
 (8.11a)

s.t.
$$\sum_{v \in Z} d_v - \sum_{v \in Z} s_v = \hat{c}_Z$$
 für alle $Z \in \mathcal{Z}$, (8.11b)

$$0 \le s_v$$
 für alle $v \in V$, (8.11c)

wobei $\hat{c}_Z = \sum_{v \in Z} (s_v - d_v)$ der Gesamtzu- bzw. -abfluss von Zone Z ist. Das heißt, Z ist eine Partitionierung in Preiszonen.

Beweis Es sei $z'=(s',d',c^*)$ eine optimale Lösung von Problem (8.11). Da z^* auch zulässig ist, gilt $\psi(z^*) \leq \psi(z')$. Wir definieren jetzt für jedes $U \subseteq V$ die Größe $\tau_U \in [0,1]$ wie folgt: Setze τ_U maximal, so dass $z^{\tau_U}:=(1-\tau_U)z^*+\tau_Uz'$ zulässig ist bzgl. der Nebenbedingungen (8.10b) und (8.10c) (für U). Damit gilt $\tau_U>0$ für alle $U\subseteq V$, wenn die Nebenbedingungen (8.10b) und (8.10c) nicht mit Gleichheit erfüllt ist für z^* . Falls sie für z^* mit Gleichheit erfüllt ist gilt aber, dass wir U als Vereinigung von Zonen darstellen können. Damit gilt aber, dass die Nebenbedingung ebenfalls für z' erfüllt ist. Somit können wir $\tau_U=1$ wählen.

Wir setzen jetzt $\tau := \min\{\tau_U : U \subseteq V\}$. Dann ist $z^{\tau} := (1 - \tau)z^* + \tau z'$ zulässig für Problem (8.10). Angenommen es gelte $\psi(z^*) < \psi(z')$. Dann gilt auch $\psi(z^{\tau}) > \psi(z^*)$, da $\tau > 0$ gilt, was aber ein Widerspruch zur Optimalität z^* für Problem (8.10) ist.

Die in diesem Abschnitt behandelten Preiszonen sind in der aktuellen politischen Diskussion von großer Bedeutung. Dies liegt insbesondere daran, dass bewusst eingerichtete, d.h. exogen gegebene, Preiszonen zu regional differenzierten Investitionsanreizen führen können. Damit einhergehend setzt man typischerweise auch Anreize für Kapazitätsinvestitionen, die näher am Verbrauch platziert sind, wodurch wiederum das Transportnetz geringer belastet wird. Detaillierte Informationen hierzu findet man in den Artikeln Egerer et al. (2016), Grimm et al. (2016, 2017, 2019), Kleinert und Schmidt (2018), Murphy und Smeers (2005) und Stoft (1997).

Aufgaben

Aufgabe 8.1 Beweisen Sie Lemma 8.1.

Aufgabe 8.2 Beweisen Sie Satz 8.2.

Aufgabe 8.3 Beweisen Sie Satz 8.4.

Aufgabe 8.4 Beweisen Sie Satz 8.5.

Literatur 111

Aufgabe 8.5 Beweisen Sie Korollar 8.6.

Aufgabe 8.6 Beweisen Sie, dass man sich in Abschn. 8.3 bei der Herleitung der dualen Zulässigkeit des Problems (8.10) tatsächlich auf die Teilmengen $U \subseteq V$ beschränken darf, die zu zusammenhängenden Teilgraphen von G gehören.

Literatur

- Egerer, J., Weibezahn, J., & Hermann, H. (2016). Two price zones for the German electricity market Market implications and distributional effects. *Energy Economics*, *59*, 365–381. https://doi.org/10.1016/j.eneco.2016.08.002.
- Fügenschuh, A., Geißler, B., Gollmer, R., Morsi, A., Pfetsch, M. E., Rövekamp, J., Schmidt, M., Spreckelsen, K., & Steinbach, M. C. (2015). Physical and technical fundamentals of gas networks. In T. von Koch, B. Hiller, M. E. Pfetsch, & L. Schewe (Hrsg.), SIAM-MOS series on Optimization. SIAM. Kap. 2: Evaluating gas network capacities (S. 17–44). Philadelphia: SIAM. https://doi.org/10.1137/1.9781611973693.ch2. ISBN: 978-1-611973-68-6.
- Gabriel, S. A., Antonio, J. C., David Fuller, J., Benjamin, F. H., & Ruiz, C. (2012). *Complementarity modeling in energy markets*. Bd. 180. New York: Springer.
- Grimm, V., Martin, A., Schmidt, M., Weibelzahl, M., & Zöttl, G. (2016). Transmission and generation investment in electricity markets: The effects of market splitting and network fee regimes. *European Journal of Operational Research*, 254(2), 493–509. https://doi.org/10.1016/j.ejor.2016.03.044.
- Grimm, V., Schewe, L., Schmidt, M., & Zöttl, G. (2017). Uniqueness of market equilibrium on a network: A peak-load pricing approach. *European Journal of Operational Research*, 261(3), 971–983. https://doi.org/10.1016/j.ejor.2017.03.036. ISSN: 0377-2217.
- Grimm, V., Kleinert, T., Liers, F., Schmidt, M., & Zöttl, G. (2019). Optimal price zones of electricity markets: A mixed-integer multilevel model and global solution approaches. *Optimization Methods and Software*, *34*, 406–436. https://doi.org/10.1080/10556788.2017.1401069.
- Groß, M., Pfetsch, M. E., Schewe, L., Schmidt, M., & Skutella, M. (2019). Algorithmic results for potential-based flows: Easy and hard cases. *Networks*, 1–9. https://doi.org/10.1002/net.21865.
- Kleinert, T., & Schmidt, M. (2018). Global optimization of multilevel electricity market models including network design and graph partitioning. Techn. Ber. FAU Erlangen-Nürnberg. http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2018/02/6460.html (Eingereicht).
- Koch, T., Hiller, B., Pfetsch, M. E., & Schewe, L. (Hrsg.). (2015). Evaluating gas network capacities: SIAM-MOS series on Optimization (S. xvi + 364). Philadelphia: SIAM. https://doi.org/10.1137/1. 9781611973693. ISBN: 978-1-611973-68-6.
- Mosler, K., Dyckerhoff, R., & Scheicher, C. (2018). *Mathematische Methoden für Ökonomen*. Wiesbaden: Gabler. https://doi.org/10.1007/978-3-662-54246-0.
- Murphy, F. H., & Smeers, Y. (2005). Generation capacity expansion in imperfectly competitive restructured electricity markets. *Operations Research*, *53*(4), 646–661.
- Robinius, M., Schewe, L., Schmidt, M., Stolten, D., Thürauf, J., & Welder, L. (2018). Robust optimal discrete arc sizing for tree-shaped potential networks. Techn. Ber. FAU Erlangen-Nürnberg; Forschungszentrum Jülich. http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2018/02/6447.html.
- Schewe, L., & Schmidt, M. (2018). The impact of potential-based physics models on pricing in energy networks. https://doi.org/10.2139/ssrn.2628611.
- Stoft, S. (1997). Transmission pricing zones: Simple or complex? *The Electricity Journal*, 10(1), 24–31. https://doi.org/10.1016/S1040-6190(97)80294-1.

Dimensionierung von Wassernetzen

Zusammenfassung

In diesem Kapitel betrachten wir das Problem der optimalen Dimensionierung von Wassertransportnetzen. Für eine gegebene Topologie des Netzes muss man bei diesem Problem die festzulegenden Rohrdurchmesser möglichst kostengünstig wählen, so dass alle technisch-physikalischen Bedingungen erfüllt sind und die Kunden ihre vertraglich vereinbarten Mengen erhalten. Die Entscheidung über die Durchmesser selbst führt zu einer gemischt-ganzzahlige Modellierung und die Physik des Wasserflusses führt zu einem nichtlinearen Modell. Wir sind also erstmals mit einem gemischt-ganzzahligen und nichtlinearen Modell konfrontiert, für das wir einfache Reformulierungen diskutieren. Außerdem leiten wir in diesem Kapitel die stationäre Flussphysik aus der genaueren Beschreibung durch zeitabhängige partielle Differentialgleichungen her.

Bisher haben wir uns hauptsächlich entweder mit linearen Problemen beschäftigt, die unter Umständen auch ganzzahlige Variablen beinhalteten (zum Beispiel in Abschn. 3.2, wo allgemeine Netzwerkdesign-Probleme diskutiert wurden) oder wir haben nichtlineare Probleme studiert, die allerdings ausschließlich kontinuierliche Variablen enthielten (zum Beispiel in Kap. 8 über potentialgetriebene Flüsse). In diesem Kapitel werden wir uns mit der optimalen Dimensionierung von Wassernetzen beschäftigen; eine Problemklasse, die beide Aspekte – ganzzahlige Variablen und Nichtlinearitäten – kombiniert. Diese Problemklasse werden wir uns im folgenden Kap. 10 genauer und von einem allgemeineren Standpunkt aus angucken.

Ein für die Praxis wichtiges Problem besteht in der optimalen Dimensionierung von Wasserversorgungsnetzen. Das heißt, dass man für vorgegebene Rohre den optimalen Durchmesser bestimmen muss. Dabei werden die allgemeine Topologie des Wassernetzes und andere technische Parameter des Netzes als gegeben angenommen. Die optimal zu wählenden Durchmesser müssen dabei aus einer diskreten Menge von kommerziell

verfügbaren Rohrdurchmessern gewählt werden und die resultierenden Flüsse in dem Wassernetz müssen technisch-physikalischen Nebenbedingungen genügen.

Wir werden die Modellierung dieses Problems – wie bisher auch – für den stationären Fall beschreiben. In der Realität hängt der Wasserfluss aber natürlich auch von zeitlichen Effekten ab. Daher wird Wasserfluss auch grundsätzlich mit zeitabhängigen partiellen Differentialgleichungen (PDEs) beschrieben. Am Ende dieses Kapitels werden wir uns deshalb einmal exemplarisch damit beschäftigen, wie man eine stationäre Modellierung aus den gegebenen PDEs herleitet.

9.1 Stationäre Modellierung

Die gegebenen Daten der Problemstellung sind die folgenden. Die Topologie des Wassernetzes bestehend aus Kanten und Knoten wird wieder als gerichteter Graph G=(V,A) beschrieben. Die Kanten $a\in A$ modellieren hier die Wasserrohre und die Knoten $v\in V$ sind entweder Verbindungen von unterschiedlichen Rohren mit gegebener Nachfrage an Wasser oder sogenannte Reservoire $V_+\subset V$, von denen aus Wasser in das Netz eingespeist werden und in die andererseits auch Wasser eingespeichert werden kann.

In diesem Abschnitt beschäftigen wir uns mit der stationären Modellierung des Wasserflusses, d. h., wir ignorieren zunächst die zeitabhängigen Phänomene des Wasserflusses in Rohren. Im folgenden Abschnitt werden wir auch noch kurz auf die instationäre, d. h. zeitabhängige, Modellierung eingehen. Um die Modellierung übersichtlicher zu gestalten, sind alle auftretenden Größen mit ihren Einheiten in Tab. 9.1 aufgeführt.

Symbol	Bedeutung	Einheit
H	Druckhöhe des Wassers	m
h	Geodätische Höhe	m
p	Wasserdruck	Pa
ρ	Wasserdichte	$ m kgm^{-3}$
v	Wassergeschwindigkeit	ms^{-1}
Q	Volumenfluss	$\mathrm{m}^{3}\mathrm{s}^{-1}$
λ	Reibungsterm	1
g	Erdbeschleunigung	ms^{-2}
L	Länge eines Rohres	m
D	Durchmesser eines Rohres	m
k	Rauheit der Rohrinnenwand	m
d_v	Wassernachfrage	$\mathrm{m}^{3}\mathrm{s}^{-1}$

Tab. 9.1 Technisch-physikalische Größen der Wassernetzmodellierung

Die Durchflussrate oder kurz der Fluss Q_a durch ein Rohr $a=(v,w)\in A$ ist in Wassernetzen wieder potentialgetrieben, wobei die Potentiale hier die sogenannten Druckhöhen H_v an den Knoten $v\in V$ des Netzes sind. Diese Druckhöhen entsprechen der totalen Energie pro Masseneinheit des Wassers und sie werden typischerweise in Höhenmetern angegeben. Es gilt

$$H = h + \frac{p}{g\rho} + \frac{v^2}{2g},$$

wobei h die geodätische Höhe, $p/(g\rho)$ die statische Druckhöhe (engl. pressure head) und $v^2/(2g)$ die kinetische Druckhöhe (engl. kinetic energy oder velocity head) beschreibt. Da die kinetische Druckhöhe typischerweise deutlich kleiner als die beiden anderen Größen ist, wird sie häufig vernachlässigt. Unter dieser vereinfachenden Annahme gilt also

Druckhöhe = geodätische Höhe + statische Druckhöhe,

d.h.,

$$H = h + \frac{p}{g\rho} =: h + \tilde{H}.$$

Die technische Spezifikation der Rohre $a \in A$ beinhaltet die Rauheit $k_a > 0$ der Rohrinnenwände, den minimalen und maximalen zu wählenden Durchmesser $D_a^- > 0$ und $D_a^+ > D_a^-$ und die Länge $L_a > 0$ des Rohres. Außerdem sei eine maximale Fließgeschwindigkeit v_a^+ des Wassers in jedem Rohr $a \in A$ gegeben.

Die Spezifikation der Knoten $v \in V$ ist gegeben durch ihre geodätische Höhe h_v , die minimale und maximale statische Druckhöhe $\tilde{H}_v^- > 0$ und $\tilde{H}_v^+ > \tilde{H}_v^-$ für alle Knoten $v \in V \setminus V_+$, die keine Reservoire sind, sowie die gegebene Druckhöhe \bar{H}_v für alle Reservoire $v \in V_+$. Außerdem ist die Nachfrage $d_v \geq 0$ an allen Nachfrageknoten $v \in V \setminus V_+$ gegeben.

Die zu wählenden Durchmesser D_a für jedes Rohr $a \in A$ entstammen einer diskreten Menge von r_a kommerziell verfügbaren Rohrdurchmessern:

$$0 < D_a^- := D_{a,1} < \cdots < D_{a,r_a} =: D_a^+$$
.

Zusätzlich hat jedes Rohr $a \in A$ eine vom Durchmesser abhängige Kostenfunktion $C_a = C_a(D_a)$. Dabei können wir annehmen, dass die Kostenfunktion monoton steigend im Durchmesser ist, d. h. für

$$\Gamma(a,i) := C_a(D_{a,i}), \quad i = 1,\ldots,r_a,$$

gilt

$$\Gamma(a,1) < \Gamma(a,2) < \cdots < \Gamma(a,r_a).$$

Im Folgenden werden wir uns eine formale Beschreibung des Problems erarbeiten und ein entsprechendes Optimierungsmodell formulieren. Als Variablen betrachten wir die Flüsse Q_a und die Durchmesser D_a für alle Rohre $a \in A$ sowie die Druckhöhen H_v an allen Knoten $v \in V$ des Netzes. Den Fluss betrachten wir wieder als im Vorzeichen unbeschränkt, so dass das Vorzeichen des Flusses zusammen mit der Orientierung der Kanten im Graphen die Flussrichtung definiert.

Als Nebenbedingungen haben wir zunächst einfache Variablenschranken: Der Durchmesser muss den Bedingungen

$$D_a^- \le D_a \le D_a^+$$
 für alle $a \in A$ (9.1)

genügen, die Druckhöhen sind nach unten und oben beschränkt,

$$h_v + \tilde{H}_v^- \le H_v \le h_v + \tilde{H}_v^+$$
 für alle $v \in V \setminus V_+$, (9.2)

und die statischen Druckhöhen an den Reservoiren sind gegeben durch

$$H_v = h_v + \bar{H}_v$$
 für alle $v \in V_+$. (9.3)

Bei all diesen Bedingungen handelt es sich um lineare Nebenbedingungen. Zusätzlich haben wir die folgenden, etwas komplexeren, Nebenbedingungen. Der Fluss in den Rohren ist nach unten und oben beschränkt durch (siehe auch Abb. 9.1)

$$-\frac{\pi}{4}v_a^+ D_a^2 \le Q_a \le \frac{\pi}{4}v_a^+ D_a^2 \quad \text{für alle} \quad a \in A$$
 (9.4)

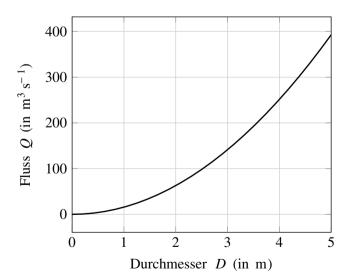


Abb. 9.1 Nichtlineare Flussbeschränkungen in Wassernetzen

und wir haben die bekannten Nebenbedingungen für die Flusserhaltung in den Knoten des Netzes.

$$\sum_{\delta^{\text{in}}(v)} Q_a - \sum_{\delta^{\text{out}}(v)} Q_a = d_v \quad \text{für alle} \quad v \in V \setminus V_+. \tag{9.5}$$

Die Reservoire können also in dieser Formulierung frei verwendet werden. Zusätzlich müssen die Durchmesser aus der gegebenen diskreten Menge gewählt werden:

$$D_a \in \{D_{a,1}, \dots, D_{a,r_a}\}$$
 für alle $a \in A$. (9.6)

Zuletzt müssen wir noch den physikalischen Zusammenhang zwischen den Flüssen auf den Kanten und den Druckhöhen auf den Knoten sicherstellen. Dieser kann modelliert werden durch

$$H_v - H_w = \frac{8\lambda_a L_a}{g\pi^2 D_a^5} \operatorname{sign}(Q_a) Q_a^2 \quad \text{für alle} \quad a = (v, w) \in A.$$
 (9.7)

Hierbei bezeichnet λ_a den sogenannten Reibungsterm, der unter anderem von der Rauheit der Rohrinnenwand abhängt. Außerdem bezeichnet g wie üblich die Erdbeschleunigung. Diese Gleichung fällt an dieser Stelle erstmal vom Himmel – wir werden uns am Ende dieses Kapitels aber ansehen, wie man solche Gleichungen herleitet. Um eine Intuition für die Gleichung zu erhalten, ist in Abb. 9.2 das qualitative Verhalten skizziert. Außerdem diskutieren wir in Kap. 12 auch noch spezielle Techniken, um über Nebenbedingungen dieser Art zu optimieren. Abstrahiert man von den gegebenen Konstanten, so kann man die

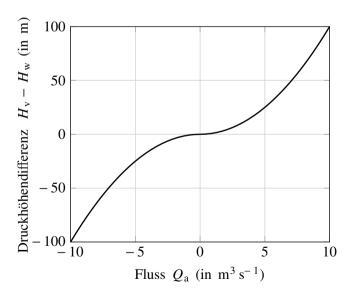


Abb.9.2 Qualitativer Verlauf des Druckhöhenverlusts in Abhängigkeit vom Fluss bei festgehaltenem Durchmesser

folgenden Interpretationen bzgl. dieses Modells anstellen: Der Druckverlust findet immer in Flussrichtung statt, hängt nichtlinear vom Fluss selbst ab und für festen Fluss ist der Druckverlust für dickere Rohre geringer. Anders formuliert entspricht eine Investition in Rohre mit größerem Durchmesser einer Investition in geringeren Druckverlust im Rohr. In allgemeinerem Kontext haben wir diese Situation auch schon in Kap. 8 gesehen. Mit der Zielfunktion ("Kosten × Länge")

$$f = f(D) := \sum_{a \in A} C_a(D_a) L_a, \quad D = (D_a)_{a \in A},$$

haben wir schließlich das folgende Optimierungsproblem zu lösen:

$$\min_{D,H,Q} f \tag{9.8a}$$

Flusserhaltung:
$$(9.5)$$
, $(9.8f)$

Leider können wir das Modell (9.8) in der gegebenen Form noch nicht lösen, da die Nebenbedingungen (9.6),

$$D_a \in \{D_{a,1}, \ldots, D_{a,r_a}\}$$
 für alle $a \in A$,

nicht in einer expliziten Nebenbedingungsform gegeben sind. Daher reformulieren wir diese Bedingungen wie folgt. Wir führen für jeden Durchmesser $D_{a,i}$, $i \in \{1, \ldots, r_a\}$, jeden Rohres $a \in A$ eine Binärvariable $z_{a,i} \in \{0, 1\}$ ein, so dass $z_{a,i} = 1$ genau dann gilt, wenn Rohr a den Durchmesser $D_{a,i}$ erhält. Da wir sicherstellen müssen, dass wir für jedes Rohr nur einen Durchmesser auswählen, fordern wir zusätzlich eine sogenannte SOS-1-Bedingung, die wir mit den Nebenbedingungen

$$\sum_{i=1}^{r_a} z_{a,i} = 1 \quad \text{für alle} \quad a \in A$$
 (9.9)

und

$$D_a = \sum_{i=1}^{r_a} z_{a,i} D_{a_i} \quad \text{für alle} \quad a \in A$$
(9.10)

modellieren.

Damit wird unser ursprüngliches Modell (9.8) zu

$\min_{D,H,Q,z}$	f	(9.11a)
s.t.	Schranken an den Durchmesser: (9.1),	(9.11b)
	Schranken an die Druckhöhen: (9.2),	(9.11c)
	Fixierung der Reservoir-Druckhöhen: (9.3),	(9.11d)
	Flussschranken: (9.4),	(9.11e)
	Flusserhaltung: (9.5),	(9.11f)
	Druckhöhenverlust: (9.7),	(9.11g)
	diskrete Durchmesserwahl: (9.9), (9.10).	(9.11h)

Um was für ein Modell handelt es sich bei (9.11)? Die Bedingungen (9.1), (9.2), (9.3) und (9.5) sind linear. Die Bedingungen (9.9) und (9.10) sind auch linear, aber enthalten Binärvariablen. Zusammen mit den kontinuierlichen Variablen für Fluss und Druckhöhe haben wir also ein gemischt-ganzzahliges Optimierungsproblem. Die weiteren Nebenbedingungen machen die Situation noch komplizierter: Die Flussschranken (9.4) sind nichtlinear und führen, wie man leicht nachrechnet, zu einer nichtkonvexen zulässigen Menge. Noch schlimmer ist aber die Druckhöhenverlust-Bedingung (9.7), die sowohl nichtlinear und nichtkonvex als auch aufgrund des Signums nichtglatt in Q=0 ist. Genauer: Die Bedingung ist einmal, aber nicht zweimal stetig differenzierbar. Dies stellt Löser für nichtlineare Optimierungsprobleme typischerweise vor Probleme, da sie die zweimal stetige Differenzierbarkeit der Nebenbedingungen ausnutzen. Da wir die Durchmesser von 0 weg beschränkt haben, ist dies aber die einzige nichtglatte Stelle.

Insgesamt ist (9.11) ein nichtglattes, gemischt-ganzzahliges, nichtlineares und nichtkonvexes Problem – und gehört somit zu einer der schwierigsten Problemklassen, die man in der Optimierung betrachten kann. Wie löst man solche Optimierungsprobleme? Grundsätzlich gibt es, wie für MIPs oder NLPs auch für (nichtkonvexe) gemischt-ganzzahlig nichtlineare Probleme (MINLPs) Löser. In Frage kommende Löser sind beispielsweise

- BARON (http://archimedes.cheme.cmu.edu/?q=baron),
- SCIP (http://scip.zib.de),
- ANTIGONE (http://helios.princeton.edu/ANTIGONE/),
- KNITRO (https://www.artelys.com/tools/knitro_doc/),
- Couenne (https://www.coin-or.org/Couenne/) oder
- Bonmin (https://www.coin-or.org/Bonmin/).

Alle genannten Löser außer KNITRO können sowohl für konvexe als auch für nichtkonvexe Probleme genutzt werden. KNITRO liefert allerdings nur für konvexe MINLPs global optimale Lösungen. Im folgenden Kap. 10 werden wir die grundlegenden algorithmischen Techniken dieser Löser diskutieren.

Aufgrund der Komplexität der Problemklasse sind diese Löser für Instanzen realistischer Größenordnung häufig noch zu ineffizient und daher leider oft nicht nutzbar, um reale Probleme zu lösen. Deshalb geht man bei MINLPs häufig zu Problem-spezifischen Lösungsmethoden über oder versucht das MINLP als MIP oder NLP zu reformulieren und dann eines dieser Modelle zu lösen – mehr dazu in den folgenden Kapiteln. Speziell für die hier betrachteten Probleme gibt es eine Reihe verschiedener spezifischer Ansätze; einen Überblick findet man in Bragalli et al. (2006, 2008, 2012). GAMS-Implementierungen für unterschiedliche Modellierungen des vorliegenden Problems sind unter

http://minlp.org/library/problem/index.php?i=134&lib=MINLP

frei verfügbar.

9.2 Eine Reformulierung zur Reduktion der Nichtlinearitäten

Bei sehr schwierigen Optimierungsproblemen lohnt sich häufig ein genauerer Blick auf die konkrete Formulierung des Problems. Wenn sich z.B. Nichtlinearitäten nicht vermeiden lassen, dann stellt sich die Frage, ob sich diese Nichtlinearitäten nicht zumindest reduzieren lassen. Hierunter kann beispielsweise die Reduktion der Anzahl der nichtlinearen Nebenbedingungen oder auch die Reduktion des Polynomgrads in polynomiellen Nebenbedingungen verstanden werden. Diese Aspekte diskutieren wir jetzt konkret an der bisherigen Wassernetzmodellierung und orientieren uns dabei an den am Ende des letzten Abschnitts zitierten Artikeln. Eine in Modell (9.11) häufig Nichtlinearitäten verursachende Variable ist der Durchmesser D_a . Dieser tritt bei den Flussschranken (9.4) quadratisch und in der Druckhöhenverlust-Gleichung (9.7) mit der Potenz 5 auf. Eine deutliche Reduktion der Nichtlinearität des Gesamtmodells lässt sich hier durch eine Reparametrisierung des Modells hin zu einer Formulierung unter Ausnutzung der Querschnittsfläche

$$A_a = \frac{\pi}{4} D_a^2$$

anstelle des Durchmessers erreichen. Die einfachen Durchmesserschranken (9.1) werden dabei zu

$$A_a^- \le A_a \le A_a^+$$
 für alle $a \in A$,

wobei die Schranken A_a^- und A_a^+ a-priori aus D_a^- und D_a^+ berechnet werden können. Mehr erreichen wir bei den Flussschranken (9.4), die zu

$$-v_a^+ A_a \le Q_a \le v_a^+ A_a$$
 für alle $a \in A$

werden. Damit haben wir nichtkonvexe und nichtlineare Nebenbedingungen durch äquivalente lineare Nebenbedingungen ersetzt und das Modell damit deutlich vereinfacht. Zuletzt müssen wir noch die Druckhöhenverlust-Gleichung (9.7) anpassen, die unter Verwendung des Querschnitts und des Durchmessers

$$H_v - H_w = \frac{\lambda_a L_a}{2g A_a^2 D_a} \operatorname{sign}(Q_a) Q_a^2$$

lautet. Man beachte, dass die diskrete Durchmesserwahl natürlich auch diskrete Querschnittsflächen impliziert. Die letzte Nebenbedingung bleibt also nichtlinear, so dass wir es nach wie vor mit einem MINLP zu tun haben – jedoch mit reduzierter Nichtlinearität, was das Lösen in der Praxis typischerweise einfacher macht.

Bisher haben wir uns nur die Auswirkung dieser neuen Parametrisierung des Modells auf die Nebenbedingungen angesehen. Man muss allerdings auch die Zielfunktion reparametrisieren.

9.3 Exkurs: Instationäre Modellierung

Bisher haben wir uns immer mit stationären Flüssen beschäftigt. Dies sind Flüsse, bei denen zeitliche physikalische Effekte vernachlässigt werden. Dies stellt in der Regel aber immer nur eine Approximation der Realität dar, da die physikalischen Gesetze typischerweise nicht stationär sind. Tatsächlich wird der druckgetriebene Fluss von Wasser in einem Rohr durch ein System von partiellen Differentialgleichungen beschrieben. Diese Gleichungen sind daher partiell, weil sie sowohl vom Ort im Rohr als auch von der Zeit abhängen. Das besagte System besteht im Fall von inkompressiblen Fluiden wie Wasser aus einer Erhaltungsgleichung für Masse und aus einer Gleichung für die Impulserhaltung:

$$\partial_t(\rho A) + \partial_x(\rho v A) = 0,$$

$$\partial_t(\rho v A) + \partial_x(\rho A v^2) + A \partial_x p = -g A \rho \left(\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}x} + \frac{\lambda}{2gD} v |v|\right),$$

vgl. beispielsweise Hante et al. (2017) und die darin angegebenen Referenzen. Hier beschreibt ρ die Dichte von Wasser, v ist die Fließgeschwindigkeit und p ist der Druck. Ferner ist A der Rohrquerschnitt, D der Rohrdurchmesser und h beschreibt die geodätische Höhe. Wir gehen jetzt zur Druckhöhe $H(t,x) = h(x) + p(t,x)/(g\rho)$ über. Der Fluss Q ist ferner definiert via Q = vA und wir nehmen im Folgenden an, dass $c^2 = \partial_\rho p$ gilt, wobei c die Schallgeschwindigkeit in Wasser unter Normbedingungen ist. Damit kann man nachrechnen, dass

$$\partial_t H = -\frac{c^2}{g\rho A} \partial_x Q,$$

$$A \partial_x p = g A \rho \partial_x (H - h)$$

gilt und das System von oben lautet damit

$$\partial_t H + \frac{c^2}{gA} \partial_x Q = 0,$$

$$\partial_t Q + \frac{1}{A} \partial_x Q^2 + gA \partial_x H = -\frac{\lambda}{2AD} |Q|Q.$$

Dies ist ein System erster Ordnung von nichtlinearen und hyperbolischen Bilanzgleichungen. Für die Praxis nimmt man typischerweise eine Reihe von Vereinfachungen vor. Zunächst kann man beispielsweise den nichtlinearen Term $1/A \partial_x Q^2$ in der Impulsgleichung vernachlässigen und erhält so das semi-lineare System

$$\partial_t H + \frac{c^2}{gA} \partial_x Q = 0,$$

$$\partial_t Q + gA \partial_x H = -\frac{\lambda}{2AD} |Q|Q.$$

Diese Gleichungen werden in der Literatur häufig als *Water Hammer Equations* bezeichnet; siehe Abreu et al. (1999). Wenn wir jetzt die zeitlichen Effekte in der Impulsgleichung vernachlässigen, so erhalten wir das sogenannte quasi-stationäre Modell

$$\partial_t H + \frac{c^2}{gA} \partial_x Q = 0,$$

$$gA \partial_x H = -\frac{\lambda}{2AD} |Q|Q.$$
(9.12)

Vernachlässigen wir zusätzlich auch noch in der ersten Gleichung die zeitlichen Effekte – wir gehen also wieder zum stationären Fall über, den wir bisher betrachtet haben – so erhalten wir

$$\frac{c^2}{gA}\partial_x Q = 0,$$

$$gA\partial_x H = -\frac{\lambda}{2AD}|Q|Q.$$
(9.13)

Jetzt folgt aus der ersten Gleichung, dass Q(x) = Q = const gilt und wir können die zweite Gleichung explizit lösen und erhalten schließlich

$$H_{\rm in} - H_{\rm out} = \frac{\lambda L}{2gA^2D}Q|Q|. \tag{9.14}$$

Diese Gleichung entspricht genau dem vorne verwendeten Modell (9.7).

