

# Quasi-Monte Carlo Methoden für Optimierungsmodelle der Energiewirtschaft mit Preis- und Last-Prozessen

Dipl.-Math. **H. Leövey**, Prof. Dr. **W. Römisch**, Humboldt-Universität zu Berlin

## Kurzfassung

Wir diskutieren Fortschritte bei Quasi-Monte Carlo Methoden zur numerischen Berechnung von Integralen bzw. Erwartungswerten und begründen warum diese Methoden effizienter sind als die klassischen Monte Carlo Methoden. Quasi-Monte Carlo Methoden erweisen sich als besonders effizient, falls die Integranden eine geringe effektive Dimension besitzen. Deshalb diskutieren wir auch den Begriff effektive Dimension und weisen am Beispiel eines stochastischen Optimierungsmodell aus der Energiewirtschaft nach, dass solche Modelle eine niedrige effektive Dimension besitzen können. Moderne Quasi-Monte Carlo Methoden sind deshalb für solche Modelle sehr erfolgversprechend.

## 1 Einleitung

Optimierungsprobleme der Energiewirtschaft enthalten häufig unsichere Parameter wie die Marktpreise für Strom und Primärenergieträger, die elektrische Last, Zuflüsse, und der durch Wind- und Solarenergie erzeugte Strom. Abhängig vom betrachteten Zeithorizont können dabei sehr große Zufallsvektoren entstehen, die auf sehr verschiedene Art und Weise, z.B. mittels Zeitreihen oder durch direkte Schätzung multivariater Wahrscheinlichkeitsverteilungen modelliert werden können. Meist ist es dann Standard, dass mittels (Pseudo-) Zufallszahlengeneratoren, d.h. mit Hilfe von Monte Carlo (MC) Methoden, eine Anzahl  $n$  von gleichwahrscheinlichen Samples erzeugt werden, deren Gesamtheit die ursprüngliche Verteilung mit Wahrscheinlichkeit 1 approximiert. Im Sinne der Konvergenz im Quadratmittel wird dabei der Erwartungswert einer Funktion  $f$  des Zufallsvektors allerdings lediglich mit der Konvergenzrate  $\frac{\sigma(f)}{\sqrt{n}}$  berechnet. Dabei bezeichnet  $\sigma(f)$  die Standardabweichung von  $f$ . Man benötigt also  $10^4$  Samples, um einen Fehler von  $0.01 \sigma(f)$  zu erreichen. Gleichzeitig führen große Sample Anzahlen zu sehr großen Optimierungsproblemen, deren Lösung lange Rechenzeiten erfordert. Dies ist insbesondere bei komplexen Optimierungsaufgaben aus der Energiewirtschaft sehr unbefriedigend.

Anliegen dieses Beitrages ist, auf die mehr als bemerkenswerten Fortschritte der letzten 10-15 Jahre bei sogenannten Quasi-Monte Carlo (QMC) Methoden aufmerksam zu machen. Mit Hilfe moderner QMC Methoden ist es möglich, die Konvergenzrate von  $\frac{1}{\sqrt{n}}$  auf nahezu  $\frac{1}{n}$  zu verbessern. Die letztere Rate ist bestmöglich und erlaubt zum Beispiel eine Reduktion der Anzahlen von  $n$  MC Samples zu  $\sqrt{n}$  QMC Samples (einschließlich der Verkürzung von Rechenzeiten bei der Optimierung) oder eben eine deutliche Steigerung der Rechengenauigkeit. Wir berichten über diese Entwicklung in Kapitel 2.

## 2 Moderne Quasi-Monte Carlo Methoden

Quasi-Monte Carlo Methoden zur numerischen Berechnung von Integralen der Form

$$I_d(g) = \int_{[0,1]^d} g(x) dx \quad (1)$$

haben die Gestalt

$$Q_{n,d}(g) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n g(x^j), \quad (2)$$

wobei die Punkte  $x^j \in [0,1]^d$ ,  $j = 1, \dots, n$ , im Unterschied zu Monte Carlo Methoden determiniert sind. Ihr mathematischer Hintergrund ist die Zahlentheorie und insbesondere die Theorie der Gleichverteilung von Punktmengen. Erste Methoden wurden bereits in den 1960er Jahren entwickelt (siehe [15] für eine Darstellung früher Entwicklungen). Heute existiert eine Vielzahl von QMC Methoden (2) und man unterscheidet zwei Hauptgruppen [3, 4, 11]:

- *Digitale Netze und Folgen*,
- *Gitter Regeln (lattice rules)*.

Die beiden modernen QMC Methoden, die wir in dieser Arbeit betrachten möchten, sind *randomisierte* Versionen einer speziellen digitalen Folge und einer speziellen Gitter Regel. Eine randomisierte Version einer QMC Punktmenge hat die Eigenschaften, dass (i) jeder Punkt der randomisierten Punktmenge eine Gleichverteilung auf  $[0,1]^d$  besitzt, und dass (ii) die QMC Eigenschaften mit Wahrscheinlichkeit 1 erhalten bleiben. Spezielle Prozeduren zur Randomisierung von digitalen Folgen wurden zuerst in [17] entwickelt und untersucht. Für einen Überblick zu Randomisierungstechniken sei auf [10, Section 5] und [4, Chapter 13] verwiesen. Beispiele sind (a) *zufällige shifts* der Komponenten von  $x^j$  bei Gitter Regeln, (b) *scrambling*, d.h. zufällige Permutationen der Ziffern aus  $\mathbb{Z}_b = \{0, 1, \dots, b-1\}$  mit  $b \geq 2$  der Zahldarstellung der Komponenten von  $x^j$  bzgl. der Basis  $b$ , und (c) *linear scrambling*, das zufällige Ziffern durch die Multiplikation von  $x^j$  mit Matrizen erzeugt, wobei die Elemente der Matrizen zufällig, unabhängig und gleichverteilt in  $\mathbb{Z}_b$  sind. Die beiden Eigenschaften (i) und (ii) ermöglichen Fehlerabschätzungen und führen zu verbesserten Konvergenzeigenschaften verglichen mit der Original QMC Methode.

