OTTO VON GUERICKE UNIVERSITÄT MAGDEBURG

MATH FAKULTÄT FÜR MATHEMATIK

Forschungsbericht 2021

Institut für Mathematische Optimierung

INSTITUT FÜR MATHEMATISCHE OPTIMIERUNG

Universitätsplatz 2, 39106 Magdeburg
Tel. 49 (0)391 67 58756, Fax 49 (0)391 67 41171
imo@uni-magdeburg.de

1. LEITUNG

Prof. Dr. Sebastian Sager (geschäftsführender Leiter bis 31.03.2021)
Prof. Dr. Volker Kaibel (geschäftsführender Leiter seit 01.04.2021)

2. HOCHSCHULLEHRER/INNEN

Prof. Dr. Volker Kaibel
Prof. Dr. Sebastian Sager
apl. Prof. Dr. Frank Werner (bis 28.02.2021)

im Ruhestand:
Prof. Dr. Dr. h.c. Eberhard Girlich
Prof. Dr. Friedrich Juhnke

3. FORSCHUNGSPROFIL

- Gemischt-ganzzahlige Optimalsteuerung
- Gemischt-ganzzahlige nichtlineare Optimierung
- Echtzeitoptimierung unter Unsicherheiten
- Optimierungsmethoden zur Unterstützung und zum Training von Entscheidungen
- Numerische Methoden zur optimalen Versuchsplanung
- Deterministische Approximation von stochastischen Steuerproblemen
- Schnittebenen in der ganzzahligen Optimierung
- Erweiterte Formulierungen für Optimierungsprobleme
- Polyedrische Kombinatorik
- Darstellung semi-algebraischer Mengen
- Untersuchung zur Komplexität von Scheduling-Problemen
- Untersuchung von Scheduling-Problemen mit Intervallbearbeitungszeiten
- Optimierung und Maschinelles Lernen

4. KOOPERATIONEN

- Avacon AG Deutschland
- BASF
- Daimler
- Deutsche Lufthansa
- mathe.medical

- MPI Magdeburg
- Volkswagen

5. FORSCHUNGSPROJEKTE

Projektleitung: Prof. Dr. Achim Kienle, Prof. Dr. Sebastian Sager, Prof. Dr. Andreas Seidel-Morgenstern
Kooperationen: MPI Magdeburg
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2021 - 30.09.2024

Machine Learning for the Design and Control of Power2X Processes with Application to Methanol Synthesis

Ziele dieses Projektes sind:

1. Die Entwicklung neuer numerischer Methoden, welche die Stärken traditioneller Modellierungs- und Optimierungsansätze und des datengetriebenen maschinellen Lernens (ML) kombinieren sowie deren Anwendung zur
2. Entwicklung einer neuen Methodik für den Entwurf und die Führung von Power2chemicals Prozessen. Die nichtlineare Dynamik infolge stark veränderlicher Feedzuläufe soll dabei explizit berücksichtigt werden. Die Methanolsynthese wird als herausforderndes Anwendungsbeispiel betrachtet. Das ambitionierte Arbeitsprogramm spiegelt die komplementäre Expertise der drei Antragsteller in den Bereichen experimentelle Analyse, konzeptioneller Prozessentwurf und -führung sowie effiziente Algorithmen wieder. Wir verwenden neuronale Differentialgleichungen und differenzierbare End-zu-End Programmierung. Dies erlaubt uns ML für unbekannte oder teuer auszuwertende Modellteile zu nutzen und Methoden der gemischt-ganzzahligen Optimalsteuerung (MIOC) und der Versuchsplanung für hybride Modelle zu entwickeln. Daraus wird eine Methodik zur hybriden Modellierung entwickelt. Diese kombiniert experimentelle Daten aus Versuchen mit einem gradientenfreien Kinetikreaktor mit verfügbarem physikalisch-chemischem Wissen und effizientem ML. Anschließend werden die hybriden Modelle für den robusten Prozessentwurf verwendet. In der ersten Antragsphase liegt der Schwerpunkt bei ideal durchmischten isothermen und örtlich verteilten nichtisothermen Reaktoren. Zur Erhöhung von Flexibilität und Toleranz gegenüber Änderungen von Durchsatz und Zusammensetzung werden Pufferbehälter eingeführt und neben einstufigen auch verschiedene Typen von mehrstufigen Reaktoren mit variabler Feedverteilung betrachtet. Die optimale Konfiguration und die optimalen nominellen Steuerungsprofile werden mit Hilfe von MIOC und den entwickelten hybriden Modellen für charakteristische Feedverläufe bestimmt. Zusätzlich zum robusten Prozessentwurf wird in einem dritten Schritt eine robuste Regelung zur Kompensation von Modellfehlern und unvorhergesehenen Abweichungen vom obigen nominellen Fall entwickelt. Diese basiert auf einer repetitiven Online-Optimierung und erfordert weitere Modellreduktionen und Erweiterung von Methoden für den Fall hybrider Modelle, um Echtzeitanforderungen einzuhalten. Modellierung, Design und Regelung für einen gradientenfreien Reaktor lehnen sich eng an die experimentellen Untersuchungen an, um eine effiziente Erzeugung von Daten und eine Validierung der entwickelten Konzepte zu gewährleisten. Untersuchung von komplexeren Festbettreaktoren werden zunächst in Silico mit Hilfe verfügbarer mechanistischer Modelle durchgeführt und sollen u.a. in einer möglichen 2. Förderphase experimentell validiert werden. Wir generieren neue Ansätze zur systematischen hybriden Modellierung und der anschließenden Verbindung mit Entscheidungsfindung, die physikalische Gesetze berücksichtigen und durch Robustheit die Sicherheit von ML Anwendungen erhöhen.