Detaillierte Information über die Herleitung solcher Modellhierarchien findet man beispielsweise in Hante et al. (2017), wo auch die verwandten Fälle von Gas- und Abwassernetzen diskutiert werden. Weitere Information zur Simulation und Optimierung von Wassernetzen findet man außerdem in dem Buch von Martin et al. (2012).

9.4 Projekt: Optimale Dimensionierung von Wassernetzen

In diesem Projekt geht es darum, dass sie erste Erfahrungen mit der praktischen Modellierung, Implementierung und Lösung von gemischt-ganzzahligen nichtlinearen Problemen (MINLPs) sammeln. Dazu werden sie das in diesem Kapitel betrachtete Problem der optimalen Dimensionierung von Wassernetzen implementieren und lösen.

Für die Modellierung von MINLPs benutzt man typischerweise sogenannte Modellierungssprachen. Die beiden wichtigsten kommerziellen Softwarepakete in diesem Bereich sind GAMS (siehe *GAMS – A Users Guide* 1988) und AMPL; siehe Fourer et al. (2002). Beide Pakete stellen eine Möglichkeit dar, Optimierungsmodelle auf eine Art und Weise zu implementieren, die der mathematischen Darstellung von Optimierungsproblemen sehr nahe kommt. Eine weitere Alternative ist Pyomo; vgl. Hart et al. (2011, 2012). Hierbei handelt es sich um ein Open-Source-Paket zur Modellierung von Optimierungsproblemen in Python. Alle genannten Pakete bieten Schnittstellen zu vielen modernen Lösern, so dass das Modell nach seiner Implementierung direkt gelöst werden kann.

Die Daten zur Kalibrierung der hier diskutierten Wassernetzmodelle sind in GAMS gegeben und wir konzentrieren uns daher auf dieses Paket, von dem man sich unter

http://gams.com/download/

auch eine freie Version mit reduziertem Umfang an Funktionalitäten herunterladen kann.

Bei der Installation von GAMS werden sie auch dazu aufgefordert, für jede in GAMS nutzbare Modellklasse einen Standardlöser festzulegen. Für die hier wichtige Problemklasse der MINLPs empfehlen wir den freien Open-Source-Löser SCIP; siehe Achterberg (2009), Gleixner et al. (2018).

Sie können sich die GAMS-Daten für einige Wassernetzdimensionierungsprobleme hier

https://www.minlp.org

unter dem Paket "Optimal Design of Water Distribution Networks" als Teil der "MINLP Library" herunterladen. Diese Netze wurden auch in den wissenschaftlichen Publikationen Bragalli et al. (2006, 2008, 2012) genutzt. Implementieren Sie das MINLP-Modell (9.11) in GAMS und lösen sie die oben erwähnten Instanzen.

Aufgaben

Aufgabe 9.1 Beweisen Sie, dass die nichtlinearen Flussschranken (9.4) zu einer nichtkonvexen zulässigen Menge führen.

Aufgabe 9.2 Leiten Sie die stationäre Lösung (9.14) aus den stationären Water-Hammer-Gleichungen (9.13) her.

Literatur

- Abreu, J., Cabrera, E., Izquierdo, J., & García-Serra, J. (1999). Flow modeling in pressurized systems revisited. *Journal of Hydraulic Engineering*, 125(11), 1154–1169. https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9429(1999)125:11(1154).
- Achterberg, T. (2009). SCIP: Solving Constraint Integer Programs. *Mathematical Programming Computation*, 1(1), 1–41. https://doi.org/10.1007/s12532-008-0001-1. ISSN: 1867-2957.
- Bragalli, C., D'Ambrosio, C., Lee, J., Lodi, A., & Toth, P. (2006). An MINLP solution method for a water network problem. In Y. Azar & T. Erlebach (Hrsg.), *Algorithms ESA 2006: Bd. 4168. Lecture notes in computer science* (S. 696–707). Heidelberg: Springer. https://doi.org/10.1007/11841036 62. ISBN: 978-3-540-38875-3.
- Bragalli, C., D'Ambrosio, C., Lee, J., Lodi, A., & Toth, P. (2008). Water network design by MINLP. Research Report RC24495 (W0802-056), IBM Research Division.
- Bragalli, C., D'Ambrosio, C., Lee, J., Lodi, A., & Toth, P. (2012). On the optimal design of water distribution networks: A practical MINLP approach. *Optimization and Engineering*, 13(2), 219– 246.
- Fourer, R., Gay, D. M., & Kernighan, B. W. (2002). *AMPL: A modeling language for mathematical programming* (2. Aufl.). Duxbury Press, Brooks & Cole Publishing Company.
- GAMS A Users Guide (1988). Redwood City: Scientific Press.
- Gleixner, A., Bastubbe, M., Eifler, L., Gally, T., Gamrath, G., Gottwald, R. L., Hendel, G., Hojny, C., Koch, T., Lübbecke, M. E., Maher, S. J., Miltenberger, M., Müller, B., Pfetsch, M. E., Puchert, C., Rehfeldt, D., Schlösser, F., Schubert, C., Serrano, F., Shinano, Y., Viernickel, J. M., Walter, M., Wegscheider, F., Witt, J. T., & Witzig, J. (2018). The SCIP optimization suite 6.0. Technical report. http://www.optimizationonline.org/DB_HTML/2018/07/6692.html.
- Hante, F. M., Leugering, G., Martin, A., Schewe, L., & Schmidt, M. (2017). Challenges in optimal control problems for gas and fluid flow in networks of pipes and canals: From modeling to industrial applications. In P. Manchanda, R. Lozi, & A. H. Siddiqi (Hrsg.), *Industrial mathematics and complex systems: Emerging mathematical models, methods and algorithms* (S. 77–122). Singapore: Springer. https://doi.org/10.1007/978-981-10-3758-0_5. ISBN: 978-981-10-3758-0.
- Hart, W. E., Watson, J. P., & Woodruff, D. L. (2011). Pyomo: Modeling and solving mathematical programs in Python. *Mathematical Programming Computation*, *3*(3). https://doi.org/10.1007/s12532-011-0026-8, ISSN: 1867-2957.
- Hart, W. E., Laird, C. D., Watson, J. P., Woodruff, D. L., Hackebeil, G. A., Nicholson, B. L., & Siirola, J. D. (2012). Pyomo-optimization modeling in python (Bd. 67). New York: Springer.
- Martin, A., Klamroth, K., Lang, J., Leugering, G., Morsi, A., Oberlack, M., Ostrowski, M., & Rosen, R. (2012). *Mathematical optimization of water networks*. Basel: Birkhäuser. https://doi.org/10.1007/978-3-0348-0436-3.



Gemischt-ganzzahlige nichtlineare Optimierungsprobleme (MINLPs)

10

Zusammenfassung

In diesem Kapitel führen wir gemischt-ganzzahlige nichtlineare Optimierungsprobleme (MINLPs) ein und diskutieren klassische Verfahren zu ihrer Lösung. Wie wir im vorherigen Kapitel gesehen haben, treten solche Optimierungsprobleme z. B. dann auf, wenn wir die Physik eines Versorgungsnetzes hinreichend genau modellieren wollen. Wir geben dabei einen Überblick über Branch-and-Bound, Outer Approximation sowie Spatial Branching und diskutieren außerdem mehrere Techniken zur Berechnung von Unter- und Überschätzern von nichtkonvexen Funktionen. Die Standardprogramme zur Lösung von MINLPs verwenden im Kern die Techniken dieses Kapitels. Leider reichen diese Methoden aber oft nicht aus, um in die für die Praxis relevanten Größenordnungen von MINLPs vorzustoßen, die wir zur Lösung realistischer Versorgungsnetze benötigen. Sie bilden aber den Maßstab für die spezialisierten Verfahren, die wir in den nächsten Kapiteln diskutieren.

Wir haben in den vorherigen Kapiteln gesehen, dass wir zur Modellierung von Optimierungsproblemen für Versorgungsnetze sowohl nichtlineare Nebenbedingungen als auch ganzzahlige Entscheidungen berücksichtigen müssen. Die Nichtlinearität wird dabei vor allem für die Modellierung der Flussphysik benötigt. Später werden uns aber auch noch nichtlineare Modelle für technische Elemente in Versorgungsnetzen begegnen. Die Ganzzahligkeit entsteht durch Entscheidungen wie Leitungsausbauten, An- und Abschalten von Anlagen, etc. Die Klasse von Problemen, die es uns erlaubt, diese beiden Aspekte abzudecken, sind die gemischt-ganzzahligen nichtlinearen Optimierungsprobleme (oder kurz MINLP für "mixedinteger nonlinear program").

Wir betrachten hier MINLPs in der folgenden Standardform:

$$\min_{x \in \mathcal{I}} f(x, z) \tag{10.1a}$$

s.t.
$$c_i(x, z) \le 0, \quad i \in \mathcal{I},$$
 (10.1b)

$$(x, z) \in P, \tag{10.1c}$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad z \in \mathbb{Z}^m.$$
 (10.1d)

Dabei sind f und die c_i , $i \in \mathcal{I}$, nichtlineare Funktionen, an die wir später noch Voraussetzungen stellen werden. Die Indexmenge \mathcal{I} der Ungleichungen ist, wie schon in Kap. 4, wieder endlich. Wir nehmen an, dass die Menge P ein Polytop, d. h. ein beschränktes Polyeder, ist. Diese Annahme kann man abschwächen: Für die beiden im Folgenden diskutierten Algorithmen reicht es, wenn die Menge der zulässigen ganzzahligen Punkte beschränkt ist. Wenn wir diese schwächere Beschränktheitsannahme allerdings nicht treffen, ist das Zulässigkeitsproblem für (10.1) Turing-vollständig, d. h. unentscheidbar. Dies folgt aus der Unlösbarkeit von Hilberts zehntem Problem; siehe z. B. die Diskussion in Köppe (2012). Die Kernideen der folgenden Algorithmen treten aber deutlicher hervor, wenn wir annehmen, dass P beschränkt ist. Daher treffen wir diese stärkere Annahme.

Wir werden im Folgenden einige Lösungsverfahren für MINLPs kennenlernen. Dazu diskutieren wir in diesem Kapitel nur die Grundlagen. Viele der Themen werden ausführlich im Übersichtsartikel von Belotti et al. (2013) oder dem Sammelband von Lee und Leyffer (2012) behandelt. Einige Themen in diesem Kapitel, speziell in Abschn. 10.2, fallen auch in den Bereich der *globalen Optimierung*. Wer mehr zu diesem Teilgebiet der Optimierung erfahren möchte findet ausführliche Diskussionen z. B. in Stein (2017) oder Horst und Tuy (2013).

10.1 Konvexe MINLPs

Wir betrachten zunächst eine verhältnismäßig beherrschbare Klasse von MINLPs, die sogenannten *konvexen MINLPs*. Diese Bezeichnung ist etabliert, aber leider etwas irreführend. Es ist nicht gemeint, dass das gesamte Problem konvex ist, sondern nur, dass in unserer Standardform (10.1) sowohl die Zielfunktion f als auch die Nebenbedingungen c_i , $i \in \mathcal{I}$, konvexe Funktionen sind. Das bedeutet, dass das nach Weglassen aller Ganzzahligkeitsbedingungen resultierende Problem konvex ist.

10.1.1 Branch-and-Bound

Die Konvexität der Zielfunktion und Nebenbedingungen erlaubt es uns nun, einen klassischen und sehr mächtigen Algorithmus anzuwenden: Branch-and-Bound.

Konvexe MINI Ps 127 10.1

Dabei werden wir sogenannte Relaxierungen des Problems lösen, bei denen wir die Schranken der ganzzahligen Variablen verändern. Dafür schreiben wir unser Problem (10.1) ein wenig um, indem wir die Schranken an die ganzzahligen Variablen explizit darstellen. Dies ist keine Einschränkung, da wir vorher angenommen haben, dass P beschränkt ist. Die leicht modifizierte Form unseres Problems lautet daher

$$\min_{x,z} \quad f(x,z) \tag{10.2a}$$

s.t.
$$c_i(x, z) < 0, \quad i \in \mathcal{I},$$
 (10.2b)

$$(x, z) \in P, \tag{10.2c}$$

$$l \le z \le u,\tag{10.2d}$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad z \in \mathbb{Z}^m,$$
 (10.2e)

mit endlichen Schranken $-\infty < l \le u < \infty$. Die Kernidee von Branch-and-Bound ist es, Schranken an den Zielfunktionswert durch Relaxierungen unseres MINLPs zu berechnen. Dabei nutzen wir aus, dass das relaxierte Problem einfacher zu lösen ist als das Ausgangsproblem. Was aber meinen wir eigentlich formal mit Relaxierung?

Definition 10.1 (Relaxierung). Sei

$$\min_{x} f(x) \tag{10.3a}$$

s.t.
$$x \in \Omega$$
 (10.3b)

ein gegebenes Optimierungsproblem. Dann heißt

$$\min_{x} g(x) \tag{10.4a}$$
s.t. $x \in \Omega'$ (10.4b)

s.t.
$$x \in \Omega'$$
 (10.4b)

Relaxierung von Problem (10.3), wenn $\Omega \subseteq \Omega'$ und $g(x) \leq f(x)$ für alle $x \in \Omega$ gilt.

Das bedeutet, dass in einer Relaxierung die zulässige Menge größer sein darf und dass auf der ursprünglich zulässigen Menge die Zielfunktion der Relaxierung die originale Zielfunktion unterschätzt. Dies impliziert direkt das folgende Lemma.

Lemma 10.2 Sei Problem (10.3) zulässig und sei τ der optimale Zielfunktionswert des Originalproblems (10.3). Außerdem sei die Relaxierung (10.4) beschränkt. Dann existiert eine Lösung der Relaxierung (10.4) mit Zielfunktionswert τ' , so dass $\tau' < \tau$ gilt.

Ebenso gilt, dass wenn die Relaxierung (10.4) unzulässig ist, auch das Originalproblem (10.3) unzulässig ist.

Wenn die Optimallösung \bar{x} der Relaxierung (10.4) auch zulässig für das Originalproblem (10.3) ist, dann ist \bar{x} auch eine Optimallösung des Originalproblems (10.3).

In unserem Fall liegt eine bestimmte Relaxierung nahe, die einfach die Ganzzahligkeit ignoriert. Da das resultierende Problem ein rein kontinuierliches und nichtlineares Problem ist, nennt man sie die *NLP-Relaxierung*. Der Vollständigkeit halber geben wir diese auch an:

$$\min_{x,z} f(x,z) \tag{10.5a}$$

s.t.
$$c_i(x, z) \le 0, \quad i \in \mathcal{I},$$
 (10.5b)

$$(x, z) \in P, \tag{10.5c}$$

$$l < z < u, \tag{10.5d}$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad z \in \mathbb{R}^m.$$
 (10.5e)

Da wir angenommen haben, dass P beschränkt ist, folgt, dass auch diese Relaxierung beschränkt ist.

Wir schauen uns nun die zwei Hauptideen des Branch-and-Bound-Algorithmus an und verpacken sie in zwei Lemmas. Wir nehmen dabei immer an, dass f, die c_i und P fixiert sind und wir nur die Schranken l und u verändern.

Lemma 10.3 Es seien $l, u \in \mathbb{R}^m$ endlich. Ferner sei o_{NLP} der Zielfunktionswert einer Optimallösung (x^*, z^*) von (10.5) und o_{MINLP} der Zielfunktionswert von (10.2), wenn sie jeweils existieren und $+\infty$ wenn nicht. Dann gilt

$$o_{\text{NLP}} \leq o_{\text{MINLP}}$$
.

Wenn zusätzlich (x^*, z^*) zulässig für das MINLP (10.2) ist, dann ist (x^*, z^*) bereits eine Optimallösung des MINLPs (10.2).

Dieses Lemma ist eine direkte Anwendung von Lemma 10.2 auf unseren Spezialfall. Es erlaubt uns, Schranken an den Zielfunktionswert anzugeben und – wenn die Lösung der Relaxierung schon ganzzahlig ist – auf Optimalität zu schließen. Die nächste Beobachtung formalisiert, was beim Runden einer gebrochenen Variable zu beachten ist.

Lemma 10.4 Es seien $l, u \in \mathbb{R}^m$ endlich. Ferner sei $z \in \mathbb{Z}^m$ zulässig für (10.2) mit Schranken l und u. Sei nun $i \in \{1, ..., m\}$ mit $l_i \le s \le u_i$ und $s \notin \mathbb{Z}$. Dann ist z für genau eines der folgenden Probleme zulässig:

- 1. (10.2) mit Schranken l und \underline{u} oder
- 2. (10.2) mit Schranken \bar{l} und u,

10.1 Konvexe MINLPs 129

wobei

$$\bar{l}_j = \begin{cases} l_j, & j \neq i, \\ \lceil s \rceil, & \text{sonst,} \end{cases}$$

und

$$\underline{u}_j = \begin{cases} u_j, & j \neq i, \\ \lfloor s \rfloor, & \text{sonst,} \end{cases}$$

für $j = 1, \ldots, m$.

Die Aussagen der beiden letzten Lemmas ergeben zusammen auch den Namen des Verfahrens: "Branch-and-Bound". Das Lemma 10.3 erlaubt uns den Zielfunktionswert zu beschränken ("bound") und Lemma 10.4 erlaubt uns das Problem in Teilprobleme zu zerlegen ("branch").

Das Branch-and-Bound-Verfahren ist formal in Algorithmus 1 dargestellt. Hier gehen wir wie folgt vor. Wir halten eine aktuelle obere Schranke ℓ an den Zielfunktionswert und eine Menge Q an aktiven Subproblemen vor. Die Subprobleme können wir dabei eindeutig mit den Werten für die Schranken l und u identifizieren. Zunächst initialisieren wir Q mit den Schranken l und u init die Schranken des Originalproblems setzen und initialisieren ℓ auf $+\infty$, um anzuzeigen, dass wir noch keine zulässige Lösung des Problems gefunden haben (Zeile 1).

In der Schleife des Algorithmus wählt man nun ein Subproblem aus Q (Zeile 3) und löst es (Zeile 4). Wenn das gewählte Subproblem unzulässig ist, können wir es direkt verwerfen und mit dem nächsten Subproblem fortfahren (Zeile 5). Wenn die Zielfunktion des Subproblems nicht besser ist als unsere Schranke ℓ , können wir es, wegen Lemma 10.3, ebenfalls verwerfen und mit dem nächsten Subproblem fortfahren (Zeile 7). Betrachten wir nun die Lösung (\bar{x}, \bar{z}) des Subproblems. Wenn \bar{z} ganzzahlig ist, wissen wir, dass wir einen Punkt gefunden haben, der für unser Ausgangsproblem (10.2) zulässig ist. Da er außerdem einen besseren Zielfunktionswert als alle bisher gefundenen Lösungen hat, können wir ℓ aktualisieren, merken uns diese Lösung (Zeile 9) und fahren mit dem nächsten Subproblem fort. Es bleibt der Fall, dass die Relaxierung zwar einen besseren Zielfunktionswert liefert als die aktuelle beste bekannte Lösung, aber die Relaxierungslösung nicht ganzzahlig ist. In diesem Fall verwenden wir Lemma 10.4 und teilen unser Problem in zwei Subprobleme auf. Wir wählen eine Variable z_i , die einen gebrochenen Wert in der aktuellen Lösung hat (Zeile 12) und runden diesen Wert einmal auf und einmal ab. Dadurch erhalten wir zwei Subprobleme, die wir zu unserer Menge Q hinzufügen (Zeile 13).

Wenn wir nun alle Probleme in Q abgearbeitet haben, gibt es zwei Fälle. Entweder haben wir im Verlauf des Algorithmus zulässige Lösungen gefunden oder nicht. Im ersten Fall ist die beste gefundene Lösung optimal, im zweiten Fall ist unser Problem unzulässig. Dies folgt wieder aus einer Kombination der Lemmas 10.3 und 10.4. Wir fassen das Ergebnis in einem Satz zusammen.

```
1 Setze \ell \leftarrow +\infty und Q \leftarrow \{(l^{\text{init}}, u^{\text{init}})\}
 2 while Q \neq \emptyset do
        Wähle (l, u) aus Q.
 3
        Q \leftarrow Q \setminus \{(l, u)\} und löse (10.5) mit l und u.
 5
        if (10.5) ist unzulässig then next
        Setze (\bar{x}, \bar{z}) auf die Optimallösung von (10.5).
 6
        if f(\bar{x}, \bar{z}) > \ell then next
 7
 8
        if \bar{z} ist ganzzahlig then
             Setze (x^*, z^*) \leftarrow (\bar{x}, \bar{z}) und \ell \leftarrow f(x^*, z^*).
10
        end
11
12
        Wähle i mit \bar{z}_i \notin \mathbb{Z}.
        Q \leftarrow Q \cup \{(l, u), (\bar{l}, u)\}.
13
14 end
15 if \ell < \infty then
16 | return optimaler Punkt (x^*, z^*)
17 else
18 return "unzulässig"
19 end
```

Algorithmus 1 : Nichtlineares Branch-and-Bound. Die verwendete Notation ist identisch mit der aus Lemma 10.3 und 10.4

Satz 10.5 Man betrachte das MINLP (10.2) mit endlichen Schranken (l, u). Wenn die Relaxierung (10.5) mit diesen Schranken beschränkt ist, ist Algorithmus 1 korrekt und terminiert. Das heißt, es werden endlich viele Subprobleme gelöst und nach Abschluss des Algorithmus wird das Ausgangsproblem entweder korrekt als unzulässig erkannt oder es wird eine Optimallösung ausgegeben.

Damit haben wir einen ersten Algorithmus zur Lösung konvexer MINLPs. Es gibt einige Punkte, die wir hier nicht diskutieren, die aber durchaus entscheidend sind, um ein für die Praxis gutes Verfahren zu erhalten. Dazu zählt u.a. die Wahl des nächsten Subproblems ("node selection") in Zeile 3 und die Wahl der zu rundenden Variable ("branching rule") in Zeile 12. Diese beiden Themen werden z.B. in Belotti et al. (2013) diskutiert. Für eine Diskussion von branching rules im MIP-Kontext siehe Achterberg et al. (2005).

Ein weiterer für die Praxis wichtiger Aspekt ist das sogenannte "presolve". Dabei wird jeweils vor dem Lösen des Hauptproblems und der Subprobleme das zu lösende Problem vereinfacht. Hier ist in der Praxis darauf zu achten, dass die dafür verwendeten Verfahren schnell sind. Dabei können z.B. überflüssige Variablen oder Nebenbedingungen entfernt oder Schranken an Variablen verschärft werden. Für mehr Informationen, speziell für den gemischt-ganzzahligen linearen Fall, verweisen wir auf Achterberg (2009a), Achterberg et al. (2016), Gamrath et al. (2015), Vigerske (2013).

10.1 Konvexe MINLPs 131

10.1.2 Outer Approximation

Eine mehr oder weniger belastbare Beobachtung in der Praxis ist, dass Branch-and-Bound gut funktioniert, wenn die Hauptschwierigkeit des Problems in der Nichtlinearität liegt. Hingegen verhält sich Branch-and-Bound nicht so gut, wenn die Ganzzahligkeiten das Problem schwer machen – insbesondere, wenn nur wenige Nichtlinearitäten im Problem auftauchen. Daher wurden schon früh andere Techniken entwickelt, um konvexe MINLPs mit großem ganzzahligen Anteil zu lösen. Eine sehr erfolgreiche Technik dafür ist *Outer Approximation* (Duran und Grossmann 1986). Diese nutzt aus, dass wir MIPs verhältnismäßig gut lösen können. Daher ist die Kernidee, keine NLP-, sondern MIP-Relaxierungen des Problems zu lösen. Um die Nichtlinearitäten in dieser Relaxierung zu berücksichtigen, nutzen wir geeignete lineare Ungleichungen. Diese Ungleichungen konstruieren wir durch das Lösen eines NLPs, in dem die wir die ganzzahligen Variablen fixiert haben. In der Darstellung des Algorithmus und speziell der Behandlung von Unzulässigkeit orientieren wir uns dabei an dem Artikel von Fletcher und Leyffer (1994).

Wir betrachten eine Reformulierung unseres Ausgangsproblems (10.1). Dabei schieben wir die Zielfunktion f unter Verwendung einer Hilfsvariablen η in die Nebenbedingungen:

$$\min_{x,z,\eta} \eta \tag{10.6a}$$

$$s.t. \quad f(x, z) \le \eta, \tag{10.6b}$$

$$c_i(x, z) \le 0, \quad i \in \mathcal{I},$$
 (10.6c)

$$(x, z) \in P, \tag{10.6d}$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad z \in \mathbb{Z}^m.$$
 (10.6e)

Wir nehmen im Folgenden zusätzlich an, dass die Funktionen f und c_i stetig differenzierbar sind. Für fixierte ganzzahlige Variablen \bar{z} erhalten wir das NLP

$$\min_{\mathbf{r}, \mathbf{r}} \quad \eta \tag{10.7a}$$

s.t.
$$f(x,\bar{z}) \le \eta$$
, (10.7b)

$$c_i(x,\bar{z}) \le 0, \quad i \in \mathcal{I},$$
 (10.7c)

$$(x,\bar{z}) \in P,\tag{10.7d}$$

$$x \in \mathbb{R}^n. \tag{10.7e}$$

Da dieses Problem unter unseren Annahmen konvex ist, kann man es mit Standard-NLP-Lösern typischerweise gut lösen, wenn wir eine geeignete constraint qualification annehmen. Wie bereits in Kap. 4 bemerkt, bedeutet dies, dass der sogenannte Linearisierungskegel gleich dem Tangentialkegel in der Lösung des Problems ist. In diesem Buch haben wir als konkrete constraint qualification beispielsweise die LICQ (siehe Definition 4.4) kennengelernt.

Wir nehmen zunächst an, dass das Problem (10.7) für alle ganzzahligen Punkte, die sich zu zulässigen Punkten in P ergänzen lassen, eine Lösung besitzt. Formal betrachten wir also die Menge

$$Z(P) := \{ z : \exists x \text{ mit } (x, z) \in P \}$$

und nehmen an, dass das NLP (10.7) für alle $\bar{z} \in Z(P)$ zulässig ist. Das heißt, wir nehmen zunächst an, dass die ganzzahlige Zulässigkeit nicht von den nichtlinearen Nebenbedingungen abhängt. Dies ist zum Beispiel der Fall, wenn nur die Zielfunktion f unseres Ausgangsproblems (10.1) nichtlinear ist. Wenn wir nun eine zulässige Lösung $(\bar{x}, \bar{z}, \bar{\eta})$ des Problems (10.7) betrachten, können wir daraus folgende Ungleichungen herleiten, die für alle Lösungen des Problems (10.6) gültig sind.

Lemma 10.6 Sei $(\bar{x}, \bar{\eta})$ eine Optimallösung des NLPs (10.7) für die Fixierung \bar{z} . Dann gelten für alle Lösungen des Ausgangsproblems (10.6) die Ungleichungen

$$\begin{split} &f(\bar{x},\bar{z}) + \nabla f(\bar{x},\bar{z})^{\top} \begin{pmatrix} x - \bar{x} \\ z - \bar{z} \end{pmatrix} \leq \eta, \\ &c_i(\bar{x},\bar{z}) + \nabla c_i(\bar{x},\bar{z})^{\top} \begin{pmatrix} x - \bar{x} \\ z - \bar{z} \end{pmatrix} \leq 0 \quad \text{für alle} \quad i \in \mathcal{I}. \end{split}$$

Wenn zusätzlich das NLP (10.7) eine constraint qualification erfüllt, gilt für alle x mit $(x, \bar{z}) \in P$, dass alle Punkte, die die linearisierten Nebenbedingungen erfüllen, keinen besseren Zielfunktionswert erlauben. Formal gilt also

$$\begin{split} c_i(\bar{x},\bar{z}) + \nabla c_i(\bar{x},\bar{z})^\top \begin{pmatrix} x - \bar{x} \\ z - \bar{z} \end{pmatrix} &\leq 0 \quad \text{für alle} \quad i \in \mathcal{I} \\ \Longrightarrow \nabla f(\bar{x},\bar{z})^\top \begin{pmatrix} x - \bar{x} \\ z - \bar{z} \end{pmatrix} &\geq 0. \end{split}$$

Beweis Wir beweisen hier nur den ersten Teil, da wir für den zweiten Teil zu sehr in die Details zu constraint qualifications gehen müssten. Hierfür verweisen wir auf Fletcher und Leyffer (1994).

Sei $(\bar{x}, \bar{\eta})$ eine zulässig Lösung des Problems (10.7) zur Fixierung \bar{z} und sei (x, z, η) eine zulässige Lösung des Problems (10.6). Da f konvex ist, folgt aus Lemma 4.15

$$\nabla f(\bar{x}, \bar{z})^{\top} \begin{pmatrix} x - \bar{x} \\ z - \bar{z} \end{pmatrix} \le f(x, z) - f(\bar{x}, \bar{z}).$$

Da aber (x, z, η) ein zulässiger Punkt des Problems (10.6) ist, gilt auch $f(x, z) \le \eta$. Daraus folgt die Behauptung. Analog folgt die Behauptung über die Nebenbedingungen.