Die erste Methode, die hier betrachtet werden soll, ist die *randomly shifted lattice rule* (see [21, 8]). Die QMC Punkte  $x^j$  werden dabei wie folgt gewählt

$$x^j = \left\{ \frac{(j-1)\mathbf{g}}{n} + \Delta \right\} \quad (j = 1, \dots, n), \quad (3)$$

wobei  $\Delta$  ein in  $[0, 1]^d$  gleichverteilter Zufallsvektor und  $\mathbf{g}$  ein Vektor mit  $d$  Komponenten in  $\{0, 1, \dots, n-1\}$  ist. Der Vektor  $\mathbf{g}$  ist der sogenannte Generator des Gitters. Die geschweiften Klammern  $\{x\}$  in (3) bedeuten, dass komponentenweise nur der gebrochene Anteil von  $x_i$  verwendet wird, d.h.  $\{x_i\} = x_i - \lfloor x_i \rfloor$ ,  $i = 1, \dots, d$ , und  $\lfloor x_i \rfloor$  die größte ganze Zahl  $\leq x_i$  ist. Der Term  $\frac{(j-1)\mathbf{g}}{n}$  entspricht dabei einer klassischen (sogenannten Rang-1) lattice rule und die Randomisierung erfolgt durch Addition des zufälligen shift.

Diese Methode besitzt sehr gute Konvergenzeigenschaften für Integranden  $g$ , die alle partiellen Ableitungen besitzen, bei denen nach jeder Variablen höchstens einmal partiell differenziert werden darf. Insbesondere besitzt  $g$  also die partielle Ableitung

$$\frac{\partial^d g}{\partial x_1 \cdots \partial x_d}.$$

Überdies sollen alle partiellen Ableitungen von  $g$  auf  $[0, 1]^d$  quadratisch integrierbar sein. Die Menge aller derartigen Funktionen  $g$  bezeichnen wir im folgenden mit  $\mathcal{W}_{2,\gamma,\text{mix}}^{(1,\dots,1)}([0, 1]^d)$ . Der Index mix verweist auf die gemischten partiellen Ableitungen und  $\gamma$  auf positive Gewichte  $\gamma_j$ , die die Komponenten  $x_j$  von  $x \in [0, 1]^d$  wichten. Als Norm in dieser Menge von Funktionen, dem sogenannten *Sobolev-Raum mit gemischten Ableitungen erster Ordnung* betrachten wir

$$\|g\|_\gamma = \left( \sum_{u \subseteq D} \gamma_u^{-1} \int_{[0,1]^{|u|}} \left( \int_{[0,1]^{d-|u|}} \frac{\partial^{|u|}}{\partial x^u} g(x) dx^{-u} \right)^2 dx^u \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4)$$

wobei  $D = \{1, \dots, d\}$ ,  $u$  eine Teilmenge von  $D$  und  $x^u$  den Vektor mit den Komponenten  $x_j$  für  $j \in u$  bezeichnen. Überdies bezeichnet  $|u|$  die Anzahl der Elemente von  $u$  und  $-u$  das Komplement von  $u$  in  $D$ . Die Summe in (4) erstreckt sich über alle Teilmengen von  $D$  einschließlich der leeren Menge. Die Konstanten  $\gamma_u$  sind als Produkt aller Gewichte  $\gamma_j$  für  $j \in u$  definiert, wobei  $\gamma_\emptyset = 1$  gesetzt wird.

In [21, 8, 3] wurde gezeigt, dass man einen Generator  $\mathbf{g}$  des Gitters komponentenweise so bestimmen kann, dass die folgende Fehlerabschätzung für die Wurzel aus dem Quadratmittelfehler für randomly shifted lattice rules gültig ist:

$$\sqrt{\mathbb{E} |Q_{n,d}(g) - I_d(g)|^2} \leq C(\delta) \|g\|_\gamma n^{-1+\delta}. \quad (5)$$

Hierbei ist  $n$  eine Primzahl,  $\delta \in (0, \frac{1}{2}]$  und die Konstante  $C(\delta) > 0$  hängt nicht von der Dimension  $d$  ab, falls die Gewichte  $(\gamma_j)$  so gewählt werden, dass

$$\sum_{j=1}^{\infty} \gamma_j^{\frac{1}{2(1-\delta)}} < \infty. \quad (6)$$

Die Bedingung (6) ist insbesondere erfüllt, falls die Gewichte in der Form  $\gamma_j = j^{-3}$  gewählt werden. Die Abschätzung (5) bedeutet, dass randomly shifted lattice rules fast die bestmögliche Konvergenzrate  $\frac{1}{n}$  erreichen mit einer Konstanten, die unabhängig von der Dimension  $d$  ist. Eine schnelle Implementierung von randomly shifted lattice rules wird in [16] diskutiert.

Als zweite Methode betrachten wir *scrambled Sobol' sequences*. Auf Sobol' [22] geht die erste bekannte Konstruktion einer digitalen Folge zurück. Die Sobol' Folge verwendet als Basis  $b = 2$ . Ihre Konstruktion ist detailliert in [3, Example 2.18] bzw. in [4, Section 8.1.3] beschrieben. Für praktische Implementierungen sei auf [1] und für neuere Entwicklungen und Vergleiche zwischen existierenden Implementierungen auf [23] verwiesen.

