



Optimale Steuerung eines Plug Flow Tube Reactors

Projektarbeit an der Universität Ulm
Numerik für gewöhnliche Differentialgleichungen

Vorgelegt von:

Joshua Bauske, Ernst Tobias Leutbecher

Betreuer/ Gutachter:

-

2021

Fassung 25. Juli 2021

Inhaltsverzeichnis

1 Aufgabenstellung	1
2 Direkte Lösungsmethoden	3
2.1 Theoretische Grundlagen	3
2.2 Ergebnisse	4
2.3 Steifigkeitsanalyse	8
3 Indirekte Lösungsmethoden	10
3.1 Theoretische Grundlagen	10
3.2 Problemanalyse	13
3.3 Stetigkeitsüberprüfung der Steuerfunktion	14
3.3.1 Stetige Differenzierbarkeit der Hamilton-Funktion	14
3.3.2 Regularitätsuntersuchung der Hamilton-Funktion	15
3.4 Optimale Steuerung	21
3.5 Ergebnisse	21
4 Fazit	29
A Steuerbereich $U = [0, 1]$	31
B Zweifach stetige Differenzierbarkeit von $H(u)$	34
Literatur	36

1 Aufgabenstellung

Modelliert werden sollen die Reaktionsgleichung

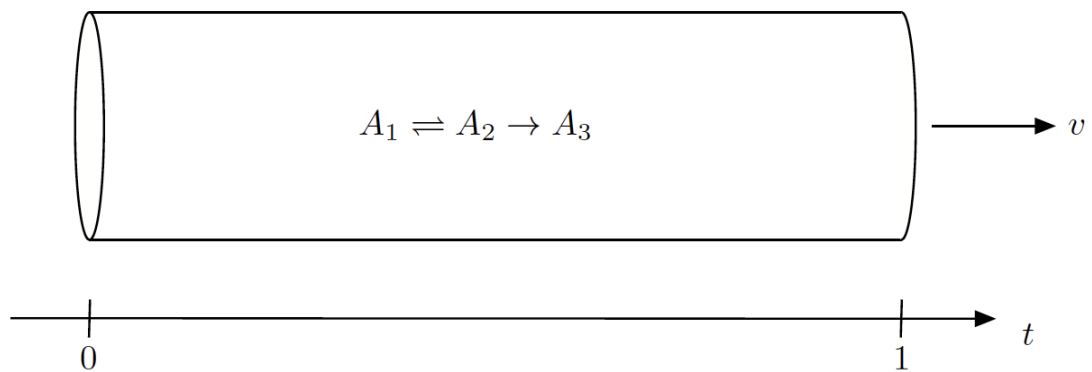


Abbildung 1.1: Plug Flow Tube Reactor

Dabei seien

- $x_1(t)$: Konzentration von A_1
- $x_2(t)$: Konzentration von A_2
- $\vartheta(t)$: ortsabhängige Temperatur im Reaktor
- $u(t)$: transformierte Steuerung.

Die Dynamik des Systems lässt sich durch

$$\dot{x}_1(t) = -k_1 x_1(t) + k_2 x_2(t) \quad (1.2)$$

$$\dot{x}_2(t) = k_1 x_1(t) - (k_2 + k_3) x_2(t) \quad (1.3)$$

1 Aufgabenstellung

beschreiben, wobei die Reaktionsraten k_1 , k_2 und k_3 von der ortsabhängigen Temperatur im Reaktor abhängen. Hierfür gilt

$$k_1 = \exp\left(-\frac{\alpha}{\vartheta(t)}\right), \alpha > 0 \quad (1.4)$$

$$k_2 = k_1^2 \quad (1.5)$$

$$k_3 = 2k_1^2 \quad (1.6)$$

und $\vartheta_{min} \leq \vartheta(t) \leq \vartheta_{max}$. Das Ziel ist die Temperatur so zu steuern, dass die Produktausbeute von A_2 am Ende des Vorgangs maximal wird. Mit der transformierten Steuervariable $u(t) = k_1(t) = \exp(-\alpha/\vartheta(t))$ ergibt sich folgendes Optimalsteuerungsproblem

$$\min_u -x_2(1) \quad (1.7)$$

s. t.

Dynamik :

$$\dot{x}_1(t) = -ux_1(t) + u^2x_2(t)$$

$$\dot{x}_2(t) = ux_1(t) - 3u^2x_2(t)$$

Anfangs- / Steuerbedingungen :

$$x_1(0) = x_{1,0}$$

$$x_2(0) = x_{2,0}$$

$$u(t) \in [u_{min}, u_{max}] \quad \forall t \in [0, 1].$$

Wir wählen $x_{1,0} = 1$, $x_{2,0} = 0$, $u_{min} = 0$ und $u_{max} = 5$.

2 Direkte Lösungsmethoden

2.1 Theoretische Grundlagen

Direkte Verfahren zur Lösungen eines Optimalsteuerungsproblems basieren auf einer Diskretisierung. Ziel ist es das Problem auf eine endlichdimensionale Optimierung der Form:

$$\min_{z \in S} F(z) \quad (\text{Zielfunktional}) \quad (2.1)$$

$$\text{s. t.} \quad G(z) \leq \theta \quad (\text{Ungleichungsbesch.})$$

$$H(z) = \theta \quad (\text{Gleichungsbesch.})$$

$$S := \mathbb{R}^{(n_x \cdot (N+1))} \times [u_{min}, u_{max}]^{(N+1)}$$

zurückzuführen und Verfahren aus der *Numerischen Optimierung* anzuwenden. Zu diesem Zweck wird eine Diskretisierung der Differentialgleichung auf dem Gitter \mathbb{G}_h vorgenommen. Für die Diskretisierung können verschiedene explizite oder implizite Verfahren zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen verwendet werden, welche die Gitterfunktionen:

$$x_h : \mathbb{G}_h \rightarrow \mathbb{R}^{n_x}, t_i \mapsto x_h(t_i) =: x^{(i)} \quad (2.2)$$

$$u_h : \mathbb{G}_h \rightarrow \mathbb{R}^{n_u}, t_i \mapsto u_h(t_i) =: u^{(i)} \quad (2.3)$$

$$(2.4)$$

definieren. [1] Im folgenden ist exemplarisch die vollständige Euler-Diskretisierung für das Problem aus Kapitel 1 dargestellt:

Zielfunktional:

$$F(z) := \varphi(x^{(0)}, x^{(N)}) = -x_2(1) =: -z_2^{(N+1)} \quad (2.5)$$

Optimierungsvariable:

$$z := \begin{pmatrix} x^{(0)} \\ \vdots \\ x^{(N)} \\ u^{(0)} \\ \vdots \\ u^{(N)} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n_x+n_u) \cdot (N+1)} \quad (2.6)$$

Gleichungsnebenbedingungen:

$$H(z) = \begin{pmatrix} x^{(0)} + h^{(0)} f(t_0, x^{(0)}, u^{(0)}) - x^{(1)} \\ \vdots \\ x^{(N-1)} + h^{(N-1)} f(t_{N-1}, x^{(N-1)}, u^{(N-1)}) - x^{(N)} \\ z_1^{(0)} - x_{1,0} \\ z_2^{(0)} - x_{2,0} \end{pmatrix} = 0 \quad (2.7)$$