Projektleitung: Prof. Dr. Thomas Richter, Prof. Dr. Peter Benner, Prof. Dr. Sebastian Sager
Förderer: Deutscher Akademischer Austauschdienst e.V. (DAAD) - 01.01.2019 - 31.12.2022

Peruvian Competence Center of Scientific Computing Stärkung des wissenschaftlichen Rechnens in der Lehre in Peru

Die Angewandte Mathematik und das Wissenschaftliche Rechnen mit dem Fokus Modellbildung, Simulation und Optimierung nimmt weltweit einen zentralen und größer werdenden Stellenwert ein. Die numerische Simulation und Optimierung sind - neben dem Experiment - in vielen wissenschaftlichen Anwendungen zunehmend etabliert. Diese Entwicklung wurde in den letzten Jahrzehnten durch die Verfügbarkeit leistungsfähiger Computer und die damit verbundene mathematische Grundlagenforschung beschleunigt. Obwohl die technischen Voraussetzungen

auch in Ländern wie Peru gegeben sind, ist die Disziplin Wissenschaftliches Rechnen hier noch nicht vertreten. Dies liegt an einem streng theoretischem Fokus der Mathematik in Peru, der fehlenden Ausbildung von DozentInnen in Bereichen der Angewandten Mathematik und einem resultierenden Mangel an entsprechenden Studienprogrammen.
In diesem Projekt verfolgen wir mehrere, eng verwandte Ziele: an der Universidad Nacional Agraria La Molina unterstützen wir die derzeit geplante Einrichtung eines Studiengangs Angewandte Mathematik, an der Universidad Nacional de Trujillo und der Pontificia Universidad Católica del Perú unterstützen wir die Weiterentwicklung der vorhandenen Studiengänge und die Entwicklung neuer Forschungslinien zur Stärkung des wissenschaftlichen Rechnens und etablieren Austauschprogramme mit deutschen Hochschulen. Begleitend initiieren wir mit diesen und weiteren Partnern die Einrichtung eines transregionalen Kompetenzzentrums Scientific Computing mit dem Arbeitstitel Peruvian Competence Center of Scientific Computing (PeC3), um eine Vernetzung der Player zum Schaffen von Synergien und eine nachhaltige Verstetigung der Maßnahmen zu erreichen.
Die Einrichtung und Weiterentwicklung von Studiengängen erfordert eine Schulung der DozentInnen in modernen Methoden des wissenschaftlichen Rechnens. Wesentliches Instrument hierzu sind Kurse und Workshops in Peru. Eine besondere Bedeutung kommt dem Einzug von praktischen Elementen in Lehr- und Lernformen zu. Weiter erarbeiten wir Kataloge aktueller und bewährter Literatur für die Lehre, aber werden auch geeignete Skripten, Übungsmaterialien und insbesondere gut dokumentierte wissenschaftliche Software bereitstellen. Schließlich ist die Co-Betreuung peruanischer Abschlussarbeiten von deutscher Seite vorgesehen, um eine Internationalisierung und einen gegenseitigen Erfahrungsaustausch zu erreichen. Darüber hinaus planen wir ein Austauschprogramm, um ein gegenseitiges Begleiten und Kennenlernen von Lehrver-
anstaltungen sowie Verwaltungs- und Forschungsstrukturen zu ermöglichen.