Zur Randomisierung wurde linear scrambling verwendet, das in [13] anstelle von Owen's scrambling [17] wegen des geringeren Aufwandes vorgeschlagen wurde. Gehört  $g$  zum Funktionenraum  $\mathcal{W}_{2,\gamma,\text{mix}}^{(1,\dots,1)}([0, 1]^d)$ , so gilt nach [4, Theorem 13.25] die folgende Abschätzung für die Wurzel aus dem Quadratmittelfehler

$$\sqrt{\mathbb{E} |Q_{n,d}(g) - I_d(g)|^2} \leq C_d \|g\|_\gamma n^{-\frac{3}{2}} (\log n)^{\frac{d-1}{2}}$$

mit einer Konstanten  $C_d$ , die i.a. von der Dimension  $d$  abhängt. Beobachtet wird häufig eine Konvergenzrate von  $O(n^{-1})$  mit Ausnahme in Fällen von sehr großen Sample Anzahlen.

Soll anstelle von (1) ein Integral der Form

$$I_{d,\rho}(f) = \int_{\mathbb{R}^d} f(\xi_1, \dots, \xi_d) \rho(\xi_1, \dots, \xi_d) d\xi_1 \cdots d\xi_d \quad (7)$$

über  $\mathbb{R}^d$  mit einem Integranden  $f$  und einer Dichtefunktion  $\rho$  berechnet werden, so muss zunächst die Dichte  $\rho$  durch geeignete Transformationen auf die Form

$$\rho(\xi) = \prod_{j=1}^d \rho_j(\xi_j) \quad (\xi \in \mathbb{R}^d) \quad (8)$$

mit unabhängigen Marginaldichten  $\rho_j$ ,  $j = 1, \dots, d$ , gebracht werden. Anschließend wird in üblicher Weise mit Hilfe der inversen Marginalverteilungen  $\varphi_j^{-1}$ , wobei  $\varphi_j(t) = \int_{-\infty}^t \rho_j(\tau) d\tau$ ,  $t \in \mathbb{R}$ , komponentenweise auf das Intervall  $[0, 1]$  transformiert und es entsteht

$$I_{d,\rho}(f) = \int_{[0,1]^d} f(\varphi_1^{-1}(x_1), \dots, \varphi_d^{-1}(x_d)) dx_1 \cdots dx_d = I_d(g).$$

mit dem Integranden  $g(x) = f(\varphi_1^{-1}(x_1), \dots, \varphi_d^{-1}(x_d))$  auf  $[0, 1]^d$ . Die marginalen Dichtefunktionen  $\rho_j$ ,  $j = 1, \dots, d$ , können zum Beispiel Gamma-, Exponential- oder (logarithmische) Normalverteilungen beschreiben.

### 3 ANOVA Darstellung und effektive Dimension

Integranden in stochastischen Optimierungsproblemen beschreiben die Abhängigkeit von dem Zufallsvektor, der das Modell beeinflusst. Die Dimension  $d$  des Zufallsvektors kann in manchen Anwendungen sehr groß sein. Man denke nur an Optimierungsmodelle mit einer stündlichen Diskretisierung und einem Zeithorizont von mehreren Tagen, einer oder mehrerer Wochen oder gar einem Jahr. Der Integrand  $f$  beschreibt zum Beispiel die nichtlineare Abhängigkeit des

Optimalwertes der zweiten Stufe in einem zweistufigen stochastischen gemischt-ganzzahligen Modell. Obwohl die Dimension  $d$  der Funktion groß sein kann, ist es möglich, dass die wirksame bzw. tatsächliche Dimension von  $f$  deutlich kleiner ist. Um dies zu erklären, betrachten wir eine nichtlineare Funktion  $f$ , die von  $d$  Variablen  $\xi_1, \dots, \xi_d$  abhängt. Unser späteres Ziel ist die Berechnung des Erwartungswertes  $\mathbb{E}[f(\xi)] = I_{d,\rho}(f)$  (vgl. (7)), wobei  $\xi$  ein  $d$ -dimensionaler Zufallsvektor mit unabhängigen Komponenten und Dichtefunktion (8) ist.

Unser erstes Ziel ist die Herleitung einer geeigneten Darstellung der Funktion  $f$  in der Form

$$f(\xi) = f_0 + \sum_{i=1}^d f_i(\xi_i) + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^d f_{ij}(\xi_i, \xi_j) + \dots + f_{12\dots d}(\xi_1, \dots, \xi_d),$$

wobei  $f_0$  eine Konstante ist, die Funktionen  $f_i$  nur von der Variablen  $\xi_i$ ,  $f_{ij}$  nur von den Variablen  $\xi_i$  und  $\xi_j$  abhängen usw. Diese Darstellung enthält insgesamt  $2^d$  Terme, von denen einige auch identisch null sein können. Sie kann kompakter auch wie folgt beschrieben werden:

$$f(\xi) = \sum_{u \subseteq D} f_u(\xi^u), \quad (9)$$

wobei wieder  $D = \{1, \dots, d\}$ ,  $u$  eine Teilmenge von  $D$  und  $\xi^u$  den Vektor mit den Komponenten  $\xi_j$  für  $j \in u$  bezeichnen. Die Summe in (9) erstreckt sich über alle Teilmengen von  $D$  einschließlich der leeren Menge. Eine Darstellung von  $f$  der Form (9) heißt *ANOVA Darstellung von  $f$* , falls die Funktionen  $f_u$ ,  $u \subseteq D$  die Eigenschaft besitzen

$$\langle f_u, f_v \rangle := \int_{\mathbb{R}^d} f_u(\xi^u) f_v(\xi^v) \rho(\xi) d\xi = 0 \quad \text{falls } u \neq v.$$