2.2 Ergebnisse

Für die Lösung des Optimierungsproblems wurde die Matlab-Routine *fmincon* verwendet und verschiedene Verfahren zur Diskretisierung des Differentialgleichungssystems getestet:

- explizites Euler-Verfahren
- implizites Radau2A-Verfahren
- Matlab-Verfahren ODE23s für steife Probleme

Wird das explizite Eulerverfahren näher betrachtet (vgl. Abbildung 2.1) fällt auf, dass alle Gitterweiten qualitativ einen ähnlichen und sinnvollen Verlauf aufweisen. Dies lässt vermuten, dass die Dynamik des Systems nicht steif und die Verwendung eines expliziten Verfahrens geeignet ist. Plausible Ergebnisse werden jedoch erst ab $N = 20$ ersichtlich, wobei ab $N = 50$ die Lösung sich mit steigender Gitterpunktzahl nicht mehr merklich verändert. Für kleine N reichen die vorhandenen Gitterpunkte nicht aus, damit das Optimierungsverfahren eine aussagekräftige Lösung

findet. Am Ende des Zeitintervalls ist ein Knick in der Lösung der optimalen Steuerung $u(t)$ zu sehen. Dies liegt daran, dass der Wert $u^{(N+1)} = u_h(T)$ erst relevant für die Optimierung des nächsten Zeitschrittes wäre, welcher außerhalb des Betrachtungszeitraumes liegt. Aus diesem Grund verhält sich das Optimierungsverfahren an dieser Stelle unvorhersehbar und erfüllt nur die Bedingung $u^{(N+1)} \in [u_{min}, u_{max}]$. Diese Aussage lässt sich mit der Tatsache bestätigen, dass mit kleiner werdenden Gitterpunktanzahl der Knick zeitlich auch eher auftritt. Beispielsweise tritt der Knick für $N = 5$ bereits bei ca. $t = 0.8$ auf, für $N = 150$ jedoch erst kurz vor $t = 1$.

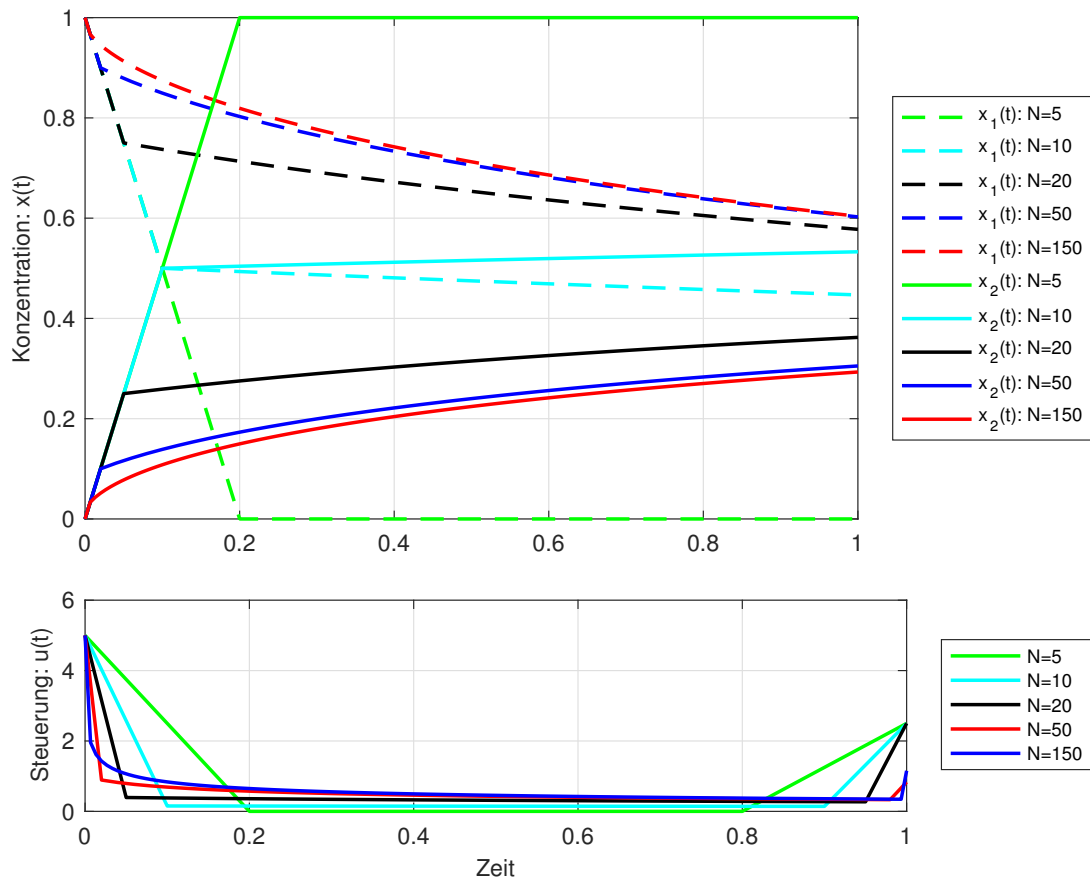


Abbildung 2.1: Direktes Verfahren: Vollständige Euler-Diskretisierung

Andere Beobachtungen können bei dem impliziten Radau2A-Verfahren gemacht werden (vgl. Abbildung 2.2). Bereits ab $N \geq 20$ sind alle Lösungen fast identisch. Im Gegensatz zum Euler-Verfahren ist indes selbst eine physikalisch sinnvolle Lösung ab $N \geq 5$ erkennbar. Sowohl die Trajektorie von $x_1(t)$ und $x_2(t)$, als auch die berechnete optimale Steuerung $u(t)$ stimmen bereits bei einer großen Gitterweite mit

den erwarteten Verläufen überein. Kleinere Ungenauigkeiten sind bei $N = 5$ bzw. $N = 10$ auf das gröbere Gitter zurückführen. Das bessere Verhalten des Radau2A-Verfahren bei einer kleineren Anzahl von Gitterpunkten lässt sich mit der höheren Konsistenz- und Konvergenzordnung begründen. Das Euler-Verfahren besitzt die Ordnung 1, das Radau2A-Verfahren hingegen die Ordnung 3.

