

文章编号: 1001-0920(2011)11-1749-04

## 基于高斯伪谱法的分区联立动态优化策略

王平, 田学民

(中国石油大学(华东)信息与控制工程学院, 山东 青岛 266555)

**摘要:** 最优控制轨迹通常由不同类型的弧段组成, 采用数值方法求解这类问题时, 其优化轨迹的不连续性可能导致求解失败, 为此基于高斯伪谱法, 提出一种分区联立动态优化求解策略. 该策略通过对优化时域合理分区, 避免了由于控制轨迹不连续而导致的病态优化问题. 另外, 通过联立求解分区后的优化问题, 能够满足各分区间的连接条件, 而且可以使用较少的节点获得高质量的优化解. 最后以抗生素发酵过程为例验证了所提出算法的有效性.

**关键词:** 动态优化; 高斯伪谱法; 弧段; 分区联立

**中图分类号:** TP273

**文献标识码:** A

## Partitioning and simultaneous strategy for dynamic optimization by Gauss pseudo-spectral method

WANG Ping, TIAN Xue-min

(College of Information and Control Engineering, China University of Petroleum (East China), Qingdao 266555, China.  
Correspondent: TIAN Xue-min, E-mail: tianxm@hdpu.edu.cn)

**Abstract:** The optimal solution of dynamic optimization problems generally consists of different kinds of arcs. And the inherent discontinuous nature of optimal control profiles may pose problems to numerical solution methods. Therefore, based on Gauss pseudo-spectral method, a partitioning and simultaneous strategy for dynamic optimization problem is presented. Through partitioning, the ill-condition problem caused by the discontinuity of optimal control profile can be avoided. In addition, the optimization problems obtained after the partition is solved in a simultaneous way and the solution can satisfy the linkage constraints. Finally simulation study shows the effectiveness of the proposed strategy.

**Key words:** dynamic optimization; Gauss pseudo-spectral method; arcs; partitioning and simultaneous

### 1 引言

动态优化问题的最优控制轨迹通常由多个不同类型的弧段组成<sup>[1]</sup>. 控制变量在各弧段内是连续可微的, 但在弧段之间可能会发生跳变; 控制轨迹这种固有的不连续性则可能导致求解算法的不稳定<sup>[2]</sup>. 文献[1-2]揭示了最优控制轨迹各弧段类型与最优性的必要条件的对应关系. 基于自适应控制向量参数化算法, [3-4]提出一种具有自动检测切换结构功能的动态优化数值求解方法; [5]研究了间歇发酵过程在不同优化时间下的奇异优化控制问题, 但没有考虑路径约束对优化的影响.

伪谱法(PM)以高阶插值多项式为基函数在整个优化时域内近似优化变量, 能够用较少的配置点获得很高的近似精度<sup>[6]</sup>. 本文则基于高斯伪谱法, 提出了

一种分区联立动态优化求解策略. 其中: 分区是指将原动态优化问题分为多个定义在不同优化时域内的子动态优化问题, 每个子问题都对应一个弧段; 联立是指采用高斯伪谱法将各子问题离散化, 由连接条件转化为一个非线性规划问题求解. 通过分区可以避免由于控制轨迹不连续而导致的病态优化问题, 而联立求解的结果则满足各分区的连接条件, 保证了与原优化问题的一致性. 本文最后以抗生素发酵过程为例验证了所提出算法的有效性.

### 2 问题描述

连续动态优化问题P1通常描述为

$$\min_{u(t), t_0, t_f} J = \Phi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} g(x(t), u(t), t) dt. \quad (1a)$$

收稿日期: 2010-05-12; 修回日期: 2011-05-26.

基金项目: 国家高技术研究发展计划项目(2007AA04Z193).