Man sagt dann auch, dass die Funktionen  $f_u$  und  $f_v$  mit  $u \neq v$  *orthogonal* sind und nennt die  $f_u$  ANOVA-Terme von  $f$ . Betrachtet man nun die *Normen*

$$\|f_u\| := \left( \int_{\mathbb{R}^d} |f_u(\xi^u)|^2 \rho(\xi) d\xi \right)^{\frac{1}{2}},$$

der ANOVA-Terme  $f_u$  und beachtet die Identität  $f_\emptyset = I_{d,\rho}(f)$ , so folgt aus der Orthogonalität der ANOVA-Terme die Formel

$$\|f - I_{d,\rho}(f)\|^2 = \sum_{\emptyset \neq u \subseteq D} \|f_u\|^2, \quad (10)$$

wobei über alle nichtleeren Teilmengen von  $D$  summiert wird. Es zeigt sich, dass die ANOVA-Terme mit Hilfe von mehrfachen eindimensionalen Integrationen von  $f$  bzgl. der (marginalen) Dichtefunktionen  $\rho_j$  (sogenannten *Projektionen* von  $f$ ) berechnet werden können. Für die ANOVA-Terme erster Ordnung ergibt sich zum Beispiel

$$f_{\{i\}}(\xi_i) = \int_{\mathbb{R}^{d-1}} f(\xi) \rho_1(\xi_1) \dots \rho_{i-1}(\xi_{i-1}) \rho_{i+1}(\xi_{i+1}) \dots \rho_d(\xi_d) d\xi_d \dots d\xi_{i+1} d\xi_{i-1} \dots d\xi_1 - I_{d,\rho}(f)$$

für jedes  $i = 1, \dots, d$ . Das obige mehrfache Integral entspricht gerade der  $(d - 1)$ -fachen Projektion von  $f$  und  $I_{d,\rho}(f)$  der  $d$ -fachen Projektion. Eine allgemeine Formel wurde in [9] hergeleitet. Sie besagt, dass der ANOVA-Term  $f_u$  über Summen bzw. Differenzen einer  $(d - |u|)$ -fachen Projektion von  $f$  und von ANOVA-Termen niedrigerer Ordnung als  $|u|$  dargestellt werden kann. Die Varianzen der ANOVA-Terme und von  $f$  sind gegeben durch

$$\sigma_u^2(f) = \|f_u\|^2 \quad \text{und} \quad \sigma^2(f) = \|f - I_{d,\rho}(f)\|^2,$$

und Formel (10) entspricht der Identität

$$\sigma^2(f) = \sum_{\emptyset \neq u \subsetneq D} \sigma_u^2(f).$$

Die Varianz der Funktion  $f$  ist gleich der Summe der Varianzen der ANOVA-Terme  $f_u$  bzgl. aller nichtleeren Teilmengen  $u$  von  $D$ . Um den Beitrag der Variablen­gruppe  $\xi^u$  zur Varianz von  $f$  zu untersuchen, betrachtet man den Quotienten von  $\sigma_u^2(f)$  und  $\sigma^2(f)$ , der im Intervall  $[0, 1]$  liegt. Ist dieser Quotient klein, gibt es gute Gründe anzunehmen, dass die Variablen­gruppe nicht wesentlich für die Funktion  $f$  ist. Für jede Genauigkeit  $\varepsilon \in (0, 1)$  heißt deshalb die Zahl

$$d_S(\varepsilon) = \min \left\{ s \in D : \sum_{|u| \leq s} \sigma_u^2(f) \geq (1 - \varepsilon) \sigma^2(f) \right\} \quad (11)$$

effektive (*Superpositions-*) Dimension von  $f$  (siehe z.B. [18, 24]). Häufig verwendet man  $\varepsilon = 0.01$ . Die effektive Dimension  $d_S(\varepsilon)$  ermöglicht die folgende Ungleichung

$$\left\| f - \sum_{|u| \leq d_S(\varepsilon)} f_u \right\| \leq \sqrt{\varepsilon} \sigma(f). \quad (12)$$

Die Abschätzung (12) bedeutet, dass die Summe aller ANOVA-Terme  $f_u$  mit  $|u| \leq d_S(\varepsilon)$  bereits eine gute Approximation von  $f$  darstellt. Es wird sich zeigen, dass die effektive Dimension  $d_S(\varepsilon)$  viel kleiner als die ursprünglich große Dimension  $d$  sein kann. Zum Beispiel ist die effektive Dimension  $d_S(\varepsilon)$  einer separablen Funktion

$$f(\xi_1, \dots, \xi_d) = \sum_{i=1}^d g_i(\xi_i) = g_1(\xi_1) + \dots + g_d(\xi_d)$$

gleich 1 und die einer Funktion der Form

$$f(\xi_1, \dots, \xi_d) = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \leq j}}^d g_{ij}(\xi_i, \xi_j)$$

gleich 2 (vgl. [18]). Allerdings besitzen viele Integranden in Optimierungsanwendungen nicht diese einfache Gestalt. Manche sind als Maximum von endlich vielen linearen oder quadratischen Funktionen beschreibbar, andere, wie die in Kapitel 4, besitzen zusätzlich Sprünge an den Rändern polyedrischer Mengen.

Zwar läßt sich die Summe  $\sum_{|u| \leq s} \sigma_u^2(f)$  für jedes  $s = 1, \dots, d$  und damit auch die Zahl  $d_S(\varepsilon)$  schwer bzw. kaum berechnen, aber eine obere Schranke für  $d_S(\varepsilon)$  kann durch die näherungsweise Berechnung des Integrals auf der rechten Seite der nachfolgenden Formel

$$\sum_{v \subseteq \{1, \dots, s\}} \sigma_v^2(f) = \int_{\mathbb{R}^{2d-s}} f(\xi) f(\xi^u, \chi^{-u}) \rho(\xi) \rho_{-u}(\chi^{-u}) d\xi d\chi^{-u} - [I_{d,\rho}(f)]^2 \quad (13)$$

mit  $u = \{1, \dots, s\}$  für  $s = 1, 2, \dots$  hergeleitet werden. Dies sollte mit Hilfe von QMC Methoden mit großen Sample Anzahlen erfolgen, um eine Genauigkeit von  $10^{-3}$  zu erreichen, falls  $\varepsilon = 0.01$  verwendet werden soll (siehe [24, 12]).

