

Teilprojekt

A15

Parallele numerische Lösung von
Optimalsteuerungsproblemen für instationäre
Diffusions-Konvektions-Reaktionsgleichungen

2.1 Teilprojekt A15

Parallele numerische Lösung von Optimalsteuerungsproblemen für instationäre Diffusions-Konvektions-Reaktionsgleichungen

2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Peter Benner
25.05.1967
Professur Mathematik in Industrie und Technik
Fakultät für Mathematik
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Tel.: (0371) 531-8367
Fax: (0371) 531-2657
benner@mathematik.tu-chemnitz.de

2.1.2 Projektbearbeiter

Dipl.-Math. Jens Saak (04/04-12/05)
Dipl.-Math. Sabine Görner (10/04-12/05)

2.2 Ausgangsfragestellung / Einleitung

Das Ziel dieses Projektes bestand darin, numerische Algorithmen für die optimale Steuerung von stationären Diffusions-Konvektions- oder auch Diffusions-Reaktionsgleichungen mit Methoden der Zustands- bzw. Ausgangsrückführung zu entwickeln. Dabei sollten sowohl lineare als auch nichtlineare Probleme behandelt werden.

2.2.1 Lineare Probleme

Betrachtet man zunächst Rand- oder Punktsteuerungsprobleme für lineare parabolische Probleme (lineare Diffusions-Konvektions- oder Diffusions-Reaktionsgleichungen mit der instationären Wärmeleitungsgleichung als einfachstem Beispiel) und legt ein quadratisches Kostenfunktional vor, so lässt sich die Aufgabe der Berechnung der optimalen Steuerung durch Interpretation als abstraktes linear-quadratisches Optimalsteuerungsproblem (oder auch linear-quadratisches Regelungsproblem, kurz: LQR Problem) auf die Berechnung einer stabilisierenden Zustandsrückführung (Feedback) für ein unendlichdimensionales lineares System zurückführen. Dazu muss eine nichtlineare Operatorgleichung gelöst werden, die aufgrund der quadratischen Nichtlinearität auch als Operator-Riccatigleichung bezeichnet wird. Bei der numerischen Lösung des LQR Problems wird zunächst die zugrundeliegende PDE semidiskretisiert, dadurch entsteht ein i.d.R. hochdimensionales endlichdimensionales LQR Problem. Für solche Probleme wurden vom

Antragsteller schon im Vorfeld des Projektes neue, effiziente Verfahren (mit-)entwickelt, die jedoch nur einen algorithmischen Rahmen bildeten. Diese sollten über geeignet zu definierende Schnittstellen mit Lösern für das zugrundeliegende stationäre (elliptische) Vorwärtsproblem gekoppelt werden. Mit der Bereitstellung numerischer Methoden zur Lösung des LQR Problems lässt sich dann auch das duale Problem der Berechnung eines Kalman-Filters lösen, da die selben Rechentechniken benötigt werden. Damit kann dann insgesamt ein LQG (linear-quadratisch Gauß'sches) Design für parabolische Probleme durchgeführt werden.

2.2.2 Nichtlineare Probleme

Bei nichtlinearen Aufgabenstellungen, die durch nichtlineare Differentialoperatoren oder nichtlineare Randbedingungen entstehen, kann eine Klasse von Optimalsteuerungsproblemen, die sogenannten Folgeregelungsprobleme, mit Hilfe von Zustands- oder Ausgangsrückführungen gelöst werden. Da im Allgemeinen eine Berechnung der optimalen Steuerung nicht direkt oder nicht mit vertretbarem Aufwand möglich ist wie im linearen Fall, verwendet man verschiedene suboptimale Strategien. Dazu sollte hier modellprädiktive Steuerung (kurz MPC, von engl., *model predictive control*, auch *receding horizon control* oder, in Spezialfällen, instantane Kontrolle genannt) eingesetzt werden. Im gewählten Ansatz wird der gesamte Zeithorizont mit kürzeren Zeitfenstern überdeckt, auf denen dann mit Hilfe eines LQG Designs Hilfsprobleme gelöst werden. Für das LQG Design benötigt man die oben genannten numerischen Methoden für das nach Linearisierung entstehende parabolische Problem. Aufgrund der Laufzeit von insgesamt nur einem Jahr (für den mit nichtlinearen Problemen erfassten Projektteil) konnte für die nichtlineare Aufgabenstellung nur ein erster Einblick gewonnen werden. Dieses Problem wird in einem Nachfolgeprojekt (DFG Normalverfahren, BE3715/1-1) detailliert bearbeitet.