作者简介: 王平(1983—), 男, 博士生, 从事复杂系统的先进控制与优化的研究; 田学民(1955—), 男, 教授, 博士生导师, 从事过程动态模拟、先进控制与优化等研究.

$$\begin{aligned} \text{s.t. } \dot{x}(t) &= f(x(t), u(t), t), x(t_0) = x_0; \\ \varphi(x(t_0), t_0, x(t_f), t_f) &\leq 0; \\ C(x(t), u(t), t) &\leq 0, t \in [t_0, t_f]. \end{aligned} \quad (1b)$$

式中:  $u(t) \in R^{n_u}$  为控制变量,  $x(t) \in R^{n_x}$  为状态变量,  $x_0$  为状态初值, 初始时刻为  $t_0$ , 终端时刻为  $t_f$ ;  $f(\cdot) \in R^{n_x}$  为过程模型,  $\varphi(\cdot) \in R^{n_\phi}$  为边界条件,  $C(\cdot) \in R^{n_c}$  为路径约束条件.

定义增广哈密尔顿函数

$$H(t) = g(x(t), u(t), t) + \lambda^T f(x(t), u(t), t) - \mu^T C(x(t), u(t), t). \quad (2)$$

式中:  $\lambda(t) \in R^{n_x}$  为伴随状态,  $\mu(t) \in R^{n_c}$  为路径约束的拉格朗日乘子. 最优解  $u(t)$  满足<sup>[1]</sup>

$$\frac{\partial H(t)}{\partial u(t)} = \frac{\partial g(\cdot)}{\partial u(t)} + \lambda^T \frac{\partial f(\cdot)}{\partial u(t)} - \mu^T \frac{\partial C(\cdot)}{\partial u(t)} = 0. \quad (3)$$

式(3)由两部分组成, 其中  $\left(\frac{\partial g(\cdot)}{\partial u_i(t)} + \lambda^T \frac{\partial f(\cdot)}{\partial u_i(t)}\right)$  由目标函数和过程模型确定,  $\left(\mu^T \frac{\partial C(\cdot)}{\partial u_i(t)}\right)$  由路径约束确定. 以  $t \in [t_{in}, t_{out}]$  内的一个弧段为例, 可能存在下述 4 种情况<sup>[1]</sup>:

- 1)  $u_i(t) = u_{i, \min}$ , 由控制下边界  $u_{i, \min}$  决定;
- 2)  $u_i(t) = u_{i, \max}$ , 由控制上边界  $u_{i, \max}$  决定;
- 3)  $u_i(t) = u_{i, \text{path}}$ , 由积极状态路径约束决定;
- 4)  $u_i(t) = u_{i, \text{sens}}$ , 由目标函数和过程模型决定.

通过对最优控制轨迹的分析发现<sup>[1]</sup>, 控制轨迹通常由上述几种不同类型的弧段组成, 且其在各弧段内是连续可微的, 但在弧段之间会发生跳变. 当采用直接法求解问题 P1 时, 需要将其转化为非线性规划问题 (NLP) 后求解<sup>[7]</sup>. 此时, 控制轨迹这种固有的不连续性可能会导致病态 NLP 问题的出现, 造成求解的不稳定<sup>[2]</sup>. 本文期望能够找到一种有效的数值求解策略, 以避免出现病态优化问题, 并提高优化解的精度.

### 3 高斯伪谱法

在特定的离散节点上, 伪谱法采用有限基函数近似状态变量和控制变量, 并通过多项式求导来近似状态变量对时间的导数. 与有限元正交配置法不同, 伪谱法以全局插值多项式为基函数来近似整个优化时域内的状态变量和控制变量, 可以用较少的节点获得很高的优化精度<sup>[6-9]</sup>. 对于连续光滑的动态优化问题, 伪谱法具有很快的收敛性, 通常可以达到指数阶收敛率, 具有所谓的谱精度<sup>[9]</sup>. 根据基函数和离散点的分布情况, 伪谱法又分为切比雪夫伪谱法、Legendre 伪谱法和高斯伪谱法等形式.