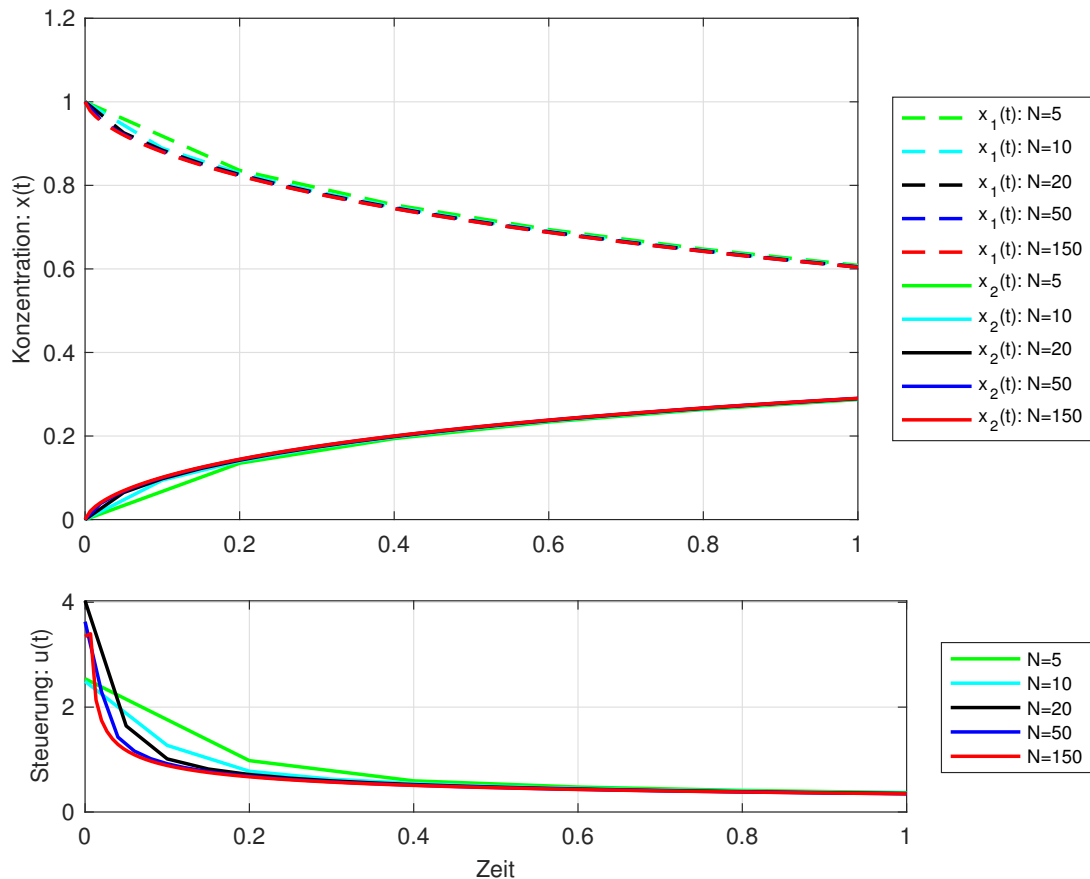


Abbildung 2.2: Direktes Verfahren: Implizites Radau2A-Verfahren

Eine ebenfalls qualitativ sehr gute Lösung berechnet das Matlab-Verfahren *ODE23s*, fast äquivalent zum Radau2A-Verfahren. Bereits bei einer sehr geringen Anzahl von Optimierungsstellen ($N = 10$) ändert/ verbessert sich das Ergebnis mit einer Erhöhung der Stützstellen nicht mehr wesentlich. Ein möglicher Grund ist die adaptive Schrittweitensteuerung des Verfahrens. Zwischen zwei Optimierungsstellen $t^{(i)}$ und $t^{(i+1)}$ macht die vollständige Euler-Diskretisierung und das Radau2A-Verfahren nur einen Schritt. Das Verfahren *ODE23s* jedoch passt die Schrittweite an und kann zwischen $t^{(i)}$ und $t^{(i+1)}$ noch Zwischenschritte einfügen, welche zwar nicht mit in

die Optimierung eingehen, jedoch helfen die Dynamik besser zu approximieren. Die Betrachtung anderer Matlab-Verfahren, wie z.B. *ODE45*, welches ebenfalls eine adaptive Schrittweitensteuerung besitzt und nicht für steife Probleme geeignet ist, lieferte ähnliche Ergebnisse und untermauert somit die Behauptung. Der Löser *ODE23s* basiert auf einem Einschrittverfahren mit modifizierter Rosenbrock-Formel der Ordnung 2. [3]

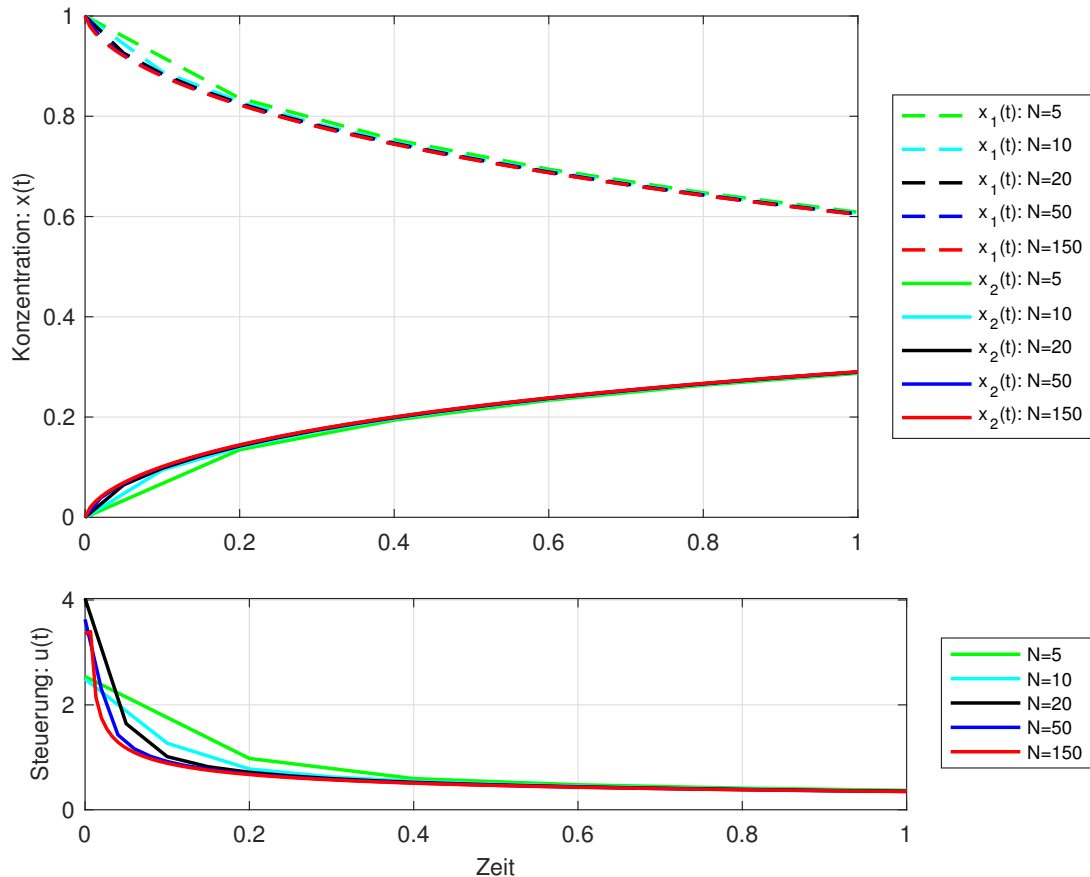


Abbildung 2.3: Direktes Verfahren: *ODE23s* Matlab-Verfahren)

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass bei der entsprechenden Wahl von N alle Verfahren sinnvolle Lösungen erzeugen. Die Konzentration von $x_1(t)$ wird kontinuierlich abgebaut und die von $x_2(t)$ gleichmäßig erhöht. Am Ende des Betrachtungszeitraum zeichnet sich ein chemisches Gleichgewicht ab, was in der Realität auch zu erwarten wäre. Aus diesem Grund stabilisiert sich auch die Steuerung zum Ende hin. Des Weiteren liefern alle Verfahren ein ähnliches Ergebnis und liegen deshalb in Abbildung 2.4 fast komplett übereinander.