2.3 Forschungsaufgaben / Methoden

Im Allgemeinen betrachten wir folgende Problemstellung:

$$\min_{\mathbf{u} \in L_2(0, T_f; \mathcal{U})} \int_0^{T_f} \mathbf{g}(\mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t)) dt + m(y(T_f)) \quad (2.1)$$

für $0 < T_f \leq \infty$ unter der dynamischen Nebenbedingung

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t)) + \mathbf{B}\mathbf{u}(t) \quad \text{für } t > 0, \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{u}(t) \in \mathcal{U} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{C}\mathbf{x}(t), \quad (2.3)$$

wobei $\mathbf{x}, \mathbf{x}_0 \in \mathcal{X}$, $\mathbf{y} \in \mathcal{Y}$. Es bezeichnen \mathbf{x} die Zustände und \mathbf{u} die Steuerungsfunktion. Der Tatsache, dass nicht immer alle Zustände für die Optimierung zugänglich sind, tragen wir durch Hinzunahme der Ausgangsfunktion \mathbf{y} Rechnung. Dabei sind im Allgemeinen $\mathbf{u}(t) \in \mathcal{U}$ die Eingangsgrößen (Kontrollen, Stellgrößen, Regelungsparameter),

$\mathbf{y}(t) \in \mathcal{Y}$ die Ausgangsgrößen (Beobachtungen, Messungen), und $\mathbf{x}(t) \in \mathcal{X}$ die Zustandsvariablen, die sich als Lösung einer (partiellen oder gewöhnlichen) Differentialgleichung ergeben. Wir haben uns hier auf den Fall konzentriert, dass \mathbf{x} Lösung einer instationären partiellen Differentialgleichung, \mathbf{f} mithin ein linearer oder nichtlinearer partieller Differentialoperator von elliptischem Typ, ist.

2.3.1 Lineare Probleme

Im Mittelpunkt standen Optimalsteuerungsprobleme der in (2.1) und (2.2) beschriebenen Form, die durch abstrakte *linear-quadratische Optimalsteuerungsprobleme* bzw. *linear-quadratische Regelungsprobleme*, kurz *LQR Probleme* beschrieben werden können. Das heißt, (2.1) ist quadratisch in y und u und (2.2) ist linear in x und u .

Die optimale Steuerung dieses Problems lässt sich als Feedback-Steuerung der Form

$$\mathbf{u}_*(t) = -\mathbf{R}^{-1}\mathbf{B}^*\Pi_\infty\mathbf{x}_*(t),$$

angeben, wobei Π_∞ die eindeutige nichtnegative Lösung der Riccatigleichung

$$0 = \mathfrak{R}(\Pi) = \mathbf{C}^*\mathbf{Q}\mathbf{C} + \mathbf{A}^*\Pi + \Pi\mathbf{A} - \Pi\mathbf{B}\mathbf{R}^{-1}\mathbf{B}^*\Pi,$$

ist.

Für die numerische Umsetzung war eine Diskretisierung erforderlich. Im Vorfeld [Saa03, Ben04] des Projektes wurde basierend auf [BK84, BI91] die Strategie “semi-discretize–optimize–semi-discretize” vorgestellt, welche auf ein lineares, endlich-dimensionales Problem führt. Analog zum unendlichdimensionalen Problem ergibt sich die Lösung wieder als Zustandsrückführung, zu deren Berechnung die Lösung einer algebraischen Riccatigleichung erforderlich ist. Dafür hat der Antragsteller schon Algorithmen (mit-)entwickelt, welche in diesem Teilprojekt eingebunden werden sollten. Die Verfahren basieren auf einem Newton-Verfahren für algebraische Riccatigleichungen, welches auf einer ADI-artigen Lösung der linearen Matrixgleichung [BLP00, LW02, Wac88] in jedem Newton-Schritt beruht.