问题 P1 的优化时域为  $t \in [t_0, t_f]$ , 而高斯伪谱法定义在  $[-1, 1]$ , 通过如下时域变换:

$$\tau = \frac{2t}{t_f - t_0} - \frac{t_f + t_0}{t_f - t_0}, \quad (4)$$

可以将时间区间  $[t_0, t_f]$  变换至  $[-1, 1]$  内. 然后以  $K$  阶 Legendre 多项式的根  $(\tau_1, \dots, \tau_K)$  和  $\tau_0 = -1$  为配置节点, 构造  $K+1$  个拉格朗日插值多项式近似状态变量

$$\bar{x}(\tau) \approx \bar{X}(\tau) = \sum_{i=0}^K L_i(\tau) \bar{X}(\tau_i). \quad (5)$$

其中拉格朗日函数

$$L_i(\tau) = \prod_{j=0, j \neq i}^K \frac{\tau - \tau_j}{\tau_i - \tau_j}, \quad i=0, 1, \dots, K$$

满足

$$L_i(\tau) = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

因此, 在节点处的离散状态值与实际状态值相同, 即满足  $X(\tau_i) = x(\tau_i)$ ,  $i=0, 1, \dots, K$ . 同理, 构造  $K$  个拉格朗日函数  $\tilde{L}_k(\tau)$  近似控制变量

$$\bar{u}(\tau) \approx \bar{U}(\tau) = \sum_{k=1}^K \tilde{L}_k(\tau) \bar{U}(\tau_k). \quad (6)$$

对式(5)关于  $\tau$  求导, 得

$$\dot{\bar{x}}(\tau_k) \approx \dot{\bar{X}}(\tau_k) = \sum_{i=0}^K D_{ki}(\tau_k) \bar{X}(\tau_i), \quad (7)$$

式中微分矩阵  $D \in R^{K \times (K+1)}$  可以离线确定<sup>[8]</sup>. 最终, 过程模型由原来的微分方程转换为下述代数方程:

$$\sum_{i=0}^K D_{ki} \bar{X}(\tau_i) = \frac{t_f - t_0}{2} f(\bar{X}(\tau_k), \bar{U}(\tau_k), \tau_k, t_0, t_f). \quad (8)$$

这里使用高斯积分近似终端时刻的状态变量

$$\begin{aligned} \bar{X}(\tau_f) = \\ X(\tau_0) + \frac{t_f - t_0}{2} \sum_{k=1}^K w_k f(\bar{X}(\tau_k), \bar{U}(\tau_k), \tau_k, t_0, t_f), \end{aligned} \quad (9)$$

式中  $w_k$  为高斯权值. 同理, 除了离散状态变量和控制变量外, 还需要近似问题 P1 中的积分项. 这里使用高斯积分来近似目标函数(1)中的积分项

$$J = \frac{t_f - t_0}{2} \sum_{k=1}^K w_k g(\bar{X}(\tau_k), \bar{U}(\tau_k), \tau_k, t_0, t_f). \quad (10)$$

最终, 采用高斯伪谱法便可将动态优化问题 P1 转化为一个非线性规划问题 (NLP) P2, 即求满足代数约束(8)和(9)以及离散路径约束

$$C(\bar{X}(\tau_k), \bar{U}(\tau_k), \tau_k, t_0, t_f) \geq 0 \quad (11)$$

的状态变量  $\bar{X}_i$  和控制变量  $\bar{U}_k$ , 使目标函数(10)最小.