10.1 Konvexe MINLPs 133

Wir sehen, dass die Ungleichungen aus dem letzten Lemma lineare Ungleichungen sind. Die Idee ist nun, dass wir aus diesen Ungleichungen eine MIP-Relaxierung konstruieren. Es seien dazu $(x^1, z^1), \ldots, (x^N, z^N)$ Punkte, die wir als Optimallösungen des Problems (10.7) für verschiedene Fixierungen $z^j, j \in [N] := \{1, \ldots, N\}$, erhalten haben. Wir betrachten alle Ungleichungen, die wir wie oben konstruiert haben und bekommen so die MIP-Relaxierung

$$\min_{x,z,\eta} \quad \eta \tag{10.8a}$$

s.t.
$$f(x^j, z^j) + \nabla f(x^j, z^j)^\top \begin{pmatrix} x - x^j \\ z - z^j \end{pmatrix} \le \eta$$
 für alle $j \in [N]$, (10.8b)

$$c_i(x^j, z^j) + \nabla c_i(x^j, z^j)^\top \begin{pmatrix} x - x^j \\ z - z^j \end{pmatrix} \le 0 \quad \text{für alle} \quad i \in \mathcal{I}, \ j \in [N],$$
 (10.8c)

$$(x, z) \in P, \tag{10.8d}$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad z \in \mathbb{Z}^m,$$
 (10.8e)

unseres MINLPs (10.6). In diesem Zusammenhang ist jetzt vor allem die folgende Frage interessant: Unter welchen Bedingungen ist diese Relaxierung "exakt", d.h., wann liefert sie die gleichen Lösungen wie unser Ausgangsproblem? Wenn wir einen unserer Punkte (x^j, z^j) in die Relaxierung einsetzen, sehen wir sofort, dass dieser Punkt zulässig sein muss und dass der Zielfunktionswert η genau mit dem Wert $f(x^j, z^j)$ übereinstimmt. Somit liefert die Relaxierung zumindest an den Punkten (x^j, z^j) den korrekten Zielfunktionswert. Wenn wir also für jeden zulässigen ganzzahligen Punkt \bar{z} eine Optimallösung des NLPs (10.7) berechnen und diese Punkte als $(x^1, z^1) \dots, (x^N, z^N)$ wählen, liefert die MIP-Relaxierung die gleichen Lösung wie unser Ausgangsproblem. Wir halten dies in einem Satz fest.

Satz 10.7 Das NLP (10.7) sei zulässig für alle $z \in Z(P)$ und erfülle eine constraint qualification. Es seien ferner $\bar{x}^1, \ldots, \bar{x}^N$ Optimallösungen des NLPs (10.7) für alle $\bar{z}^1, \ldots, \bar{z}^N \in Z(P)$. Dann ist der Optimalwert des MINLPs (10.6) gleich dem Optimalwert der MIP-Relaxierung (10.8).

Beweis Aus Lemma 10.6 folgt, dass das MIP (10.8) eine Relaxierung des MINLPs (10.6) ist. Daher reicht es zu zeigen, dass das MIP keinen besseren Zielfunktionswert haben kann. Sei also (x^*, z^*, η^*) eine Optimallösung der MIP-Relaxierung (10.8). Dann gibt es ein $j \in \{1, \ldots, N\}$, so dass $z^* = z^j$ gilt. Da $(x^*, z^* = z^j, \eta^*)$ eine zulässige Lösung der MIP-Relaxierung ist, erfüllt sie insbesondere die Ungleichungen

$$\eta^* \ge f(x^j, z^*) + \nabla f(x^j, z^*)^\top \begin{pmatrix} x^* - x^j \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$0 \ge c_i(x^j, z^*) + \nabla c_i(x^j, z^*)^\top \begin{pmatrix} x^* - x^j \\ 0 \end{pmatrix} \text{ für alle } i \in \mathcal{I}.$$

Da das NLP (10.7) zu Berechnung von x^j nach Annahme eine constraint qualification erfüllt, können wir den zweiten Teil des Lemmas 10.6 anwenden.

Es gilt

$$\nabla f(x^j, z^*)^\top \begin{pmatrix} x^* - x^j \\ 0 \end{pmatrix} \ge 0.$$

Damit folgt

$$\eta^* \ge f(x^j, z^*) + \nabla f(x^j, z^*)^\top \begin{pmatrix} x^* - x^j \\ 0 \end{pmatrix} \ge f(x^j, z^*).$$

Damit haben wir gezeigt, dass die MIP-Relaxierung (10.8) keinen besseren Zielfunktionswert haben kann als das Originalproblem (10.6). \Box

Diese Beobachtungen liefern noch keinen praktikablen Algorithmus. Wenn wir alle ganzzahligen Belegungen betrachten und dafür das NLP (10.7) lösen, haben wir bereits die Optimallösung gefunden. Wir benötigen das MIP (10.8) dann nicht. Die Idee ist nun, dass wir nacheinander immer eine weitere ganzzahlige Lösungen berechnen und die entsprechenden Ungleichungen zur Relaxierung (10.8) hinzufügen.

Bevor wir diese Idee zu einem Algorithmus ausbauen, müssen wir noch einen Sonderfall besprechen: Was machen wir, wenn sich eine ganzzahlige Belegung \bar{z} sich nicht zu einer zulässigen Lösung (\bar{x}, \bar{z}) des Problems (10.7) ergänzen lässt? In diesem Fall nutzen wir, dass die meisten NLP-Löser die Unzulässigkeit eines Problems zertifizieren, in dem sie ein Zulässigkeitsproblem lösen, um die verletzten Nebenbedingungen zu identifizieren. Dieses Zulässigkeitsproblem hat typischerweise die Form

$$\min_{x,\varepsilon} \sum_{i\in\mathcal{I}} w_i \varepsilon_i \tag{10.9a}$$

s.t.
$$c_i(x,\bar{z}) < \varepsilon_i, \quad i \in \mathcal{I},$$
 (10.9b)

$$(x,\bar{z}) \in P, \tag{10.9c}$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad 0 < \varepsilon,$$
 (10.9d)

mit Gewichten w > 0. Die Idee ist, dass wir Variablen ε_i einführen, die uns erlauben, die nichtlinearen Nebenbedingungen des Problems zu verletzen. Anstatt nun die ursprüngliche Zielfunktion zu minimieren, minimieren wir die gewichtete Summe der Verletzung der Nebenbedingung. Wenn das Zulässigkeitsproblem (10.9) eine Lösung mit Zielfunktionswert 0 hat, ist unser Ursprungsproblem zulässig und umgekehrt.

Je nach NLP-Löser werden verschiedene Strategien verfolgt, um zu identifizieren, welche Nebenbedingungen die Unzulässigkeit verursachen. Wir abstrahieren hier davon, in dem wir annehmen, dass uns der NLP-Löser im Fall von Unzulässigkeit eine Menge $\mathcal{I}^{\inf} \subseteq \mathcal{I}$, Gewichte $w \in \mathbb{R}^{\mathcal{I}^{\inf}}$ mit w>0 sowie eine Lösung des Optimierungsproblems

10.1 Konvexe MINLPs 135

$$\min_{x,\varepsilon} \sum_{i \in \mathcal{T}^{\inf}} w_i \varepsilon_i \tag{10.10a}$$

s.t.
$$c_i(x, \bar{z}) \le \varepsilon_i, \quad i \in \mathcal{I}^{\inf},$$
 (10.10b)

$$c_i(x,\bar{z}) \le 0, \quad i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{I}^{\inf},$$
 (10.10c)

$$(x,\bar{z}) \in P,\tag{10.10d}$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad 0 \le \varepsilon,$$
 (10.10e)

liefert. Für dieses Problem gilt eine zu Lemma 10.6 analoge Aussage. Nun linearisieren wir die Nebenbedingungen, die für die Unzulässigkeit notwendig sind, an einen Punkt minimaler Unzulässigkeit. Dann erhalten wir lineare Ungleichungen, die uns unzulässige Punkte unserer MIP-Relaxierung "abschneiden".

Lemma 10.8 Sei für eine ganzzahlige Belegung $\bar{z} \in Z(P)$ das NLP (10.7) unzulässig. Dann gibt es eine Menge \mathcal{I}^{inf} und Gewichte w, so dass das Zulässigkeitsproblem (10.10) eine Optimallösung $(\bar{x}, \bar{\varepsilon})$ mit $\sum_{i \in \mathcal{I}^{\text{inf}}} w_i \bar{\varepsilon}_i > 0$ besitzt. Außerdem ist $z = \bar{z}$ unzulässig bzgl. der Ungleichungen

$$\begin{split} 0 &\geq c_i(\bar{x},\bar{z}) + \nabla c_i(\bar{x},\bar{z})^\top \begin{pmatrix} x - \bar{x} \\ z - \bar{z} \end{pmatrix} & \text{für alle} \quad i \in \mathcal{I}^{\inf}, \\ 0 &\geq c_i(\bar{x},\bar{z}) + \nabla c_i(\bar{x},\bar{z})^\top \begin{pmatrix} x - \bar{x} \\ z - \bar{z} \end{pmatrix} & \text{für alle} \quad i \in \mathcal{I} \setminus \mathcal{I}^{\inf}. \end{split}$$

Für einen Beweis dieses Lemmas verweisen wir auf Fletcher und Leyffer (1994).

Wir müssen noch ein weiteres Problem ausschließen: Es muss verhindert werden, dass wir beim Lösen der MIP-Relaxierung mehrfach die gleiche ganzzahlige Belegung erhalten. Dies löst der klassische Outer-Approximation-Algorithmus in dem wir fordern, dass wir uns in jeder Iteration im Zielfunktionswert um mindestens $\varepsilon>0$ verbessern. Damit verhindern wir die Wiederholung der Ganzzahligkeit. Wir erkaufen uns dies aber damit, dass wir das Problem nur noch auf ε -Genauigkeit lösen. Da aber sowohl NLP- als auch MIP-Löser uns in der Praxis die Subprobleme inexakt lösen, ist dies ein akzeptabler Nachteil.

Mit diesen zwei Erweiterungen erhalten wir eine neue MIP-Relaxierung. Wir betrachten zwei Mengen S und T von ganzzahligen Belegungen, bei denen die zugehörigen NLPs jeweils unzulässig bzw. zulässig gelöst wurden. Ebenso berücksichtigen wir den Zielfunktionswert η^* der besten bekannten Lösung des Ausgangsproblems (10.6). Die dadurch gegebene MIP-Relaxierung lautet dann

$$\min_{x,z,n} \quad \eta \tag{10.11a}$$

s.t.
$$\eta \le \eta^* - \varepsilon$$
, (10.11b)

$$f(x^j, z^j) + \nabla f(x^j, z^j)^\top \begin{pmatrix} x - x^j \\ z - z^j \end{pmatrix} \le \eta \quad \text{für alle} \quad j \in T,$$
 (10.11c)

$$c_i(x^j, z^j) + \nabla c_i(x^j, z^j)^\top \begin{pmatrix} x - x^j \\ z - z^j \end{pmatrix} \le 0 \quad \text{für alle} \quad i \in \mathcal{I}, \ j \in T,$$
 (10.11d)

$$c_i(x^j, z^j) + \nabla c_i(x^j, z^j)^\top \begin{pmatrix} x - x^j \\ z - z^j \end{pmatrix} \le 0 \quad \text{für alle} \quad i \in \mathcal{I}, \ j \in S,$$
 (10.11e)

$$(x, z) \in P, \tag{10.11f}$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad z \in \mathbb{Z}^m.$$
 (10.11g)

Damit können wir nun den Outer-Approximation-Algorithmus (Algorithmus 2) angeben. Dabei gehen wir wie folgt vor: In jeder Iteration j lösen wir die MIP-Relaxierung (10.11). Wenn diese unzulässig ist, wissen wir, dass wir keine bessere ganzzahlige Belegung z finden können. Daher können wir in diesem Fall abbrechen (Zeile 4). Ansonsten nehmen wir die optimale ganzzahlige Belegung z^j und lösen dafür das NLP (10.7) in Zeile 6. Wenn dieses NLP zulässig ist, fügen wir die Ungleichungen aus Lemma 10.6 hinzu (Zeile 9). Sollten wir dabei eine bessere Lösung erhalten, setzen wir η^* auf den neuen Optimalwert (Zeile 11). Wenn das NLP hingegen unzulässig ist, fügen wir die Ungleichungen aus Lemma 10.8 hinzu (Zeile 17). Wenn wir keine neuen ganzzahligen Belegungen finden können, können wir die Optimallösung ausgeben bzw. Unzulässigkeit feststellen.

Die Eigenschaften dieses Verfahrens fassen wir in einem Satz zusammen.

Satz 10.9 Betrachte das MINLP (10.6). Es seien die Zielfunktion f und die Nebenbedingungen c_i für $i \in \mathcal{I}$ konvex sowie stetig differenzierbar. Zusätzlich erfülle das NLP (10.7) eine constraint qualification für alle $\bar{z} \in Z(P)$. Dann terminiert Algorithmus 2 nach endlich vielen Schritten. Wenn das Problem (10.6) unzulässig ist, stellt Algorithmus 2 dies fest. Ansonsten liefert Algorithmus 2 eine Lösung (x^*, z^*) die für das Ausgangsproblem (10.6) zulässig ist. Diese Lösung ist um höchstens ε schlechter als die Optimallösung des Ausgangsproblem (10.6).

10.2 Nichtkonvexe MINLPs

Nachdem wir uns angesehen haben, wie wir konvexe MINLPs lösen können, bleibt die Frage, was wir in dem Fall tun, in dem nach Fixieren der ganzzahligen Variablen ein nichtkonvexes NLP übrig bleibt. Nun ist es aber bereits schwer, rein kontinuierliche nichtkonvexe NLPs global optimal zu lösen. Beispielsweise ist es NP-schwer indefinite quadratische Funktionen über dem Einheitswürfel zu optimieren; siehe wieder Köppe (2012). Daher müssen wir einen Weg finden, um zusätzlich die Nichtkonvexitäten der nichtlinearen Nebenbedingungen in den Griff zu bekommen. Wir werden hierfür wieder auf die Technik aus dem vorherigen Abschnitt zurückgreifen: Branch-and-Bound. Damit wir Branch-and-Bound anwenden können, müssen wir zunächst Relaxierungen für die nichtkonvexen Nebenbedingungen konstruieren. Dazu gibt es verschiedene Methoden, die wir im Folgenden diskutieren wollen.

```
1 \eta^* \leftarrow +\infty, S \leftarrow \emptyset, T \leftarrow \emptyset
 2 for j = 1, 2, ... do
       Löse das MIP (10.11).
       if (10.11) ist unzulässig then break
        Setze z^j auf den ganzzahligen Teil der Optimallösung von (10.11).
 5
        Löse das NLP (10.7) für \bar{z} = z^j.
       if (10.7) ist zulässig then
 7
           Setze x^j auf die Optimallösung von (10.7).
 8
            T \leftarrow T \cup \{j\}
           if f(x^j, z^j) \le \eta^* - \varepsilon then
10
               \eta^* \leftarrow f(x^j, z^j)
11
               (x^*, z^*) \leftarrow (x^j, z^j)
           end
13
       else
14
15
           Löse das Zulässigkeitsproblem (10.10).
           Setze x^j auf die Optimallösung von (10.10).
16
            S \leftarrow S \cup \{i\}
17
       end
18
19 end
20 if \eta^* < \infty then
21 | return optimaler Punkt (x^*, z^*)
22 else
23 return "unzulässig"
24 end
```

Algorithmus 2 : Der Outer-Approximation-Algorithmus

Selbst ohne ganzzahlige Variablen ist dies ein eigenes Gebiet, die globale Optimierung, welches wir hier, aus Platzgründen, nur anreißen können. Für weiteres Material verweisen wir auf Bücher zur globalen Optimierung wie das Lehrbuch von Stein (2017) und die ausführliche Monographie von Horst und Tuy (2013).

Zunächst führen wir einige Begriffe ein, die uns helfen, um Relaxierungen zu analysieren.

Definition 10.10 (konvexe Unterschätzer, konkave Überschätzer, konvexe/konkave Einhüllende). Es sei $f: \Omega \to \mathbb{R}$ ein Funktion auf der konvexen Menge $\Omega \subset \mathbb{R}^n$.

- 1. Eine Funktion $\xi: \Omega \to \mathbb{R}$ heißt *konvexer Unterschätzer* von f auf Ω , wenn ξ eine konvexe Funktion ist und $\xi(x) \leq f(x)$ für alle $x \in \Omega$ gilt. Wir bezeichnen die Menge aller konvexen Unterschätzer mit $\mathcal{U}(f, \Omega)$.
- 2. Eine Funktion $\omega: \Omega \to \mathbb{R}$ heißt *konkaver Überschätzer* von f auf Ω , wenn ω eine konkave Funktion ist und $\omega(x) \geq f(x)$ für alle $x \in \Omega$ gilt. Wir bezeichnen die Menge aller konkaven Überschätzer mit $\mathcal{O}(f, \Omega)$.

3. Wir definieren die Funktion $vex_{\Omega}[f]$ wie folgt:

$$\operatorname{vex}_{\Omega}[f](x) := \sup\{\xi(x) : \xi \in \mathcal{U}(f, \Omega)\} \text{ für alle } x \in \Omega.$$

Dann heißt $vex_{\Omega}[f]$ die konvexe Einhüllende von f.

4. Wir definieren die Funktion cave $\Omega[f]$ wie folgt:

$$\operatorname{cave}_{\Omega}[f](x) := \inf\{\omega(x) : \omega \in \mathcal{O}(f, \Omega)\} \text{ für alle } x \in \Omega.$$

Dann heißt cave $\Omega[f]$ die konkave Einhüllende von f.

Wir bemerken, dass wir die konvexe Einhüllende auch alternativ wie folgt charakterisieren können: Es gilt, dass $\text{vex}_{\Omega}[f]$ den Fehler $\|f - \xi\|_{\infty}$ über allen Funktionen $\xi \in \mathcal{U}(f,\Omega)$ minimiert. Dies folgt aus der Eigenschaft von konvexen Funktionen, dass das punktweise Supremum von konvexen Funktionen wieder eine konvexe Funktion ist (siehe Boyd und Vandenberghe 2004, Abschn. 3.2.3). Diese Aussagen gelten natürlich auch analog für die konkave Einhüllende. Ein Beispiel für konvexe und konkave Einhüllende finden Sie in Abb. 10.1.

Für die spätere Verwendung in Kap. 11 geben wir hier schon einige elementare Eigenschaften der Einhüllenden an. Für Beweise dieser Resultate und mehr Details verweisen wir auf die Übersicht in Tardella (2004).

Wir benötigen vorab noch eine Definition:

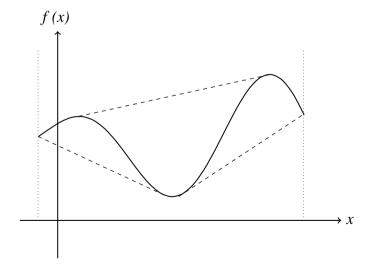


Abb. 10.1 Die konvexe und konkave Einhüllende (gestrichelt) einer nichtkonvexen Funktion (durchgezogen)

Definition 10.11 (konvexe Hülle). Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ eine Menge. Dann ist die konvexe Hülle conv Ω wie folgt definiert:

$$\operatorname{conv} \Omega := \left\{ \sum_{i=1}^{n} \lambda_{i} x_{i} : x_{i} \in \Omega, \ \lambda_{i} \geq 0 \text{ für alle } i \in \{1, \dots, n\}, \ \sum_{i=1}^{n} \lambda_{i} = 1 \right\}.$$

Die konvexe Hülle enthält also alle Punkte, die sich als Konvexkombination von Punkten aus Ω darstellen lassen. Für eine genauere Diskussion aus Optimierungssicht verweisen wir auf Boyd und Vandenberghe (2004).

Zunächst bemerken wir, dass wir bei der Berechnung von Einhüllenden affin-lineare Funktionen vernachlässigen können.

Lemma 10.12 Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine konvexe Menge und $f: \Omega \to \mathbb{R}$ sei eine Funktion auf Ω . Nehmen wir weiter an, dass $\eta: \Omega \to \mathbb{R}$ eine affine Funktion ist, dann gelten für alle $x \in \Omega$ die folgenden Gleichungen:

- 1. $\operatorname{vex}_{\Omega}[f](x) + \operatorname{vex}_{\Omega}[\eta](x) = \operatorname{vex}_{\Omega}[f + \eta](x)$,
- 2. $\operatorname{cave}_{\Omega}[f](x) + \operatorname{cave}_{\Omega}[\eta](x) = \operatorname{cave}_{\Omega}[f + \eta](x)$.

Das folgende Lemma zeigt, dass wir unter sehr milden Voraussetzungen eine konvexe Einhüllende nutzen können, um globale Minima zu berechnen.

Lemma 10.13 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine kompakte Menge und $f: \Omega \to \mathbb{R}$ stetig. Dann gilt

$$\min_{x \in \Omega} f(x) = \min_{x \in \text{conv }\Omega} \text{vex}_{\Omega}[f](x).$$

Des Weiteren sei \mathcal{M} die Menge der globalen Minima von f auf Ω und es sei \mathcal{N} die Menge der globalen Minima von vex $\Omega[f]$ über conv Ω . Dann gilt $\mathcal{N}=\operatorname{conv}\mathcal{M}$.

Das zweite Lemma gibt uns auch einen Hinweis dafür, dass das Berechnen von Einhüllenden schwer ist. Da wir mit der Einhüllenden globale Minima der Ursprungsfunktion berechnen können, muss es schwer sein, die Einhüllende zu berechnen bzw. auszuwerten. Wenn wir die untere Einhüllende einer indefiniten quadratischen Funktion einfach berechnen und auswerten könnten, könnten wir mithilfe des Lemmas 10.13 auch einfach über diese Funktion optimieren. Dies steht aber im Widerspruch dazu, dass es NP-schwer ist, eine indefinite quadratische Funktion über dem Einheitswürfel zu optimieren.

Um in der Praxis Unter- und Überschätzer zu verwenden, müssen wir zwei Ziele gegeneinander abwägen: Wir wollen einerseits gute Unter- und Überschätzer konstruieren – d.h. Funktionen, die nahe an den Einhüllenden liegen. Andererseits wollen wir sie aber auch schnell berechnen können.

Wie konstruieren wir nun konkrete Über- und Unterschätzer? Am besten, man betrachtet Spezialfälle. Der Klassiker ist die nichtkonvexe aber bilineare Funktion f(x, y) = xy. Hier gilt folgende Aussage.

Lemma 10.14 Sei w = xy und seien $x \in [\underline{x}, \overline{x}]$ und $y \in [\underline{y}, \overline{y}]$. Dann gelten die folgenden Ungleichungen:

$$w \ge \underline{y}x + \underline{x}y - \underline{x}\underline{y},$$

$$w \ge \overline{y}x + \overline{x}y - \overline{x}\overline{y},$$

$$w \le \underline{y}x + \overline{x}y - \overline{x}\underline{y},$$

$$w < \overline{y}x + xy - x\overline{y}.$$

Beweis Wir betrachten beispielhaft die erste und vierte Ungleichung:

$$0 \le (x - \underline{x})(y - \underline{y}) = xy - x\underline{y} - y\underline{x} + \underline{x}\underline{y},$$

$$0 \le (x - \underline{x})(\overline{y} - y) = x\overline{y} - xy - \underline{x}\overline{y} + \underline{x}y.$$

Die beiden anderen Ungleichungen können analog bewiesen werden.

Diese Ungleichungen sind als McCormick-Ungleichungen bekannt (McCormick 1976).

Als einen konkreten Unterschätzer für eine allgemeinere Klasse von Funktionen betrachten wir die sogenannten α -Unterschätzer (Androulakis et al. 1995; Maranas und Floudas 1994). Wir betrachten dazu eine zweimal stetig differenzierbare Funktion $f:\Omega\to\mathbb{R}$. Dabei ist $\Omega\subseteq\mathbb{R}^n$ ein Produkt von Intervallen, d.h.

$$\Omega = [\underline{x}, \bar{x}] = \prod_{i=1}^{n} [\underline{x}_i, \bar{x}_i].$$

Um eine Funktion $f: \Omega \to \mathbb{R}$ zu unterschätzen, modifizieren wir sie. Dazu addieren wir für ein $\alpha \in \mathbb{R}^n_{>0}$ die Funktion

$$\phi_{\alpha}(x) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (\underline{x}_i - x_i)(\bar{x}_i - x_i)$$

und erhalten so

$$\check{f}_{\alpha}(x) := f(x) + \phi_{\alpha}(x) = f(x) + \sum_{i=1}^{n} \alpha_i (\underline{x}_i - x_i)(\bar{x}_i - x_i).$$

Da für $\alpha \geq 0$ die Funktion $\phi_{\alpha}(x)$ immer nicht-positiv auf Ω ist, gilt offensichtlich, dass \check{f}_{α} ein Unterschätzer von f auf Ω ist. Wann aber ist \check{f}_{α} konvex? Dazu betrachten wir die

Hessematrix, also die zweite Ableitung, dieser Funktion. Es gilt

$$H_{\check{f}_{\alpha}}(x) = H_f(x) + 2\operatorname{diag}(\alpha).$$

Somit können wir ein hinreichendes Kriterium für Konvexität angeben.

Lemma 10.15 Sei λ^{\min} der kleinste Eigenwert von $H_f(x)$ auf Ω . Die Funktion \check{f}_{α} ist konvex auf Ω , wenn $\lambda^{\min} + 2 \min_i \alpha_i \ge 0$ gilt.

Beweis Wir betrachten $H_{\check{f}_{\alpha}}$. Wenn wir zeigen können, dass $H_{\check{f}_{\alpha}}(x)$ positiv semidefinit für alle $x \in \Omega$ ist, haben wir gezeigt, dass \check{f}_{α} konvex ist (siehe Abschn. 4.1). Aus der linearen Algebra wissen wir, dass für jede symmetrische Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und jeden Vektor $h \in \mathbb{R}^n$ gilt, dass

$$h^{\top} A h \geq \mu_{\min} ||h||_2^2$$

wobei μ_{\min} der kleinste Eigenwert von A ist.

Um nun zu zeigen, dass $H_{\check{f}_{\alpha}}(x)$ positiv semidefinit ist, reicht es zu zeigen, dass $h^{\top}H_{\check{f}_{\alpha}}(x)h \geq 0$ für alle $h \in \mathbb{R}^n$ gilt. Da wir wissen, dass

$$H_{\check{f}_{\alpha}}(x) = H_f(x) + 2\operatorname{diag}(\alpha)$$

gilt, erhalten wir

$$h^{\top} H_{\check{f}_{\alpha}}(x) h = h^{\top} H_{f}(x) h + 2h^{\top} \operatorname{diag}(\alpha) h$$

$$\geq \lambda_{\min} \|h\|_{2}^{2} + 2(\min_{i} \alpha_{i}) \|h\|_{2}^{2}$$

$$> 0.$$

Im Spezialfall von quadratischen Funktionen ist dieses Kriterium sehr einfach anzuwenden, da die Hessematrix konstant ist. Die Abschätzung, die wir mit diesem Kriterium erhalten, ist häufig sehr grob. Eine genauere Diskussion zur Abschätzung von α findet sich z. B. in Adjiman et al. (1998).

Wie können wir diese Unter- und Überschätzer nun ausnutzen? Wir integrieren sie in unseren Branch-and-Bound-Algorithmus von vorher. Dabei branchen wir nicht mehr nur auf den ganzzahligen Variablen, sondern auch auf den kontinuierlichen Variablen. Wenn wir eine Relaxierungslösung x^* haben, die eine nichtlineare Nebenbedingung nicht erfüllt, wählen wir eine Variable x_i , die in dieser Nebenbedingung auftaucht und unterteilen ihren zulässigen Bereich $[\underline{x}_i, \bar{x}_i]$ in die Teilmengen $[\underline{x}_i, x^*]$ und $[x^*, \bar{x}_i]$. Dieses Branching auf kontinuierlichen Variablen ist als *spatial branching* bekannt.

Unter welchen Bedingungen erhalten wir hier Konvergenz gegen eine Optimallösung? Nach dem Branchen müssen wir alle Unter- und Überschätzer aktualisieren, an denen x_i beteiligt war. Wenn die entsprechenden Unter- und Überschätzer nun die Eigenschaft haben, dass sie für kleiner werdende Intervalle gegen die wahre Funktion konvergieren, dann kann man Konvergenz zeigen. Für einen konkreten Algorithmus verweisen wir auf Stein (2017). Eine ausführliche Diskussion der Theorie findet sich in Horst und Tuy (2013).

Wir haben in diesem Kapitel eine Reihe von Techniken zur Lösung von MINLPS kennengelernt. Varianten dieser Techniken sind in Programmpaketen wie z.B. ANTIGONE (Misener und Floudas 2014), BARON (Tawarmalani und Sahinidis 2005), Bonmin (Bonami et al. 2005), Couenne (Belotti et al. 2013), SCIP (Achterberg 2009b; Gleixner et al. 2018) oder KNITRO (Byrd et al. 2006) implementiert.

Leider ist die Forschung in diesem Bereich noch nicht so weit fortgeschritten, dass wir damit routinemäßig die Probleme lösen können, die bei der Optimierung von realen Versorgungsnetzen auftreten. Da aber zur Integration von technischen und ökonomischen Aspekten MINLP-Modelle absolut zentral sind, müssen wir uns problemspezifische Techniken ansehen. Diese diskutieren wir in den beiden folgenden Kapiteln: In Kap. 11 studieren wir einen Ansatz, um MINLPs als MIPs zu reformulieren. Kap. 12 behandelt dann Verfahren, die NLP-Techniken verwenden, um die MINLPs zu lösen. Beide Verfahrensklassen haben sich als sehr mächtig beim Lösen von Versorgungsnetzproblemen gezeigt: z. B. bei Gasnetzoptimierungsproblemen, wie sie in Kap. 13 behandelt werden, oder bei den Wassernetzwerkoptimierungsproblemen aus Kap. 9.

Aufgaben

Aufgaben 10.1 Beweisen Sie Lemma 10.2.

Aufgaben 10.2 Beweisen Sie Lemma 10.3.

Aufgaben 10.3 Betrachten Sie das MINLP

$$\min_{x} 0$$
s.t.
$$\sum_{i=1}^{n} \left(x_{i} - \frac{1}{2} \right)^{2} \le \frac{n-1}{4},$$

$$x \in \{0, 1\}^{n}$$

aus Bonami et al. (2005). Beweisen Sie, dass dies ein konvexes MINLP ist und dass das Problem für alle *n* unzulässig ist. Analysieren Sie, wie viele Schritte die folgenden Verfahren benötigen, um dieses Problem zu lösen:

Literatur 143

- 1. Nichtlineares Branch-and-Bound und
- 2. Outer Approximation.

Aufgaben 10.4 Beweisen Sie, dass das Problem (10.6) genau dann eine zulässige Lösung hat, wenn das Problem (10.9) eine Optimallösung mit Zielfunktionswert 0 hat.

Aufgaben 10.5 Beweisen Sie Lemma 10.12.

Aufgaben 10.6 Beweisen Sie Lemma 10.13. Überlegen Sie sich dazu zunächst einen möglichst einfachen Unterschätzer der Funktion f und leiten Sie daraus eine untere Schranke für $\text{vex}_{\Omega}[f](x)$ her.