Dabei sollte die Lösung des endlichdimensionalen Problems für immer feinere Diskretisierungen gegen die Lösung des unendlichdimensionalen Problems konvergieren. Unter einigen Voraussetzungen an das Diskretisierungsschema, die z.B. von Standard-Galerkin-Verfahren erfüllt werden, konnte in [BK84] für lineare parabolische Probleme mit verteilter Kontrolle und homogenen Dirichlet-Randbedingungen gezeigt werden, dass die Lösungen der endlichdimensionalen LQR Probleme gleichmäßig gegen die gesuchte Lösung des unendlichdimensionalen Problems konvergieren. Diese Aussagen konnten in [BS05] auf Probleme mit gemischten Randbedingungen übertragen werden.

Die obigen Ausführungen beziehen sich auf Stabilisierungsprobleme. Betrachtet man nun Folgeregelungsprobleme, das heißt, Probleme, bei denen an eine gegebene Referenztrajektorie gesteuert werden soll, dann kann man das ebenfalls als Stabilisierungsproblem für die Abweichung des aktuellen Zustands von der Referenztrajektorie auffassen. Es kam also die Frage auf, ob man dieses Problem mit den vorhandenen Routinen für das Stabilisierungsproblem lösen kann.

2.3.2 Nichtlineare Probleme

Hier betrachteten wir nichtlineare Diffusions-Konvektions- bzw. Diffusions-Reaktionsprobleme der Form

$$\frac{\partial}{\partial t} S\mathbf{x} + \nabla \cdot (\mathbf{C}(\mathbf{x}) - \mathbf{K}(\nabla\mathbf{x})) - \mathbf{Q}(\mathbf{x}) = \mathcal{B}\mathbf{u}(t), \quad t \in [0, T_f], \quad (2.4)$$

auf $\Omega \in \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2, 3$, mit geeigneten Anfangs- und Randbedingungen. Hierbei sind S ein (nur von Ort und Zeit abhängiger) Speicherterm, \mathbf{C} der konvektive Anteil, \mathbf{K} der diffusive Anteil, und \mathbf{Q} ein ungesteuerter Quellterm. Die Steuerung erfolgt entweder über den gesteuerten Quellterm $\mathcal{B}\mathbf{u}$ oder die Randbedingungen, wobei nichtlineare Probleme auch bei linearen Gleichungen der Form (2.4) durch nichtlineare Randbedingungen entstehen.

Im ersten Schritt wurde sich hier zunächst auf semilineare und quasilineare Probleme konzentriert, wobei Steuerungsprobleme für die nichtlineare Wärmeleitungsgleichung und die Burgers-Gleichung als erste Modellbeispiele dienen sollten.

Die Lösungsstrategie folgte der modellprädiktiven Kontrolle (MPC) (bzw. Receding Horizon Regelung). Dabei werden kleinere linearisierte Probleme auf kleinen Teilintervallen gelöst. Die Approximation an die optimale Steuerung wird dann zusammengesetzt aus den optimalen Steuerungen auf den Teilintervallen.

Es gibt verschiedene Techniken, die Probleme auf den Teilintervallen zu lösen. Ein vielversprechender Zugang ist das LQG Design, welches in [IK03] vorgestellt wird. Diese Methode verlangt je nach Art der Linearisierung die Lösung von zwei algebraischen Riccati-Gleichungen oder zwei Riccati-Differentialgleichungen. Somit konnten dieselben Algorithmen wie im linearen Fall verwendet werden.

2.3.3 Zusammenfassung der Aufgaben

Es waren im linearen Fall also folgende Aufgaben zu bearbeiten:

- Numerische Implementierung anhand eines 2D-Modellbeispiels
- Integration des ADI-artigen Löser für die Lösung der Riccati-Gleichung
- Untersuchung theoretischer Aspekte, um die verwendeten numerischen Methoden zu rechtfertigen
- Untersuchung von Folgeregelungsproblemen

Im nichtlinearen Fall waren folgende Schritte geplant:

- Einführende Betrachtungen zur modellprädiktiven Kontrolle
- Einführende Betrachtungen zum linear-quadratisch Gauß'schen Design
- Numerische Implementierung anhand eines 1D-Modellbeispiels