高斯伪谱法所具有的一个重要性质是, 从理论上证明了非线性规划问题 P2 的最优解一定满足原动态优化问题 P1 的一阶最优性必要条件. 这便克服了其他直接法所求得的最优解不一定满足一阶最优性必

要条件的缺点. 上述性质可描述为下述协态映射定理<sup>[8]</sup>:

**定理 1** 问题 P2 的 KKT 条件与基于高斯伪谱法离散化的问题 P1 的一阶最优必要条件是完全等价的, 且在初始时刻、终端时刻及 Legendre-Gauss 配置点上的伴随状态与拉格朗日乘子  $\tilde{\Lambda}_k, \tilde{\Lambda}_f, \tilde{\mu}_k$  满足

$$\begin{aligned} \Lambda_k &= \frac{\tilde{\Lambda}_k}{w_k} + \tilde{\Lambda}_f, \\ \Lambda_0 &= \tilde{\Lambda}_0 = \tilde{\Lambda}_f - \sum_{i=1}^K D_{i0} \tilde{\Lambda}_i, \\ \Lambda_f &= \tilde{\Lambda}_f, \mu_k = \frac{2}{t_f - t_0} \frac{\tilde{\mu}_k}{w_k}. \end{aligned} \quad (12)$$

式中:  $\Lambda_0, \Lambda_k$  为问题 P1 的离散伴随状态变量;  $\mu_k$  为关于路径约束的拉格朗日乘子.

## 4 分区联立动态优化求解策略

### 4.1 分区策略

当问题 P1 的最优控制轨迹不连续时, 由高斯伪谱法离散得到的问题 P2 是一个病态 NLP 问题, 难以获得精确解. 另外, 若选择  $K$  个配置点离散化, 则问题 P2 的维数为  $n_x(K+2) + n_u K + 2$ . 当  $K$  较大时, 求解问题 P2 的耗时很长, 且容易收敛到局部解, 甚至不可行解<sup>[10]</sup>.

为避免得到一个病态和高维的非线性规划问题, 在问题 P1 转化为 NLP 求解之前, 应根据组成控制轨迹的弧段顺序对优化时域  $[t_0, t_f]$  合理分区, 使每个分区都对应着一个特定弧段. 另外, 根据弧段类型选择不同节点数进行离散化可以有效地降低 NLP 的维数. 如当  $u_i = u_{i,\min}$  或  $u_i = u_{i,\max}$  时, 可选择较少节点离散化; 当  $u_i = u_{i,\text{path}}$  或  $u_i = u_{i,\text{sens}}$  时, 为保证优化解可行, 应选择较多节点数进行逼近.

为获得组成控制轨迹的弧段顺序等信息, 这里首先使用全局高斯伪谱法在整个优化时域内离散问题 P1 并求解; 然后, 利用非线性规划求解器提供的乘子信息, 基于协态映射定理计算得到离散伴随状态并依此判断控制轨迹是否由积极路径约束所决定, 最终获得组成控制轨迹的弧段顺序和类型. 实施上述分区策略的关键在于, 全局高斯伪谱法的求解结果能够完全揭示最优轨迹所包含的切换信息. 考虑到动态优化问题的增广哈密顿函数在最优轨迹上对时间的全导数等于其对时间的偏导数<sup>[10]</sup>, 当问题 P1 不显含时间时, 哈密顿函数最优值是一个常数. 因此, 比较哈密顿函数的计算值与最优值的近似程度, 可以检验解的最优性和选择配置点个数, 进而判断出高斯伪谱法的求解结果是否已经充分揭示出控制轨迹的切换信息.

### 4.2 联立求解策略

基于上述分区策略只能得到弧度的切换顺序, 而要得到具体的切换时间点则需要对分区后的问题 P1 联立求解. 假设优化时域  $[t_0, t_f]$  被划分为  $N$  个子区域  $[t_{i-1}, t_i]$ ,  $1 \leq i \leq N$ , 则此时联立求解的目标为各分区子动态优化问题的目标函数之和, 即

$$\min_{x_i, u_i, t_0, t_i, t_f} J = \Phi(x_N(t_f), t_f) + \sum_{i=1}^N \left( \int_{t_{i-1}}^{t_i} g(x_i(t), u_i(t), t) dt \right).$$