ANOVA-Darstellungen wurden zuerst in der Statistik verwendet, haben sich aber auch als geeignetes Werkzeug zur Untersuchung der effektiven Dimension einer Funktion erwiesen. Ein bedeutendes Nebenprodukt ist, dass ANOVA-Terme niedriger Ordnung häufig *glatter* als die Funktion  $f$  selbst sind, falls die marginalen Dichtefunktionen  $\rho_j$  *glatt* sind (siehe [7, 12]).

Eine überraschende Beobachtung für (logarithmische) Normalverteilungen mit Kovarianzmatrix  $\Sigma$  ist, dass die effektive Dimension durch die Wahl der Matrix  $A$  für die Faktorisierung  $\Sigma = A A^\top$  beeinflusst werden kann. Diese Erkenntnis wird bereits seit längerem bei Anwendungen von QMC im Finanzbereich (siehe [24, 25]) genutzt. Für MC Anwendungen ist sie bedeutungslos. Die klassische Faktorisierung ist die Cholesky-Zerlegung  $A = L_{Ch}$ , eine Variante des Gaußschen Algorithmus, bei dem  $L_{Ch}$  eine untere Dreiecksmatrix darstellt. Für diese stellte sich allerdings in Experimenten heraus, dass sie jeder Variablen die gleiche Bedeutung zuzumessen scheint und folglich zur Dimensionsreduktion ungeeignet ist. Ganz anders sieht es aber für die Hauptkomponentenanalyse (principal component analysis (PCA)) aus, bei der  $\Sigma$  mittels orthogonaler Transformation auf Diagonalgestalt gebracht wird. In diesem Fall gilt

$$A = U_{PCA} = (\sqrt{\lambda_1} u_1, \dots, \sqrt{\lambda_d} u_d), \quad (14)$$

wobei  $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_d > 0$  die Eigenwerte und  $u_1, \dots, u_d$  die Eigenvektoren von  $\Sigma$  sind. In [24] wird über bemerkenswerte Dimensionsreduktionen durch PCA berichtet.

Abschließend sei angemerkt, dass beide in Kapitel 2 dargestellten QMC Methoden sich besonders günstig verhalten, falls der Integrand eine geringe effektive Dimension besitzt.

#### 4 Energiewirtschaftliches Planungsmodell und numerische Resultate

Wir betrachten ein stochastisches Planungsmodell für Stromerzeugung und Stromhandel eines kleineren Marktteilnehmers. Zielstellung ist die Minimierung der Gesamtkosten in einem gewissen Zeitraum. Das Modell enthält die elektrische Last  $\xi_\delta$  und Strommarktpreise  $\xi_c$  als stochastische Parameter. Beide sind Komponenten des Zufallsvektors

$$\xi = (\xi_{\delta,1}, \dots, \xi_{\delta,T}, \xi_{c,1}, \dots, \xi_{c,T})^\top.$$

Der Zeithorizont ist in  $T$  Zeitintervalle unterteilt. In jedem Zeitpunkt  $t \in \{1, \dots, T\}$  muss die Firma die Last decken, was ihr aber in Spitzenzeiten auf der Basis der eigenen Produktionskapazität nicht gelingt. Deshalb ist sie auf Stromhandel basierend auf bilateralen Verträgen zu festen Preisen bzw. auf Zukäufe am Strommarkt zu stochastischen Preisen angewiesen. Bei Niedriglast ist ein Abschalten eigener Einheiten erforderlich.

Das zweistufige Produktionsmodell besitzt die Gestalt

$$\min \left\{ \sum_{t=1}^T \left( c_t^\top x_t + \int_{\mathbb{R}^T} q_t(\xi)^\top y_t P(d\xi) \right) : Wy + Vx \geq h(\xi), y \in Y, x \in X \right\}, \quad (15)$$

wobei der Vektor  $x_t$  die Leistungen der Grundlast-Blöcke und  $c_t$  deren Kosten zum Zeitpunkt  $t$  beschreiben. Die Menge  $X$  enthält Leistungsgrenzen und mögliche Schranken für Leistungsänderungen dieser Blöcke in jedem Zeitpunkt. Der Vektor  $y_t$  der Zweitstufen-Entscheidung enthält die 0-1-Schaltentscheidungen und Leistungen der zyklischen Blöcke und des bilateralen Vertrages sowie den Zukauf vom Strommarkt. Die Restriktionen  $Wy + Vx \geq h(\xi)$  beschreiben die Lastdeckung in jedem Zeitpunkt  $t$  und Mindestlauf- bzw. Mindeststillstandszeiten der zyklischen Blöcke. Die Restriktion  $y \in Y$  enthält Leistungsgrenzen und Ganzzahligkeitsbedingungen.  $P$  beschreibt die multivariate Wahrscheinlichkeitsverteilung von  $\xi$  auf  $\mathbb{R}^{2T}$ .

Der Einfachheit halber nehmen wir hier an, dass der stochastische Last- und Preis-Prozess  $\{\xi_{\delta,t}, \xi_{c,t}\}$  als lineare multivariate Zeitreihe (siehe [2] und [5]) modelliert werden kann, genauer als multivariater ARMA(1,1) Prozess

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \xi_{\delta,t} \\ \xi_{c,t} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \bar{\xi}_{\delta,t} \\ \bar{\xi}_{c,t} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} E_{1,t} \\ E_{2,t} \end{pmatrix} \quad (t = 1, \dots, T), \quad \begin{pmatrix} \bar{\xi}_{\delta,1} \\ \bar{\xi}_{c,1} \end{pmatrix} = B_1 \begin{pmatrix} \gamma_{1,1} \\ \gamma_{2,1} \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \bar{\xi}_{\delta,t} \\ \bar{\xi}_{c,t} \end{pmatrix} &= A \begin{pmatrix} \bar{\xi}_{\delta,t-1} \\ \bar{\xi}_{c,t-1} \end{pmatrix} + B_1 \begin{pmatrix} \gamma_{1,t} \\ \gamma_{2,t} \end{pmatrix} + B_2 \begin{pmatrix} \gamma_{1,t-1} \\ \gamma_{2,t-1} \end{pmatrix} \quad (t = 2, \dots, T), \end{aligned}$$

wobei  $E_{1,t} = \mathbb{E}[\xi_{\delta,t}]$ ,  $E_{2,t} = \mathbb{E}[\xi_{c,t}]$ ,  $A$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  (2,2)-Matrizen und  $\gamma_{1,t}$ ,  $\gamma_{2,t}$  unabhängige und standard normalverteilte Zufallsvariablen sind. Die multivariate Zeitreihe erlaubt die Berücksichtigung von Korrelationen zwischen Last und Preisen.