Literaturverzeichnis (eigene Vorarbeiten und Fremdliteratur)

- [Ben04] P. Benner. Solving large-scale control problems. *IEEE Control Systems Magazine*, 14(1):44–59, 2004.
- [BI91] H.T. Banks and K. Ito. A numerical algorithm for optimal feedback gains in high dimensional linear quadratic regulator problems. *SIAM J. Cont. Optim.*, 29(3):499–515, 1991.
- [BK84] H.T. Banks and K. Kunisch. The linear regulator problem for parabolic systems. *SIAM J. Cont. Optim.*, 22:684–698, 1984.
- [BLP00] P. Benner, J.-R. Li, and T. Penzl. Numerical solution of large Lyapunov equations, Riccati equations, and linear-quadratic control problems. Unpublished manuscript, 2000.
- [BS05] P. Benner and J. Saak. A semi-discretized heat transfer model for optimal cooling of steel profiles. In P. Benner, V. Mehrmann, and D. Sorensen, editors, *Dimension Reduction of Large-Scale Systems*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering, pages 353–356. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, Germany, 2005.
- [IK03] K. Ito and K. Kunisch. Receding horizon control with incomplete observations. Preprint, October 2003.
- [LW02] J.-R. Li and J. White. Low rank solution of Lyapunov equations. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 24(1):260–280, 2002.
- [Saa03] J. Saak. Effiziente numerische Lösung eines Optimalsteuerungsproblems für die Abkühlung von Stahlprofilen. Diplomarbeit, Fachbereich 3/Mathematik und Informatik, Universität Bremen, D-28334 Bremen, September 2003.
- [Wac88] E.L. Wachspress. Iterative solution of the Lyapunov matrix equation. *Appl. Math. Letters*, 107:87–90, 1988.

2.4 Ergebnisse

Da dieses Teilprojekt nur 21 Monate am SFB beteiligt war, sind nur beschränkt Ergebnisse vorzuweisen.

2.4.1 Lineare Probleme

Das lineare Problem wurde anhand eines 2D-Modellbeispiels numerisch implementiert. Als Beispiel diente die optimale Abkühlung von Stahlprofilen, wie sie in Walzwerken zwischen den einzelnen Bearbeitungsschritten benötigt wird. Dabei wird aus Düsen eine kühlende Flüssigkeit auf die Oberfläche des Stahls gesprüht. Die Modellgleichungen beruhen auf [ET01a, ET01b, KSTW97, TU01] und werden unter anderem in [BS05] genauer erläutert.

Die theoretischen Grundlagen für die numerischen Methoden werden ebenfalls in [BS05] aufgezeigt. Damit konnte nachgewiesen werden, dass das endlichdimensionale System,

welches aus der Optimierung des semidiskretisierten Problems resultiert, gegen das unendlichdimensionale System konvergiert.

Für das approximierende endlichdimensionale System wurden für die Zustandsrückführung Matrizen benötigt, deren Dimensionen größer als 1000 war. Damit waren klassische Methoden zur Lösung der Riccatigleichungen nicht mehr anwendbar. In [BLP00, Pen00a] wurde ein Verfahren zum effizienten Lösen der Riccatigleichungen entwickelt, welches auch für große dünnbesetzte Riccatigleichungen angewendet werden kann. Dabei wird auf die nichtlineare Riccatigleichung ein Newtonverfahren angewendet und in jedem Schritt eine Lyapunovgleichung mit einer ADI-artigen Methode gelöst. Details sind in [BGS] zu finden.

Für die Implementierung des gesamten Problems wurden die Programmpakete **LyaPack** [Pen00b] und **ALBERTA** [SS05] verwendet. Die Initialisierung erfolgt in **MATLAB**. Die Parameter werden an eine C-Funktion übergeben, welche die FEM-Bibliothek **ALBERTA** nutzt, um die Systemmatrizen zu assemblieren. Diese werden wieder an **MATLAB** übergeben, um mit Hilfe von **LyaPack** die Rückführungsmatrix zu berechnen. In [BGS] wird dies genauer erläutert. Ergebnisse zu den numerischen Tests für das oben aufgeführte