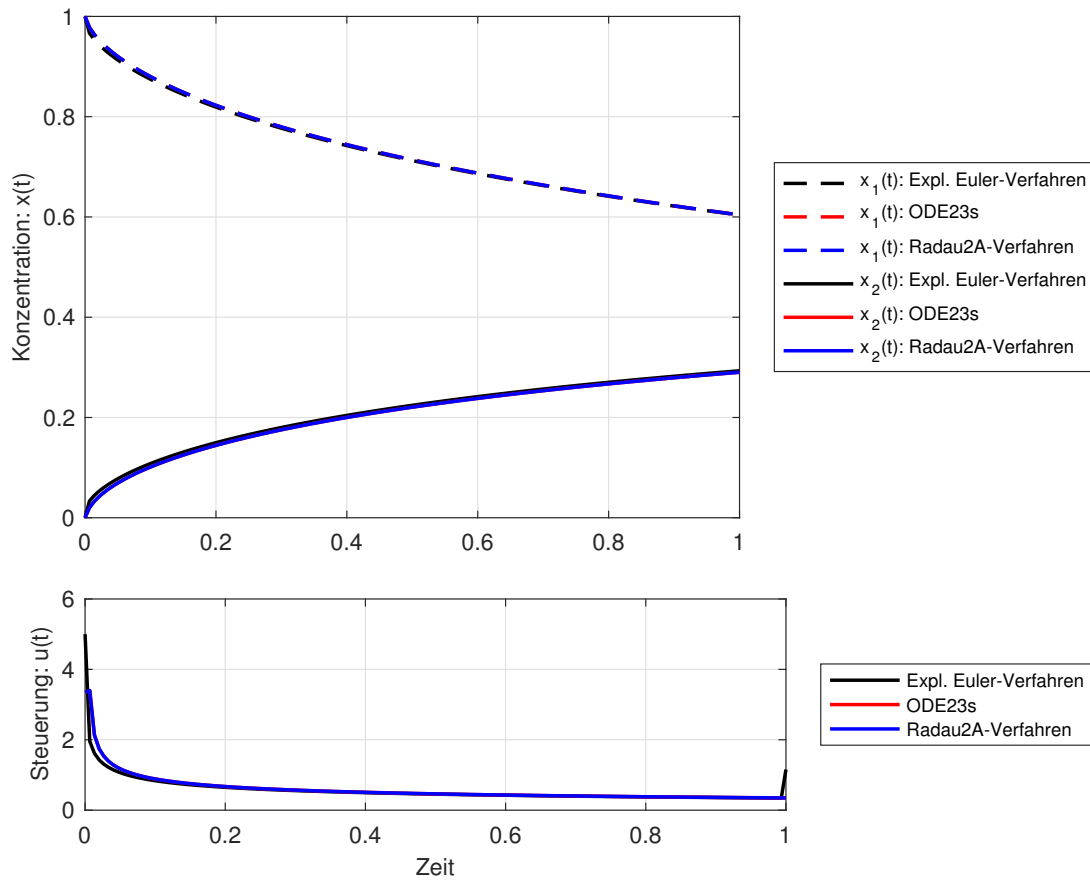


Abbildung 2.4: Direkte Verfahren: Vergleich

2.3 Steifigkeitsanalyse

Um die Behauptung aus Abschnitt 2.2 zu bestätigen, dass das System aus Kapitel 1 nicht steif ist, wird eine vereinfachte Steifigkeitsanalyse durchgeführt. Im Allgemeinen wird ein lineares Anfangswertproblem (kurz: AWP) der Form

$$\dot{x}(t) = Ax + b, \quad x(0) = x_0 \quad (2.8)$$

als steif bezeichnet, wenn gilt :

$$\Re(\lambda_i) < 0, \quad \max_{i,j} \frac{|\lambda_i|}{|\lambda_j|} \gg 1 \quad (2.9)$$

Dabei stellen λ_k die Eigenwerte der Matrix A dar. Ist ein nichtlineares AWP zu untersuchen, dann muss zu jedem Zeitpunkt eine Taylor-Entwicklung 1. Ordnung durchgeführt und die Eigenwerte der Jacobi-Matrix in jedem Iterationsschritt einzeln betrachtet werden. Dies trifft auf das Problem aus Kapitel 1 zu. Die Jacobi-Matrix für das DGL-System lautet:

$$\frac{\partial f(t, u(t), y(t))}{\partial y} = J_f(t, u(t), y(t)) = \begin{pmatrix} -u & u^2 & 0 & 0 \\ u & -3u^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & -u \\ 0 & 0 & -u^2 & 3u^2 \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

Entsprechend ergibt sich durch Einsetzen der Steuerung aus Abbildung 2.4 der Verlauf des Quotienten (2.9) in Abbildung 2.5. Der Maximalwert beträgt ca. 23,56 und ist somit zwar größer als 1, jedoch nicht in dem Maß, dass die Dynamik als steif anzusehen ist. Aus diesem Grund wird die Aussage aus Abschnitt 2.2 bestätigt, dass das System nicht steif ist. In erster Linie bereitet das Phänomen der Steifigkeit ex-

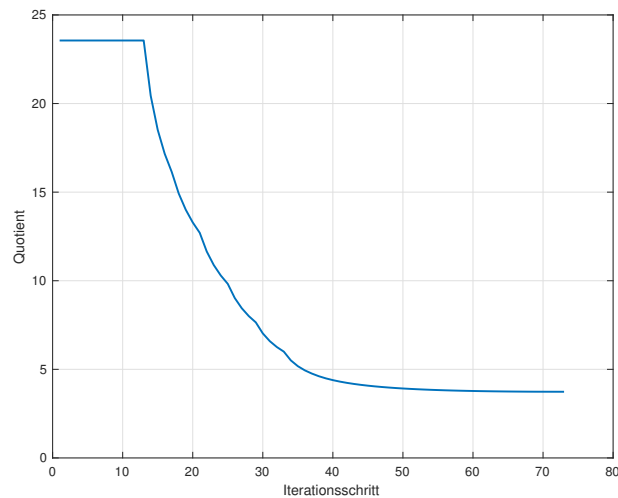


Abbildung 2.5: Steifigkeitsanalyse: Quotient $\max_{i,j} \frac{|\lambda_i|}{|\lambda_j|}$ über Iterationsschritt $t^{(k)}$

pliziten Verfahren zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen Probleme, sodass diese nicht konvergieren und ein instabiles Verhalten aufzeigen. Dies hat zur Folge, dass für die Lösung steifer Probleme implizite Verfahren zu bevorzugen sind, welche jedoch einen erhöhten Rechenaufwand aufweisen. Da das hier vorliegende Problem hingegen nicht steif ist, liefern auch explizite Verfahren sinnvolle Lösungen und bieten den Vorteil des geringeren Berechnungsaufwandes.