Die Maßnahmen werden unter die Schirmherrschaft eines neu zu gründenden Kompetenzverbunds PeC3 gestellt, um so eine Institutionalisierung und eine Identifikation mit den Maßnahmen zu erzeugen. Dabei denken wir an einen ideellen Verbund im Sinne des WIR - Wissenschaftlichen Rechnen in Baden-Württemberg oder des NoKo - Northern German Colloquium on Applied Analysis and Numerical Mathematics, welches identitätsstiftend für das gesamte Projekt wirkt. Dieser Verbund wird weiteren interessierten Partnern in Südamerika, aber auch kooperierenden Partnern in Europa und Nordamerika offen stehen und soll langfristig als Plattform die Aktivitäten im Bereich Wissenschaftliches Rechnen bündeln und vertreten.
Durch bisher vier vom DAAD finanzierte Sommerschulen sowie der Mitarbeit bei der Etablierung von Promotionsprogrammen sind wir in Südamerika, insbesondere in Peru, bestens vernetzt und kennen die Stärken und Schwächen im Universitätssystem. Von diesem Projekt erhoffen wir uns eine strukturelle Stärkung der Lehre auf dem Gebiet des wissenschaftlichen Rechnens in Peru, die langfristig auch auf die Forschung wirkt. Wir profitieren von einer Institutionalisierung des Kontakts, welche auch zu einer Internationalisierung unserer Hochschulen und zu Austauschmöglichkeiten mit entsprechenden Studiengängen in Deutschland führt.

Projektleitung:	Prof. Dr. Sebastian Sager
Kooperationen:	Argonne National Lab, Sven Leyffer; TU Braunschweig, Prof. Christian Kirches
Förderer:	Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.10.2016 - 30.09.2022

Nichtglatte Verfahren für auf Komplementaritäten basierende Formulierungen geschalteter Advektions-Diffusions-Prozesse

Teilprojekt innerhalb des Schwerpunktprogrammes 1962 "Nichtglatte Systeme und Komplementaritätsprobleme mit verteilten Parametern: Simulation und mehrstufige Optimierung" der Deutschen Forschungsgemeinschaft. Ziel ist es, in Kooperation mit Christian Kirches (TU Braunschweig) und Sven Leyffer (Forschungszentrum Argonne, USA) neuartige mathematische Optimierungsmethoden zu entwickeln, die die besonderen Strukturen der geschalteten PDE Nebenbedingungen berücksichtigen.

Projektleitung: Prof. Dr. Sebastian Sager
Projektbearbeitung: Prof. Dr. Thomas Richter, Prof. Dr. Alexandra Carpentier, Jun.-Prof. Dr. Jan Heiland, Prof. Dr. Petra Schwer, Prof. Dr. Anja Janßen, Prof. Dr. Peter Benner, Prof. Dr.-Ing. Rolf Findeisen, Prof. Dr. Thomas Kahle, Prof. Dr. Rainer Schwabe, Prof. Dr. Claudia Kirch, Prof. Dr. Alexander Pott, Prof. Dr. Benjamin Nill, Doz. Dr. Gennadiy Averkov, Prof. Dr. Volker Kaibel
Förderer: Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) - 01.04.2017 - 31.03.2026

Mathematische Komplexitätsreduktion (GRK 2297/1)

Das Projekt wird von den genannten Principal Investigators getragen. Diese sind den Instituten für Mathematische Optimierung (Averkov, Kaibel, Sager), für Algebra und Geometrie (Kahle, Nill, Pott), für Mathematische Stochastik (Kirch, Schwabe) und für Analysis und Numerik (Benner) der Fakultät zugeordnet. Benner ist zudem Direktor des Max-Planck Institutes für Dynamik komplexer technischer Systeme. Die Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik ist über Findeisen beteiligt.