Literatur

- Achterberg, T. (2009a). Constraint integer programming. Dissertation, TU Berlin.
- Achterberg, T. (2009b). SCIP: Solving Constraint Integer Programs. *Mathematical Programming Computation*, *I*(1), 1–41. https://doi.org/10.1007/s12532-008-0001-1. ISSN: 1867-2957.
- Achterberg, T., Bixby, R. E., Gu, Z., Rothberg, E., & Weninger, D. (2016). *Presolve reductions in mixed integer programming*.
- Achterberg, T., Koch, T., & Martin, A. (2005). Branching rules revisited. *Operations Research Letters*, 33(1), 42–54. https://doi.org/10.1016/j.orl.2004.04.002. ISSN: 0167-6377.
- Adjiman, C. S., Dallwig, S., Floudas, C. A., & Neumaier, A. (1998). A global optimization method, αBB, for general twice differentiable constrained NLPs-I. Theoretical advances. *Computers & Chemical Engineering*, 22(9), 1137–1158.
- Androulakis, I. P., Maranas, C. D., & Floudas, C. A. (1995). αBB: A global optimization method for general constrained nonconvex problems. *Journal of Global Optimization*, 7(4), 337–363. https://doi.org/10.1007/BF01099647. ISSN: 0925-5001. (State of the art in global optimization: Computational methods and applications, Princeton).
- Belotti, P., Kirches, C., Leyffer, S., Linderoth, J., Luedtke, J., & Mahajan, A. (2013). Mixed-integer nonlinear optimization. *Acta Numerica*, 22, 1–131. https://doi.org/10.1017/S0962492913000032. ISSN: 1474-0508.
- Bonami, P., Biegler, L. T., Conn, A. R., Cornuéjols, G., Grossmann, I. E., Laird, C. D., Lee, J., Lodi, A., Margot, F., Sawaya, N., & Wächter, A. (2008). An algorithmic framework for convex mixed integer nonlinear programs. *Discrete Optimization*, *5*(2), 186–204. https://doi.org/10.1016/j.disopt.2006.10.011. ISSN: 1572-5286.
- Boyd, S., & Vandenberghe, L. (2004). *Convex optimization* (S. xiv+716). Cambridge: Cambridge University Press. ISBN: 0-521-83378-7.
- Byrd, R. H., Nocedal, J., & Waltz, R. A. (2006). KNITRO: An integrated package for nonlinear optimization. In *Large scale nonlinear optimization* (S. 35–59). Springer. https://doi.org/10.1007/0-387-30065-1_4.

- Duran, M. A., & Grossmann, I. E. (1986). An outer-approximation algorithm for a class of mixed-integer nonlinear programs. *Mathematical Programming*, *36*(3), 307–339. https://doi.org/10.1007/BF02592064. (Erratum in "Erratum: An Outer-Approximation Algorithm for a Class of Mixed-Integer Nonlinear Programs". *Mathematical Programming*, *39*(3), 337. https://doi.org/10.1007/BF02592081. ISSN: 0025-5610).
- Fletcher, R., & Leyffer, S. (1994). Solving mixed integer nonlinear programs by outer approximation. *Mathematical programming*, 66A(3), 327–349. ISSN: [ISSN 0025-5610].
- Gamrath, G., Koch, T., Martin, A., Miltenberger, M., & Weninger, D. (2015). Progress in presolving for mixed integer programming. *Mathematical Programming Computation*, 7(4), 367–398.
- Gleixner, A., Bastubbe, M., Eifler, L., Gally, T., Gamrath, G., Gottwald, R.L., Hendel, G., Hojny, C., Koch, T., Lübbecke, M. E., Maher, S. J., Miltenberger, M., Müller, B., Pfetsch, M. E., Puchert, C., Rehfeldt, D., Schlösser, F., Schubert, C., Serrano, F., Shinano, Y., Viernickel, J. M., Walter, M., Wegscheider, F., Jonas T., & Witzig, J. (2018). *The SCIP Optimization Suite 6.0*. Technical Report. Optimization Online. http://www.optimizationonline.org/DB_HTML/2018/07/6692.html.
- Horst, R., & Tuy, H. (2013). *Global optimization: Deterministic approaches*. New York: Springer Science & Business Media.
- Köppe, M. (2012). On the complexity of nonlinear mixed-integer optimization. In J. Lee & S. Leyffer (Hrsg.), *Mixed integer nonlinear programming: Bd. 154. The IMA volumes in mathematics and its applications* (S. 533–557). New York: Springer. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-1927-3_19. ISBN: 978-1-4614-1926-6.
- Lee, J., & Leyffer, S. (Hrsg.). (2012). Mixed integer nonlinear programming: Bd. 154. The IMA volumes in mathematics and its applications. New York: Springer. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-1927-3. ISBN: 978-1-4614-1926-6.
- Maranas, C. D., & Floudas, C. A. (1994). Global minimum potential energy conformations of small molecules. *Journal of Global Optimization*, 4, 135–170.
- McCormick, G. P. (1976). Computability of global solutions to factorable nonconvex programs: Part I-Convex underestimating problems. *Mathematical Programming*, 10(1), 147–175.
- Misener, R., & Floudas, C. A. (2014). ANTIGONE: Algorithms for coNTinuous/ integer global optimization of nonlinear equations. *Journal of Global Optimization*, 59(2–3), 503–526. https://doi.org/10.1007/s10898-014-0166-2.
- Stein, O. (2017). *Grundzüge der Globalen Optimierung*. Berlin: Springer Spektrum. https://doi.org/10.1007/978-3-662-55360-2.
- Tardella, F. (2004). On the existence of polyhedral convex envelopes. In C. A. Floudas & P. M. Pardalos (Hrsg.), *Frontiers in global optimization: Bd. 74. Nonconvex optimization and its applications* (S. 563–573). Boston: Springer.
- Tawarmalani, M., & Sahinidis, N. V. (2005). A polyhedral branchand-cut approach to global optimization. *Mathematical Programming*, 103(2), 225–249. https://doi.org/10.1007/s10107-005-0581-8. ISSN: 0025-5610.
- Vigerske, S. (2013). Decomposition in multistage stochastic programming and a constraint integer programming approach to mixed-integer nonlinear programming. Dissertation Humboldt-Universität zu Berlin, Mathematisch-Naturwissenschaftliche Fakultät II. https://doi.org/10.18452/16704.



MIP-Techniken für MINLPs

Zusammenfassung

Nachdem wir im vorherigen Kapitel allgemeine Techniken zur Lösung von MINLPs gesehen haben, betrachten wir hier eine Technik, die sich speziell für Versorgungsnetze bewährt hat. Wir betrachten Relaxierungen von MINLPs durch MIPs. Wir diskutieren, wie man geeignete MIP-Relaxierungen konstruiert und wie sich diese Techniken anwenden lassen. Diese Verfahren haben sich gerade bei der Lösung von Gas- und Wassernetzproblemen als sehr mächtig erwiesen, um schnell zu Lösungen mit annehmbarer Genauigkeit zu gelangen oder Unzulässigkeit zu beweisen. Allerdings gibt es zur Zeit noch keine allgemeine Implementierung dieser Verfahren, so dass sie problemspezifisch angepasst werden müssen.

Um die MIP-Techniken für MINLPs vorzustellen gehen wir in zwei Schritten vor. Zunächst diskutieren wir, wie man stückweise lineare Funktionen in MIPs darstellen kann. Dann diskutieren wir, wie man nichtlineare Funktionen stückweise linear relaxieren kann. In der Diskussion halten wir uns eng an Geißler et al. (2012); hier findet sich auch weiterführendes Material. Weitere Informationen findet man auch in dem Übersichtsartikel von Vielma (2015).

11.1 Modellierung stückweise linearer Funktionen

Bevor wir stückweise lineare Funktionen nutzen können, um MINLPs zu lösen, diskutieren wir zunächst, wie wir stückweise lineare Funktionen als MIP modellieren können. Dabei beginnen wir mit dem eindimensionalen Fall und diskutieren dann eine Erweiterung auf höhere Dimensionen.

Es gibt eine Reihe von Modellierungsansätzen für diese Aufgabe. Wir werden hier nur einen vorstellen: die sogenannte *inkrementelle Methode* von Markowitz und Manne (1957). Für Details und einen Vergleich mit anderen Methoden verweisen wir auf Geißler et al. (2012) und Vielma (2015).

Wir nehmen im Folgenden an, dass uns eine stückweise lineare Funktion $\phi \colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ durch ihre Stützstellen (\bar{x}_i, \bar{y}_i) für $i \in \{0, \dots, n\}$ gegeben ist, wobei $\bar{x}_i < \bar{x}_j$ für i < j gilt. In unserem Fall ist ϕ eine Approximation einer nichtlinearen Funktion $f \colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, wobei wir annehmen, dass die Approximation in den Stützstellen exakt ist.

Um die Notation zu vereinfachen, nummerieren wir die Intervalle: Das Intervall zwischen den Punkten \bar{x}_{i-1} und \bar{x}_i erhält die Nummer i. Die Steigung von ϕ auf Intervall i bezeichnen wir mit \bar{h}_i , d.h. es gilt

$$\bar{h}_i = \frac{\bar{y}_i - \bar{y}_{i-1}}{\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}}.$$

Für ein gegebenes x im Intervall i können wir nun ein nichtnegatives δ_i finden, so dass $x = \bar{x}_{i-1} + \delta_i$ gilt. Der Funktionswert ist dann durch

$$y = \bar{y}_{i-1} + \bar{h}_i \delta_i$$

gegeben. Diese Darstellungen sind die Basis der inkrementellen Methode.

Wir führen eine Variable δ_i für jedes Intervall i mit Schranken $0 \le \delta_i \le \bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}$ ein. Zusätzliche Binärvariablen z_i geben an, ob $\delta_i > 0$ gilt. Wir nutzen dann diese Binärvariablen, um die sogenannte "filling condition" einzuhalten, d. h. wir fordern, dass $\delta_{i+1} > 0$ impliziert, dass δ_i an seiner oberen Schranke ist:

$$x = \bar{x}_0 + \sum_{i=1}^n \delta_i,$$

$$y = \bar{y}_0 + \sum_{i=1}^n \bar{h}_i \delta_i,$$

$$\delta_i \le (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}) z_i \quad \text{für alle} \quad i \in \{1, \dots, n\},$$

$$\delta_i \ge (\bar{x}_i - \bar{x}_{i-1}) z_{i+1} \quad \text{für alle} \quad i \in \{1, \dots, n-1\}.$$

Die Situation in einem Intervall ist in Abb. 11.1 dargestellt.

Um dieses Verfahren auf höhere Dimensionen zu übertragen, müssen wir unsere Notation noch ein wenig anpassen. Wir beginnen mit dem Definitionsbereich der Funktion. Hier nehmen wir an, dass der Definitionsbereich $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Polytop ist. Um unsere stückweise lineare Funktion ϕ zu definieren, benötigen wir den Begriff einer *Triangulierung* Δ von Ω . Wir meinen damit, dass Δ eine endliche Menge von d-dimensionalen Simplizes ist, welche die folgenden Bedingungen erfüllt: Für alle $S, T \in \Delta$ mit $S \neq T$ gilt, dass $\mathring{S} \cap \mathring{T} = \emptyset$ und $\bigcup_{S \in \Delta} S = \Omega$ gilt. Hierbei bezeichnen wir mit \mathring{S} das topologische

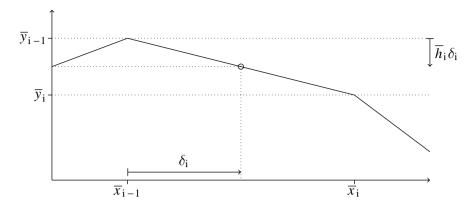
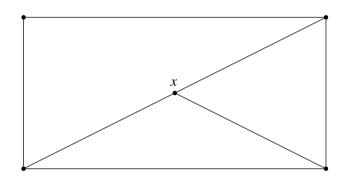


Abb. 11.1 Inkrementelle Methode. (Entnommen aus Geißler et al. 2012; mit freundlicher Genehmigung von © Springer Nature 2012. All Rights Reserved)

Abb. 11.2 Eine Triangulierung im \mathbb{R}^2 mit hängendem Knoten x



Innere von S. Wenn Ihnen in einem anderen Kontext Triangulierungen bereits begegnet sind, machen wir hier auf eine Besonderheit unserer Definition aufmerksam: Wir fordern nicht, dass Δ ein Simplizialkomplex ist, d.h., dass zwei Simplizes sich immer in einem Simplex schneiden. Unsere Definition erlaubt auch sogenannte hängende Knoten (vgl. Abb. 11.2), die sonst typischerweise ausgeschlossen werden. Es sei nun $\phi: \Omega \to \mathbb{R}$ eine stückweise lineare Funktion mit unterliegender Triangulierung Δ , d.h. ϕ ist affin auf jedem Simplex $S \in \Delta$. Um nun unsere Notation konsistent mit dem eindimensionalen Fall zu halten, verwenden wir n für die Kardinalität von Δ . Wir bezeichnen die Eckenmenge des Simplex $S \in \Delta$ mit V(S) und die Menge aller Ecken mit $V(\Delta)$, d. h., $V(\Delta) = \bigcup_{S \in \Lambda} V(S)$. Um wieder die Analogie zum eindimensionalen Fall zu unterstreichen, bezeichnen wir auch die Ecken mit \bar{x} . Wir schummeln ein wenig in unserer Notation, in dem wir für jede Ecke $v \in S$ die Koordinaten der Ecke mit \bar{x}_{v}^{S} bezeichnen; d. h. der untere Index steht nicht wie sonst für eine Koordinate, sondern für die Ecke zu dem der Vektor gehört. Um nun einen Punkt im Simplex $S \in \Delta$ zu beschreiben, fixieren wir eine Ecke s des Simplex S mit Koordinaten \bar{x}_s^S und führen Variablen δ_v^S für jede Ecke $v \in V(S) \setminus \{s\}$ ein, wobei wir $\delta_v^S \ge 0$ fordern. Da diese Konstruktion häufiger auftaucht führen wir eine Abkürzung ein: $\mathring{V}(S) = V(S) \setminus \{s\}$.

Somit können wir einen Punkt $x \in S$ und seinen Funktionswert $y = \phi(x)$ eindeutig schreiben als

$$x = \bar{x}_s^S + \sum_{v \in \hat{V}(S)} \delta_v^S (\bar{x}_v^S - \bar{x}_s^S),$$

$$y = \bar{y}_s^S + \sum_{v \in \hat{V}(S)} \delta_v^S (\bar{y}_v^S - \bar{y}_s^S)$$

mit der zusätzlichen Bedingung

$$\sum_{v \in \mathring{V}(S)} \delta_v^S \le 1.$$

Zur Illustration dieser Notation verweisen wir auf Abb. 11.3. Im eindimensionalen Fall war die Kernidee der inkrementellen Methode die filling condition: Ein neues Intervall durfte nur dann benutzt werden, wenn wir alle vorherigen Intervalle vollständig "aufgefüllt" hatten. Dies hat erstmal keine offensichtliche Verallgemeinerung im mehrdimensionalen Fall. Woher sollen wir eine Ordnung auf den Simplizes bekommen? Wir werden jetzt wie folgt vorgehen: Wir identifizieren zunächst, was eine gute Ordnung ausmacht, um dann zu überlegen, wie wir solche guten Ordnungen konstruieren können. Dafür sortieren wir die Simplizes so, dass wir von Ecke zu Ecke gehen können, d. h. Simplizes, die in der Ordnung aufeinanderfolgen, sollten immer mindestens eine Ecke gemeinsam haben. Dies ist die erste Eigenschaft einer guten Ordnung. Die zweite Eigenschaft einer guten Ordnung stellt sicher, dass wir einen Simplex nie über die gleiche Ecke betreten und auch wieder verlassen.

Wir können nun eine formale Definition einer guten Ordnung angeben. Dazu fixieren wir noch ein wenig Notation. Wir suchen eine totale Ordnung < auf den Simplizes aus Δ

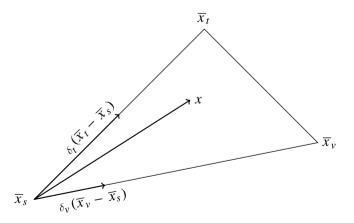


Abb. 11.3 Ein Punkt $x = \bar{x}_s + \delta_v(\bar{x}_v - \bar{x}_s) + \delta_t(\bar{x}_t - \bar{x}_s)$ in einem Dreieck. (Entnommen aus Geißler et al. 2012; mit freundlicher Genehmigung von © Springer Nature 2012. All Rights Reserved)

und wir schreiben S < T, wenn S der direkte Vorgänger von T in dieser Ordnung ist. Wir zeichnen auch zwei Ecken in jedem Simplex $S \in \Delta$ aus, wozu wir die Funktionen s(S) und t(S) verwenden.

Definition 11.1 (gute Ordnung). Sei Δ eine Triangulierung von $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Wir nennen eine Ordnung < der Simplizes in Δ *gut*, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

- (O1) Für alle $S, T \in \Delta$ mit $S \lessdot T$ gilt, dass $V(S) \cap V(T) \neq \emptyset$.
- (O2) Es gibt ausgezeichnete Ecken $s(\cdot)$ und $t(\cdot)$, so dass für alle $S, T \in \Delta$ mit S < T gilt, dass t(S) = s(T).

Ein Beispiel für eine gute Ordnung findet sich in Abb. 11.4.

Mit solch einer guten Ordnung können wir nun die filling condition verallgemeinern. Für alle Simplizes $S, T \in \Delta$ mit $S \lessdot T$ und alle Ecken $v \in \mathring{V}(T)$ fordern wir

$$\delta_v^T > 0 \implies \delta_{t(S)}^S = 1. \tag{11.1}$$

Warum ist das die richtige Verallgemeinerung? Wenn A der erste Simplex in unserer Ordnung ist, gilt für alle Simplizes $T \in \Delta$ die folgende Gleichung:

$$\bar{x}_{s(T)}^{T} = \bar{x}_{s(A)}^{A} + \sum_{\substack{U \in \Delta: \ U < T}} \left(\bar{x}_{t(U)}^{U} - \bar{x}_{s(U)}^{U} \right).$$

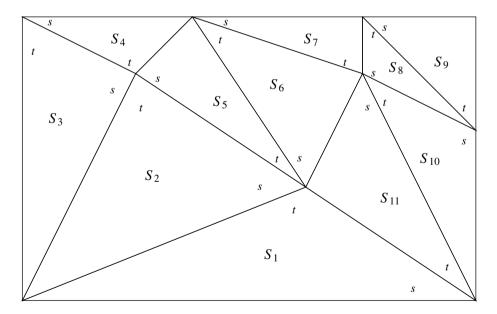


Abb. 11.4 Eine Ordnung von Dreiecken auf einem rechteckigen Definitionsbereich

Unter der Annahme, dass die filling condition (11.1) gilt, sieht unser Modell wie folgt aus:

$$x = \bar{x}_{s(A)}^A + \sum_{T \in \Delta} \sum_{v \in \mathring{V}(T)} \left(\bar{x}_v^T - \bar{x}_{s(T)}^T \right) \delta_v^T, \tag{11.2a}$$

$$y = \bar{y}_{s(A)}^{A} + \sum_{T \in \Delta} \sum_{v \in \hat{V}(T)} \left(\bar{y}_{v}^{T} - \bar{y}_{s(T)}^{T} \right) \delta_{v}^{T}, \tag{11.2b}$$

$$\sum_{v \in \mathring{V}(T)} \delta_v^T \le 1 \quad \text{für alle} \quad T \in \Delta, \tag{11.2c}$$

$$\delta_v^T \ge 0$$
 für alle $T \in \Delta, \ v \in \mathring{V}(T)$. (11.2d)

Nun müssen wir noch die filling condition modellieren. Wir können aber, da wir die Ordnung so definiert haben, direkt wie im eindimensionalen Fall vorgehen. Wir führen also Binärvariablen z_S für $S \in \Delta$ ein und erhalten

$$\sum_{v \in \mathring{V}(T)} \delta_v^T \le z_S \quad \text{für alle} \quad S, T \in \Delta, \ S \lessdot T,$$

$$z_S \le \delta_{t(S)}^S \quad \text{für alle} \quad S \in \Delta.$$
(11.3a)

$$z_S \le \delta_{t(S)}^S$$
 für alle $S \in \Delta$. (11.3b)

Die Korrektheit des Modells folgt direkt aus folgender Beobachtung:

Lemma 11.2 Für jede Lösung (x, y, z), die die Bedingungen (11.2) und (11.3) erfüllt, gilt auch: Es gibt einen Simplex $T \in \Delta$ mit

$$z_S = 1$$
 für alle $S \in \Delta$ mit $S < T$ und $z_S = 0$ für alle $S \in \Delta$ mit $S \ge T$.

Wie aber konstruieren wir Triangulierungen, die (O1) und (O2) erfüllen? Für Triangulierungen einer Kreisscheibe (und homöomorpher Mengen) hat Wilson (1998) gezeigt, dass wir immer eine gute Ordnung finden können. Wir werden hier einen algorithmischen Zugang für Dimension 3 und höher angeben. Wir benötigen zunächst ein besseres Kriterium, mit dem wir die Eigenschaften gut testen können. Wir nennen dazu eine Triangulierung Δ Facetten-adjazent, wenn es für jede Partition $\Delta = \Delta_1 \cup \Delta_2$ Simplizes $S \in \Delta_1$ und $T \in \Delta_2$ gibt, so dass $|V(S) \cap V(T)| = d$ gilt. Wir diskutieren hier, dass dies ein hinreichendes Kriterium für die Existenz einer guten Ordnung ist.

Lemma 11.3 Sei Δ eine Facetten-adjazente Triangulierung von $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ mit $d \geq 3$. Dann existiert eine Ordnung auf Δ , so dass die Bedingungen (O1) und (O2) erfüllt werden.

Um die Ordnung zu berechnen, kann man sie durch Hinzufügen von Simplizes konstruieren.

Hilfssatz 11.4 Sei Δ eine Facetten-adjazente Triangulierung in Dimension 3 oder höher und sei $\Delta_1 \subset \Delta$. Sei nun auf Δ_1 eine Ordnung der Simplizes gegeben, so dass die Bedingungen (O1) und (O2) erfüllt sind und sei $T \in \Delta \setminus \Delta_1$. Dann kann die Ordnung auf die Triangulierung $\Delta_1 \cup \{T\}$ erweitert werden.

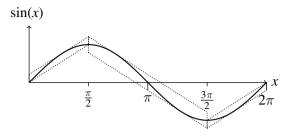
Das obige Lemma 11.3 folgt direkt aus diesem Hilfssatz. Einen Beweis des Hilfssatzes und des Lemmas findet man in Geißler (2011) und Geißler et al. (2012). Damit können wir jetzt stückweise lineare Funktionen in MIPs modellieren. Dabei haben wir aber auch gesehen, dass dies sehr aufwendig wird, wenn wir hochdimensionale Funktionen modellieren wollen. Die Anzahl der notwendigen Simplizes in der Triangulierung steigt im allgemeinen exponentiell und damit auch der Aufwand zur Lösung der entstehenden MIPs. Daher sind diese Techniken vor allem in Fällen geeignet, wo wir wir viele, aber einfache niederdimensionale nichtlineare Funktionen haben.

11.2 Stückweise lineare Relaxierungen

Bisher haben wir in diesem Kapitel diskutiert, wie wir ein- und mehrdimensionale stückweise Linearisierungen als MIP modellieren. Das löst aber nicht unser ursprüngliches Problem: Wir wollen ja eigentlich eine nichtlineare Nebenbedingung, sagen wir f(x) = 0, in unserem MIP modellieren. Die direkte Methode, um stückweise lineare Funktionen zu nutzen, ist eine stückweise lineare Näherung ϕ von f zu konstruieren und dann statt f(x) = 0 die Bedingung $\phi(x) = 0$ als MIP zu modellieren. Dies funktioniert leider bei Problemen in Versorgungsnetzen oft sehr schlecht. Der Grund dafür ist, dass in diesen Fällen die nichtlinearen Nebenbedingungen oft (diskretisierte) Erhaltungsgleichungen sind. Das heißt, sie beschreiben, dass physikalische Größen (z. B. Masse, Impuls) erhalten werden. Leider müssen wir oft die stückweise linearen Approximationen sehr grob wählen, da wir sonst den MIP-Löser überfordern. Dann passen aber häufig die Approximationen nicht zusammen; es gibt keine Werte, für die die Gleichung exakt eingehalten wird. Mit unserem Wissen aus dem vorherigen Kapitel ist aber auch klar, was die Antwort darauf ist: Wir suchen keine Approximation der nichtlinearen Funktion, sondern wir müssen eine stückweise lineare Relaxierung der Nebenbedingung wie in Abb. 11.5 konstruieren. Dies tun wir in diesem Abschnitt.

Beginnen wir mit einem Polytop $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ auf dem unsere stetige Funktion $f:\Omega \to \mathbb{R}$ definiert ist. Dieses Polytop sei trianguliert, wobei wir die Triangulierung wie im vorherigen Abschnitt mit Δ bezeichnen. Wir nehmen an, dass uns jemand eine stückweise lineare Approximation $\phi:\Omega \to \mathbb{R}$ konstruiert hat, so dass ϕ auf allen Simplizes in Δ linear ist und $\phi(x)=f(x)$ auf allen Ecken der Triangulierung Δ gilt. Wir werden hier nicht diskutieren, wie man an ein solches ϕ kommt, dies kann man z. B. in Geißler et al. (2015a) oder Morsi (2013) nachlesen. Unter diesen Annahmen können wir die Diskussion über Fehler immer auf einen Simplex $S\in\Delta$ in der Triangulierung einschränken.

Abb. 11.5 Stückweise lineare Über-/Unterschätzer von $\sin(x)$ auf $[0, 2\pi]$ mit Stützstellen $0, \pi/2, 3\pi/2, 2\pi$. (Entnommen aus Geißler et al. 2012; mit freundlicher Genehmigung von © Springer Nature 2012. All Rights Reserved)



Dabei sind die Fehlermaße, an denen wir interessiert sind, die folgenden (siehe auch Abb. 11.6):

Definition 11.5 (Linearisierungsfehler). Wir bezeichnen mit

$$\varepsilon_{\mathbf{u}}(f,\Omega) = \max\{f(x) - \phi(x) : x \in \Omega\}$$

den maximalen Unterschätzungsfehler, mit

$$\varepsilon_{\Omega}(f, \Omega) = \max \{ \phi(x) - f(x) : x \in \Omega \}$$

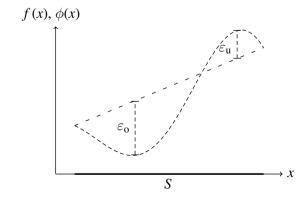
den maximalen Überschätzungsfehler und mit

$$\varepsilon(f, \Omega) = \max \{ \varepsilon_{\mathsf{u}}(f, \Omega), \varepsilon_{\mathsf{o}}(f, \Omega) \}$$

den maximalen Linearisierungsfehler von f durch ϕ auf Ω .

Wenn wir den Fehler berechnen wollen, müssen wir in der Lage sein, die Funktion f effizient über einem Simplex S zu berechnen. Warum ist das eine sinnvolle Annahme? Nun, gerade in unseren Anwendungen ist oft nicht die einzelne Funktion f das Problem, sondern dass

Abb. 11.6 Die maximale Unterschätzung $\varepsilon_{\rm u}$ und die maximale Überschätzung $\varepsilon_{\rm 0}$ von f durch ϕ auf S. (Entommen aus Geißler et al. 2012; mit freundlicher Genehmigung von © Springer Nature 2012. All Rights Reserved)



wir so viele verschiedene Funktionen haben. Wenn wir, wie in Kap. 9, jede einzelne Kante ansehen, ist die Funktion auf jeder Kante einfach zu verstehen. Sie koppelt auch nur drei Variablen pro Kante – nämlich H_v , H_w und Q_a . Die Komplexität kommt nicht aus der einzelnen Funktion, sondern aus dem Netzwerk. Daher ist die Annahme, dass wir jede einzelne Funktion gut verstehen und Optimierungsprobleme über ihr schnell lösen können, in unseren Anwendungen typischerweise gerechtfertigt.

Zunächst betrachten wir einen der einfachsten Fälle, in dem wir etwas über diese Fehler sagen können; nämlich wenn f konvex oder konkav ist.

Hilfssatz 11.6

- 1. Wenn f konvex auf S ist, dann gilt $\varepsilon_{\rm u}(f,S)=0$ und $\varepsilon_{\rm o}(f,S)$ kann durch Lösen eines konvexen Optimierungsproblems bestimmt werden.
- 2. Wenn f konkav auf S ist, dann kann $\varepsilon_{\rm u}(f,S)$ durch Lösen eines konvexen Optimierungsproblems bestimmt werden und es gilt $\varepsilon_{\rm o}(f,S)=0$.

Wenn wir den Fehler abschätzen wollen, können wir auf die Konzepte aus dem letzten Kapitel zurückgreifen. Denn dazu reichen uns Unter- und Überschätzer (siehe Definition 10.10):

Hilfssatz 11.7 Es sei $f: \Omega \to \mathbb{R}$ eine Funktion auf Ω . Dann gilt für alle $\mu \in \mathcal{U}(f, \Omega)$, dass

$$\varepsilon_0(f,\Omega) < \varepsilon_0(\mu,\Omega).$$

Und für alle $\omega \in \mathcal{O}(f, \Omega)$ gilt, dass

$$\varepsilon_{\rm II}(f,\Omega) < \varepsilon_{\rm II}(\omega,\Omega).$$

Wir können aber den Fehler auch exakt ausrechnen, wenn wir die Einhüllenden kennen.

Satz 11.8 Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ eine kompakte konvexe Menge und $f: \Omega \to \mathbb{R}$ sei stetig. Dann ist die Über- bzw. Unterschätzungsfehler wie folgt gegeben:

$$\varepsilon_{0}(f, \Omega) = \varepsilon_{0}(\text{vex}_{\Omega}[f], \Omega) \text{ und } \varepsilon_{0}(f, \Omega) = \varepsilon_{0}(\text{cave}_{\Omega}[f], \Omega).$$

Wir bezeichnen die Menge der Punkte, bei der der Unterschätzungsfehler angenommen wird, sowie die Menge der Punkte, bei denen der Unterschätzungsfehler der Einhüllenden angenommen wird, mit

$$\mathcal{M}_{\mathbf{u}} = \{ x \in S : f(x) - \phi(x) = \varepsilon_{\mathbf{u}}(f, S) \},$$

$$\mathcal{N}_{\mathbf{u}} = \{ x \in S : \operatorname{cave}_{S}[f](x) - f(x) = \varepsilon_{\mathbf{u}}(\operatorname{cave}_{S}[f], S) \}$$

und die analogen Mengen für den Überschätzungsfehler mit

$$\mathcal{M}_{o} = \{ x \in S : \phi(x) - f(x) = \varepsilon_{o}(f, S) \},$$

$$\mathcal{N}_{o} = \{ x \in S : f(x) - \text{vex}_{S}[f](x) = \varepsilon_{o}(\text{vex}_{S}[f], S) \}.$$

Dann gilt folgende Aussage:

$$\mathcal{N}_0 = \operatorname{conv} \mathcal{M}_0$$
 und $\mathcal{N}_u = \operatorname{conv} \mathcal{M}_u$.