Der Zufallsvektor  $\xi$  ist folglich normalverteilt mit Mittelwert  $m = \mathbb{E}[\xi]$  und Kovarianzmatrix  $\Sigma$ . Die übliche Vorgehensweise zur Realisierung von MC bzw. QMC Methoden, besteht nun darin, die Kovarianzmatrix  $\Sigma$  mit Hilfe einer geeigneten Matrix  $A$  in der Form  $\Sigma = AA^\top$  zu faktorisieren. Der Zufallsvektor  $z = (z_1, \dots, z_{2T})$  mit der Eigenschaft

$$\xi = Az + m$$

ist normalverteilt mit Mittelwert 0 und seine Komponenten besitzen Varianz 1. Bezeichnet  $\phi$  die Verteilungsfunktion der Standard-Normalverteilung, so ist  $\eta_i$  mit  $z_i = \phi^{-1}(\eta_i)$ , gleichverteilt in  $[0, 1]$  für jedes  $i = 1, \dots, 2T$  und damit  $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_{2T})$  gleichverteilt in  $[0, 1]^{2T}$ .



Die inverse Funktion  $\phi^{-1}$  kann effizient und genau durch Moro's Algorithmus (siehe [6, Sect. 2.3.2]) berechnet werden.

Für die numerischen Tests wurde  $T = 100$ , also  $d = 2T = 200$ , gewählt. Die Matrizen  $A$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  und die anderen Parameter des Modells wurden wie bei den Testrechnungen in [12, Sect. 8] für zweistufige stochastische Planungsmodelle ohne ganzzahlige Variable in der zweiten Stufe gewählt.

Als Matrix  $A$  wurden in den numerischen Tests die Matrix  $A = L_{\text{Ch}}$  der Cholesky Faktorisierung (CH) sowie die Matrix  $A = U_{\text{PCA}}$  der Hauptkomponentenanalyse (PCA) in (14) verwendet. Durch Berechnung der Integrale in (13) mit  $2^{15}$  randomly scrambled Sobol' points ergaben sich die oberen Schranken  $d_S(0.01) \leq 2$  bei Verwendung von PCA und  $d_S(0.01) \leq 200$  bei CH. Detailliertere Untersuchungen ergaben bei PCA  $d_S(0.01) = 2$  und bei CH  $d_S(0.01) > 2$ . Die Anwendung der Hauptkomponentenanalyse führt also zu einer sehr starken Reduktion der effektiven Dimension. Für die numerischen Tests werden jetzt  $n$  MC und randomisierte QMC

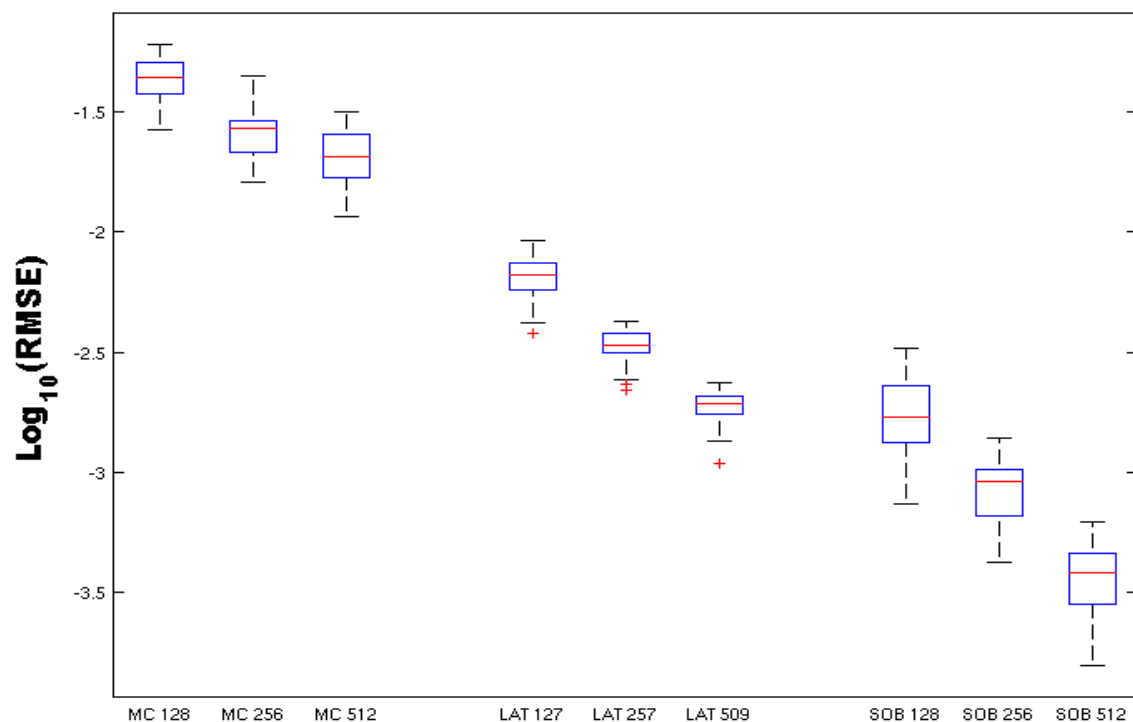


Abbildung 1: Gezeigt wird  $\log_{10}$  des relativen Quadratmittelfehlers für die optimalen Kosten von (15) unter Verwendung der PCA Faktorisierung der Kovarianzmatrix. Resultate für Mersenne Twister MC und randomly scrambled Sobol' (SOB) mit  $n = 128, 256$  und  $512$  Punkten und randomly shifted lattice rules (LAT) mit  $n = 127, 257$  und  $509$  Punkten.