3 Indirekte Lösungsmethoden

3.1 Theoretische Grundlagen

Ausgangspunkt dieses Abschnittes¹ ist die allgemeine Definition eines optimalen Steuerprozesses.

Definition 1: Optimaler Steuerprozess

Sei der zulässige Steuerbereich $U \subset \mathbb{R}^m$ nichtleer, konvex und abgeschlossen, dann ist ein allgemeiner optimaler Steuerprozess definiert als:

$$\begin{aligned} \text{Minimiere } F(x, u) &= g(x(T)) + \int_0^T f_0(t, x(t), u(t)) dt & (3.1) \\ \text{s.t. } \dot{x} &= f(t, x, u), \quad t \in [0, T] \\ x(0) &= x_0, \quad \psi(x(T)) = 0 \\ u(t) &\in U \end{aligned}$$

Dabei ist $\psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^r$ eine C^1 -Funktion ($0 \leq r \leq n$) und T die Endzeit des Prozesses.

Des Weiteren wird für den Steuerprozess 1 die Hamilton-Funktion wie folgt definiert:

$$H(t, x, \lambda, u) := \lambda_0 \cdot f_0(t, x, u) + \lambda^T \cdot f(t, x, u), \quad \lambda_0 \in \mathbb{R}, \lambda \in \mathbb{R}^n \quad (3.2)$$

Dabei wird λ als adjungierte Variable bezeichnet. Das *Minimumsprinzip von Pontryagin* (vgl. Theorem 1) ist der zentrale Satz der Theorie optimaler Steuerprozesse

¹Hinweis: Nachfolgende Theorie orientiert sich sehr stark an [1].

und vereint die notwendigen Optimalitätsbedingungen für das Problem 1. Unter zusätzlichen Annahmen sind die Bedingungen sogar hinreichend (vgl. Theorem 2).

Theorem 1: Minimumprinzip von Pontryagin

Es sei $(x^*, u^*) : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n \times U$ eine optimale Lösung von (1), wobei die Matrix $\psi_x(x^*(T))$ vollen Rang habe. Dann existieren $\lambda_0 \geq 0$ und eine stetige und stückweise stetig differenzierbare Funktion $\lambda : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ und ein Vektor $\nu \in \mathbb{R}^r$ mit $(\lambda_0, \lambda(t), \nu) \neq 0$ für alle $t \in [0, T]$, sodass die folgenden Aussagen gelten:

- (i) An allen Stetigkeitsstellen $t \in [0, T]$ von $u^*(\cdot)$ gilt die Minimumsbedingung

$$H(t, x^*(t), \lambda(t), u^*(t)) = \min_{u \in U} H(t, x^*(t), \lambda(t), u) \quad (3.3)$$

- (ii) An allen Stetigkeitsstellen $t \in [0, T]$ von $u^*(\cdot)$ gilt die adjungierte Differentialgleichung

$$\dot{\lambda}(t)^T = -H_x(t, x^*(t), \lambda(t), u^*(t)) \quad (3.4)$$

- (iii) Im Endzeitpunkt T gilt die Transversalitätsbedingung

$$\lambda(T)^T = \lambda_0 g_x(x^*(T)) + \nu^T \psi_x(x^*(T)) \quad (3.5)$$

- (iv) Im Falle freier Endzeit gilt für die optimale Endzeit T^*

$$H(T^*, x^*(T^*), \lambda(T^*), u^*(T^*)) = 0 \quad (3.6)$$

- (v) Für autonome Systeme gilt außerdem

$$H(T^*, x^*(T^*), \lambda(T^*), u^*(T^*)) = \text{const in } [0, T] \quad (3.7)$$

Korollar 1 ergänzt für eine wichtige Modellklasse (freier Endzustand) die Aussage von Theorem 1.

Korollar 1

Bei freiem Endzustand $x(T)$, d.h., im Falle $\psi \equiv 0$, kann ohne Beschränkung der Allgemeinheit $\lambda_0 = 1$ in Theorem 1 angenommen werden.

Theorem 2: Hinreichende Optimalitätsbed. für opt. Steuerprozesse

Es sei (x^*, u^*) ein zulässiges Paar für das Problem 1. Es existieren eine Funktion $\lambda : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ und ein $\nu \in \mathbb{R}^r$, sodass die Bedingungen von Satz 1 mit $\lambda_0 = 1$ erfüllt sind. Zusätzlich sei

- (a) $\psi(\cdot)$ affin-linear
- (b) $g(\cdot)$ konvex und
- (c) $H^{(0)} := \min_{u \in U} H(t, x, \lambda, u)$ konvex in x für jedes $(t, \lambda(t))$.

Damit ist (x^*, u^*) eine optimale Lösung des Problems 1.

Damit sichergestellt werden kann, ob das Minimumsprinzip von Pontryagin anwendbar ist, ist die Steuerfunktion $u(t)$ auf Stetigkeit zu überprüfen. Zu diesem Zweck wird ein Regularitätsbegriff bezogen auf die Hamilton-Funktion (vgl. Definition 2) eingeführt, welcher unter gewissen Umständen Stetigkeit garantiert (vgl. Korollar 2).

Defintion 2: Regularität der Hamilton-Funktion

Die Hamilton-Funktion $H(t, x, \lambda, u)$ heißt regulär (bzgl. einer optimalen Lösung $x^*(t), \lambda^*(t)$), wenn es ein $\epsilon > 0$ gibt, sodass für die Menge

$$D_\epsilon = \{(t, x, \lambda) : t \in [0, T], \|x - x^*(t)\| < \epsilon, \|\lambda - \lambda^*(t)\| < \epsilon\}$$

gilt: Die Hamilton-Funktion hat eine eindeutig bestimmte Minimalstelle

$$u^*(t, x, \lambda) = \arg \min_{u \in U} H(t, x, \lambda, u) \quad \forall (t, x, \lambda) \in D_\epsilon.$$

Korollar 2

Im Falle einer regulären Hamilton-Funktion ist die optimale Steuerung $u^*(t)$ stetig. Ist $U = \mathbb{R}^m$, so ist die optimale Steuerung $u^*(t)$ sogar eine C^k -Funktion ist.