Beweis Wir diskutieren nur den Beweis für den Überschätzungsfehler. Der Beweis für den Unterschätzungsfehler verläuft analog. Es gilt

$$\begin{split} \varepsilon_0(\operatorname{vex}_\Omega[f],\Omega) &= \max \left\{ \phi(x) - \operatorname{vex}_\Omega[f](x) : x \in \Omega \right\} \\ &= -\min \left\{ \operatorname{vex}_\Omega[f](x) - \phi(x) : x \in \Omega \right\} \\ &= -\min \left\{ \operatorname{vex}_\Omega[f](x) - \operatorname{vex}_\Omega[\phi](x) : x \in \Omega \right\} \qquad (\phi \text{ ist affin}) \\ &= -\min \left\{ \operatorname{vex}_\Omega[f - \phi](x) : x \in \Omega \right\} \qquad (\text{Lemma 10.12}) \\ &= -\min \left\{ f(x) - \phi(x) : x \in \Omega \right\} \qquad (\text{Lemma 10.13}) \\ &= \varepsilon_0(f,\Omega) \end{split}$$

Die Behauptung, dass $\mathcal{N}_{o} = \text{conv } \mathcal{M}_{o}$ gilt, folgt ebenfalls aus Lemma 10.13.

Nachdem wir jetzt den Linearisierungsfehler zumindest abschätzen, wenn nicht sogar exakt angeben können, ist die Erweiterung des Modells (11.2) zu einer Relaxierung gar nicht mehr so aufwendig. Wir beschränken uns dabei auf den Fall, dass wir die Nebenbedingung f(x) = 0 relaxieren möchten und ϕ eine sinnvolle stückweise lineare Approximation von f ist. Unser Ziel ist nun für alle $S \in \Delta$ die Nebenbedingung $-\varepsilon_0(f, S) \le \phi(x) \le \varepsilon_{\rm u}(f, S)$ zu modellieren. Dies ist nach unserer obigen Diskussion eine Relaxierung von f(x) = 0. Wenn wir nur Abschätzungen für den Unter- bzw. Überschätzungsfehler haben, bleibt dies immer noch eine Relaxierung, wenn auch eine schwächere.

Nun können wir die Techniken, die wir zur Modellierung einer stückweise linearen Funktion genutzt haben nutzen, um daraus eine stückweise lineare Relaxierung zu konstruieren. Wir führen eine neue Variable e ein und ersetzen (11.2b) durch

$$y = \bar{y}_{s(A)}^{A} + \sum_{T \in \Delta} \sum_{v \in \hat{V}(T)} \left(\bar{y}_{v}^{T} - \bar{y}_{s(T)}^{T} \right) \delta_{v}^{T} + e$$
 (11.4)

Um den Fehler zu beschränken, führen wir dann noch folgende Ungleichungen hinzu:

$$e \le \varepsilon_{\mathbf{u}}(f, A) + \sum_{\substack{S, T \in \Delta: \\ S \le T}} z_S(\varepsilon_{\mathbf{u}}(f, T) - \varepsilon_{\mathbf{u}}(f, S)),$$
 (11.5a)

$$e \leq \varepsilon_{\mathbf{u}}(f, A) + \sum_{\substack{S, T \in \Delta: \\ S < T}} z_{S}(\varepsilon_{\mathbf{u}}(f, T) - \varepsilon_{\mathbf{u}}(f, S)), \tag{11.5a}$$

$$e \geq -\varepsilon_{\mathbf{o}}(f, A) - \sum_{\substack{S, T \in \Delta: \\ S < T}} z_{S}(\varepsilon_{\mathbf{o}}(f, T) - \varepsilon_{\mathbf{o}}(f, S)). \tag{11.5b}$$

Die Korrektheit dieser Konstruktion folgt wiederum aus Lemma 11.2.

Daraus können wir nun abschätzen, wie groß der Fehler relativ zur ursprünglichen nichtlinearen Funktion ist. Da die Summen in den Ungleichungen (11.5a) und (11.5b) Teleskopsummen sind, erhalten wir direkt folgenden Satz:

Satz 11.9 Seien $x \in \Omega$ und $y \in \mathbb{R}$ gegeben. Wenn x und y die Bedingungen (11.2a), (11.4), (11.2c), (11.2d), (11.3), (11.5a), sowie (11.5b) erfüllen, gilt

$$-\varepsilon_0(f, S) \le e \le \varepsilon_0(f, S),$$

wobei S ein Simplex ist, für den $x \in S$ gilt.

Wir haben nun eine Technik, um MIP-Relaxierungen für MINLPs anzugeben, die sich hoffentlich mit Standardlösern gut lösen lassen. Dies ist insbesondere interessant, wenn wir in vielen Nebenbedingungen die gleiche Nichtlinearität vorliegen haben. Dann lässt sich die Arbeit der Bestimmung guter Approximationen – die wir hier ausgelassen haben – wiederverwenden, so dass man mit dieser Technik sehr gute problemspezifische Verfahren erhalten kann.

Wofür können wir diese Techniken verwenden? Wir können damit zum Beispiel das Wassernetzwerkdesignproblem aus Kap. 9 behandeln; für weitere Beispiele aus der Wasserwirtschaft siehe Morsi (2013) und Morsi et al. (2012). Für die Gasnetzoptimierungsprobleme in Kap. 13 wurden diese ebenfalls Techniken bereits sehr erfolgreich angewandt (siehe z. B. Geißler et al. 2015b, 2018).

Die inkrementelle Methode, die wir in diesem Kapitel in den Mittelpunkt gestellt haben, ist nicht der einzige Weg, um stückweise lineare Funktionen zu modellieren. Für weitere Techniken verweisen wir auf die bereits oben genannten Artikel Geißler et al. (2012) und Vielma (2015). Eine wichtige Technik, die wir hier nicht diskutiert haben, ist eine Modellierung von Vielma und Nemhauser (2011) sowie Vielma und Nemhauser (2008). Diese Technik erlaubt es, mit wesentlich weniger Binärvariablen auszukommen. Anstatt pro Simplex eine Binärvariable einzuführen, kommt diese Formulierung nur mit logarithmisch vielen Binärvariablen aus. Allerdings führt diese Formulierung bei Versorgungsnetzbeispielen in unserer Erfahrung zu längeren Laufzeiten, weshalb wir die Formulierung hier nicht diskutiert haben.

Man kann diese Methode auch dahingehend erweitern, dass wir die stückweise lineare Relaxierung nicht fixieren, sondern diese adaptiv verfeinern. Die Verfeinerung können wir dabei davon abhängig machen, wie groß der jeweilige Fehler ist. Dies führt zu Verfahren, die im Prinzip allgemeine MINLPs lösen können (siehe Burlacu et al. 2017, 2018; Geißler et al. 2013).

Aufgaben

Aufgabe 11.1 Beweisen Sie Lemma 11.2.

Aufgabe 11.2 Beweisen Sie Lemma 11.3 und dazu auch den Hilfssatz 11.4.

Aufgabe 11.3 Beweisen Sie die Hilfssätze 11.6 und 11.7.

Aufgabe 11.4 Berechnen Sie den Linearisierungsfehler für die lineare Approximation von x^2 auf einem Intervall [a, b].

Literatur

- Burlacu, R., Geißler, B., & Schewe, L. (2017). Solving mixed-integer nonlinear programs using adaptively refined mixed-integer linear programs. Optimization Online: 2017/05/6029 (Eingereicht).
- Burlacu, R., Egger, H., Groß, M., Martin, A., Pfetsch, M., Schewe, L., Sirvent M., & Skutella M. (2018). A global optimization approach for instationary gas transport in pipeline networks. https://opus4.kobv.de/opus4-trr154/frontdoor/index/index/docId/221 (Eingereicht).
- Geißler, B. (2011). Towards globally optimal solutions for MINLPs by discretization techniques with applications in gas network optimization. Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg.
- Geißler, B., Martin, A., Morsi, A., & Schewe, L. (2012). Using piecewise linear functions for solving MINLPs. In J. von Lee & S. Leyffer (Hrsg.), *Mixed integer nonlinear programming: Bd. 154. The IMA volumes in mathematics and its applications* (S. 287–314). New York: Springer. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-1927-3_10. ISBN: 978-1-4614-1926-6.
- Geißler, B., Morsi, A., & Schewe, L. (2013). A new algorithm for MINLP applied to gas transport energy cost minimization. In M. Jünger & G. Reinelt (Hrsg.), *Facets of Combinatorial Optimization* (S. 321–353). Berlin: Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-642-38189-8_14.
- Geißler, B., Martin, A., Morsi, A., & Schewe, L. (2015a). The MILP-relaxation approach. In T. von Koch, B. Hiller, M. E. Pfetsch, & L. Schewe. (Hrsg.), *Evaluating gas network capacities: SIAM-MOS series on optimization* (Kap. 6, S. 103–122). Philadelphia: SIAM. https://doi.org/10.1137/1. 9781611973693.ch6. ISBN: 978-1-611973-68-6.
- Geißler, B., Morsi, A., Schewe, L., & Schmidt, M. (2015b). Solving power-constrained gas transportation problems using an MIP-based alternating direction method. *Computers & Chemical Engineering*, 82, 303–317. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.07.005. ISSN: 0098-1354.

Literatur 157

Geißler, B., Morsi, A., Schewe, L., & Schmidt, M. (2018). Solving highly detailed gas transport MINLPs: Block separability and penalty alternating direction methods. *INFORMS Journal on Computing*, 30(2), 309–323. https://doi.org/10.1287/ijoc.2017.0780. ISSN: 1091-9856.

- Markowitz, H. M., & Manne, A. S. (1957). On the solution of discrete programming problems. *Econometrica*. 25, 84–110.
- Morsi, A. (2013). Solving MINLPs on loosely-coupled networks with applications in water and gas network optimization. Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg.
- Morsi, A., Geißler, B., & Martin, A. (2012). Mixed integer optimization of water supply networks. In A. von Martin, K. Klamroth, J. Lang, G. Leugering, A. Morsi, M. Oberlack, M. Ostrowski, & R. Rosen (Hrsg.), Mathematical optimization of water networks: Bd. 162. International series of numerical mathematics (S. xiv+196). Basel: Birkhäuser & Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-0348-0436-3_3. ISBN: 978-3-0348-0435-6.
- Vielma, J. P. (2015). Mixed integer linear programming formulation techniques. *SIAM Review*, *57*, 3–57. https://doi.org/10.1137/130915303.
- Vielma, J. P., & Nemhauser, G. (2008). Modeling disjunctive constraints with a logarithmic number of binary variables and constraints. In A. von Lodi, A. Panconesi, & G. Rinaldi (Hrsg.), *Integer programming and combinatorial optimization: Bd. 5035. Lecture notes in computer science* (S. 199–213). Berlin: Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-540-68891-4_14. ISBN: 978-3-540-68886-0.
- Vielma, J. P., & Nemhauser, G. (2011). Modeling disjunctive constraints with a logarithmic number of binary variables and constraints. *Mathematical Programming*, 128, 49–72. https://doi.org/10.1007/s10107-009-0295-4.
- Wilson, D. (1998). Polyhedral methods for piecewise-linear functions. Ph.D. thesis in Discrete Mathematics, University of Kentucky.



NLP-Techniken für MINLPs 12

Zusammenfassung

Diskret-kontinuierliche Optimierungsprobleme sind schwer zu lösen, weil sie sowohl ganzzahlige Variablen als auch häufig Nichtlinearitäten beinhalten. Nachdem wir im letzten Abschnitt MIP-basierte Techniken zum Lösen von MINLPs diskutiert haben, behandeln wir in diesem Kapitel NLP-basierte Techniken. Dabei gehen wir zunächst darauf ein, wie man nichtglatte Aspekte in Optimierungsmodellen durch Glättungen approximieren kann und diskutieren danach, wie Binärvariablen kontinuierlich reformuliert werden können. Ein Vorteil der in diesem Kapitel behandelten Ideen ist, dass die resultierenden Modelle typischerweise sehr effizient gelöst werden können. Der Nachteil ist, dass man in der Regel nur lokale anstelle von globalen Lösungen erhält.

In den beiden letzten Kapiteln haben wir allgemeine sowie MIP-basierte Techniken zum Lösen von MINLPs kennengelernt. Jetzt wenden wir uns NLP-Techniken für MINLPs zu. Die Idee der MIP-basierten Techniken war es, die gegebenen Nichtlinearitäten des MINLP-Modells durch stückweise Linearisierungen zu approximieren oder zu relaxieren. Das resultierende Modell ist dann ein gemischt-ganzzahlig lineares Problem. Allerdings ist durch die verwendete Linearisierungstechnik die Anzahl der kontinuierlichen Variablen, der Nebenbedingungen, und vor allem auch die Anzahl der diskreten Variablen, gestiegen. Dies ist einer der wesentlichen Nachteile MIP-basierter Ansätze zur Lösung von MINLPs: Die resultierenden MIPs sind typischerweise sehr groß und ihre Größe steigt mit der Genauigkeit der Linearisierung. Es ist daher klar, dass die MIP-basierten Ansätze von Vorteil sind, wenn das zu lösende MINLP-Modell nur wenige und/oder milde Nichtlinearitäten aufweist. Außerdem ist der Ansatz zu bevorzugen, wenn das zugrunde liegende MINLP von den Ganzzahligkeiten dominiert wird. Zuletzt sind die zur Lösung des resultierenden MIPs verwendeten Verfahren typischerweise Methoden, die global optimale Lösungen des linearisierten und damit approximierten oder relaxierten Modells liefern.

MIP-Techniken			
Pro	Kontra		
wenig/milde Nichtlinearitäten	viele/starke Nichtlinearitäten		
viele diskrete Aspekte/Anteile	lange Rechenzeiten		
globale Optimalität	approximierte Modelle		
robuste Algorithmen			
NLP-	Techniken		
Pro	Kontra		
kurze Rechenzeiten	lokale Optimalität		
viele/starke Nichtlinearitäten	wenig/milde Nichtlinearitäten		
exakte Modelle Sensitivität der Verfahren			

Tab. 12.1 Vor- und Nachteile von MIP- und NLP-basierten MINLP-Techniken

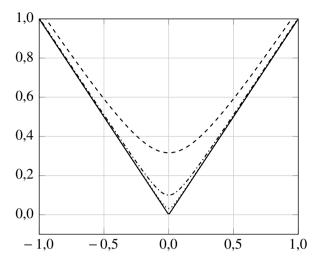
Bei MINLPs, die nur wenige ganzzahlige Aspekte aufweisen und außerdem über viele und/oder starke Nichtlinearitäten verfügen, bietet sich manchmal ein konträrer, NLP-basierter, Ansatz an. NLP-basierte Ansätze versuchen die Ganzzahligkeiten zu vermeiden bzw. mithilfe von kontinuierlichen Variablen und glatten Nebenbedingungen äquivalent zu reformulieren oder zu approximieren. Der Vorteil dieser Ansätze ist, dass die verwendeten Verfahren in der Regel deutlich schneller Lösungen liefern als MIP-Methoden. Dieser Vorteil wird allerdings teuer erkauft, da die ermittelten Lösungen typischerweise nur lokal optimal sind und die genutzten NLP-Verfahren häufig anfällig bzgl. der verwendeten Startlösungen oder der Skalierung des Modells sind. MIP-Algorithmen sind diesbezüglich deutlich robuster. Die Vor- und Nachteile der Methoden sind in Tab. 12.1 zusammengefasst.

In diesem Kapitel diskutieren wir exemplarisch Techniken, die diskrete Aspekte von MINLPs mithilfe von (zusätzlichen) kontinuierlichen Variablen und glatten Nebenbedingungen reformulieren. Die Glattheit ist insbesondere deshalb wichtig, da die resultierenden Modelle mit NLP-Algorithmen gelöst werden sollen, die in der Regel auf erste und häufig auch zweite Ableitungen angewiesen sind.

12.1 Glättung von Nichtdifferenzierbarkeiten

Häufig treten in der Praxis nichtlineare Nebenbedingungen auf, die an bestimmten Stellen nicht differenzierbar sind. Meistens hat man es dabei mit Funktionen wie zum Beispiel der Betragsfunktion, der min- oder max- Funktion zu tun. Eine Möglichkeit, diese Nichtglattheiten zu behandeln, ist die Einführung von ganzzahligen Variablen und weiteren glatten

Abb. 12.1 Glättungen der Betragsfunktion für $\varepsilon \in \{0,001,0,01,0,1\}$. Je kleiner das ε , desto besser die Approximation



Nebenbedingungen. Da die genannten Funktionen stetig sind, kann man sie aber auch glätten. Die Betragsfunktion kann beispielsweise durch

$$|x| \approx \sqrt{x^2 + \varepsilon}, \quad \varepsilon > 0,$$

approximiert werden; siehe auch Abb. 12.1. Mit dieser Glättung kann man dann auch die anderen, oben genannten, Funktionen behandeln:

$$\min(x, y) = y - \frac{1}{2}(|d| - d) \approx y - \frac{1}{2}(\sqrt{d^2 + \varepsilon} - d), \quad d := x - y,$$

$$\max(x, y) = y + \frac{1}{2}(|d| + d) \approx y + \frac{1}{2}(\sqrt{d^2 + \varepsilon} + d), \quad d := x - y,$$

$$\operatorname{sign}(x) = \frac{x}{|x|} \approx \frac{x}{\sqrt{x^2 + \varepsilon}}.$$

Andererseits kann man oftmals bessere Glättungen erzielen, wenn man noch speziellere Strukturen der zu glättenden Funktion ausnutzt. Als Beispiel betrachten wir hier die sogenannte Hazen–Williams-Gleichung

$$H_v - H_w = 10.7 \operatorname{sign}(Q_e) |Q_e|^{1.852} \frac{L_e k_e^{-1.852}}{D_e^{4.87}},$$
(12.1)

die eine in der Praxis häufig verwendete Alternative zur Druckhöhenverlust-Gleichung (9.7) aus Kap. 9 darstellt. Eine ausführlichere Diskussion dieser Gleichung findet man beispielsweise in Larock et al. (2010). Aufgrund des Terms

$$\operatorname{sign}(Q_e)|Q_e|^{1,852}$$

ist diese Nebenbedingung nicht zweimal stetig differenzierbar an der Stelle $Q_e = 0$. Wir verallgemeinern diese Situation hin zu einer allgemeinen Funktion f(x) der folgenden Bauart:

$$f(x) = \begin{cases} x^p, & x \ge 0, \\ -|x|^p, & x < 0. \end{cases}$$

In der Hazen-Williams-Gleichung ist $x=Q_e$ und p=1,852. Später werden wir bei der Betrachtung von Gasnetzen eine analoge Situation mit p=2 vorfinden. Im letzten Fall sind die Ableitungen von f gegeben durch

$$f'(x) = \begin{cases} 2x, & x \ge 0, \\ -2x, & x < 0, \end{cases} \qquad f''(x) = \begin{cases} 2, & x \ge 0, \\ -2, & x < 0. \end{cases}$$

Das heißt, f ist einmal, aber nicht zweimal stetig differenzierbar. Man sieht direkt, dass f eingeschränkt auf die beiden Flussrichtungen (d.h. für $x \ge 0$ und $x \le 0$) glatt ist. Eine auf diskreten Variablen basierende Möglichkeit der Reformulierung wäre die Einführung einer die Flussrichtung modellierenden ganzzahligen Variable, mit deren Hilfe die Hazen-Williams-Gleichung schließlich reformuliert werden kann; siehe Aufgabe 12.4.

Eine andere, NLP-basierte, Möglichkeit besteht darin, die Nichtdifferenzierbarkeit bei $Q_e=0$ zu glätten. Die Idee ist dabei, die Funktion

$$f(x) = 10.7 \operatorname{sign}(x)|x|^{1.852} \frac{Lk^{-1.852}}{D^{4.87}}$$

um 0 herum durch eine glatte Funktion g(x) zu ersetzen. Das heißt, wir definieren ein (kleines) $\delta > 0$ und ersetzen f durch

$$\hat{f}(x) = \begin{cases} g(x), & x \in [-\delta, \delta], \\ f(x), & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Frage ist, welche Bedingungen wir an g stellen müssen, um eine mindestens zweimal stetig differenzierbare Funktion \hat{f} zu konstruieren. Das heißt, für $|x| = \delta$ soll

$$f(x) = g(x), \quad f'(x) = g'(x), \quad f''(x) = g''(x)$$
 (12.2)

gelten. Da f antisymmetrisch ist, ist es sinnvoll, als Ansatzfunktion das antisymmetrische Polynom

$$g(x) = ax + bx^3 + cx^5$$

zu wählen, dessen Koeffizienten a, b, c durch (12.2) eindeutig bestimmt sind. Durch Lösen des entsprechenden Gleichungssystems erhält man (vgl. Bragalli et al. 2012)

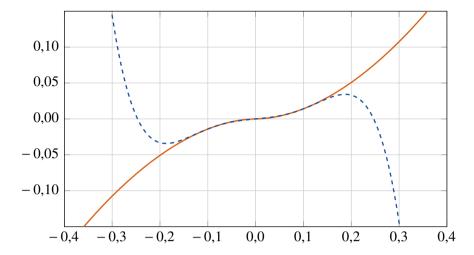


Abb. 12.2 Die Funktion $|x|^p$, p=1,852, (durchgezogen) und die Approximation (gestrichelt) für $\delta=0,1$

$$g(x) = \left(\frac{3\delta^{p-5}}{8} + \frac{1}{8}(p-1)\delta^{p-5} - \frac{3}{8}p\delta^{p-5}\right)x^{5}$$

$$+ \left(-\frac{5\delta^{p-3}}{4} + \frac{1}{4}(p-1)\delta^{p-3} + \frac{5}{4}p\delta^{p-3}\right)x^{3}$$

$$+ \left(\frac{15\delta^{p-1}}{8} + \frac{1}{8}(p-1)p\delta^{p-1} - \frac{7}{8}p\delta^{p-1}\right)x.$$
(12.3)

Man beachte, dass f'(0) = 0 gilt, wohingegen die Approximation \hat{f} diese Eigenschaft nicht erfüllt ($g'(0) \neq 0$). Abb. 12.2 zeigt die Funktion $|x|^p$ mit p = 1,852 und die Approximation für $\delta = 0,1$.

Insgesamt erhalten wir aber eine für die Praxis brauchbare glatte Approximation einer nichtglatten Formulierung.

12.2 Kontinuierliche Reformulierung von Binärvariablen

Im vorangegangenen Abschnitt haben wir uns mit der Glättung von stetigen Nichtdifferenzierbarkeiten befasst. Jetzt diskutieren wir unstetige Modellaspekte, die typischerweise aufgrund von ganzzahligen Variablen in die Modelle gelangen. Die Motivation dieses Abschnitts ist es, die Ganzzahligkeiten eines allgemeinen MINLPs der Form

$$\min_{x,z} \quad f(x,z)$$
s.t. $c_i(x,z) = 0, \quad i \in \mathcal{E},$

$$c_i(x,z) \ge 0, \quad i \in \mathcal{I},$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad z \in \mathbb{Z}^m,$$

zu reformulieren. Dabei sind die Funktionen $f, c_i : \mathbb{R}^n \times \mathbb{Z}^m \to \mathbb{R}$ (mit $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$) hinreichend glatte Funktionen. Die Mengen \mathcal{E} und \mathcal{I} mit $\mathcal{E} \cap \mathcal{I} = \emptyset$ bezeichnen dabei wieder die Indexmengen der Gleichungs- und Ungleichungsnebenbedingungen.

Eine häufig verwendete Reformulierungstechnik nutzt sogenannte NCP-Funktionen (NCP steht hierbei für "nonlinear complementarity problem"):

Definition 12.1 (NCP-Funktion). Eine bivariate Funktion $\varphi: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ heißt *NCP-Funktion*, falls sie

$$\varphi(a, b) = 0 \iff a, b \ge 0, \quad ab = 0$$

erfüllt.

Diese Funktionen haben unter anderem die Eigenschaft, dass man den zulässigen Bereich einer kontinuierlichen Variable $x \in \mathbb{R}$ auf

$$B = \{0, 1\}$$
 oder $\tilde{B} = \{0\} \cup [1, \infty)$

einschränken kann. Das prominenteste Beispiel für NCP-Funktionen ist die Fischer-Burmeister-Funktion.

Definition 12.2 (Fischer–Burmeister-Funktion). Die Funktion $\varphi : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ mit

$$\varphi(a, b) := \sqrt{a^2 + b^2} - (a + b)$$

heißt Fischer-Burmeister-Funktion.

Betrachtet man die Fischer-Burmeister-Nebenbedingungen

$$\varphi(a, b) = 0, \quad a \ge 0, \quad b \ge 0,$$

so sieht man direkt, dass der zulässige Bereich durch

$$(\{0\} \times [0, \infty)) \cup ([0, \infty) \times \{0\})$$

gegeben ist. Mithilfe der zusätzlichen Bedingung

$$a + b > 1$$
 oder $a + b = 1$

erhalten wir schließlich

$$(\{0\} \times [1, \infty)) \cup ([1, \infty) \times \{0\})$$

oder

$$\{(0,1)\} \cup \{(1,0)\},\$$

womit offensichtlich "diskretes Verhalten" modelliert ist.

Eng verbunden mit den NCP-Funktionen sind Komplementaritätsbedingungen

$$\phi(x)\psi(x) = 0, \quad \phi(x), \psi(x) \ge 0.$$
 (12.4)

Auch bei diesen Bedingungen ist es direkt ersichtlich, dass "diskretes Verhalten" modelliert werden kann. Für eine Binärvariable $z \in B$ führt man dafür zwei kontinuierliche Variablen $x, y \in \mathbb{R}$ und die zusätzlichen Komplementaritätsbedingungen

$$xy = 0, \quad x, y \ge 0, \quad y = 1 - x$$

ein. Die zulässige Menge dieser Ungleichungen ist $\{(1,0),(0,1)\}$ und wir können beispielsweise mit

$$z = 1 \leftrightarrow (x, y) = (1, 0)$$
 und $z = 0 \leftrightarrow (x, y) = (0, 1)$

die ganzzahligen Lösungen mit den kontinuierlichen identifizieren. Mit denselben zusätzlichen Bedingungen wie oben erhält man somit also auch ein Ersatzmodell für binäre Variablen.

Beide Ansätze – d.h. sowohl die NCP-Funktionen als auch die Komplementaritätsbedingungen – sind nicht unproblematisch. Da wir die resultierenden nichtlinearen Probleme mit NLP-Algorithmen lösen wollen, sollten die zu lösenden Modelle gewisse Eigenschaften erfüllen. Zwei dieser Eigenschaften sind für die vorgestellten Ansätze typischerweise verletzt:

- 1. Die beteiligten Funktionen f und c_i , $i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$, müssen stetig differenzierbar sein.
- 2. Die Nebenbedingungen müssen Regularitätsbedingungen wie z. B. die LICQ (vgl. Definition 4.4) erfüllen.

Bezüglich des ersten Punktes betrachten wir zunächst die Fischer-Burmeister-Nebenbedingung

$$\varphi(a, b) = \sqrt{a^2 + b^2} - (a + b) = 0$$

und stellen fest, dass die Ableitungen

$$\frac{\partial \varphi}{\partial a}(a,b) = \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} - 1, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial b}(a,b) = \frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} - 1$$

im Punkt (0, 0) nicht existieren. Auch andere NCP-Funktionen wie beispielsweise

$$\varphi(a, b) = \min\{a, b\}$$

sind nicht differenzierbar in (0, 0).

Betrachtet man dahingegen Komplementaritätsbedingungen der Form (12.4), so stellt man zwar einerseits fest, dass sie unendlich oft differenzierbar sind (wenn es ϕ und ψ sind). Der folgende Satz zeigt aber, dass es keinen bzgl. (12.4) zulässigen Punkt gibt, der die LICQ erfüllt.

Satz 12.3 Man betrachte das allgemeine NLP

$$\min_{x} f(x)$$
s.t. $c_i(x) = 0, \quad i \in \mathcal{E},$

$$c_i(x) \ge 0, \quad i \in \mathcal{I},$$

$$\phi(x)\psi(x) = 0, \quad \phi(x), \psi(x) > 0,$$

mit einer zusätzlichen Komplementaritätsbedingung und es sei Ω die zulässige Menge. Dann ist LICQ für keinen Punkt $x \in \Omega$ erfüllt.

Beweis Wir betrachten ausschließlich die Komplementaritätsbedingung. Da $\phi(x)\psi(x)=0$ aufgrund von $x\in\Omega$ gelten muss, sei o. B. d. A. $\phi(x)=0$ und $\psi(x)\geq0$ beliebig. Damit ist sowohl die Gleichungsnebenbedingung $\phi(x)\psi(x)=0$ als auch die Ungleichungsnebenbedingung $\phi(x)>0$ aktiv. Die zugehörigen Gradienten sind

$$\psi(x)\nabla\phi(x) + \phi(x)\nabla\psi(x) = \psi(x)\nabla\phi(x)$$
 und $\nabla\phi(x)$.

Diese beiden Vektoren sind offensichtlich linear abhängig und somit ist LICQ nicht erfüllt. □

In diesem Abschnitt haben wir also gesehen, dass man ganzzahlige Modellierungen durch alternative Modelle ersetzen kann, die ausschließlich kontinuierliche Variablen benutzen. Typischerweise gelangt man dann aber in andere Probleme – wie z.B. Nichtdifferenzierbarkeiten oder Regularitätsverluste – die man zu behandeln hat.

12.3 Reformulierungen von GDPs

Eine weitere Klasse von inhärent diskreten Problemen sind sogenannte *general disjunctive programs* (GDPs); siehe Grossmann (2002) oder Raman und Grossmann (1994). Die hier diskutierten Reformulierungen gehen insbesondere auf Stein et al. (2004) zurück. In allgemeiner Form lassen sich GDPs wie folgt formulieren:

$$\min \sum_{i \in \mathcal{C}} \gamma_{i}$$
s.t.
$$\bigvee_{i \in \mathcal{C}} \begin{pmatrix} z_{i} \\ c_{\mathcal{E},i}(x) = 0, \\ c_{\mathcal{I},i}(x) \geq 0, \\ \gamma_{i} = f_{i}(x) \end{pmatrix},$$

$$\sum_{i \in \mathcal{C}} z_{i} = 1.$$

GDP-Modelle bestehen aus sogenannten "lokalen" Nebenbedingungen und Zielfunktionen, die durch eine logische Disjunktion "ausgewählt" werden. Jeder Teil der Disjunktion wird dabei über die zugehörige Variable z_i (de)aktiviert. Wird ein Teil i nicht ausgewählt, so werden die zugehörigen Nebenbedingungen ignoriert und die entsprechenden Zielfunktionsterme $\gamma_i = 0$ gesetzt.