Punkte in  $[0, 1]^d$  für drei verschiedene Sample Anzahlen  $n$  erzeugt, die nach Transformation

mit  $\phi^{-1}$  und Einsetzen in die Zeitreihe zu Samples  $\xi^j \in \mathbb{R}^d$ ,  $j = 1, \dots, n$ , führen. Mit diesen Samples entsteht das approximative Optimierungsproblem

$$\min \left\{ \sum_{t=1}^T c_t^\top x_t + \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \Phi(q(\xi^j), h(\xi^j) - Vx) : x \in X \right\}, \quad (16)$$

in dem  $\Phi$  die Optimalwertfunktion des gemischt-ganzzahligen linearen Optimierungsproblems der zweiten Stufe bezeichnet. Sie ist stetig auf gewissen polyedrischen Mengen und hat eventuell Sprungstellen an den Rändern dieser Polyeder (siehe auch [19, 20]). Hintergrund der Sprünge ist das Vorhandensein der 0-1-Entscheidungen. Für MC points in  $[0, 1]^d$  wird der Mer-

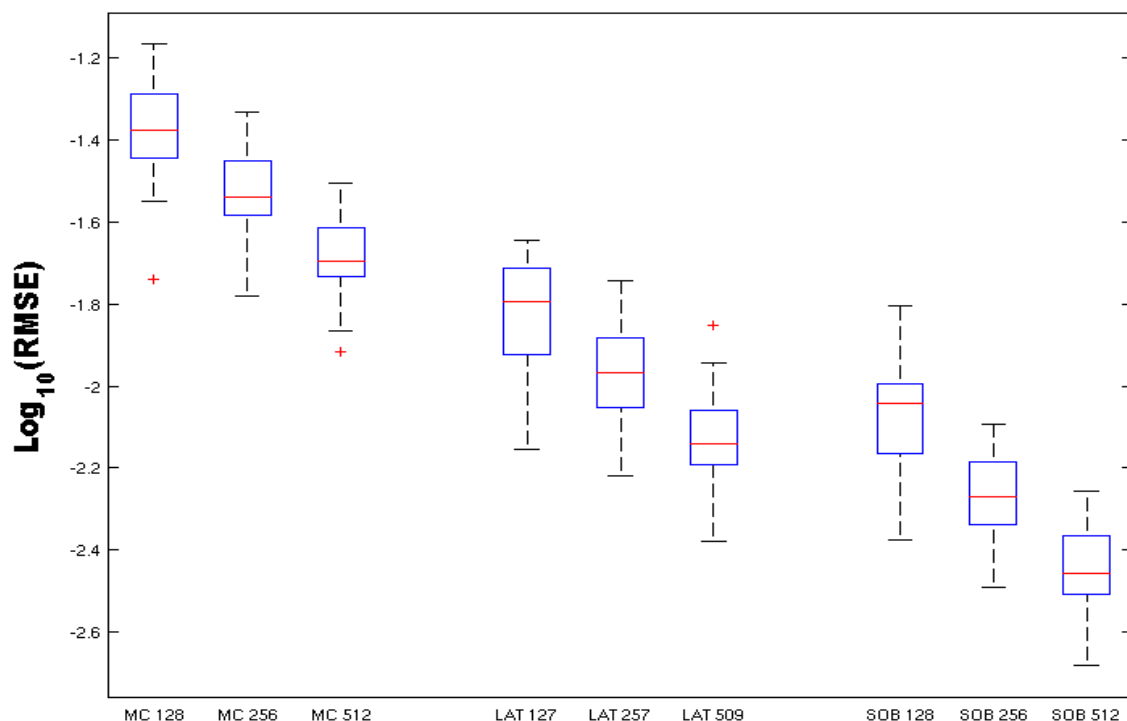


Abbildung 2: Gezeigt wird  $\log_{10}$  des relativen Quadratmittelfehlers für die optimalen Kosten von (15) unter Verwendung der Cholesky (CH) Faktorisierung der Kovarianzmatrix. Resultate für Mersenne Twister MC und randomly scrambled Sobol' (SOB) mit  $n = 128, 256$  und  $512$  Punkten und randomly shifted lattice rules (LAT) mit  $n = 127, 257$  und  $509$  Punkten.

senne Twister [14] als Generator für unabhängige Pseudo-Zufallszahlen und  $n = 128, 256, 512$  verwendet. Als randomisierte QMC Methoden verwenden wir randomly scrambled Sobol' points für  $n = 128, 256, 512$  und randomly shifted lattice rules [21, 8] mit  $n = 127, 257, 509$  (da Primzahlen  $n$  für diese Methoden günstiger sind). Dabei wird das scrambling mit Hilfe

des sogenannten random linear scrambling [13] realisiert. Hierbei und beim Generieren der random shifts wird ebenfalls der Mersenne Twister eingesetzt.

Geschätzt wird der relative Fehler der Wurzel aus dem Quadratmittel (RMSE) der optimalen Kosten von (16) durch Realisieren von 10 Versuchen für jedes Experiment und von 30 Wiederholungen. Die Box-plots in beiden Abbildungen entstehen dadurch, dass die untere bzw. obere Seite der Boxen durch das erste und dritte Quartil der Schätzungen gebildet werden. Der Median entspricht der Linie zwischen unterer und oberer Seite. Ausreißer, die nicht in den Boxen liegen, werden mit + markiert.