Im Kontext des vorgeschlagenen Graduiertenkollegs (GK) verstehen wir Komplexität als eine intrinsische Eigenschaft, die einen mathematischen Zugang zu einem Problem auf drei Ebenen erschwert. Diese Ebenen sind eine angemessene mathematische Darstellung eines realen Problems, die Erkenntnis fundamentaler Eigenschaften und Strukturen mathematischer Objekte und das algorithmische Lösen einer mathematischen Problemstellung. Wir bezeichnen alle Ansätze, die systematisch auf einer dieser drei Ebenen zu einer zumindest partiellen Verbesserung führen, als mathematische Komplexitätsreduktion.

Für viele mathematische Fragestellungen sind Approximation und Dimensionsreduktion die wichtigsten Werkzeuge auf dem Weg zu einer vereinfachten Darstellung und Rechenzeitgewinnen. Wir sehen die Komplexitätsreduktionin einem allgemeineren Sinne und werden zusätzlich auch Liftings in höherdimensionale Räume und den Einfluss der Kosten von Datenerhebungen systematisch untersuchen. Unsere Forschungsziele sind die Entwicklung von mathematischer Theorie und Algorithmen sowie die Identifikation relevanter Problemklassen und möglicher Strukturausnutzung im Fokus der oben beschriebenen Komplexitätsreduktion.

Unsere Vision ist ein umfassendes Lehr- und Forschungsprogramm, das auf geometrischen, algebraischen, stochastischen und analytischen Ansätzen beruht und durch effiziente numerische Implementierungen komplementiert wird. Die Doktorandinnen und Doktoranden werden an einem maßgeschneiderten Ausbildungsprogramm teilnehmen. Dieses enthält unter anderem Kompaktkurse, ein wöchentliches Seminar und ermutigt zu einer frühzeitigen Integration in die wissenschaftliche Community. Wir erwarten, dass das GK als ein Katalysator zur Etablierung dieser erfolgreichen DFG-Ausbildungskonzepte an der Fakultät für Mathematik dienen und zudem helfen wird, die Gleichstellungssituation zu verbessern.

Die Komplexitätsreduktion ist ein elementarer Aspekt der wissenschaftlichen Hintergründe der beteiligten Wissenschaftler. Die Kombination von Expertisen unterschiedlicher mathematischer Bereiche gibt dem GK ein Alleinstellungsmerkmal mit großen Chancen für wissenschaftliche Durchbrüche. Das GK wird Anknüpfungspunkte an zwei Fakultäten der OVGU, an ein Max Planck Institut und mehrere nationale und internationale Forschungsaktivitäten in verschiedenen wissenschaftlichen Communities haben. Die Studierenden im GK werden in einer Fülle von mathematischen Methoden und Konzepten ausgebildet und erlangen dadurch die Fähigkeit, herausfordernde Aufgaben zu lösen. Wir erwarten Erfolge in der Forschung und in der Ausbildung der nächsten Generation führender Wissenschaftler in Akademia und Industrie.

Projektleitung: Prof. Dr. Sebastian Sager
Projektbearbeitung: Prof. Dr. Peter Benner, Prof. Dr. Kai Sundmacher, Prof. Dr. Martin Stoll
Kooperationen: BASF AG (Deutschland); Avacon AG Deutschland
Förderer: Bund-Länder-Kommission für Bildungsplanung & Forschungsförderung - 01.04.2018 - 31.03.2021

Power to Chemicals (P2Chem)

Im Rahmen der Energiewende in der Bundesrepublik Deutschland steigt der Anteil erneuerbarer Energien im Versorgungssystem stetig an. Dieses impliziert Herausforderungen und Chancen, insbesondere im Umgang mit

Überhängen in der Stromproduktion. Wir betrachten Power-to-Chemicals (P2Chem) Prozesse, die Strom zur Herstellung von hochwertigen Chemikalien nutzen. Hierbei können grundsätzlich verschiedenste Komponenten wie katalytische Reaktoren oder Elektrolysezellen eingesetzt und miteinander kombiniert werden. Als Zielprodukt betrachten wir in diesem Projekt Synthesegas (SG), aus dem man viele wichtige Basischemikalien wie Methanol, Ameisensäure oder Phosgen erzeugen kann, wenn man die H2-zu-CO-Zusammensetzung auf verschiedene Niveaus einstellt. In P2Chem befassen wir uns mit der mathematischen Analyse dieser Prozesse und den treibenden Fragestellungen unserer Industriepartner, der Avacon AG als großem deutschen Energieversorger und der BASF SE als weltgrößtem Chemieunternehmen.