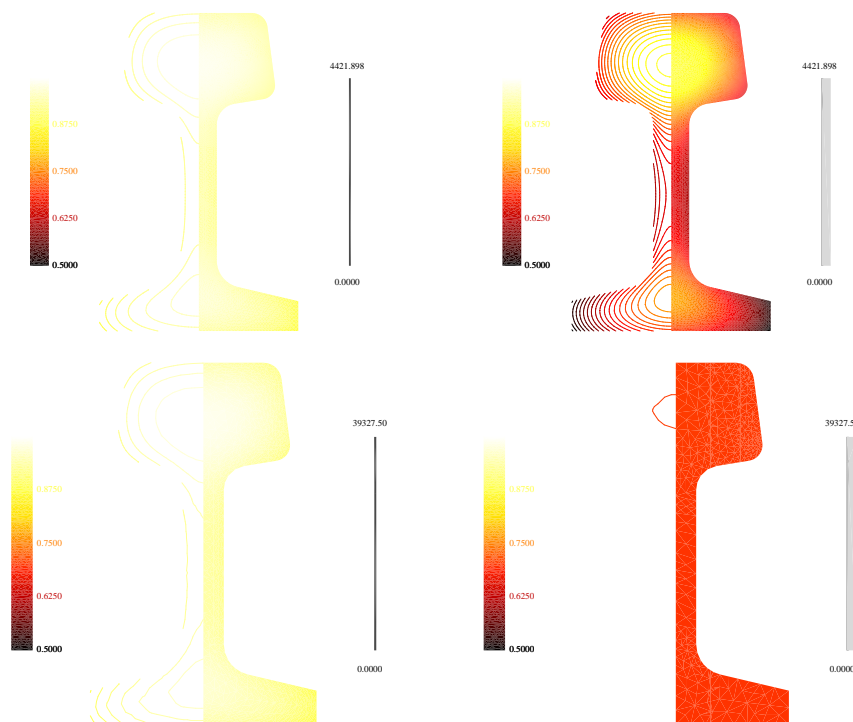


Abbildung 2.1: Anfangs- (links) und Endtemperaturverteilungen (rechts) für das Stabilisierungs- (oben) und Folgeregelungsproblem (unten) bei der optimalen Abkühlung von Stahlprofilen.

Beispiel werden in [BS05] vorgestellt. Ein beispielhaftes Testergebnis ist in Abbildung 2.1 oben dargestellt.

In [BGS] wurde ebenfalls gezeigt, wie sich das Folgeregelungsproblem als Stabilisierungsproblem für die Abweichung des aktuellen Zustands von einer gegebenen Referenztra-

vektorie auffassen lässt. Damit kann dieses Problem mit den Methoden für Stabilisierungsprobleme gelöst werden.

Numerische Resultate für das Folgeregelungsproblem sind in [BGS] zu finden. Abbildung 2.1 unten zeigt das Ergebnis einer Simulation zur Abkühlung auf konstante 700°C .

2.4.2 Nichtlineare Probleme

Für den nichtlinearen Fall wurde das Kontrollproblem bezüglich der eindimensionalen Burgers-Gleichung formuliert und erste Testrechnungen mit dem MPC/LQG Schema durchgeführt. Dabei stand das Stabilisierungsproblem im Vordergrund, d.h., der Zustand sollte in den Nullzustand gesteuert werden. In Abbildung 2.2 (links) sieht man