Für alle drei Methoden wurden die Konvergenzraten geschätzt. Im Mittel ergab sich für MC die theoretisch erwartete Rate von  $-0.5$ , bei Verwendung von PCA etwa  $-0.9$  für randomly shifted lattice rules und  $-1.0$  für randomly scrambled Sobol' points. Die sehr guten Konvergenzraten für die randomisierten QMC Methoden sind auch optisch in der logarithmischen Skala von Abbildung 1 zu erkennen. Bei Verwendung von CH ergaben sich für alle drei Methoden als mittlere Konvergenzrate etwa  $-0.5$ . Auch dies ist optisch in Abbildung 2 zu erkennen. Dort wird aber ebenfalls deutlich, dass die beiden randomisierten QMC Methoden zu kleineren Fehlern als MC führen.

Eine Erklärung für das deutlich bessere Verhalten beider randomisierter QMC Methoden unter Verwendung von PCA ist die durch die niedrige effektive Dimension erreichte Glättung des Integranden. Eine solche Glättung scheint aber bei CH wegen der höheren effektiven Dimension nicht einzutreten.

## Literatur

- [1] P. Bratley and B. L. Fox: Algorithm 659 – Implementing Sobol's quasirandom sequence generator, *ACM Transactions on Mathematical Software* 14 (1988), 88–100.
- [2] P. J. Brockwell and R. A. Davis: *Introduction to Time Series and Forecasting* (Second Edition), Springer, New York, 2002.
- [3] J. Dick, F. Y. Kuo and I. H. Sloan: High-dimensional integration – the Quasi-Monte Carlo way, *Acta Numerica* 22 (2013), 133–288.
- [4] J. Dick and F. Pillichshammer: *Digital Nets and Sequences. Discrepancy Theory and Quasi-Monte Carlo Integration*, Cambridge University Press, Cambridge, 2010.
- [5] A. Eichhorn, W. Römisch and I. Wegner: Mean-risk optimization of electricity portfolios using multiperiod polyhedral risk measures, IEEE St. Petersburg Power Tech 2005.
- [6] P. Glasserman: *Monte Carlo Methods in Financial Engineering*, Springer, New York, 2004.
- [7] M. Griebel, F. Y. Kuo and I. H. Sloan: The smoothing effect of integration in  $\mathbb{R}^d$  and the ANOVA decomposition, *Mathematics of Computation* 82 (2013), 383–400.
- [8] F. Y. Kuo: Component-by-component constructions achieve the optimal rate of convergence in weighted Korobov and Sobolev spaces, *Journal of Complexity* 19 (2003), 301–320.

- [9] F. Y. Kuo, I. H. Sloan, G. W. Wasilkowski and H. Woźniakowski: On decomposition of multivariate functions, *Mathematics of Computation* 79 (2010), 953–966.
- [10] P. L'Ecuyer and Ch. Lemieux: Recent advances in randomized quasi-Monte Carlo methods, in *Modeling Uncertainty* (M. Dror, P. L'Ecuyer, F. Szidarovski eds.), Kluwer, Boston, 2002, 419–474.
- [11] G. Leobacher and F. Pillichshammer: *Introduction to Quasi-Monte Carlo Integration and Applications*, Birkhäuser, Heidelberg, 2014.
- [12] H. Leövey and W. Römisch: Quasi-Monte Carlo methods for linear two-stage stochastic programming problems, *Mathematical Programming* 151 (2015), 315–345.
- [13] J. Matoušek: On the  $L_2$ -discrepancy for anchored boxes, *Journal of Complexity* 14 (1998), 527–556.
- [14] M. Matsumoto and T. Nishimura: Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudo-random number generator, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation* 8 (1998), 3–30.
- [15] H. Niederreiter: *Random Number Generation and Quasi-Monte Carlo Methods*, SIAM, Philadelphia, 1992.
- [16] D. Nuyens and R. Cools: Fast algorithms for component-by-component constructions of rank-1 lattice rules in shift-invariant reproducing kernel Hilbert spaces, *Mathematics of Computation* 75 (2006), 903–922.
- [17] A. B. Owen: Randomly permuted  $(t, m, s)$ -nets and  $(t, s)$ -sequences, in: *Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing*, Lecture Notes in Statistics, Vol. 106, Springer, New York, 1995, 299–317.
- [18] A. B. Owen: The dimension distribution and quadrature test functions, *Statistica Sinica* 13 (2003), 1–17.
- [19] W. Römisch and S. Vigerske: Recent progress in two-stage mixed-integer stochastic programming with applications in power production planning, in *Handbook of Power Systems*, Vol. I (S. Rebennack, P.M. Pardalos, M.V.F. Pereira, N.A. Iliadis), Springer, 2010, 177–208.
- [20] R. Schultz: Stochastic programming with integer variables, *Mathematical Programming* 97 (2003), 285–309.
- [21] I. H. Sloan, F. Y. Kuo and S. Joe: Constructing randomly shifted lattice rules in weighted Sobolev spaces, *SIAM Journal Numerical Analysis* 40 (2002), 1650–1665.
- [22] I. M. Sobol': The distribution of points in a cube and the approximate evaluation of integrals, *U.S.S.R. Comput. Math. and Math. Phys.* 7 (1967), 86–112.
- [23] I. M. Sobol', D. Asotsky, A. Kreinin and S. Kucherenko: Construction and comparison of high-dimensional Sobol' generators, *Wilmott* 56 (2011), 64–79.
- [24] X. Wang and K.-T. Fang: The effective dimension and Quasi-Monte Carlo integration, *Journal of Complexity* 19 (2003), 101–124.
- [25] X. Wang and I. H. Sloan: Quasi-Monte Carlo methods in financial engineering: An equivalence principle and dimension reduction, *Operations Research* 59 (2011), 80–95.