优化变量为各分区的初始时刻和终端时刻  $[t_{i-1}, t_i]$  以及控制变量和状态变量. 另外, 因为各分区在时间上是连续的, 所以满足  $t_f^i = t_0^{i+1}$ ,  $t_f^i$  为  $i$  分区的终端时刻,  $t_0^{i+1}$  为  $i+1$  分区的初始时刻. 因此, 状态变量在切换时间点处满足下述连接条件:

$$x_i(t_f^i) = x_{i+1}(t_0^{i+1}), \quad 1 \leq i \leq N-1. \quad (13)$$

这里采用高斯伪谱法求解上述联立的动态优化问题. 伪谱法同时离散状态变量和控制变量, 将微分方程转化为代数约束, 模型方程仅在最优点处求解一次, 而无需对微分方程多次积分, 能够有效地降低优化耗时且能够灵活地处理路径约束. 但是, 将状态变量和控制变量作为优化变量, 需要特殊的求解策略才能保证求解的收敛性和收敛速度<sup>[10]</sup>. 为充分利用 NLP 问题的稀疏性, 本文采用稀疏非线性优化器 SNOPT 求解<sup>[11]</sup>所得到的非线性规划问题. SNOPT 应用稀疏序列二次规划 (SQP) 算法求解非线性约束, 每次迭代通过调整超基变量求解二次规划子问题. 算法采用有限内存的拟牛顿法来近似拉格朗日函数的 Hessian 矩阵, 并用扩展的拉格朗日评价函数来加速收敛.

## 5 抗生素发酵过程优化

抗生素发酵优化问题源于文献 [3], 生化罐内发生反应  $S \rightarrow X, S \xrightarrow{X} P$ , 过程模型为

$$\begin{cases} \dot{X} = \mu X - \frac{u}{V} X, & X(0) = X_0; \\ \dot{S} = -\frac{\mu X}{Y_x} - \frac{vX}{Y_p} + \frac{u}{V} (S_{\text{in}} - S), & S(0) = S_0; \\ \dot{P} = vX - \frac{u}{V} P, & P(0) = P_0; \\ \dot{V} = u, & V(0) = V_0. \end{cases} \quad (14)$$

其中

$$\mu(S) = \frac{\mu_m S}{K_m + S + \frac{S^2}{K_i}}, \quad v(S) = \frac{v_m S}{S + K_0},$$

$X$  为菌体浓度,  $S$  为限制性基质浓度,  $P$  为抗生素浓度, 控制变量  $u$  为流加速率. 抗生素发酵过程的优化目的是, 控制流加速率  $u$ , 在满足菌体浓度的约束条件

下,最大化末端时刻产品  $P$  的浓度<sup>[3]</sup>.

首先,不考虑控制轨迹的不连续性对该动态优化问题求解的影响,直接使用全局高斯伪谱法在优化时域  $[0, 8\text{h}]$  内求解. 当节点数  $K = 60$  时,优化结果如图 1 和图 2 所示. 此时得到的最优目标函数值  $P^*(t_f) = 6.2350$ , 非常接近文献 [3] 报道的最好结果. 但由图 1 可知,此时控制变量振荡发散,说明控制轨迹的不连续性导致病态 NLP 问题的出现,使得求解过程不稳定. 当增加节点数至 80, 100, 甚至更多时,最优目标函数值和控制轨迹均无明显改进.