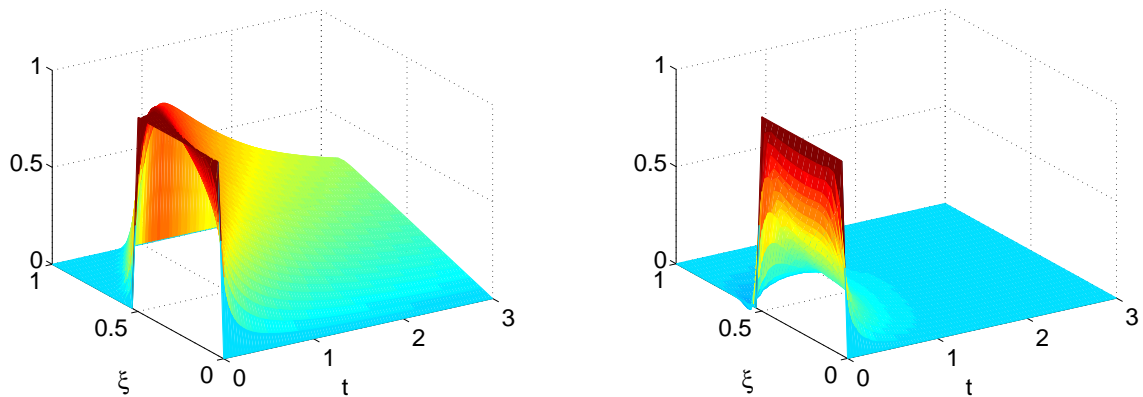


Abbildung 2.2: Lösung der ungesteuerten Burgers-Gleichung (links) und gesteuerte Lösung über das Zwei-Punkt-Randwertproblem (rechts)

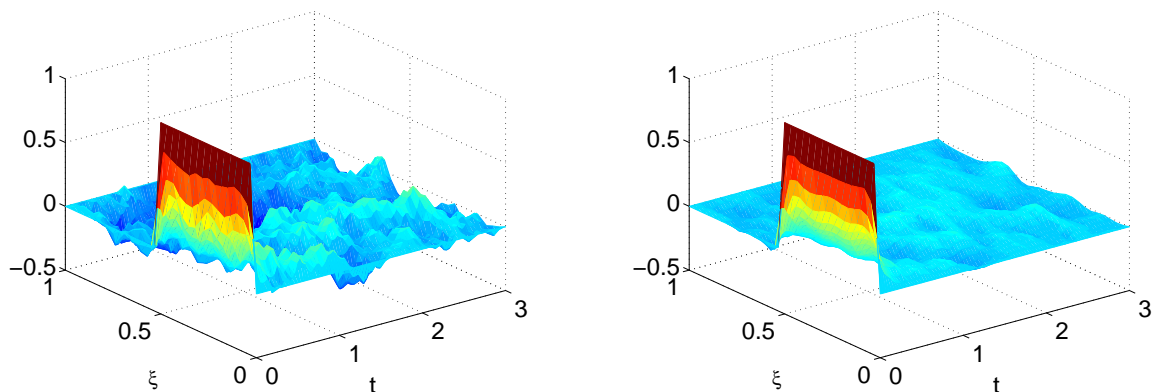


Abbildung 2.3: Gesteuerte Lösung über das Zwei-Punkt-Randwertproblem mit Eingangsstörung (links) und MPC/LQG Lösung mit Eingangsstörung (rechts)

die Lösung der Burgers-Gleichung. Die Anfangsbedingung zum Zeitpunkt $t = 0$ ist eine Rechteckfunktion. Charakteristisch für die Burgers-Gleichung als Transportgleichung

ist, dass der Sprung an der Stelle $\xi = \frac{1}{2}$ für wachsendes t in Richtung $\xi = 1$ transportiert wird, während die Höhe kleiner wird. Im rechten Bild sollte der Zustand des ungestörten Systems in die Null gesteuert werden. Dazu wurde über die Hamilton-Funktion ein nicht-lineares Zwei-Punkt-Randwertproblem gelöst.

Das Zwei-Punkt-Randwertproblem wurde in Abbildung 2.3 (links) erneut gelöst, wobei das System von einer Eingangsstörung beeinflusst wurde.

Im Gegensatz dazu sieht man die MPC/LQG-Lösung in der Abbildung 2.3 (rechts). Der Zustand ist hier deutlich geglätteter als in Abbildung 2.3 (links). Fügt man dem System noch eine Ausgangsstörung (Messfehler) und eine Störung in der Anfangsbedingung hinzu, dann ergibt sich ein ähnlich geglätteter Zustand wie in Abbildung 2.3 (rechts).