Es gibt eine große Anzahl denkbarer Verschaltungen zwischen Reaktions- und Separationsschritten zur Konversion auftretender stofflicher Gemische. Wir möchten erstmals systematisch und mit Hilfe moderner Mathematik untersuchen, welche Varianten von P2Chem unter welchen Rahmenbedingungen sinnvolle Beiträge zur Nutzung erneuerbarer Energie zur Chemieproduktion leisten können.

Neben der Wirtschaftlichkeit und Ankopplungsmöglichkeiten an Gas- und Stromnetzwerke sind die Sicherheit und die Flexibilität der Prozessführung sehr wichtig. Es geht hier um das schnelle Reagieren auf zeitlich variierende Randbedingungen (Strompreis, Qualität biogener Rohstoffe, Preis von CO2-Emissionszertifikaten, Preis der erzeugten chemischen Produkte).
Dabei müssen rechtliche, ökonomische und ökologische Aspekte sowie sicherheitstechnische Restriktionen der einzelnen Teilprozesse berücksichtigt werden.

6. EIGENE KONGRESSE, WISSENSCHAFTLICHE TAGUNGEN UND EXPONATE AUF MESSEN

MathCoRe: Annual Colloquium Potsdam
03.10.2021 - 05.10.2021

7. VERÖFFENTLICHUNGEN

BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFSÄTZE

Khodabandeh, Pouria; Kayvanfar, Vahid; Rafiee, Majid; Werner, Frank
A bi-objective home health care routing and scheduling model with considering nurse downgrading costs
International journal of environmental research and public health: IJERPH - Basel: MDPI AG, Volume 18(2021), issue 3, article 900, 24 Seiten;
[Imp.fact.: 2.849]

Le, Do Duc; Merkert, Maximilian; Sorgatz, Stephan; Hahn, Mirko; Sager, Sebastian
Autonomous traffic at intersections - an optimization-based analysis of possible time, energy, and CO 2 savings
Networks: an international journal - New York, NY: Wiley . - 2021, insges. 26 S.;
[Imp.fact.: 5.059]

Minakowska, Martyna; Richter, Thomas; Sager, Sebastian
A finite element/neural network framework for modeling suspensions of non-spherical particles
Vietnam journal of mathematics: formerly Tạp chí Toán học (Journal of Mathematics) - Singapore: Springer, Bd. 49 (2021), 1, S. 207-235;

Orlovich, Yury; Kukharenko, Kirill; Kaibel, Volker; Skums, Pavel
Scale-free spanning trees and their application in genomic epidemiology
Journal of computational biology - Larchmont, NY: Liebert, Bd. 28 (2021), 10, S. 945-960;
[Imp.fact.: 1.479]

Robuschi, Nicolò; Zeile, Clemens; Sager, Sebastian; Braghin, Francesco
Multiphase mixed-integer nonlinear optimal control of hybrid electric vehicles
Automatica: a journal of IFAC, the International Federation of Automatic Control - Amsterdam [u.a.]: Elsevier, Pergamon Press, 123 (2021), Artikel 109325, insgesamt 10 Seiten;
[Imp.fact.: 5.541]

Shahedi, Alireza; Nasiri, Mohammad Mahdi; Sangari, Mohamad Sadegh; Werner, Frank; Jolai, Fariborz
A stochastic multi-objective model for a sustainable closed-loop supply chain network design in the automotive industry
Process integration and optimization for sustainability - [Singapore]: Springer Singapore . - 2021;