Man kann sich relativ leicht überlegen, dass sich jedes GDP als 0-1-MINLP darstellen lässt und umgekehrt. Damit sind die in diesem Abschnitt diskutierten Techniken also für allgemeine 0-1-MINLPs nutzbar. Die Zulässigkeit des obigen GDPs lässt sich als Teil eines MINLPs wie folgt beschreiben:

$$M(1-z_i) - c_{\mathcal{E},i}(x) \ge 0, \quad i \in \mathcal{C}, \tag{12.5a}$$

$$M(1-z_i) + c_{\mathcal{E},i}(x) \ge 0, \quad i \in \mathcal{C}, \tag{12.5b}$$

$$M(1 - z_i) + c_{\mathcal{I},i}(x) \ge 0, \quad i \in \mathcal{C}, \tag{12.5c}$$

$$\sum_{i \in \mathcal{C}} z_i = 1, \quad z_i \in \{0, 1\}, \quad i \in \mathcal{C}.$$
 (12.5d)

Hierbei ist M eine hinreichend große Zahl. Zuletzt können die Ganzzahligkeiten entfernt werden. Dazu führen wir die reellen Variablen (σ_i, τ_i) für alle $i \in \mathcal{C}$ ein und formulieren die zusätzlichen Nebenbedingungen

$$\varphi(\sigma_i, \tau_i) = 0 \quad i \in \mathcal{C}, \tag{12.6a}$$

$$\sigma_i + \tau_i = 1 \quad i \in \mathcal{C},\tag{12.6b}$$

$$\sum_{i \in C} \sigma_i = 1,\tag{12.6c}$$

wobei (12.6c) die SOS-1-Bedingung

$$\sum_{i \in \mathcal{C}} z_i = 1$$

des MINLPs ersetzt. φ ist dabei eine beliebige Funktion, die die Eigenschaft

$$\varphi(a,b) = 0 \implies a = 0 \text{ oder } b = 0$$

erfüllt. Der Ausdruck z_i kann überall durch σ_i und der Ausdruck $1 - z_i$ kann überall durch $1 - \sigma_i$ oder τ_i ersetzt werden. Insgesamt haben wir

$$(\sigma_i, \tau_i) \in \{(1, 0), (0, 1)\}\$$
 (12.7)

und es gilt

$$(\sigma_i, \tau_i) = (1, 0) \Leftrightarrow z_i = 1, \quad (\sigma_i, \tau_i) = (0, 1) \Leftrightarrow z_i = 0.$$

Manchmal reicht auch eine relaxierte Fassung von (12.7), die durch

$$\varphi(\sigma_i, \tau_i) = 0 \quad i \in \mathcal{C},$$

$$\sigma_i + \tau_i \ge 1 \quad i \in \mathcal{C},$$

$$\sum_{i \in \mathcal{C}} \sigma_i = 1,$$

erreicht werden kann; siehe auch Abb. 12.3.

Diese Techniken können verwendet werden, um eine Heuristik für MINLPs zu erhalten, bei denen alle ganzzahligen Variablen binär sind; siehe z.B. Schewe und Schmidt (2018). Problemspezifische Reformulierungen für Probleme aus dem Gastransport sind in Hante und

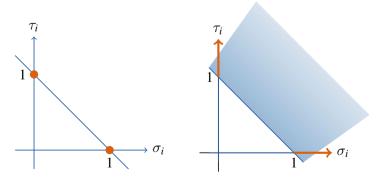


Abb. 12.3 Zulässige Mengen kontinuierlicher GDP-Reformulierungen. Entnommen aus Rose et al. (2016); lizensiert unter CC BY

Aufgaben 169

Schmidt (2017), Rose et al. (2016) und Schmidt et al. (2015) beschrieben. Der Gastransport und die dabei auftretenden Probleme sind Thema des nächsten Kapitels.

Aufgaben

Aufgabe 12.1 Angenommen, Sie sollen ein MINLP der Form

$$\min_{x,z} \quad f(x,z)$$
s.t. $c_i(x,z) = 0, \quad i \in \mathcal{E},$

$$c_i(x,z) \ge 0, \quad i \in \mathcal{I},$$

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad z \in \mathbb{Z}^m,$$

approximativ lösen. Welche Größen bzw. Dimensionen des Modells liefern Ihnen quantitative Entscheidungsmöglichkeiten für die Verwendung von NLP-basierten Techniken?

Aufgabe 12.2 In Gastransportnetzen gibt es Elemente wie Filter oder Messeinrichtungen, bei denen der Gasdruck abfällt, wenn Gas durch das Element fließt. Angenommen das Element ist eine Kante $a \in A$ in einem Graphen, der die Kantenmenge A und die Knotenmenge V hat. Der Startknoten sei $u \in V$ und der Endknoten sei $v \in V$. Das heißt, a = (u, v). Der Fluss q_a durch das Element kann positiv (Fluss von v nach v) oder negativ (Fluss von v nach v) sein. Der konstante Druckabfall $\Delta_a > 0$ erfolgt dabei immer in Flussrichtung. Die Drücke an den beiden Knoten seien p_u bzw. p_v . Das Modell lässt sich also schreiben als

$$p_u - p_v = \operatorname{sign}(q_a) \Delta_a$$
.

Formulieren Sie ein exaktes gemischt-ganzzahliges Modell und eine rein kontinuierliche und glatte Approximation für dieses Element.

Aufgabe 12.3 Betrachten Sie die folgende Situation. Es sei eine Binärvariable $y \in \{0, 1\}$ gegeben, die anzeigt, ob eine andere kontinuierliche Variable $x \in \mathbb{R}$ nicht-negativ (im Fall von y = 0) oder beliebig (im Fall von y = 1) sein soll. Formulieren Sie dieses Modell mit nur einer Gleichungsnebenbedingung.

Aufgabe 12.4 Betrachten Sie die Hazen-Williams-Gleichung (12.1) und reformulieren Sie das Modell mithilfe einer binären Variable, die die Flussrichtung in dem entsprechenden Wasserrohr modelliert. Die zu formulierenden Nebenbedingungen sollen dabei die Eigenschaft haben, dass sie für fixierte ganzzahlige Variablen zweimal stetig differenzierbar sind.

Aufgabe 12.5 Bei der glatten Approximation (12.3) der Hazen–Williams-Gleichung kann man die Genauigkeit der Approximation um 0 herum steuern, in dem man δ variiert: Kleinere δ führen zu genaueren Approximationen. Was ist der Nachteil sehr kleiner Werte für δ ?

Aufgabe 12.6 Zeigen Sie, dass die Fischer-Burmeister-Funktion eine NCP-Funktion ist.

Aufgabe 12.7 Wir haben in diesem Kapitel die Fischer–Burmeister-Funktion und die min-Funktion als Beispiele für NCP-Funktionen kennengelernt? Überlegen Sie sich oder recherchieren Sie weitere NCP-Funktionen.

Aufgabe 12.8 Betrachten Sie die Nebenbedingungen

$$xy = 0, \quad x, y \ge 0$$

und zeigen Sie, dass die MFCQ für keinen zulässigen Punkt (x^* , y^*) erfüllt ist. Falls Sie diese Bedingung noch nicht kennen sollten, finden Sie sie in (fast) jedem Buch zur nichtlinearen Optimierung wie zum Beispiel in Nocedal und Wright (2006) oder Geiger und Kanzow (2002).

Aufgabe 12.9 Versuchen Sie ein big-*M* anzugeben, so dass die GDP-Reformulierung (12.5) korrekt ist.

Aufgabe 12.10 Es sei die Formulierung in (12.6) gegeben, wobei wir $\varphi(\sigma_i, \tau_i) = \sigma_i \tau_i$, $i \in \mathcal{C}$, wählen. Es sei $(\sigma_i^*, \tau_i^*)_{i \in \mathcal{C}}$ eine zulässige Lösung. Beweisen oder widerlegen Sie, dass die LICQ in diesem Punkt erfüllt ist.

Literatur

Bragalli, C., D'Ambrosio, C., Lee, J., Lodi, A., & Toth, P. (2012). On the optimal design of water distribution networks: A practical MINLP approach. *Optimization and Engineering*, 13(2), 219–246. https://doi.org/10.1007/s11081-011-9141-7. ISSN: 1389-4420.

Geiger, C., & Kanzow, C. (2002). *Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben*. Berlin: Springer. ISBN: 9783540427902.

Grossmann, I. E. (2002). Review of nonlinear mixed-integer and disjunctive programming techniques. *Optimization and Engineering*, *3*(3), 227–252. https://doi.org/10.1023/A:1021039126272. ISSN: 1389-4420 (Special issue on mixed-integer programming and its applications to engineering).

Hante, F. M., & Schmidt, M. (2017). Complementarity-based nonlinear programming techniques for optimal mixing in gas networks. Techn. Ber. http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2017/09/6198.html (Eingereicht).

Larock, B. E., Jeppson, R. W., & Watters, G. Z. (2010). *Hydraulics of pipeline systems*. Boca Raton: CRC Press.

Nocedal, J., & Wright, S. J. (2006). *Numerical Optimization* (2. Aufl). Berlin: Springer. https://doi.org/10.1007/978-0-387-40065-5.

Raman, R., & Grossmann, I. E. (1994). Modeling and computational techniques for logic based integer programming. *Computers & Chemical Engineering*, *18*(7), 563–578. https://doi.org/10.1016/0098-1354(93)E0010-7.

Literatur 171

Rose, D., Schmidt, M., Steinbach, M. C., & Willert, B. M. (2016). Computational optimization of gas compressor stations: MINLP models versus continuous reformulations. *Mathematical Methods of Operations Research*, 83(3), 409–444. https://doi.org/10.1007/s00186-016-0533-5. ISSN: 1432-2994

- Schewe, L., & Schmidt, M. (2018). Computing feasible points for binary MINLPs with MPECs. *Mathematical Programming Computation*. https://doi.org/10.1007/s12532-018-0141-x.
- Schmidt, M., Steinbach, M. C., & Willert, B. M. (2015). An MPEC based heuristic. In T. von Koch, B. Hiller, M. E. Pfetsch, & L. Schewe (Hrsg.), *Evaluating gas network capacities: SIAMMOS series on optimization* (Kap. 9, S. 163–180). Philadelphia: SIAM. https://doi.org/10.1137/1.9781611973693. ch9.
- Stein, O., Oldenburg, J., & Marquardt, W. (2004). Continuous reformulations of discrete-continuous optimization problems. *Computers & Chemical Engineering*, 28(10), 1951–1966. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2004.03.011.



Gasnetzwerke 13

Zusammenfassung

In diesem letzten Kapitel modellieren wir Optimierungsprobleme für Gastransportnetzwerke. Ähnlich wie bei Wassernetzen gibt es sowohl diskrete Entscheidungen als auch Nichtlinearitäten im Modell. Die Nichtlinearitäten kommen unter anderem wieder aus den Differentialgleichungen, die den Gasfluss in Rohren beschreiben. Wir diskutieren insbesondere, wie man diese Differentialgleichungen in ein endlich-dimensionales Modell integrieren kann. Des Weiteren sind die in diesem Kapitel diskutierten Modelle die komplexesten, da wir die bisher größte Anzahl an unterschiedlichen Netzelementen modellieren. Dies soll abschließend einen Einblick geben, welche Komplexität zu bewältigen ist, um für reale Versorgungsnetze praxistaugliche Optimierungsmodelle zu entwickeln.

In diesem letzten Kapitel befassen wir uns mit der Modellierung und Optimierung von Gastransportnetzwerken. Damit haben wir, mit den zuvor behandelten Verkehrs-, Stromund Wassernetzen, einen großen Teil der wichtigsten Versorgungsnetze behandelt.

Die Betrachtung der Gasnetzwerke steht dabei nicht ohne Grund am Ende dieses Buches. Aufgrund der hohen Anzahl an verschiedenen Netzelementen und ihrer anspruchsvollen technisch-physikalischen Modellierung eignen sich Gasnetze sehr gut, um die hohe Komplexität realer Problemstellungen aus dem Bereich der Optimierung von Versorgungsnetzen zu veranschaulichen.

Zunächst leiten wir in Abschn. 13.1 eine mathematische Modellierung der technischphysikalischen Aspekte des Gastransports her. Für diese Beschreibung wird es aber noch nicht direkt möglich sein, sie in ein endlich-dimensionales Optimierungsmodell zu integrieren. Dies liegt insbesondere an den die Gasflussmodellierung dominierenden Differentialgleichungen, für die wir in Abschn. 13.2 entsprechende Modellierungstechniken diskutieren. 174 13 Gasnetzwerke

Es sei außerdem angemerkt, dass sich auf der Basis der hier vorgestellten technischphysikalischen Modelle auch Optimierungsmodelle zur Beantwortung von Fragen des Marktdesigns aufstellen lassen. Die im Gasmarkt gegebenen Regeln führen aus mathematischer Sicht auf weitaus kompliziertere Fragestellungen als im Strommarkt und werden hier nicht diskutiert. Ein Problem – insbesondere im Vergleich zu den in Kap. 7 diskutierten DC-Modellen – ist die inhärente Nichtlinearität von Gasflussmodellen. Dies führt u. a. dazu, dass die KKT-Bedingungen nicht mehr hinreichend sind – was aber häufig eine entscheidende Voraussetzung für die Modellierung von Märkten ist. Eine ausführliche Diskussion dazu findet sich beispielsweise in Grimm et al. (2018a). Aufgrund ihrer Bedeutung in der Praxis sind diese Aspekte aber Gegenstand aktueller Forschung; vgl. beispielsweise Grimm et al. (2018b) und Schewe et al. (2018), wo ein mathematisches Modell des europäischen Gashandels hergeleitet und analysiert wird.

13.1 Allgemeine Problembeschreibung

Wie die bisherigen Versorgungsnetze modellieren wir auch Gasnetze als gerichtete Graphen G=(V,A) mit Knotenmenge V und Kantenmenge A. Die Knotenmenge ist hier weiter partitioniert in die Menge der Einspeisestellen (Entries) V_+ , an denen Gas in das Netz eingespeist wird, in die Menge der Ausspeisestellen (Exits) V_- , an denen Gas ausgespeist wird, und in die Menge der restlichen, innere Knoten genannten, Knoten V_0 . Die Kantenmenge besteht aus der Menge der

- Rohre A_{pi} (engl. *pipes*),
- Kurzschlüsse A_{sc} (engl. short cuts),
- Widerstände A_{rs} (engl. resistors),
- Schieber A_{va} (engl. valves),
- Regler A_{cv} (engl. control valves) und
- Verdichter A_{cm} (engl. *compressor machines*).

An dieser Stelle sei angemerkt, dass man nicht alle diese technischen Elemente zwangsläufig als Kanten modellieren muss. Häufig werden in der Literatur beispielsweise Schieber, Regler oder Verdichter auch als Knoten modelliert.

Tab. 13.1 fasst alle Knoten- und Kantentypen zusammen. In Abb. 13.1 sieht man eine schematische Darstellung des sogenannten H-Gas-Netzes des Erdgastransporteurs Open Grid Europe GmbH. Die Anzahl der entsprechenden Netzelemente sind in Tab. 13.2 gegeben. Das Ziel dieses Kapitels ist es, dass wir am Ende in der Lage sind, Netze wie in Abb. 13.1 mit ihren unterschiedlichen technischen Elementen zu modellieren.

Legen wir los. Gasfluss in Gastransportnetzen wird im Wesentlichen durch den Massenfluss q und die Leistung P sowie durch die drei Zustandsgrößen Druck p, Temperatur T und Dichte ρ beschrieben. Der Zusammenhang der Zustandsgrößen wird durch eine

Knoten-/Kantentyp	Bezeichnung
Knoten	$V = V_+ \cup V \cup V_0$
Einspeisestellen	V_{+}
Ausspeisestellen	V_{-}
Innere Knoten	V_0
Kanten	$A = A_{pi} \cup A_{sc} \cup A_{rs} \cup A_{va} \cup A_{cv} \cup A_{cm}$
Rohre	$A_{ m pi}$
Kurzschlüsse	$A_{ m SC}$
Widerstände	$A_{ m rs}$
– Flussabhängig	$A_{ m nl-rs}$
- Konstant	$A_{ m lin-rs}$
Schieber	$A_{ m va}$
Regler	A_{cv}
Verdichter	$A_{ m cm}$

Tab. 13.1 Knoten- und Kantentypen in Gasnetzen

sogenannte Zustandsgleichung beschrieben. Wir verwenden im Folgenden die thermodynamische Standardgleichung

$$\rho R_{s} z T = p, \tag{13.1}$$

wobei R_s die spezifische Gaskonstante und z der Realgasfaktor ist. Letzterer beschreibt die Abweichung von realem zu idealem Gas, die wir mit der Formel von Papay modellieren:

$$z(p,T) = 1 - 3.52(p/p_c)e^{-2.26T/T_c} + 0.247(p/p_c)^2 e^{-1.878T/T_c}.$$
 (13.2)

Die Formel von Papay ist nur eine von vielen Möglichkeiten, den Realgasfaktor zu approximieren. Weitere Modelle findet man z. B. in Fügenschuh et al. (2015) und Schmidt et al. (2014, 2015). Einige Realgasfaktor-Darstellungen als Funktion vom Druck p für feste Temperaturen T findet man in Abb. 13.2. Die Größen p_c und T_c sind der pseudokritische Druck und die pseudokritische Temperatur. Für beide pseudokritischen Größen nehmen wir an, dass sie konstant sind. Dies ist eine Approximation der Realität, da diese Größen in Wirklichkeit von der konkreten chemischen Zusammensetzung des Gases abhängen.

Wie immer interpretieren wir positive Flüsse auf den Kanten $a=(v,w)\in A$ mit einem Fluss in Kantenrichtung; d. h., $q_a>0$ gilt, wenn Gas von v nach w fließt und $q_a<0$ gilt, wenn das Gas von w nach v fließt. Neben der üblichen δ -Notation benötigen wir noch die zusätzlichen Mengen

$$\mathcal{I}_{v}(q_{A}) := \{ a \in \delta^{\text{in}}(v) : q_{a} \ge 0 \} \cup \{ a \in \delta^{\text{out}}(v) : q_{a} \le 0 \},$$

$$\mathcal{O}_{v}(q_{A}) := \{ a \in \delta^{\text{in}}(v) : q_{a} < 0 \} \cup \{ a \in \delta^{\text{out}}(v) : q_{a} > 0 \}$$

der flussspezifisch ein- bzw ausgehenden Kanten eines Knotens v.

176 13 Gasnetzwerke

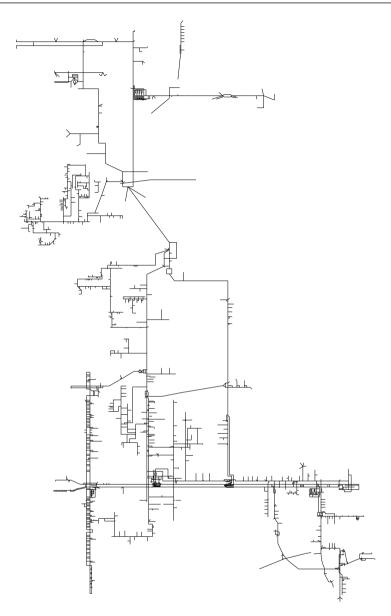


Abb. 13.1 Eine schematische Darstellung des H-Gas-Netzes von Open Grid Europe GmbH. (Entnommen aus Geißler et al. 2015; mit freundlicher Genehmigung von © Elsevier AG 2015. All Rights Reserved)

Entries	45
Exits	429
Innere Knoten	2261
Rohre	1747
Kurzschlüsse	511
Widerstände	557
Schieber	545
Regler	145
Verdichterstationen	41
Verdichter	104

Tab. 13.2 Die Netzelemente und deren Anzahl im Netz aus Abb. 13.1

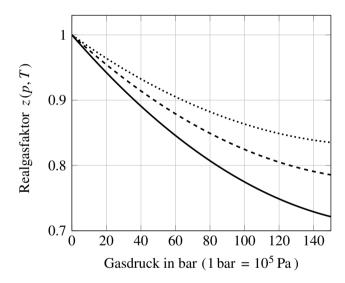


Abb. 13.2 Der Realgasfaktor z mit der Papay-Gleichung (13.2) für unterschiedliche Gastemperaturen

Der Vollständigkeit halber finden Sie alle in diesem Kapitel verwendeten physikalischen und technischen Größen in Tab. 13.3.

13.1.1 Knoten

Wir nehmen an, dass für jeden Knoten $v \in V$ untere und obere Druckschranken, $p_v^- > 0$ und $p_v^+ \ge p_v^-$, gegeben sind, die die entsprechende Druckvariable p_v des Knotens beschränken. Das heißt, es gilt

178 13 Gasnetzwerke

Tab. 13.3 Technisch-physikalische Größen der Gasnetzmodellierung

Symbol	Bedeutung	Einheit
p	Gasdruck	Pa
T	Gastemperatur	K
ho	Gasdichte	${\rm kg}{\rm m}^{-3}$
z	Realgasfaktor	1
$z_{\mathbf{m}}$	Mittlerer Realgasfaktor	1
v	Gasgeschwindigkeit	$\mathrm{m}\mathrm{s}^{-1}$
q	Massenfluss	$kg s^{-1}$
Q	Volumenfluss	$m^3 s^{-1}$
P	Leistung	W
m	Molare Masse	kg mol ⁻¹
$H_{\rm c}$	Brennwert	$J kg^{-1}$
p_{c}	Pseudokritischer Druck	Pa
$T_{\rm c}$	Pseudokritische Temperatur	K
R	Universelle Gaskonstante	$J \mathrm{mol}^{-1} \mathrm{K}^{-1}$
$R_{\rm S}$	Spezifische Gaskonstante	$J kg^{-1} K^{-1}$
g	Erdbeschleunigung	$\mathrm{m}\mathrm{s}^{-2}$
λ	Reibungsterm	1
L	Länge eines Rohres	m
D	Durchmesser eines Rohres	m
A	Querschnittsfläche eines Rohres	m^2
k	Rauheit eines Rohres	m
S	Steigung eines Rohres	1
ζ	Widerstandsbeiwert eines Widerstands	1
ξ	Konstanter Druckverlust eines Widerstands	Pa
Δ	Druckdifferenz an einem Regler	Pa
H_{ad}	Adiabatische Veränderung der spez. Enthalpie	g Jkg ^{−1}
$\eta_{ m ad}$	Adiabatischer Wirkungsgrad	1
κ	Isentropenexponent	1
n	Drehzahl eines Verdichters	s^{-1}

$$p_v \in [p_v^-, p_v^+]$$
 für alle $v \in V$. (13.3)

Zusätzlich modellieren wir auf den Knoten die Massenerhaltung, indem wir das erste Kirchhoffsche Gesetz anwenden, d. h., es gilt

$$\sum_{a \in \delta^{\text{out}}(v)} q_a - \sum_{a \in \delta^{\text{in}}(v)} q_a = q_v \quad \text{für alle} \quad v \in V.$$
 (13.4)

Hierbei gilt $q_v \ge 0$ für Einspeisestellen $v \in V_+$, $q_v \le 0$ für Ausspeisestellen $v \in V_-$ und $q_v = 0$ für innere Knoten $v \in V_0$, an denen weder ein- noch ausgespeist wird.

13.1.2 Kanten

Für jede Kante $a \in A$ führen wir eine Massenflussvariable q_a ein, die aus technischen Gründen nach unten und oben beschränkt ist:

$$q_a \in [q_a^-, q_a^+]$$
 für alle $a \in A$. (13.5)

Im Folgenden diskutieren wir die Modelle der einzelnen Kantentypen und starten mit Gasrohren.

Rohre

Rohre $a \in A_{\rm pi}$ werden genutzt, um Gas zu transportieren. Allein zahlenmäßig dominieren sie alle weiteren Elemente in typischen Gastransportnetzen. Ein Rohr ist für unsere Modelle spezifiziert durch seine Länge L_a , seinen Durchmesser D_a und seine Rauheit k_a (der inneren Rohrwände). Wir treffen außerdem die realistische Annahme, dass die Rohre alle zylindrisch geformt sind und dass ihre Steigung s_a konstant ist. In dieser Situation beschreiben die Eulergleichungen für kompressible Fluide zusammen mit einer Energiegleichung und der gegebenen Zustandsgleichung den Gasfluss in Rohren. Dieses System von hyperbolischen partiellen Differentialgleichungen lautet in unserer Notation

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{A} \frac{\partial q}{\partial x} = 0, \tag{13.6a}$$

$$\frac{1}{A}\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{A}\frac{\partial (qv)}{\partial x} + g\rho s + \lambda(q)\frac{|v|v}{2D}\rho = 0,$$

$$(13.6b)$$

$$A\rho c_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v \frac{\partial T}{\partial x} \right) - A \left(1 + \frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \right) \frac{\partial p}{\partial t}$$

$$-Av\frac{T}{z}\frac{\partial z}{\partial T}\frac{\partial p}{\partial x} + A\rho vgs + \pi Dc_{\text{HT}}(T - T_{\text{soil}}) = 0.$$
 (13.6c)

Gl. (13.6a) ist die sogenannte Kontinuitätsgleichung (engl. *continuity equation*), Gl. (13.6b) ist die sogenannte Impulsgleichung (engl. *momentum equation*) und Gl. (13.6c) ist die

Energiegleichung (engl. energy equation). Dabei beschreibt t die Zeit und $x \in [0, L]$ die Position im Rohr. Die Größen ρ oder p sind also Funktionen in Ort und Zeit, d.h., es gilt beispielsweise p = p(x,t). Man beachte, dass dies "nur" eine zweidimensionale partielle Differentialgleichung ist, da wir die Rohre als "linienhafte" Elemente mit nur einer Raumkoordinate $x \in \mathbb{R}$ beschreiben. Eine noch genauere Modellierung würde drei Raumkoordinaten $x \in \mathbb{R}^3$ und die zeitliche Koordinate t verwenden.

Wir treffen jetzt einige vereinfachende Annahmen. Zuerst gehen wir vom dynamischen (transienten) zum stationären Fall über. Das heißt, wir vernachlässigen alle zeitabhängigen Aspekte in den Differentialgleichungen. Für die Eulergleichungen bedeutet dies, dass alle partiellen Ableitungen $\partial_t(\cdot)$ nach der Zeit verschwinden. Wir erhalten somit

$$\frac{1}{A}\frac{\partial q}{\partial x} = 0, \tag{13.7a}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial (qv)}{\partial x} + g\rho s + \lambda(q) \frac{|v|v}{2D} \rho = 0, \tag{13.7b}$$

$$A\rho c_p v \frac{\partial T}{\partial x} - Av \frac{T}{z} \frac{\partial z}{\partial T} \frac{\partial p}{\partial x} + A\rho v g s + \pi D c_{\text{HT}} (T - T_{\text{soil}}) = 0.$$
 (13.7c)

Außerdem betrachten wir hier nur den isothermen Fall, d.h. den Fall, in dem die Gastemperatur nicht als dynamische Größe, sondern als Konstante betrachtet wird. Dies macht die Energiegleichung (13.7c) überflüssig und wir erhalten das System von isothermen und stationären Eulergleichungen

$$\frac{1}{A}\frac{\partial q}{\partial x} = 0, \tag{13.8a}$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial (qv)}{\partial x} + g\rho s + \lambda(q) \frac{|v|v}{2D} \rho = 0.$$
 (13.8b)

Was sagen uns diese Gleichungen? Zunächst impliziert die vereinfachte Version (13.8a) der Kontinuitätsgleichung, dass der Fluss auf einer Kante konstant ist, d. h., das

$$\frac{1}{A} \frac{\partial q}{\partial x} = 0 \implies q(x) = q \text{ für alle } x \in [0, L]$$

gilt. Dies legitimiert die Einführung einer Massenflussvariable q_a auf den Kanten $a \in A$ des Graphen. Es bleibt damit nur noch die Impulsgleichung (13.8b). Hierbei wird der Druckgradient $\partial_x p$, d. h., die Veränderung des Druckes im Ort x, durch den sogenannten Staudruck $\partial_x (qv)/A$, durch Gravitationskräfte $g\rho s$ und durch Reibungskräfte

$$\lambda(q)\frac{|v|v}{2D}\rho$$

beschrieben. Der letzte Term ist quadratisch in der Gasgeschwindigkeit (und daher, wie wir später sehen werden, quadratisch im Massenfluss q) und dominiert den Druckgradienten. Man beachte, dass die vereinfachte Impulsgleichung noch einmal einfacher wird für den Fall horizontaler Rohre, d.h., wenn s=0 gilt:

$$\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial (qv)}{\partial x} + \lambda(q) \frac{|v|v}{2D} \rho = 0. \tag{13.9}$$

Die letzten beiden Varianten (13.8b) und (13.9) der Impulsgleichung sind "nur noch" gewöhnliche Differentialgleichungen im Ort x. Allerdings würde eine direkte Einbeziehung dieser Gleichungen zu einem Optimierungsproblem mit Differentialgleichungen und damit zu einem unendlich-dimensionalen Problem führen. In Abschn. 13.2 werden wir sehen, wie man unter Verwendung weiterer vereinfachender Annahmen oder mit Diskretisierungstechniken der Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen zu einem endlich-dimensionalen Problem gelangt. Zuvor wollen wir aber noch den Reibungsterm der Gl. (13.8b) in Massenfluss anstelle der Geschwindigkeit formulieren. Dazu nutzen wir die Gleichung

$$q = A\rho v$$

und sehen direkt, dass (13.8b) äquivalent ist zu

$$\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial (qv)}{\partial x} + g\rho s + \lambda(q) \frac{|q|q}{2A^2 D\rho} = 0.$$
 (13.10)

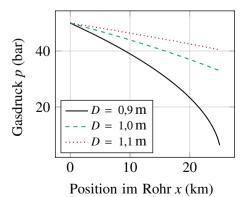
Unter Ausnutzung der Zustandsgleichung (13.1) lässt sich zuletzt noch die Dichte eliminieren und wir erhalten

$$\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial (qv)}{\partial x} + g \frac{p}{R_s z T} s + \lambda(q) \frac{|q|q}{2A^2 D} \frac{R_s z T}{p} = 0.$$
 (13.11)

Drei exemplarische Druckprofile für unterschiedliche Durchmesser eines Rohres findet man in Abb. 13.3.

Als einzige bislang nicht diskutierte Größe in dieser Gleichung verbleibt der Reibungsterm $\lambda = \lambda(q)$. Für die Reibung λ in Abhängigkeit vom Fluss gibt es viele verschiedene Modelle in der Literatur. Für einen ausführlichen Überblick verweisen wir auf Fügenschuh et al. (2015) und Schmidt et al. (2014). Diese Modelle lassen sich in erster Linie in Modelle

Abb. 13.3 Druckprofile von drei horizontalen Rohren mit $L = 25 \,\mathrm{km}, k = 0.06 \,\mathrm{mm}, q = 500 \,\mathrm{kg \, s^{-1}}$ und unterschiedlichen Durchmessern. (Entnommen aus Schmidt et al. 2014; mit freundlicher Genehmigung von © Springer Nature 2014. All Rights Reserved)



für *turbulenten* und für *laminaren* Fluss trennen, wobei diese Trennung von der sogenannten Reynoldszahl abhängt:

$$Re(q) = \frac{D}{A\eta}|q|.$$

Hier beschreibt η die dynamische Viskosität des Gases. Man klassifiziert Gasfluss als turbulent, falls $Re(q) \ge Re_{crit} \approx 2320$ gilt. Ansonsten nennt man den Fluss laminar.