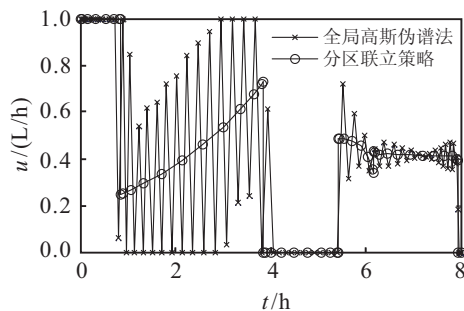


图 1 控制轨迹  $u(t)$

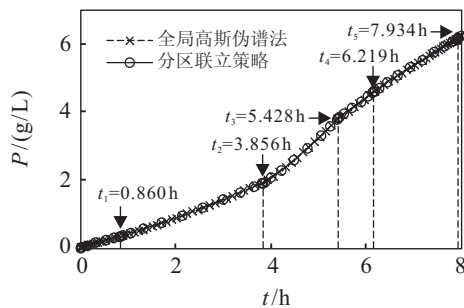


图 2 产品  $P(t)$  的浓度变化

为解决上述问题,基于分区策略将优化时域分为 6 个区域,并根据各分区对应的弧段类型,分别选择节点数  $K = 6, 10, 8, 6, 10, 2$  对分区后的优化问题重新离散并联立求解,所得结果如图 1 和图 2 所示. 此时优化得到的切换时间点为  $t_1 = 0.860\text{h}$ ,  $t_2 = 3.856\text{h}$ ,  $t_3 = 5.428\text{h}$ ,  $t_4 = 6.219\text{h}$ ,  $t_5 = 7.934\text{h}$ , 最优目标函数值  $P^*(t_f) = 6.2352$ . 尽管目标函数无明显改善,但由图 1 可以清楚地看到,此时控制轨迹除了在切换点处跳变外,在其他各个弧段内都是连续光滑的.

## 6 结 论

采用直接法求解动态优化问题时,控制轨迹的不连续性可能导致优化算法不稳定,为此提出一种分区联立动态优化策略. 基于协态映射定理,利用分区策略分析控制轨迹的弧段类型和顺序;然后使用联立求解策略得到最优切换时间点和控制轨迹. 抗生素发酵

过程的研究表明,所提出的策略能够使用较少的节点获得高质量的控制轨迹.

## 参考文献(References)

- [1] Srinivasan B, Palanki S, Bonvin D. Dynamic optimization of batch processes I. Characterization of the nominal solution[J]. Computers and Chemical Engineering, 2003, 27(15): 1-26.
- [2] Schlegel M, Marquardt W. Detection and exploitation of the control switching structure in the solution of dynamic optimization problems[J]. J of Process Control, 2006, 16(3): 275-290.
- [3] Kadam J V, Schlegel M, Srinivasan B, et al. Dynamic optimization in the presence of uncertainty: From off-line nominal solution to measurement-based implementation[J]. J of Process Control, 2007, 17 (5): 389-398.
- [4] Schlegel M, Marquardt W. Adaptive switching structure detection for the solution of dynamic optimization problems[J]. Industrial and Engineering Chemistry Research, 2006, 45(24): 8083-8094.
- [5] Korytowski A, Szymkat M, Maurer H, et al. Optimal control of a fedbatch fermentation process numerical methods, sufficient conditions and sensitivity analysis[C]. Proc of the 47th IEEE Conf on Decision and Control. Mexico: Cancun, 2008: 1151-1156.
- [6] Geoffrey T, Huntington, Rao A V. A comparison between global and local orthogonal collocation methods for solving optimal control problems[C]. Proc of the 2007 American Control Conf. New York, 2007: 1950-1957.
- [7] Biegler L T. An overview of simultaneous strategies for dynamic optimization[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2007, 46(11): 1043-1053.
- [8] Huntington G T. Advancement and analysis of a gauss pseudospectral transcription for optimal control[D]. Cambridge: Massachusetts Institute of Technology, 2007.
- [9] Benson D A, Huntington G T, Thorvaldsen T P, et al. Direct trajectory optimization and costate estimation via an orthogonal collocation method[J]. J of Guidance, Control and Dynamics, 2006, 29(6): 1435-1440.
- [10] Betts J T. Practical methods for optimal control using nonlinear programming[M]. Philadelphia: SIAM Press, 2001: 92-98.
- [11] Gill P E, Murray W, Saunders M A. SNOPT: An SQP algorithm for large-scale constrained optimization[J]. SIAM J on Optimization, 2002, 12(4): 979-1006.