Uebbing, Jennifer; Biegler, Lorenz T.; Rihko-Struckmann, Liisa; Sager, Sebastian; Sundmacher, Kai
Optimization of pressure swing adsorption via a trust-region filter algorithm and equilibrium theory
Computers & chemical engineering: an international journal of computer applications in chemical engineering - Amsterdam [u.a.]: Elsevier Science, Bd. 151 (2021);
[Imp.fact.: 3.845]

Vakhania, Nodari; Werner, Frank
Branch less, cut more and schedule jobs with release and delivery times on uniform machines
Mathematics: open access journal - Basel: MDPI, Volume 9(2021), issue 6, article 633, 18 Seiten;
[Imp.fact.: 1.747]

Werner, Frank
2020 selected papers from algorithms editorial board members
Algorithms - Basel, Bd. 14.2021, 2, insges. 2 S.;
[Imp.fact.: 2.2]

Werner, Frank
Special Issue Mathematical methods for operations research problems
Mathematics - Basel: MDPI, Bd. 9 (2021), 21, insges. 4 S.;
[Imp.fact.: 2.258]

Zeile, Clemens; Rauwolf, Thomas; Schmeisser, Alexander; Mizerski, Jeremi Kaj; Braun-Dullaeus, Rüdiger; Sager, Sebastian
An intra-cycle optimal control framework for ventricular assist devices based on atrioventricular plane displacement modeling
Annals of biomedical engineering - Dordrecht [u.a.]: Springer Science + Business Media B.V, 1972, Bd. 49 (2021), insges. 16 S.;
[Imp.fact.: 3.934]

Zeile, Clemens; Robuschi, Nicolò; Sager, Sebastian
Mixed-integer optimal control under minimum dwell time constraints
Mathematical programming: Series A, Series B ; a publication of the Mathematical Programming Society - Berlin: Springer, Bd. 188 (2021), S. 653-694;
[Imp.fact.: 3.995]

NICHT BEGUTACHTETE ZEITSCHRIFTENAUFSÄTZE

Vakhania, Nodari; Werner, Frank
A polynomial algorithm for sequencing jobs with release and delivery times on uniform machines
Basel: MDPI, 2021, 1 Online-Ressource;

BEGUTACHTETE BUCHBEITRÄGE

Garmatter, Dominik; Maggi, Andrea; Wenzel, Marcus; Monem, Shaimaa; Hahn, Mirko; Stoll, Martin; Sager, Sebastian; Benner, Peter; Sundmacher, Kai
Power-to-chemicals - a superstructure problem for sustainable syngas production
Mathematical Modeling, Simulation and Optimization for Power Engineering and Management - Cham: Springer International Publishing; Göttlich, Simone . - 2021, S. 145-168 - (Mathematics in industry; volume 34);

HERAUSGEBERSCHAFTEN

Wagner, Gerd; Werner, Frank; Ören, Tuncer; De Rango, Floriano
11th International Conference on Simulation and Modeling Methodologies, Technologies and Applications 2021 - Editors: Gerd Wagner, Frank Werner, Tuncer Ören and Floriano De Rango ; SIMULTECH 2021, online streaming, 7-9 July 2021
[Setúbal, Portugal]: SCITEPRESS - Science and Technology Publications, Lda., 2021, Online-Ressource;
Kongress: International Conference on Simulation and Modeling Methodologies, Technologies and Applications 11 (Online : 2021.07.07-09)

DISSERTATIONEN

Himmel, Andreas; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]; Sager, Sebastian [AkademischeR BetreuerIn]
Optimization-based operation strategy and storage design for coupled processes
Magdeburg, 2021, e-o, 220 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 24 cm

Peters, Benjamin; Sager, Sebastian [AkademischeR BetreuerIn]
Monomial patterns in polynomial optimization
Magdeburg, 2021, VI, 125 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm

Uebbing, Jennifer; Sager, Sebastian [AkademischeR BetreuerIn]; Sundmacher, Kai [AkademischeR BetreuerIn]
Power-to-methane process synthesis via mixed integer nonlinear programming
Magdeburg, 2021, XII, 167 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm

Zeile, Clemens; Sager, Sebastian [AkademischeR BetreuerIn]
Combinatorial integral decompositions for mixed-integer optimal control
Magdeburg, 2021, VIII, 254 Seiten, Illustrationen, Diagramme, 30 cm