Im laminaren Fall wird meistens die Formel von Hagen-Poisseuille

$$\lambda(q) = \frac{64}{Re(q)}.$$

zur Berechnung der Reibung genutzt.

Im turbulenten Fall ist die genaueste bekannte Beschreibung der Reibung gegeben durch die implizite Gleichung von *Prandtl und Colebrook:*

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda}} = -2\log_{10}\left(\frac{2.51}{Re(g)\sqrt{\lambda}} + \frac{k}{3.71D}\right).$$

Es gibt einen weiteren qualitativen Unterschied zwischen den beiden letzten Gleichungen. Die Formel von Hagen-Poisseuille gilt als eine exakte Gleichung, die aus grundlegenden physikalischen Gesetzen hergeleitet werden kann. Dahingegen ist die Gleichung von Prandtl und Colebrook eine rein empirisch motivierte Gleichung, die im Wesentlichen durch Anpassung von Parametern einer Ansatzfunktion an Messdaten entstanden ist. Für diese implizite Gleichung gibt es eine Reihe von expliziten Approximationen, wie z. B. die Gleichung nach Hofer,

$$\lambda(q) = \left(-2\log_{10}\left(\frac{4,518}{Re(q)}\log_{10}\left(\frac{Re(q)}{7}\right) + \frac{k}{3,71D}\right)\right)^{-2},$$

oder die Gleichung von Nikuradse,

$$\lambda = \left(2\log_{10}\left(\frac{D}{k}\right) + 1{,}138\right)^{-2}.$$

Letztere kann durch Grenzübergang für $Re \to \infty$ aus der Gleichung von Hofer hergeleitet werden.

Kurzschlüsse

Manchmal nutzt man, z. B. zur Modellierung vertraglich komplexer Situationen, sogenannte Kurzschlüsse $a \in A_{sc}$; siehe Abb. 13.4. Diese fiktiven Elemente können als Rohre mit Länge 0 interpretiert werden. Die entsprechende Modellgleichung lautet demnach

$$p_v = p_w$$
 für alle $a = (v, w) \in A_{sc}$.

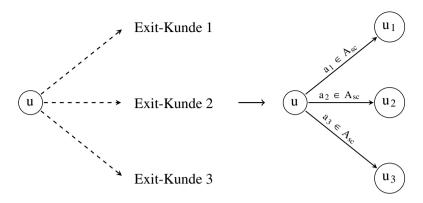


Abb. 13.4 Verwendung fiktiver Kurzschlüsse bei einem Exit-Knoten mit mehreren Kunden

Widerstände

Ein Widerstand $a \in A_{rs}$ wird bei der Modellierung von Gastransportnetzen genutzt, um Druckverluste zu beschreiben, für die entweder keine exakten physikalischen Modelle oder keine ausreichend exakten Daten vorliegen. Dies kann beispielsweise bei Filter- oder Messanlagen, aber auch bei komplexen Rohrverläufen in Verdichter- oder Reglerstationen der Fall sein. Typischerweise unterscheidet man zwei Typen von Widerständen: Widerstände $(A_{\text{lin-rs}})$ mit konstantem Druckverlust (in Flussrichtung des Gases) und Widerstände mit einem vom Massenfluss abhängigen und nichtlinearen Druckverlust $(A_{\text{nl-rs}})$. Es gilt also $A_{\text{rs}} = A_{\text{lin-rs}} \cup A_{\text{nl-rs}}$.

Der nichtlineare Typ folgt dem Gesetz von Darcy-Weisbach und ist durch die Gleichung

$$p_{\rm in} - p_{\rm out} = \frac{1}{2} \zeta \rho_{\rm in} v_{\rm in}^2,$$
 (13.12)

beschrieben, wobei $\zeta_a > 0$ der sogenannte Widerstandsbeiwert ist. Unter Ausnutzung des Zusammenhangs von Geschwindigkeit und Massenfluss lässt sich diese Gleichung wieder im Massenfluss formulieren. Die rechte Seite, d. h. die Druckdifferenz, ist dann quadratisch im Massenfluss.

Ein Widerstand $a=(v,w)\in A_{\text{lin-rs}}$ ist durch einen konstanten Druckabfall ξ_a beschrieben, so dass wir

$$p_v - p_w = \operatorname{sign}(q_a)\xi_a \tag{13.13}$$

erhalten.

Schieber

Die Modelle der bisher eingeführten Netzelemente waren alle allesamt nichtlinear. Ein Schieber $a \in A_{va}$ ist ein Netzelement, dass sich gemischt-ganzzahlig, aber linear, beschreiben lässt. Schieber können bei stationärer Betrachtung in zwei Zustanden sein: offen

oder geschlossen. Wenn der Schieber offen ist, dann kann das Gas einfach hindurch fließen. Da wir vereinfachend davon ausgehen, dass Schieber Elemente ohne räumliche Ausdehnung sind, ist kein Druckabfall an einem offenen Schieber zu modellieren und wir erhalten $p_v = p_w$ für $a = (v, w) \in A$. Falls der Schieber geschlossen ist, kann kein Gas fließen $(q_a = 0)$ und die Drücke sind entkoppelt.

Insgesamt haben wir also das folgende Modell:

$$a ext{ ist offen} \implies p_v = p_w,$$
 (13.14a)

$$a \text{ ist geschlossen} \implies q_a = 0.$$
 (13.14b)

Regler

Regler $a=(v,w)\in A_{\rm cv}$ werden genutzt, um den Gasdruck kontrolliert zu verringern. Dies ist beispielsweise am Übergang von Transportnetzen zu regionalen Verteilnetzen notwendig, da die Leitungen der regionalen Verteilnetze typischerweise nicht für die auf den großen Transportleitungen notwendigen hohen Drücke ausgelegt sind.

In der Praxis gibt es verschiedene Typen von Reglern. Der Einfachheit halber betrachten wir hier aber nur einen Typ. Ähnlich wie Schieber können auch Regler in verschiedenen Zuständen sein. Dabei wird zunächst entschieden, ob der Regler, ebenso wie ein Schieber, offen oder geschlossen sein soll. Der geschlossene Zustand wird dabei analog zu geschlossenen Schiebern modelliert ($q_a=0$ und entkoppelte Drücke). Im offenen Zustand muss noch eine weitere Entscheidung getroffen werden, nämlich ob der Regler aktiv oder im sogenannten bypass-Modus sein soll. Im bypass-Modus strömt das Gas "ungestört" durch den Regler und der Gasdruck wird nicht beeinflusst. Das Modell des im bypass befindlichen Reglers entspricht also genau dem des offenen Schiebers. Im aktiven Zustand kann der Regler den eingehenden Gasdruck kontrolliert verringern. Diese Fähigkeit modellieren wir durch eine kontinuierliche Variable $\Delta_a \in \mathbb{R}$, die sowohl nach unten als auch nach oben beschränkt ist, d.h., wir haben $\Delta_a \in [\Delta_a^-, \Delta_a^+]$ mit $\Delta_a^- \geq 0$ und $\Delta_a^+ \geq \Delta_a^-$. Das Gesamtverhalten lässt sich wie folgt beschreiben:

$$a ext{ ist aktiv} \implies p_w = p_v - \Delta_a,$$
 (13.15a)

$$a \text{ ist geschlossen} \implies q_a = 0.$$
 (13.15b)

Bei dieser Darstellung treffen wir die zusätzliche vereinfachende Annahme, dass die untere Schranke Δ_a^- an die Druckverringerung immer 0 ist. Somit brauchen wir keinen dritten diskreten Zustand und der bypass-Modus entspricht einfach dem aktiven Modus mit $\Delta_a = 0$.

Zuletzt sei bemerkt, dass Regler den eingehenden Gasdruck nur für eine vorgegebene Flussrichtung reduzieren können. Hier nehmen wir an, dass dies immer die Kantenrichtung $v \to w$ ist. Im aktiven Zustand muss demnach immer $q_a \ge 0$ gelten. In der Praxis hängt es von der konkreten Datenlage ab, wie dieser Aspekt zu behandeln ist. Typischerweise gibt es die beiden folgenden Möglichkeiten:

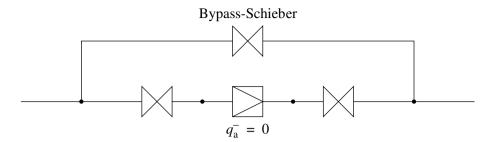


Abb. 13.5 Ein Bypass-Schieber für einen Regler

- Der Regler ist explizit als unidirektionales Element ausgezeichnet, in dem die untere Flussschranke auf 0 gesetzt ist. In diesem Fall ist dann ein zugehöriger bypass-Schieber in den Daten modelliert. Diese Situation ist Abb. 13.5 dargestellt.
- Der Regler ist bidirektional zu modellieren, da es den genannten bypass-Schieber nicht gibt.

Die Formulierung eines gemischt-ganzzahligen Modells für Regler ist relativ einfach. Für jeden Regler $a=(v,w)\in A_{\rm cv}$ verwenden wir eine untere Schranke $\Delta_a^-\geq 0$ und eine obere Schranke $\Delta_a^+\geq \Delta_a^-$ für die Druckreduktion. Außerdem betrachten wir hier den unidirektionalen Fall, d. h., es gilt $q_a^-\geq 0$. Schließlich benötigen wir die folgenden Ungleichungen, wobei $s_a\in\{0,1\}$ eine Binärvariable ist, die entscheidet, ob der Regler offen $(s_a=1)$ oder geschlossen $(s_a=0)$ ist:

$$\begin{aligned} q_a^+ s_a &\geq q_a & \text{für alle} & a \in A_{\text{cv}}, \\ q_a^- s_a &\leq q_a & \text{für alle} & a \in A_{\text{cv}}, \\ (p_w^+ - p_v^- + \Delta_a^-) s_a + p_w - p_v &\leq p_w^+ - p_v^- & \text{für alle} & a = (v, w) \in A_{\text{cv}}, \\ (p_v^+ - p_w^+ - \Delta_a^+) s_a + p_v - p_w &\leq p_v^+ - p_w^+ & \text{für alle} & a = (v, w) \in A_{\text{cv}}. \end{aligned}$$

Verdichter

Da Gas typischerweise von hohem zu niedrigem Druck fließt und Gasfluss aufgrund der Reibung an den rauen Rohrinnenwänden einen Druckabfall erfährt, benötigen wir Maschinen, die den Druck erhöhen, so dass wir das Gas über lange Strecken transportieren können. Diese Maschinen sind die sogenannten Verdichter $a \in A_{\rm cm}$.

In einem sehr einfachen Modell könnte man annehmen, dass man Verdichter genau wie Regler, nur mit anderem Vorzeichen vor dem Δ_a in (13.15), modellieren kann. Dieses Modell ist aber für echte Anwendungen zu praxisfern, weshalb wir im Folgenden realitätsnähere Modelle diskutieren.

Der Verdichtungsprozess einer einzelnen Maschine wird in der Thermodynamik meistens durch einen adiabatischen Prozess beschrieben, d.h. durch einen Prozess in einem System, bei dem es keinen Wärmeaustausch des Systems mit der Umgebung gibt. In einem solchen thermodynamischen Modell führt Verdichtung zu einer Veränderung der spezifischen Enthalpie $H_{\mathrm{ad},a}$:

$$H_{\mathrm{ad},a} = z_v T R_{\mathrm{s}} \frac{\kappa}{\kappa - 1} \left(\left(\frac{p_w}{p_v} \right)^{\frac{\kappa - 1}{\kappa}} - 1 \right), \quad a = (v, w) \in A_{\mathrm{cm}}. \tag{13.16}$$

Hier bezeichnet $z_v = z(p_v, T)$ den Realgasfaktor gemäß der Papay-Gleichung (13.2) unter Eingangsbedingungen und κ ist der sogenannte Isentropenexponent (den wir im Folgenden als konstant annehmen und nicht weiter diskutieren). Da die Beschreibung der Verdichtung typischerweise in Volumenfluss Q anstelle von Massenfluss erfolgt, müssen wir diese Flusseinheiten noch ineinander umrechnen, wobei wir die physikalische Gesetzmäßigkeit

$$\rho Q = q$$

nutzen. Die Gl. (13.16) gilt unabhängig vom konkreten Typ des Verdichters. In Gasnetzen findet man üblicherweise zwei verschiedene Arten von Verdichtern: Turbo- und Kolbenverdichter. Wir besprechen hier nur Turboverdichter, die in Transportnetzen häufiger verwendet werden.

Der Arbeitsbereich eines Turboverdichters kann durch ein Kennfelder in den Koordinaten Q und H_{ad} beschrieben werden; vgl. Abb. 13.6 (links). Die Kurven des Kennfelds werden dabei als (bi-)quadratische Least-Squares Approximationen $F_2(x, y; A)$ und $F_1(z; b)$, an Messdatenpunkte mit Ansatzfunktionen

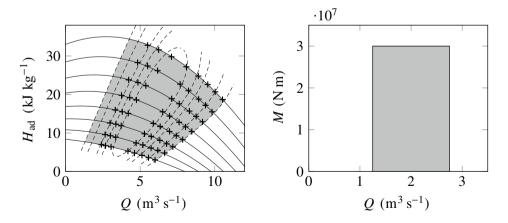


Abb. 13.6 Kennfeld eines Turboverdichters (links) und eines Kolbenverdichters (rechts). Die zulässigen Bereiche sind grau markiert. (Entnommen aus Rose et al. 2016; lizensiert unter CC BY)

$$F_2(x, y; A) = \begin{pmatrix} 1 \\ x \\ x^2 \end{pmatrix}^{\top} \begin{bmatrix} a_{00} \ a_{01} \ a_{02} \\ a_{10} \ a_{11} \ a_{12} \\ a_{20} \ a_{21} \ a_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ y \\ y^2 \end{pmatrix}, \quad F_1(z; b) = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}^{\top} \begin{pmatrix} 1 \\ z \\ z^2 \end{pmatrix}$$

angegeben. Diese Messpunkte sind in Abb. 13.6 (links) durch Kreuze dargestellt.

Die eher horizontalen und durchgezogen gedruckten Linien sind Isolinien der Verdichterdrehzahl $n_a \in [n_a^-, n_a^+]$ und die eher vertikal verlaufenden und gestrichelt gedruckten Linien sind Isolinien des Wirkungsgrads $\eta_{\mathrm{ad},a} \in [0,1]$. Formal sind diese Linien gegeben durch

$$H_{\text{ad},a} = F_2(Q_a, n_a; A_a^{H_{\text{ad}}}), \quad \eta_{\text{ad},a} = F_2(Q_a, n_a; A_a^{\eta_{\text{ad}}}).$$

Der zulässige Bereich, in dem ein Turboverdichter betrieben werden kann (in der Abbildung grau markiert) ist beschränkt durch die Isolinien der minimalen und maximalen Drehzahl n_a^- und n_a^+ . Nach links und rechts begrenzen die sogenannte Pump- und Schluckgrenze (engl. *surgeline* und *chokeline*) das Kennfeld. Diese Kurven sind quadratische Funktionen im Volumenfluss:

$$H_{\text{ad},a} \le F_1(Q_a; b_a^{\text{surge}}), \quad H_{\text{ad},a} \ge F_1(Q_a; b_a^{\text{choke}}).$$
 (13.17)

Für die Verdichtung einer gewissen Menge von Gas wird Energie benötigt. Diese Energie wird von sogenannten Antrieben erzeugt. Der Kürze wegen klammern wir diesen Aspekt aber aus. Ebenso diskutieren wir hier auch keine Kolbenverdichter, die neben den besprochenen Turboverdichtern ebenfalls in realen Gastransportnetzen genutzt werden. Der Illustration halber befindet sich rechts in Abb. 13.6 aber auch ein exemplarisches Kennfeld eines Kolbenverdichters.

Verdichterstationen

In der Praxis werden nicht einzelne Verdichter, sondern ganze Verdichterstationen genutzt. Verdichterstationen selber können, ähnlich wie Regler, in drei unterschiedlichen Zuständen betrieben werden: Sie können geschlossen, im bypass-Modus oder aktiv sein. Der bypass-Modus und der geschlossene Zustand entsprechen in unseren Modellen exakt den entsprechenden Zuständen von Reglern und Schiebern.

Der aktive Zustand ist aber deutlich komplizierter als bei Reglern, da die Station hier in einer sogenannten *Konfiguration* betrieben werden kann, die aus einer (endlichen) Menge von Konfigurationen gewählt wird. Hierbei bezeichnet man als Konfiguration eine Serienschaltung von Parallelschaltungen einzelner Verdichter. Als Beispiel sind in Abb. 13.7 alle möglichen Konfigurationen für eine Verdichterstation mit zwei Maschinen dargestellt. Physikalisch gelten die folgenden Regeln:

 Bei Parallelschaltungen teilt sich der gesamte Massenfluss auf alle parallel genutzten Maschinen auf, wobei es in der Praxis zum Teil komplizierte Regeln für diese Aufteilung gibt.

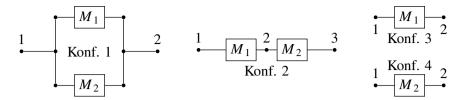


Abb. 13.7 Vollständige Menge aller möglichen Konfigurationen einer Verdichterstation mit zwei Maschinen. (Entnommen aus Schmidt et al. 2014; mit freundlicher Genehmigung von © Springer Nature 2014. All Rights Reserved)

2. Parallel betriebene Maschinen haben alle den gleichen Eingangsdruck und verdichten alle auf den gleichen Ausgangsdruck.

Typischerweise wird eine parallele Verdichtung verwendet, um größere Gasflüsse zu verdichten, wohingegen eine serielle Verdichtung bevorzugt wird, wenn größere Verdichtungsverhältnisse realisiert werden müssen.

13.1.3 Schaltregeln für Teilnetze

In realistischen Gastransportnetzen ist man häufig mit voneinander abhängigen Entscheidungen für die Schaltung aktiver Elemente wie Schieber, Regler oder Verdichter konfrontiert. Ein Beispiel dafür haben wir bereits bei den Reglern kennengelernt, die explizit als unidirektionale Elemente modelliert und demnach mit einem zusätzlichen bypass-Schieber ausgestattet sind. Hier haben wir die folgenden Abhängigkeiten:

- 1. Ist der Regler aktiv, dann muss der bypass-Schieber geschlossen sein.
- 2. Ist der Regler im bypass-Modus, so ist der bypass-Schieber geöffnet.
- 3. Ist der Regler geschlossen, so ist es auch der bypass-Schieber.

Wir beschreiben im Folgenden die Modellierung solcher Teilnetze, die gewissen gemeinsamen Schaltregeln unterliegen. Dazu sei $\mathcal S$ die Menge der Teilnetze mit zusätzlichen Schaltregeln, wobei jedes Teilnetz $S \in \mathcal S$ ein Tripel $S = (A_S, \mathcal M_S, f_S)$ ist. Dabei beschreibt $A_S \subset A$ die Menge der Elemente (Kanten) des Teilnetzes, $\mathcal M_S \subseteq \{0,1\}^{A_S}$ sind die möglichen Schaltungen des Teilnetzes und $f_S: A_S \times \mathcal M_S \to \{-1,0,1\}$ ist eine Abbildung, die gegeben ist durch

$$f_S(a, m) = \begin{cases} -1, & \text{falls Gas von } w \text{ nach } v \text{ fließt für Schaltung } m, \\ 0, & \text{falls die Flussrichtung für } a \text{ beliebig ist in } m, \\ 1, & \text{falls Gas von } v \text{ nach } w \text{ fließt für Schaltung } m. \end{cases}$$

Hierbei ist a = (v, w) die betrachtete Kante. Wir führen jetzt Binärvariablen $z_m \in \{0, 1\}$ für alle Schaltentscheidungen $m \in \mathcal{M}_S$ und $S \in \mathcal{S}$ ein und modellieren für jedes Teilnetz, dass genau eine Entscheidung getroffen werden muss:

$$\sum_{m \in \mathcal{M}_S} z_m = 1 \quad \text{für alle} \quad S \in \mathcal{S}. \tag{13.18}$$

Außerdem darf ein Element $a \in A_S$ eines Teilnetzes nur dann geöffnet (geschlossen) werden, wenn es in der entsprechenden Teilnetzentscheidung geöffnet (geschlossen) ist. Dabei seien die Kantenmodelle der betroffenen Elemente $a \in A$ bzgl. ihrer offen/geschlossen-Entscheidung mit Binärvariablen z_a modelliert. Damit erhalten wir

$$\sum_{m \in \mathcal{M}_S} m_a z_m \ge z_a \qquad \qquad \text{für alle} \quad S \in \mathcal{S}, \ a \in A_S,$$

$$\sum_{m \in \mathcal{M}_S} (1 - m_a) z_m \ge 1 - z_a \qquad \qquad \text{für alle} \quad S \in \mathcal{S}, \ a \in A_S.$$

Man beachte, dass $m_a \in \{0, 1\}$ den Zustand (offen/geschlossen) der Kante $a \in A_S$ des Teilnetzwerks beschreibt. Zuletzt müssen wir sicherstellen, dass durch Teilnetzregeln festgelegte Flussrichtungen auch tatsächlich realisiert werden:

$$\left(1 + \sum_{(a,m)\in As\times\mathcal{M}_s} fs(a,z)z_m\right) q_a^+ \ge q_a \quad \text{für alle } S \in \mathcal{S}, \ a \in A_s, \qquad (13.19a)$$

$$\left(1 - \sum_{(a,m)\in As\times\mathcal{M}_s} fs(a,z)z_m\right) q_a^- \ge q_a \quad \text{für alle } S \in \mathcal{S}, \ a \in A_s. \qquad (13.19b)$$

$$\left(1 - \sum_{(a,m) \in As \times \mathcal{M}_s} fs(a,z)z_m\right) q_a^- \ge q_a \quad \text{für alle } S \in \mathcal{S}, \ a \in A_s.$$
 (13.19b)

13.1.4 Leistungen

Die bisherige Modellformulierung basiert darauf, dass die ein- und ausgespeisten Mengen als Massenflüsse gegeben sind; vgl. q_v auf der rechten Seite der Massenerhaltungsgleichung (13.4). Dies ist in den in der Literatur zu findenden Modellen auch die am häufigsten betrachtete Situation. In der Praxis ist die Situation aber wesentlich komplizierter, da die einund ausgespeisten Mengen nicht durch Massenflüsse, sondern durch Leistungen gegeben sind. Diese Leistungen hängen sowohl von der Gasmenge als auch von dem Brennwert $H_{c,v}$ des Gases an dem entsprechenden Knoten $v \in V$ ab. Erachtet man diese Brennwerte als konstante Größen, so gibt es keinen wirklich Unterschied zwischen diesen beiden Betrachtungsweisen. Anderenfalls müssen diese Brennwerte aber durch das gesamte Netz verfolgt, d.h. gemischt, werden. Da an unterschiedlichen Einspeisestellen des Netzes Gas mit unterschiedlicher Qualität (d. h., mit unterschiedlichem Brennwert) eingespeist wird, treffen

sich, je nach Flusssituation, an den Knoten des Netzes Gassorten mit unterschiedlichem Brennwert, die sich dann dort mischen.

Im Folgenden leiten wir hierfür ein Modell her. Zunächst benötigen wir Variablen P_v für die Leistung an allen Ein- und Ausspeisestellen $v \in V_+ \cup V_-$, Variablen $H_{c,v}$ für den Brennwert an allen Knoten $v \in V$ und Variablen $H_{c,a}$ für die Brennwerte auf allen Kanten $a \in A$ des Netzes.

An den Ein- und Ausspeisestellen fixieren wir die Leistung gemäß der Absprache des Netzbetreibers mit seinen Kunden auf einen festen Wert \bar{P}_v :

$$P_v = \bar{P}_v \quad \text{für alle} \quad v \in V_+ \cup V_-. \tag{13.20}$$

Die gelieferten Brennwerte $H_{c,v}^{\mathrm{ext}}$ an den Einspeisestellen $v \in V_+$ sind ebenfalls bekannt. Schließlich sind Brennwert, Leistung und Massenfluss gekoppelt durch die Zusammenhänge

$$P_v = q_v H_{c,v}^{\mathrm{ext}}$$
 für alle $v \in V_+$,
 $P_v = q_v H_{c,v}$ für alle $v \in V_- \cup V_0$.

Die Brennwerte werden an jedem Knoten des Netzes gemäß

$$H_{c,v} = \frac{H_{c,v}^{\text{ext}} q_v^{\text{ext}} + \sum_{a \in \mathcal{I}_v(q_A)} H_{c,a} |q_a|}{q_v^{\text{ext}} + \sum_{a \in \mathcal{I}_v(q_A)} |q_a|} \quad \text{für alle} \quad v \in V,$$

$$(13.21)$$

gemischt, wobei wir $H_{c,v}^{\rm ext}=q_v^{\rm ext}=0$ setzen für alle inneren Knoten und alle Ausspeisestellen. Außerdem setzen wir $q_v^{\rm ext}=q_v$ an allen Einspeisestellen. Zuletzt müssen die gemischten Größen auf alle flussspezifisch ausgehenden Kanten propagiert werden:

$$H_{c,a} = H_{c,v}$$
 für alle $v \in V$, $a \in \mathcal{O}_v(q_A)$. (13.22)

An dieser Stelle sei noch bemerkt, dass nur unter der Annahme einer netzweit konstanten molaren Masse m das Mischungsmodell in der vereinfachten Form (13.21) dargestellt werden kann. Im allgemeinen Fall muss aber mit den molaren Flüssen, d.h. mit den Termen $\hat{q} = |q|/m$ in (13.21) gewichtet werden.

13.1.5 Ein konkretes Problem

Bisher haben wir die Modelle der einzelnen Elemente eines Gastransportnetzwerks diskutiert. Allein ein richtiges Optimierungsproblem fehlt uns noch.

In diesem Abschnitt betrachten wir das Problem der Nominierungsvalidierung. Eine *Nominierung* ist ein Vektor von fixierten Leistungen an den Ein- und Ausspeisestellen zusammen mit zusätzlichen Spezifikationen an die ein- und ausgespeisten Mengen wie die festgelegten Brennwerte bei den Einspeisungen oder Druckschranken an allen Ein- und

Ausspeisestellen. Die sich den Gasnetzbetreibern täglich stellende Aufgabe der *Nominie-rungsvalidierung* ist es, für eine gegebene Nominierung zu entscheiden, ob es eine Einstellung der aktiven, d. h. steuerbaren, Netzelemente (Schieber, Regler, Verdichter) gibt, so dass die gegebene Nominierung transportiert werden kann.

Bezeichnen wir mit p den Vektor aller Druckvariablen, mit q den Vektor aller Massenflüsse und seien die Brennwerte und Leistungen gegeben in den Vektoren H_c und P. Seien ferner alle zusätzlichen kontinuierlichen Variablen der Regler, Verdichter und Widerstände gegeben in den Vektoren x_{cv} , x_{cm} und x_{rs} und seien zuletzt alle Binärvariablen gegeben im Vektor s. Dann lautet das Problem der Nominierungsvalidierung:

Gibt es	$(p, q, H_{\rm c}, P, x_{\rm cv}, x_{\rm cm}, x_{\rm rs}, s)$	(13.23a)
so dass	Druck- und Flussschranken: (13.3), (13.5),	(13.23b)
	Massenerhaltung: (13.4),	(13.23c)
	Rohre: (13.11),	(13.23d)
	Widerstände: (13.12), (13.13),	(13.23e)
	Schieber: (13.14),	(13.23f)
	Regler: (13.15),	(13.23g)
	Verdichter: (13.16)–(13.17),	(13.23h)
	Teilnetzmodellierung: (13.18)–(13.19),	(13.23i)
	Leistungen: (13.20)–(13.22)?	(13.23j)

An dieser Stelle sei bemerkt, dass das Modell (13.23) nicht direkt in der bisher beschriebenen Form gelöst werden kann. Es enthält einige noch nicht spezifizierte Aspekte, wie beispielsweise die explizite Behandlung der Differentialgleichungen auf Rohren.

Das Teilmodell (13.23a)–(13.23i) ist ein Zulässigkeitsproblem, das ausschließlich auf Flüssen und Drücken basiert. Modelle von diesem Typ sind in der Literatur sehr gut studiert; siehe, z. B., Koch et al. (2015) oder Schmidt et al. (2014, 2016) und die jeweils darin befindlichen Referenzen. Die Nebenbedingungen (13.23j) erweitern dieses Modell und fügen ihm zusätzliche bilineare und nichtglatte Gleichungen hinzu. Die Nichtglattheit ist in der Mischungsgleichung (13.21) durch die a priori nicht bekannten Mengen $\mathcal{I}_v(q_A)$ und $\mathcal{O}_v(q_A)$ begründet. Das vollständige Modell (13.23) ist ein gemischt-ganzzahliges, nichtlineares, nichtkonvexes, nichtdifferenzierbares, unendlichdimensionales Zulässigkeitsproblem. Da es eine spezielle Instanz des sogenannten Pooling-Problems beinhaltet, ist es NP-schwer; siehe dazu Misener und Floudas (2009) und Alfaki und Haugland (2013).

Aus diesem Zulässigkeitsproblem lässt sich leicht ein, für die Praxis ebenfalls wichtiges, Optimierungsproblem generieren. Hierzu muss nur die Existenzfrage in Modell (13.23) durch eine sinnvolle Zielfunktion ersetzt werden. Die in der Literatur am häufigsten betrachtete Zielfunktion minimiert die Leistungsaufnahme oder den Treibgasverbrauch der Verdichter. Details findet man beispielsweise in Geißler et al. (2013).

13.2 Techniken zur Behandlung von Differentialgleichungen

Für die Behandlung von Differentialgleichungen in endlich-dimensionalen Optimierungsmodellen gibt es im Wesentlichen drei unterschiedliche Möglichkeiten:

1. Falls die Differentialgleichungen analytisch gelöst werden können, können eben diese Lösungen in das Modell integriert werden. Da wir Flussvariablen q_a auf Kanten und Druckvariablen p_v auf Knoten haben, sind wir für Rohre $a=(v,w)\in A$ an Lösungen bzw. Nebenbedingungen

$$c_a(q_a, p_v, p_w) = 0$$

interessiert, so dass zulässige Lösungen (q_a, p_v, p_w) auch Lösung der Differentialgleichung für $p(0) = p_v$ und $p(L) = p_w$ für den Massenfluss q_a sind.