3.2 Problemanalyse

Wird das Problem aus Kapitel 1 näher betrachtet fällt auf, dass keine variable Endzeit vorliegt ($T = 1$). Des Weiteren ist Korollar 1 anwendbar, da der Endzustand frei ist ($\psi(x(T)) \equiv 0$), wodurch in der Hamilton-Funktion $\lambda_0 = 1$ angenommen werden darf. Die Steuerung $u := u(t)$ muss sich im Bereich $U = [0, 5]$ bewegen und geht nichtlinear in die Dynamik ein. Durch die fehlende direkte Zeitabhängigkeit des Differentialgleichungssystems liegt ein autonomes System in Zusammenspiel mit einem reinen Mayer-Problem vor. Demnach folgt aus der Zustandsbeschreibung:

$$f_0(t, x(t), u(t)) \equiv 0 \quad (\text{LagrangeTerm})$$

$$g(x(T)) = -x_2(T) \quad (\text{Mayer-Term})$$

$$f(t, x(t), u(t)) = \begin{pmatrix} -ux_1(t) + u^2x_2(t) \\ ux_1(t) - 3u^2x_2(t) \end{pmatrix} \quad (\text{DGL-System})$$

Entsprechend dem Minimumprinzip von Pontryagin (Theorem 1) ist aus den erlangten Erkenntnissen die problemspezifische Hamilton-Funktion,

$$H(t, x(t), \lambda(t), u(t)) = \underbrace{\lambda_0 \cdot f_0(t, x, u)}_{=0} + \lambda^T \cdot f(t, x, u) \quad (3.8)$$

$$= (-\lambda_1(t) + \lambda_2(t)) \cdot x_1(t)u + (\lambda_1(t) - 3\lambda_2(t)) \cdot x_2(t)u^2 \quad (3.9)$$

die adjungierte Differentialgleichung

$$\dot{\lambda}(t)^T = -H_x(t, x^*(t), \lambda(t), u^*(t)) \quad (3.10)$$

$$= \begin{pmatrix} \lambda_1(t)u - \lambda_2(t)u \\ -\lambda_1(t)u^2 + 3\lambda_2(t)u^2 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

und die Transversalitätsbedingung

$$\lambda(T)^T = \underbrace{\lambda_0}_{=1 \text{ (Korollar 1)}} g_x(x^*(T)) + \underbrace{\nu^T \psi_x(x^*(T))}_{=0, \text{ da } \psi \equiv 0} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

ableitbar. Da zusätzlich ein autonomes System vorliegt, ist die Hamilton-Funktion konstant für alle $t \in [0, T]$ und es gilt:

$$H(x^*(t), \lambda(t), u^*(t)) = c = \text{konstant in } [0, 1] \quad (3.13)$$

3.3 Stetigkeitsüberprüfung der Steuerfunktion

Zur Anwendung der Minimumsbedingung (3.3) des Pontryaginischen Minimumsprinzips (vgl. Theorem 1) muss zunächst die Stetigkeit der optimalen Steuerfunktion $u^*(t)$ auf dem gesamten betrachteten Zeitintervall sichergestellt werden. Dies kann anhand einer Regularitätsuntersuchung der Hamilton-Funktion erfolgen. Dazu belegen wir in diesem Abschnitt zunächst die partielle, stetige Differenzierbarkeit der Hamilton-Funktion nach der Steuerung u , als Voraussetzung für die nachfolgende Regularitätsanalyse.

3.3.1 Stetige Differenzierbarkeit der Hamilton-Funktion

Ziel ist es, die zweifache partielle stetige Differenzierbarkeit der Hamilton-Funktion nach der Steuerfunktion u im gesamten Zeitintervall $[0, 1]$ nachzuweisen. Dazu sei $t \in [0, 1]$ beliebig aber fest mit zugehörigem $x := x(t)$ und $\lambda := \lambda(t)$. Die Hamilton-Funktion lässt sich dann, zu einem festen Zeitpunkt, als Funktion der Steuerung u

mit Definitionsbereich U interpretieren:

$$H : U \rightarrow \mathbb{R}, u \mapsto H(u) = (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot x_1 \cdot u + (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 \cdot u^2. \quad (3.14)$$

Es ist erkennbar, dass es sich bei $H(u)$ um ein Polynom zweiten Grades handelt. Da Polynome zu den beliebig oft stetig differenzierbaren Funktionen zählen, folgt entsprechend für $H(u)$ zweifach stetige Differenzierbarkeit. Alternativ findet sich im Anhang ein ausführlicher Beweis mittels Differentialquotient und Epsilon-Delta-Kriterium (vgl. Anhang B). Insgesamt ergibt sich also für die Hamilton-Funktion $H(t, x, \lambda, u)$ zweifach partielle stetige Differenzierbarkeit nach u , für alle $t \in [0, 1]$ und $u \in U$.

3.3.2 Regularitätsuntersuchung der Hamilton-Funktion

Die Regularitätsuntersuchung der Hamilton-Funktion ist essentiell, da diese die Stetigkeit der optimalen Steuerung sicherstellt und somit eine Anwendung der Minimumsbedingung (3.3) ermöglicht. Die Hamilton-Funktion heißt regulär, wenn sie zu jedem festen Zeitpunkt $t \in [0, 1]$, für alle Ausprägungen x und λ aus Trajektorien $x(t)$ und $\lambda(t)$, welche innerhalb einer ϵ -Umgebung um die optimalen Trajektorien $x^*(t)$ und $\lambda^*(t)$ variieren, ein eindeutiges Minimum über u besitzt.

Es ist also in jedem Zeitschritt zu überprüfen, ob das beschränkte Optimierungsproblem

$$\min_{u \in U} H(x(t), \lambda(t), u), \quad t \in [0, T] \quad (3.15)$$

eine eindeutige Lösung besitzt.

Dazu sei im folgenden $t \in [0, 1]$ beliebig, aber fest, mit zugehörigen $x := x(t)$ beliebig, aber fest und $\lambda := \lambda(t)$ beliebig, aber fest, sowie $u := u(t) \in U$. Da es sich als physikalisch sinnvoll erweist positive Konzentrationen zu betrachten, gelte für die Stoffkonzentrationen im Weiteren stets:

$$\begin{aligned} x_1(t) &> 0 \quad \forall t \in [0, 1], \\ x_2(t) &> 0 \quad \forall t \in (0, 1]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Außerdem ist zu beachten, dass die untere Steuerintervallgrenze $u_{min} = 0$ widersprüchlich zum exponentiellen Zusammenhang (1.4) zwischen transformierter Steuervariable $u(t)$ und ortsabhängiger Reaktortemperatur $\theta(t)$ ist. Die Steuerung u sollte deshalb, soweit möglich, nicht die untere Steuerintervallgrenze u_{min} annehmen.

Im folgenden betrachten wir das vorliegende Optimierungsproblem (3.15) zunächst mit unbeschränktem Steuerintervall $U = \mathbb{R}$, hinsichtlich möglicher Extremwerte und ziehen anhand dessen Rückschlüsse über das Auftreten von Minima u^* im beschränkten Fall, mit $U = [0, 5]$.