Literaturverzeichnis

- [BGS] P. Benner, S. Görner, and J. Saak. Numerical solution of optimal control problems for parabolic systems. In K.H. Hoffmann and A. Meyer, editors, *Parallel Algorithms and Cluster Computing. Implementations, Algorithms, and Applications*, Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, Germany. to appear.
- [BLP00] P. Benner, J.-R. Li, and T. Penzl. Numerical solution of large Lyapunov equations, Riccati equations, and linear-quadratic control problems. Unpublished manuscript, 2000.
- [BS05] P. Benner and J. Saak. Linear-quadratic regulator design for optimal cooling of steel profiles. Technical Report SFB393/05-05, Sonderforschungsbereich 393 *Parallele Numerische Simulation für Physik und Kontinuumsmechanik*, TU Chemnitz, D-09107 Chemnitz (Germany), 2005. Available from <http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/sfb05pr.html>.
- [ET01a] K. Eppler and F. Tröltzsch. Discrete and continuous optimal control strategies in the selective cooling of steel profiles. *Z. Angew. Math. Mech.*, 81(2):247–248, 2001.
- [ET01b] K. Eppler and F. Tröltzsch. Discrete and continuous optimal control strategies in the selective cooling of steel profiles. Preprint 01-3, DFG Schwerpunktprogramm *Echtzeit-Optimierung großer Systeme*, 2001. Available from <http://www.zib.de/dfg-echtzeit/Publikationen/Preprints/Preprint-01-3.html>.
- [KSTW97] R. Kregel, R. Standke, F. Tröltzsch, and H. Wehage. Mathematisches Modell einer optimal gesteuerten Abkühlung von Profilstählen in Kühlstrecken. Preprint 98-6, Fakultät für Mathematik TU Chemnitz, November 1997.
- [Pen00a] T. Penzl. A cyclic low rank Smith method for large sparse Lyapunov equations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 21(4):1401–1418, 2000.
- [Pen00b] T. Penzl. LYAPACK Users Guide. Technical Report SFB393/00-33, Sonderforschungsbereich 393 *Numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern*, TU Chemnitz, 09107 Chemnitz, FRG, 2000. Available from <http://www.tu-chemnitz.de/sfb393/sfb00pr.html>.

- [SS05] A. Schmidt and K. Siebert. *Design of Adaptive Finite Element Software; The Finite Element Toolbox ALBERTA*, volume 42 of *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*. Springer-Verlag, Berlin/Heidelberg, 2005.
- [TU01] F. Tröltzsch and A. Unger. Fast solution of optimal control problems in the selective cooling of steel. *Z. Angew. Math. Mech.*, 81:447–456, 2001.

2.5 Offene Fragen / Ausblick

Folgende Dinge konnten aufgrund des zu kurzen Zeitraums noch nicht untersucht bzw. umgesetzt werden:

- Weiterentwicklung des 2D-Lösers auf nicht-selbstadjungierte Probleme, wobei für die Lösung der entstehenden Gleichungssysteme auch Schnittstellen zu direkten Lösern geschaffen werden sollen. Geeignet erscheinen hier insbesondere UMFPAK¹ und PARDISO² für nicht-selbstadjungierte Probleme, sowie TAUCS³ und PARDISO für selbstadjungierte Probleme. Außerdem sollen die Schnittstellen zu den in ALBERTA-1.2 enthaltenen iterativen Methoden (PCG für selbstadjungierte Probleme, vorkonditioniertes GMRES und BiCGStab für nicht-selbstadjungierte Probleme) bereitgestellt/erhalten werden, so dass ein möglichst allgemeiner und vielseitig einsetzbarer Löser entsteht.
- Entwicklung von Residuen-basierten a posteriori Fehlerschätzern für das gesteuerte Problem, wobei dies durch eine Anpassung der in der FEM Bibliothek ALBERTA-1.2 enthaltenen Fehlerschätzer erfolgen soll.
- Erweiterung des Lösers auf lineare 3D-Probleme
- Implementierung des nichtlinearen MPC/LQG Problems für 2D und 3D
- Theoretische Untersuchungen zur Konvergenz des MPC/LQG Schemas

Teile der offenen Fragen sollen im Laufe des DFG-Nachfolgeprojektes *Numerische Lösung von Optimalsteuerungsproblemen für instationäre Diffusions-Konvektions- und Diffusions-Reaktionsgleichungen* (BE3715/1-1) bearbeitet werden.

¹Siehe <http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/umfpack>.

²Siehe <http://www.computational.unibas.ch/cs/scicomp/software/pardiso/>

³Siehe <http://www.tau.ac.il/~stoledo/taucs/>.