- Man kann die Differentialgleichungen diskretisieren, indem man, je nach Feinheit des zugrunde liegenden Gitters, eine endliche Menge von Diskretisierungsgleichungen einführt.
- Man kann die Lösung der Differentialgleichungen approximieren, in dem man exakte Lösungen einer weiter vereinfachten Form der Differentialgleichung in das Modell integriert.

In diesem Abschnitt betrachten wir nur stationäre Zustände des eigentlich zeitabhängigen Systems von partiellen Differentialgleichungen. Eine allgemeinere Diskussion solcher stationärer Zustände findet man z.B. in Gugat et al. (2015). Zunächst diskutieren wir im Folgenden den Fall der Approximation der Lösungen – den wir auch auch schon in Abschn. 9.3 über instationäre Wasserflussmodellierung verfolgt haben.

Wir betrachten dazu die Differentialgleichung (13.11):

$$\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial (qv)}{\partial x} + g \frac{p}{R_s z T} s + \lambda(q) \frac{|q|q}{2A^2 D} \frac{R_s z T}{p} = 0.$$

Eine weitere Vereinfachung besteht in der Vernachlässigung des sogenannten Staudruckterms

$$\frac{1}{A}\frac{\partial (qv)}{\partial x},$$

was zu

$$\frac{\partial p}{\partial x} + g \frac{p}{R_s z T} s + \lambda(q) \frac{|q|q}{2A^2 D} \frac{R_s z T}{p} = 0$$
 (13.24)

führt.

Satz 13.1 Es sei der Realgasfaktor konstant gegeben, z.B. als mittlerer Realgasfaktor $z = z_{\rm m}$. Für $s \neq 0$ ist die Lösung p(x) der gewöhnlichen Differentialgleichung (13.24) mit gegebenem Anfangswert $p(0) = p_{\rm in}$ gegeben durch

$$p(x)^{2} = \left(p_{\text{in}}^{2} - \tilde{\Lambda}|q|q\frac{e^{\tilde{S}x} - 1}{\tilde{S}}\right)e^{-\tilde{S}x}$$
(13.25)

mit

$$\tilde{S} := \frac{2gs}{R_s z_m T}, \quad \tilde{\Lambda} := \lambda(q) \frac{R_s z_m T}{A^2 D}.$$

Beweis In (13.24) ersetzen wir zunächst alle als konstant angenommenen Größen durch entsprechende Mittelwerte:

$$\frac{\partial p}{\partial x} + g \frac{p}{R_{\rm s} z_{\rm m} T} s + \lambda(q) \frac{|q|q}{2A^2 D} \frac{R_{\rm s} z_{\rm m} T}{p} = 0. \label{eq:deltapprox}$$

Multiplikation dieser Gleichung mit 2p ergibt

$$\frac{\partial}{\partial x}p^2 + \tilde{S}p^2 = -\tilde{\Lambda}|q|q.$$

Jetzt substituieren wir $y=p^2$ und erhalten die lineare gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung

$$y' + \tilde{S}y = -\tilde{\Lambda}|q|q, \quad y(0) = p_{\text{in}}^2.$$
 (13.26)

Die zugehörige homogene Gleichung $y' + \tilde{S}y = 0$ hat die Lösung

$$y_h(x) = ce^{-\tilde{S}x}$$

Variation der Konstanten liefert dann

$$c'(x)e^{-\tilde{S}x} - \tilde{S}c(x)e^{-\tilde{S}x} + \tilde{S}c(x)e^{-\tilde{S}x} = -\tilde{\Lambda}|q|q$$

$$\iff c'(x) = -\tilde{\Lambda}|q|qe^{\tilde{S}x}$$

und

$$c(x) = -\tilde{\Lambda}|q|q\frac{1}{\tilde{S}}e^{\tilde{S}x} + C.$$

Die Lösung lautet daher

$$y(x) = \left(-\tilde{\Lambda}|q|q\frac{1}{\tilde{S}}e^{\tilde{S}x} + C\right)e^{-\tilde{S}x}.$$

Zuletzt bestimmen wir die Konstante C durch Ausnutzen des Anfangswerts $y(0) = p_{in}^2$. Dies liefert

$$y(0) = -\tilde{\Lambda}|q|q\frac{1}{\tilde{S}} + C = p_{\text{in}}^2 \iff C = p_{\text{in}}^2 + \tilde{\Lambda}|q|q\frac{1}{\tilde{S}}$$

und wir erhalten

$$y(x) = p(x)^2 = \left(-\tilde{\Lambda}|q|q\frac{1}{\tilde{S}}e^{\tilde{S}x} + p_{\text{in}}^2 + \tilde{\Lambda}|q|q\frac{1}{\tilde{S}}\right)e^{-\tilde{S}x}.$$

Durch Auswertung der Lösung (13.25) an der Stelle x = L (mit $p(L) = p_{out}$) und nach Festlegung der Notation $\Lambda := \tilde{\Lambda}L$ und $S := \tilde{S}L$ erhalten wir schließlich die in der Literatur sehr bekannte Darstellung des Druckabfalls

$$p_{\text{out}}^2 = \left(p_{\text{in}}^2 - \Lambda |q| q \frac{e^S - 1}{S}\right) e^{-S}.$$
 (13.27)

Man beachte, dass der Druck p(x) gemäß (13.25) und damit $p(L) = p_{\text{out}}$ gemäß (13.27) für horizontale Rohre (s = 0) nicht definiert sind. In diesem Fall erhält man die Lösung durch Lösen der ODE (13.26) mit $\tilde{S} = 0$ oder durch Grenzübergang $s \to 0$ (oder, äquivalent, $\tilde{S} \to 0$) in (13.25) mit Anwendung der Regel von l'Hôpital.

Lemma 13.2 Unter den Annahmen des Satzes 13.1 ist die Lösung p(x) von (13.24) mit Anfangswert $p(0) = p_{in}$ und s = 0 gegeben durch

$$p(x)^{2} = p_{\text{in}}^{2} - x\tilde{\Lambda}|q|q, \qquad (13.28)$$

wobei $\tilde{\Lambda}$ definiert ist wie in Satz 13.1.

Auswertung der Lösung (13.28) an der Stelle x = L liefert uns dann eine Formel für den Druckabfall auf horizontalen Rohren:

$$p_{\text{out}}^2 = p_{\text{in}}^2 - \Lambda |q| q.$$

Zuletzt diskutieren wir noch kurz die Möglichkeit der Diskretisierung von Differentialgleichungen. Wir gehen wieder aus von der Gl. (13.11) und führen die entsprechenden Vereinfachungen durch, bis wir wieder bei Gl. (13.24) ankommen:

$$\frac{\partial p}{\partial x} + g \frac{p}{R_s z T} s + \lambda(q) \frac{|q|q}{2A^2 D} \frac{R_s z T}{p} = 0. \label{eq:deltapprox}$$

Zur Approximation der Ableitung $\partial_x p$ führen wir jetzt ein Gitter $\Gamma = \{x_0, x_1, \dots, x_k\}$ ein mit $x_0 = 0$ und $x_k = L$. Das heißt, wir unterteilen das Rohr in k Segmente der Länge $x_i - x_{i-1}$ für $i = 1, \dots, k$. Auf jedem Segment approximieren wir jetzt die Ableitung mit finiten Differenzen:

$$\partial_x p \approx \frac{p(x_i) - p(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}, \quad i = 1, \dots, k.$$

Wenden wir dies jetzt auf die gesamte Gleichung an, so erhalten wir

$$\frac{p(x_i) - p(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} + g \frac{p(x_i)}{R_s z(x_i) T} s + \lambda(q) \frac{|q|q}{2A^2 D} \frac{R_s z(x_i) T}{p(x_i)} = 0$$
 (13.29)

für jedes $i=1,\ldots,k$, wobei wir die Gastemperatur wieder als konstant angenommen haben. Man beachte außerdem, dass wir den Massenfluss sowie die Daten des Rohrs wie Durchmesser oder Querschnitt nicht diskretisieren müssen, da sie konstant im gesamten Rohr sind. Die Abhängigkeit des Realgasfaktors vom diskretisierten Ort im Rohr kommt durch seine Abhängigkeit vom Druck zustande. Es gilt

$$z(x_i) = z(p(x_i), T).$$

Da wir bei bei den nicht differentiell auftretenden aber vom Ort abhängigen Ausdrücken immer x_i anstelle von x_{i-1} gewählt haben, spricht man von einer sogenannten impliziten Eulerdiskretisierung. Andererseits (d. h. bei Verwendung von x_{i-1}) würde man von einer expliziten Eulerdiskretisierung sprechen.

Was haben wir jetzt erreicht? Wir haben die Gl.(13.24) durch die k Gleichungen in (13.29) ersetzt haben. Dafür müssen wir die entsprechenden diskretisierten Drücke $p(x_i)$, i = 1, ..., k, als Variablen einführen. Wir haben also die Differentialgleichung durch endlich viele neue Variablen und endlich viele neue Nebenbedingungen ersetzt. Die Genauigkeit der dadurch erzielten Approximation hängt natürlich vor allem von der Feinheit des Gitters Γ ab.

Zum Abschluss dieses Kapitels und des gesamten Buches möchten wir anhand der Gasnetze aufzeigen, wie der Stand der Forschung bzgl. der Lösbarkeit großer Netze ist. Einen Überblick über die Literatur findet man in dem Buch von Koch et al. (2015) und dem Überblicksartikel von Ríos-Mercado und Borraz-Sánchez (2015). Ein Vergleich mehrerer moderner Ansätze zur Lösung der hier diskutierten Modelle ist außerdem in Pfetsch et al. (2015) gegeben.

Welche Modelle kann man heute auf Gasnetzen welcher Größe in welcher Zeit lösen? Das in Abb. 13.1 dargestellte Netz ist ein real existierendes Netz und stellt ungefähr die Grenze dessen dar, was man mit modernsten Techniken der Optimierung behandeln kann. Nehmen wir an, dass wir auf diesem Netz eine Version der Nominierungsvalidierung lösen wollen, die eine algebraische Modellierung der Rohre und eine sehr feine Modellierung der Verdichter beinhaltet sowie außerdem Mischungseffekte beachtet, um Leistungsschranken abbilden zu können. Wir haben in diesem Kapitel festgestellt, dass es sich bei diesem Modell um ein nichtlineares, nichtglattes und gemischt-ganzzahliges Problem handelt, das sehr schwer zu lösen ist: Allgemeine Standardlöser schaffen es beispielsweise überhaupt nicht, Lösungen in geeigneter Zeit (z. B. 2h) zu berechnen. Daher wurden in einer Reihe von Artikeln problemspezifische Techniken entwickelt, um diese Probleme lösen zu können; vgl. Geißler et al. (2015, 2017, 2018) und Rose et al. (2016). Viele der dort verwendeten Techniken haben wir in diesem Buch kennengelernt. Diese Techniken werden in

Geißler et al. (2018) auf 30 verschiedene Nominierungen angewandt, für die eine zulässige Netzsteuerung bestimmt werden soll. Trotz der schon sehr fortgeschrittenen Techniken braucht man noch bis hin zu 55 h, um eine zulässige Lösung zu bestimmen. Man sieht also, es gibt für Mathematiker im Bereich der Versorgungsnetze noch viel zu tun. Dazu kommt, dass wir einige Punkte so gut wie gar nicht adressiert haben. Die diskutierten Ergebnisse beziehen sich z. B. nur auf den stationären Fall. Der zeitabhängige Fall ist aber weitaus komplizierter und schwieriger zu lösen. Auch dies ist ein sehr aktives Forschungsfeld (Burlacu et al. 2018; Gugat et al. 2018; Leugering et al. 2017) in dem es noch viele offene Herausforderungen gibt – insbesondere wenn es wie z. B. in Hante (2017, 2018) und Hante und Sager (2013) um die Verknüpfung von partiellen Differentialgleichungen und schaltenden Systemen geht. Wer sich hierfür im Detail interessiert, findet beispielsweise in Hante et al. (2017) eine Auswahl an offenen Problemen. Herausfordernde Netzwerkdesignprobleme im Gasbereich, die wir hier nicht diskutiert haben, oder offene Problem im Kontext des Gashandels sind u. a. in Fügenschuh et al. (2014) beschrieben.

13.3 Projekt: Gasnetzoptimierung

Unter

http://gaslib.zib.de

finden sie die Bibliothek GasLib von frei verfügbaren Gasnetzinstanzen; vgl. Schmidt et al. (2017). Die dort enthaltenen Daten können zur Modellierung von Zulässigkeits- oder Optimierungsprobleme im Bereich des Gastransports genutzt werden. Laden Sie sich die Instanzen GasLib-40 und GasLib-135 herunter und implementieren Sie mindestens ein Modell der Nominierungsvalidierung, d. h., des Zulässigkeitsproblems für die gegebenen Instanzen.

Entscheiden Sie sich dabei für eine konkrete Modellierung der auftretenden Elemente. Sie können für die Implementierung sowohl GAMS (siehe dazu auch Projekt 9.4) als auch Gurobi (mit seiner Python-Schnittstelle; vgl. Projekt 2.4) wählen. Machen Sie sich aber vorher die Abhängigkeiten bzgl. der Wahl der Modellierung und der Wahl der Modellierungssprache/des Lösers klar.

Bei GitHub können Sie sich unter

https://github.com/m-schmidt-math-opt/Optimierung-von-Versorgungsnetzwerken

aus dem Unterordner gaslib2gams ein Python-Programm zum Parsen der GasLib-Daten herunterladen (gaslib-parser.zip), das Sie zum Konvertieren der GasLib-Daten hin zu GAMS-lesbaren Daten verwenden können.

Achten Sie bei Ihrer Implementierung des Modells insbesondere auf die verwendeten technischen und physikalischen Einheiten. Zum einen ist dieses Feld eine häufige

Literatur 197

Fehlerquelle bei der Implementierung konkreter Modellierungen. Zum anderen gibt es gewisse Einheiten, die sich für die Numerik besser eignen als andere. Ein konkretes Beispiel sind bar und Pa für den Gasdruck. Die physikalischen Modelle in diesem Kapitel sind alle in Pa formuliert. Die Verwendung dieser Einheit auf dem Computer führt aber zu sehr großen Zahlen, was häufig instabile Rechnungen zur Folge hat. In diesem Fall ist beispielsweise die Verwendung der Einheit bar zu empfehlen (1 bar $= 10^5$ Pa), die zu deutlich kleineren Zahlen führt.

Aufgaben

Aufgabe 13.1 Formulieren Sie ein gemischt-ganzzahliges und lineares Modell für Schieber; siehe (13.14).

Aufgabe 13.2 Beweisen Sie Lemma 13.2.

Aufgabe 13.3 Diskretisieren Sie die zweite Gleichung der quasi-stationären water hammer Gl. (9.12) mit dem impliziten Eulerverfahren.

Aufgabe 13.4 Diskretisieren Sie die stationäre Impulsgleichung (13.11) mit dem expliziten Eulerverfahren.

Aufgabe 13.5 Das Mischungsmodell bestehend aus (13.21) und (13.22) ist deshalb nichtglatt, weil man a priori nicht die flussrichtungsabhängigen Mengen $\mathcal{I}_v(q_A)$ und $\mathcal{O}_v(q_A)$ kennt. Formulieren Sie ein gemischt-ganzzahliges und nichtlineares Modell, das ohne diese Mengen auskommt.

Hinweis: Probieren Sie es mit einer Binärvariable für die Flussrichtung in jedem Rohr.

Literatur

Alfaki, M., & Haugland, D. (2013). Strong formulations for the pooling problem. *Journal of Global Optimization*, 56(3), 897–916. https://doi.org/10.1007/s10898-012-9875-6.

Burlacu, R., Egger, H., Groß, M., Martin, A., Pfetsch, M., Schewe, L., Sirvent, M., & Skutella, M. (2018). A global optimization approach for instationary gas transport in pipeline networks. https://opus4.kobv.de/opus4-trr154/frontdoor/index/index/docId/221 (Eingereicht).

Fügenschuh, A., Geißler, B., Gollmer, R., Hayn, C., Henrion, R., Hiller, B., Humpola, J., Koch, T., Lehmann, T., Martin, A., Mirkov, R., Morsi, A., Rövekamp, J., Schewe, L., Schmidt, M., Schultz, R., Schwarz, R., Schweiger, J., Stangl, C., Steinbach, M. C., & Willert, B. M. (2014). Mathematical optimization for challenging network planning problems in unbundled liberalized gas markets. *Energy Systems*, 5(3), 449–473. https://doi.org/10.1007/s12667-013-0099-8. ISSN: 1868-3975.

Fügenschuh, A., Geißler, B., Gollmer, R., Morsi, A., Pfetsch, M. E., Rövekamp, J., Schmidt, M., Spreckelsen, K., & Steinbach, M. C. (2015). Physical and technical fundamentals of gas networks. In T. von Koch, B. Hiller, M. E. Pfetsch, & L. Schewe (Hrsg.), *Evaluating gas network capacities: SIAM-MOS series on optimization* (Kap. 2, S. 17–44.). Philadelphia: SIAM. https://doi.org/10.1137/1.9781611973693.ch2. ISBN: 978-1-611973-68-6.

- Geißler, B., Morsi, A., & Schewe, L. (2013). A new algorithm for MINLP applied to gas transport energy cost minimization. In M. Jünger & G. Reinelt (Hrsg.), *Facets of combinatorial optimization* (S. 321–353). Heidelberg: Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-642-38189-8_14.
- Geißler, B., Morsi, A., Schewe, L., & Schmidt, M. (2015). Solving power-constrained gas transportation problems using an MIP-based alternating direction method. *Computers & Chemical Engineering*, 82, 303–317. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2015.07.005. ISSN: 0098-1354.
- Geißler, B., Morsi, A., Schewe, L., & Schmidt, M. (2017). Penalty alternating direction methods for mixed-integer optimization: A new view on feasibility pumps. *SIAM Journal on Optimization*, 27(3), 1611–1636. https://doi.org/10.1137/16M1069687.
- Geißler, B., Morsi, A., Schewe, L., & Schmidt, M. (2018). Solving highly detailed gas transport MINLPs: Block separability and penalty alternating direction methods. *INFORMS Journal on Computing*, 30(2), 309–323. https://doi.org/10.1287/ijoc.2017.0780. ISSN: 1091-9856.
- Grimm, V., Grübel, J., Schewe, L., Schmidt, M., & Zöttl, G. (2018a). Nonconvex equilibrium models for gas market analysis: Failure of standard techniques and alternative modeling approaches. *European Journal of Operational Research*. https://doi.org/10.1016/j.ejor.2018.09.016 (Im Erscheinen).
- Grimm, V., Schewe, L., Schmidt, M., & Zöttl, G. (2018b). A multilevel model of the European entry-exit gas market. *Mathematical Methods of Operations Research*. https://doi.org/10.1007/s00186-018-0647-z.
- Gugat, M., Hante, F. M., Hirsch-Dick, M., & Leugering, G. (2015). Stationary states in gas networks. *Networks and Heterogeneous Media*, 10(2), 295–320. https://doi.org/10.3934/nhm.2015.10.295.
- Gugat, M., Leugering, G., Martin, A., Schmidt, M., Sirvent, M., & Wintergerst, D. (2018). MIP-Based instantaneous control of mixed-integer PDE-constrained gas transport problems. *Computational Optimization and Applications*, 70(1), 267–294. https://doi.org/10.1007/s10589-017-9970-1.
- Hante, F. M. (2017). Relaxation methods for hyperbolic PDE mixed-integer optimal control problems. *Optimal Control Applications and Methods*, *38*(6), 1103–1110. https://doi.org/10.1002/oca.2315.
- Hante, F. M. (2018). Mixed-Integer optimal control for PDEs: Relaxation via differential inclusions and applications to gas network optimization. Techn. Ber. https://opus4.kobv.de/opus4-trr154/frontdoor/index/docId/241.
- Hante, F. M., & Sager, S. (2013). Relaxation methods for mixed- integer optimal control of partial differential equations. *Computational Optimization and Applications*, 55(1), 197–225. https://doi. org/10.1007/s10589-012-9518-3.
- Hante, F. M., Leugering, G., Martin, A., Schewe, L., & Schmidt, M. (2017). Challenges in optimal control problems for gas and fluid flow in networks of pipes and canals: From modeling to industrial applications. In P. von Manchanda, R. Lozi, & A. B. Siddiqi (Hrsg.), *Industrial mathematics and complex systems: Emerging mathematical models, methods and algorithms: Industrial and applied mathematics* (S. 77–122). Singapore: Springer. https://doi.org/10.1007/978-981-10-3758-0_5. ISBN: 978-981-10-3758-0.
- Koch, T., Hiller, B., Pfetsch, M. E., & Schewe, L. (Hrsg.). (2015). Evaluating gas network capacities: SIAM-MOS series on optimization (S. xvi + 364). Philadelphia: SIAM. https://doi.org/10.1137/1.9781611973693. ISBN: 978-1-611973-68-6.
- Leugering, G., Martin, A., Schmidt, M., & Sirvent, M. (2017). Nonoverlapping domain decomposition for optimal control problems governed by semilinear models for gas flow in networks. *Control and Cybernetics*, 46(3), 191–225.

Literatur 199

Misener, R., & Floudas, C. A. (2009). Advances for the pooling problem: Modeling, global optimization, and computational studies. *Applied and Computational Mathematics*, 8(1), 3–22.

- Pfetsch, M. E., Fügenschuh, A., Geißler, B., Geißler, N., Gollmer, R., Hiller, B., Humpola, J., Koch, T., Lehmann, T., Martin, A., Morsi, A., Rövekamp, J., Schewe, L., Schmidt, M., Schultz, R., Schwarz, R., Schweiger, J., Stangl, C., Steinbach, M. C., Vigerske, S., & Willert, B. M. (2015). Validation of nominations in gas network optimization: Models, methods, and solutions. *Optimization Methods and Software*, 30(1), 15–53. https://doi.org/10.1080/10556788.2014.888426.
- Ríos-Mercado, R. Z., & Borraz-Sánchez, C. (2015). Optimization problems in natural gas transportation systems: A state-of-the-art review. *Applied Energy*, *147*, 536–555. https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2015.03.017. ISSN: 0306-2619.
- Rose, D., Schmidt, M., Steinbach, M. C., & Willert, B. M. (2016). Computational optimization of gas compressor stations: MINLP models versus continuous reformulations. *Mathematical Methods of Operations Research*, 83(3), 409–444. https://doi.org/10.1007/s00186-016-0533-5. ISSN: 1432-2994.
- Schewe, L., Schmidt, M., & Thürauf, J. (2018). Structural properties of feasible bookings in the European entry-exit gas market system. Techn. Ber. http://www.optimization-online.org/DB_HTML/2018/09/6831.html.
- Schmidt, M., Steinbach, M. C., & Willert, B. M. (2014). High detail stationary optimization models for gas networks. *Optimization and Engineering*, 1–34. https://doi.org/10.1007/s11081-014-9246-x. ISSN: 1389-4420.
- Schmidt, M., Steinbach, M. C., & Willert, B. M. (2015). The precise NLP model. In T. von Koch, B. Hiller, M. E. Pfetsch, & L. Schewe (Hrsg.), *Evaluating gas network capacities: SIAM-MOS series on optimization* (Kap. 10, S. 181–210). Philadelphia: SIAM. https://doi.org/10.1137/1. 9781611973693.ch10.
- Schmidt, M., Steinbach, M. C., & Willert, B. M. (2016). High detail stationary optimization models for gas networks: Validation and results. *Optimization and Engineering*, 17(2), 437–472. https://doi.org/10.1007/s11081-015-9300-3. ISSN: 1389-4420.
- Schmidt, M., Aßmann, D., Burlacu, R., Humpola, J., Joormann, I., Kanelakis, N., Koch, T., Oucherif, D., Pfetsch, M. E., Schewe, L., Schwarz, R., & Sirvent, M. (2017). GasLib A library of gas network instances. *Data*, 2(4), https://doi.org/10.3390/data2040040. ISSN: 2306-5729.

Sachverzeichnis

A	Dualitat, 11, 13
AC-Fluss, 85	
Angebotsgraph, 26	
Approximation, lineare, 151	E
	Einhüllende
_	konkave, 137
B	konvexe, 137
b-transshipment, 9, 12	Energiegleichung, 179, 180
Big-M, 94, 167	Eulerdiskretisierung, 195
Blindleitwert, 85	Eulergleichungen, 179
Branch-and-Bound, 126	stationäre, 180
Brennwert, 189	stationare, 100
Bruttokonsumentenrente, 59	
C	F
Column generation, 29	Filling condition, 146, 148
Constraint qualification, 40, 131, 132	Fischer–Burmeister-Funktion, 164
LICQ, 41, 166	Fluss, 10
MFCQ, 170	AC, 85
	DC, 85
	Flussfunktion, 104
D	laminarer, 182
Darcy-Weisbach, 183	linearer, 9
DC-Fluss, 85	Mehrgüterfluss, 26
Delta-Notation, 10, 108, 175	potentialgetriebener, 99
Differentialgleichung	stationärer, 105
Behandlung von, 192	turbulenter, 182
Diskretisierung, 194	Wert, 10
gewöhnliche, 181	Funktion
partielle, 121	konvexe, 47
Differenz, finite, 194	strikt konvexe, 47
© Springer-Verlag GmbH Deutschland, ein Teil von S	Springer Nature 2019
L. Schewe und M. Schmidt, Optimierung von Versorg	
https://doi.org/10.1007/978-3-662-58539-9	

201

202 Sachverzeichnis

G	Markträumung, 60	
Gasnetz, 173	Massenerhaltung, 179	
Gastemperatur, 180	Massenfluss, 180	
General disjunctive program, 167	Max-Flow-Min-Cut-Satz, 11	
Glättung, 160	Max-Flow-Problem, 10	
Gleichgewichtsproblem, 73	McCormick-Ungleichungen, 140	
Graph	Mehrgüterfluss, 26	
gerichteter, 174	Menge	
ungerichteter, 9	aktive, 40	
Gut, 26	konvexe, 47	
	zulässige	
Н	eines LCPs, 74	
Hazen–Williams-Gleichung, 161	eines NLPs, 40	
Hülle, konvexe, 139	Methode, inkrementelle, 146	
Trune, Ronvexe, 137	MFCQ, 170	
	Min-Cost-Flow-Problem, 12, 21, 45, 51	
I	Min-Cut-Problem, 11	
Impulsgleichung, 179	MINLP (mixed-integer nonlinear program) 125	
K	konvexes, 126	
Kennfeld, 186	Löser, 119	
Kirchhoffsches Gesetz, 179	MIP-Techniken, 145	
KKT, 39, 42	nichtkonvexes, 136	
Punkt, 42	NLP-Techniken, 159	
Komplementaritätspaar, 75	Software, 119	
Komplementaritätsproblem, 60		
gemischtes lineares, 77	N T	
lineares, 54, 73	N	
nichtlineares, 74	Nachfragefunktion, inverse, 58, 91	
Kontinuitätsgleichung, 179	NCP-Funktion, 164	
Kurzschluss, 182	Network design, 32 survivable, 33	
110123011433, 102	ŕ	
	Netzgebühr, 92	
L	Netzwerkdesignproblem, 32 Nodalpreissystem, 86	
Lagrangefunktion, 42, 45, 76	Nominierung, 190	
Lagrangemultiplikator, 42	Nominierungsvalidierung, 190	
Leistung (Gas), 189	Nonlinerungsvandierung, 190	
LICQ (linear independence constraint quali-		
fication), 41, 131, 166	0	
Linearisierungsfehler, 152	OD-(origin-destination)Matrix, 26	
Linienplanung, 31	Optimalitätsbedingungen, 39	
Lösung	Optimierungsproblem	
eines LCPs, 75	gemischt-ganzzahlig nichtlineares, 125	
globale, 40	globales, 126	
lokale, 40	konvex-quadratisches, 49	
	konvexes, 47, 48	
M	lineares, 11, 43	
Marktgleichgewicht, 58	mehrstufiges, 95	
	=	

Sachverzeichnis 203

quadratisches, 76 Ordnung gute, 149 totale, 148 Outer Approximation, 131 P Papay, 175 Peak-Load-Pricing-Problem, 54, 57	Schnitt, 11 Kapazität, 11 Sensitivitätsanalyse, 50 Simplex, 146 SOS-1-Bedingung, 118, 168 Spaltenerzeugung, 29 Spatial branching, 141 Spotmarkt, 84 Steinerbaum-Problem, 34 Strombörse, 15
Phasenwinkel, 85 Pooling-Problem, 191 Potential, 104 Verlustfunktion, 104 Preisnehmer, 58 Preiszone, 109	T Triangulierung, 146 Facetten-adjazente, 150
flussinduzierte, 109 Pricing-Problem, 30 PTDF-Matrix, 85	U Überschätzer, konkaver, 137 Umlaufplanung, 30 Unterschätzer Alpha-Unterschätzer, 140
R Realgasfaktor, 175, 186 Redispatch, 88	konvexer, 137
kostenbasierter, 89 Regler, 184 Bypass-Modus, 184 Regularitätsbedingung, 40 Reibung, 117, 181 Relaxierung, 127, 151	V Verdichter, 185 Turboverdichter, 186 Verdichterstation, 187
MIP, 133 NLP, 128 Reynoldszahl, 182 Rohr Gas, 179 Wasser, 115	W Wassernetz, 113 Water Hammer Equations, 122 Wegformulierung, 28 Wettbewerb, vollständiger, 58 Widerstand, 183 Wohlfahrt, 61
S s-t-Fluss, 10 s-t-Schnitt, 11 Schieber, 183	Z Zirkulation, 12, 20 Zustandsgleichung, 175, 179, 181





Willkommen zu den Springer Alerts

Jetzt anmelden!

 Unser Neuerscheinungs-Service für Sie: aktuell *** kostenlos *** passgenau *** flexibel

Springer veröffentlicht mehr als 5.500 wissenschaftliche Bücher jährlich in gedruckter Form. Mehr als 2.200 englischsprachige Zeitschriften und mehr als 120.000 eBooks und Referenzwerke sind auf unserer Online Plattform SpringerLink verfügbar. Seit seiner Gründung 1842 arbeitet Springer weltweit mit den hervorragendsten und anerkanntesten Wissenschaftlern zusammen, eine Partnerschaft, die auf Offenheit und gegenseitigem Vertrauen beruht.

Die SpringerAlerts sind der beste Weg, um über Neuentwicklungen im eigenen Fachgebiet auf dem Laufenden zu sein. Sie sind der/die Erste, der/die über neu erschienene Bücher informiert ist oder das Inhaltsverzeichnis des neuesten Zeitschriftenheftes erhält. Unser Service ist kostenlos, schnell und vor allem flexibel. Passen Sie die SpringerAlerts genau an Ihre Interessen und Ihren Bedarf an, um nur diejenigen Information zu erhalten, die Sie wirklich benötigen.

Mehr Infos unter: springer.com/alert