Im unbeschränkten Fall lautet das notwendige Kriterium für lokale Extrema:

$$H_u(x, \lambda, u) = (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot x_1 + 2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 \cdot u = 0. \quad (3.17)$$

Durch umstellen ergibt sich bei

$$\bar{u} := \frac{(\lambda_1 - \lambda_2) \cdot x_1}{(2\lambda_1 - 6\lambda_2) \cdot x_2} \quad (3.18)$$

die einzige, eindeutige Extremstelle, wobei $(2\lambda_1 - 6\lambda_2) \neq 0$ und $x_2 \neq 0$ gelten muss. Die Art der Extremstelle lässt sich anhand des Vorzeichens der zweiten partiellen Ableitung

$$H_{uu}(x, \lambda, u) = (2\lambda_1 - 6\lambda_2) \cdot x_2 \quad (3.19)$$

charakterisieren.

Es ergeben sich die folgenden drei Fälle zur näheren Betrachtung:

Fall 1: $\lambda_1 > 3\lambda_2 \wedge x_2 > 0$

Falls $\lambda_1 > 3\lambda_2$ und $x_2 > 0$, so gilt für die zweite Ableitung an der Extremstelle

$$H_{uu}(x, \lambda, \bar{u}) = (2\lambda_1 - 6\lambda_2) \cdot x_2 > 0. \quad (3.20)$$

Somit erfüllt \bar{u} die hinreichende Bedingung für eine Minimalstelle und die Hamilton-Funktion besitzt im unbeschränkten Fall $U = \mathbb{R}$ ein eindeutiges Minimum über u . Da mit \bar{u} lediglich eine eindeutige Extremstelle in Form eines Minimums auftritt, lässt

sich daraus folgern, dass die Hamilton-Funktion links von dieser streng monoton fallend und rechts davon, streng monoton steigend, über u , verlaufen muss.

Wird nun der beschränkte Fall $U = [0, 5]$ betrachtet, so ergeben sich für ein potentielles Minimum u^* drei mögliche Teilfälle:

- (a) Das Minimum des unbeschränkten Problems liegt innerhalb der Steuerbeschränkung. Das eindeutige Minimum des beschränkten Problems entspricht folglich dem des unbeschränkten Problems:

$$\bar{u} \in U = [0, 5] \Rightarrow u^* = \bar{u}$$

- (b) Das Minimum des unbeschränkten Problems unterschreitet die Steuerbeschränkung. Das eindeutige Minimum des beschränkten Problems liegt folglich auf der unteren Steuerintervallgrenze:

$$\bar{u} < u_{min} = 0 \Rightarrow u^* = u_{min} = 0$$

- (c) Das eindeutige Minimum des unbeschränkten Problems überschreitet die Steuerbeschränkung. Das eindeutige Minimum des beschränkten Problems liegt folglich auf der oberen Steuerintervallgrenze:

$$\bar{u} > u_{max} = 5 \Rightarrow u^* = u_{max} = 5$$

In allen Teilfällen weist das beschränkte Steuerproblem ein eindeutiges Minimum auf und die Hamilton-Funktion ist somit regulär.

Fall 2: $\lambda_1 < 3\lambda_2 \wedge x_2 > 0$

Ist $\lambda_1 < 3\lambda_2$ und $x_2 > 0$ so liegt in \bar{u} ein eindeutiges Maximum vor, da für die zweite Ableitung

$$H_{uu}(x, \lambda, \bar{u}) = (2\lambda_1 - 6\lambda_2) \cdot x_2(t) < 0 \quad (3.21)$$

gilt. Da \bar{u} bei unbeschränktem Steuerintervall $U = \mathbb{R}$ das einzige Extremum in Gestalt eines Maximums ist, erkennt man leicht, dass die Hamilton-Funktion links davon streng monoton steigend und rechts streng monoton fallend, über u , verlaufen muss. Für das Minimierungsproblem (3.15) mit beschränktem Steuerbereich $U = [0, 5]$, lassen sich dann wieder mehrere Teilfälle unterscheiden:

- (a) Das Maximum des unbeschränkten Problems unterschreitet die Steuerbeschränkung. Das eindeutige Minimum des beschränkten Problems liegt fol-

lich auf der oberen Steuerintervallgrenze:

$$\bar{u} < u_{min} = 0 \Rightarrow u^* = u_{max} = 5$$

- (b) Das Maximum des unbeschränkten Problems überschreitet die Steuerbeschränkung. Das eindeutige Minimum des beschränkten Problems liegt folglich auf der unteren Steuerintervallgrenze:

$$\bar{u} > u_{max} = 5 \Rightarrow u^* = u_{min} = 0$$

- (c) Das Maximum des unbeschränkten Problems liegt innerhalb der Steuerbeschränkung. Es ergeben sich die möglichen Teilfälle:

- (i) Das eindeutige Minimum des beschränkten Problems liegt auf der unteren Steuerintervallgrenze:

$$u^* = u_{min} = 0 \Leftrightarrow H(u_{min}) < H(u_{max})$$

- (ii) Das eindeutige Minimum des beschränkten Problems liegt auf der oberen Steuerintervallgrenze:

$$u^* = u_{max} = 5 \Leftrightarrow H(u_{min}) > H(u_{max})$$

- (iii) Es liegt kein eindeutiges Minimum vor. Die Hamilton-Funktion weißt auf den Steuerintervallgrenzen den selben Wert auf:

$$u^* = \{u_{min}, u_{max}\} \Leftrightarrow H(u_{min}) = H(u_{max})$$

In den Teilfällen (a), (b), (c, i), sowie (c, ii) findet sich ein eindeutiges Minimum für die Hamilton-Funktion, womit auch deren Regularität sichergestellt ist. Problematisch ist der Teilfall (c, iii), da bei diesem kein eindeutiges Minimum der Hamilton-Funktion gefunden werden kann.

Im folgenden untersuchen wir, unter welchen Bedingungen dieser Fall ausschließbar ist. Die Hamilton-Funktion nimmt an der unteren Steuerintervallgrenze $u_{min} = 0$ mit

$$H(x, \lambda, u_{min}) = (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot u_{min} \cdot x_1 + (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot u_{min}^2 \cdot x_2 = 0 \quad (3.22)$$

stets einen konstanten Wert an. Da die untere Steuerintervallgrenze $u_{min} = 0$ widersprüchlich zum exponentiellen Zusammenhang in (1.4) ist, soll das Minimum im beschränkten Fall an der oberen Steuerintervallgrenze $u_{max} = 5$ angenommen

werden. Für die Hamilton-Funktion muss also

$$\begin{aligned} H(u_{max}) &= H(5) \stackrel{!}{<} H(u_{min}) = 0 \\ \Leftrightarrow (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot u_{max} \cdot x_1 + (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot u_{max}^2 \cdot x_2 &\stackrel{!}{<} 0 \end{aligned} \quad (3.23)$$

gelten. Weiter ist im aktuellen Fall $\lambda_1 < 3\lambda_2$ und $x_2 > 0$, sowie wegen Annahme (3.16) die Konzentration $x_1 > 0$, wodurch sich der Ausdruck weiter vereinfacht zu:

$$5 \cdot (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot \underbrace{x_1}_{>0} + 25 \cdot \underbrace{(\lambda_1 - 3\lambda_2)}_{<0} \cdot \underbrace{x_2}_{>0} \stackrel{!}{<} 0. \quad (3.24)$$

Da $x_2 > 0$ einhergeht mit Zeitpunkten $t > 0$ fordert man für die adjungierte Variable

$$\lambda_1(t) > \lambda_2(t) \quad \forall t > 0 \quad (3.25)$$

um die Abschätzung (3.24) zu erfüllen. Es gilt dann

$$\lambda_2 < \lambda_1 < 3\lambda_2 \Leftrightarrow H(u_{max}) < H(u_{min}) \Leftrightarrow u^* = u_{max}. \quad (3.26)$$

Somit wird ein eindeutiges Minimum auf der oberen Steuerintervallgrenze $u_{max} = 5$ angenommen. Folglich kann Teilfall (c, iii) sicher ausgeschlossen werden und die Regularität ist sichergestellt.

Fall 3: $x_2 = 0 \vee \lambda_1 = 3\lambda_2$

Für $x_2 = 0$ oder $\lambda_1 = 3\lambda_2$ lässt sich nach (3.17) keine Extremstelle für das unbeschränkte Steuerproblem, mit $U = \mathbb{R}$, finden. Deshalb betrachten wir direkt das beschränkte Steuerproblem mit $U = [0, 5]$. Die Hamilton-Funktion vereinfacht sich nun zu

$$H(x, \lambda, u) = (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot u \cdot x_1 + \underbrace{(\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot u^2 \cdot x_2}_{=0} = (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot u \cdot x_1 \quad (3.27)$$

während für die Schaltfunktion

$$H_u(x, \lambda) = (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot \underbrace{x_1}_{>0} \quad (3.28)$$

gilt. Dabei ist zu beachten, dass die Schaltfunktion unabhängig von u ist und somit zu einem festen Zeitpunkt über dem gesamten Steuerintervall einen konstanten Wert annimmt. Außerdem gilt nach Annahme (3.16) wieder $x_1 > 0$.

Nach dem Satz vom Minimum und Maximum nimmt die Hamilton-Funktion im kompakten und beschränkten Steuerintervall stets ein Minimum an. Verläuft die Hamilton-Funktion streng monoton auf dem gesamten Steuerintervall, so lässt sich zusätzlich auf ein eindeutiges Minimum auf einer der beiden Intervallgrenzen schließen.

Anhand des Vorzeichens der Schaltfunktion lässt sich nun untersuchen, ob die Hamilton-Funktion einen streng monotonen Verlauf aufweist. Es ergeben sich drei mögliche Teilfälle:

(a) eindeutiges Minimum auf der unteren Intervallgrenze:

$$\lambda_1 > \lambda_2 \Leftrightarrow H_u < 0 \Leftrightarrow H \text{ streng monoton fallend} \Leftrightarrow u^* = u_{max}$$

(b) eindeutiges Minimum auf der oberen Intervallgrenze:

$$\lambda_1 < \lambda_2 \Leftrightarrow H_u > 0 \Leftrightarrow H \text{ streng monoton steigend} \Leftrightarrow u^* = u_{min}$$

(c) kein eindeutiges Minimum:

$$\lambda_1 = \lambda_2 \Leftrightarrow H_u = 0$$

In den Teilfällen (a) und (b) wird ein eindeutiges Minimum angenommen und die Hamilton-Funktion ist entsprechend regulär. Der kritische Teilfall (c) ist für Zeitpunkte $t > 0$ widersprüchlich zu Annahme (3.25) und lässt sich somit auf den Zeitpunkt $t = 0$ mit Startkonzentration $x_2 = 0$ zurückführen.

Um auch im Startpunkt die Regularität der Hamilton-Funktion sicherzustellen, gelte bei $t = 0$ als weitere Annahme

$$\lambda_1(0) \neq \lambda_2(0). \quad (3.29)$$

Soll zusätzlich sichergestellt werden, dass das Minimum auf der oberen Intervallgrenze $u_{max} = 5$ angenommen wird, gelte sogar

$$\lambda_1(0) > \lambda_2(0). \quad (3.30)$$

Dabei ist zu beachten, dass diese Anforderung als eine Erweiterung von Annahme (3.25) im Zeitpunkt $t = 0$ gesehen werden kann.

3.4 Optimale Steuerung

Im vorherigen Abschnitt haben wir gezeigt, dass unter entsprechenden Annahmen (vgl. (3.16), (3.25), (3.30)) die Hamilton-Funktion regulär ist und somit die Stetigkeit der optimalen Steuerfunktion u^* sichergestellt ist. Aus der Minimumsbedingung (3.3) ergibt sich die optimale Steuerung nun zu:

$$u^*(t, x(t), \lambda(t)) = \begin{cases} u_{min} = 0, & [\lambda_1 > 3\lambda_2 \wedge x_2 > 0 \wedge \bar{u} \leq u_{min}] \vee \\ & [\lambda_1 < 3\lambda_2 \wedge x_2 > 0 \wedge H(u_{min}) < H(u_{max})] \vee \\ & [(x_2 = 0 \vee \lambda_1 = 3\lambda_2) \wedge \lambda_1 < \lambda_2] \\ \bar{u} = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2) \cdot x_1}{(2\lambda_1 - 6\lambda_2) \cdot x_2}, & \lambda_1 > 3\lambda_2 \wedge x_2 > 0 \wedge \bar{u} \in (u_{min}, u_{max}) \\ u_{max} = 5, & [\lambda_1 > 3\lambda_2 \wedge x_2 > 0 \wedge \bar{u} \geq u_{max}] \vee \\ & [\lambda_1 < 3\lambda_2 \wedge x_2 > 0 \wedge H(u_{min}) > H(u_{max})] \vee \\ & [(x_2 = 0 \vee \lambda_1 = 3\lambda_2) \wedge \lambda_1 > \lambda_2] \end{cases} \quad (3.31)$$

Es sei nochmal darauf verwiesen, dass das Minimumsprinzip von Pontryagin (vgl. Theorem 1) lediglich ein notwendiges Optimalitätskriterium darstellt. Auf die Überprüfung eines hinreichenden Kriteriums wird hier verzichtet.

3.5 Ergebnisse

Durch die Erkenntnisse aus den vorherigen Abschnitten kann ein Randwertproblem formuliert werden, welches über verschiedene numerische Verfahren lösbar ist. Die Lösung des Randwertproblems liefert die optimalen Trajektorien $x^*(t)$ und $\lambda^*(t)$. Der explizite Verlauf der optimalen Steuerung, welche $x_2(T)$ maximiert, lässt sich dann durch das Einsetzen von $x^*(t)$ und $\lambda^*(t)$ in $u^*(t)$ (vgl. Gleichung 3.31) ermitteln.

Das Randwertproblem lautet:

$$f(t, x, \lambda) = \begin{pmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \\ \dot{\lambda}_1(t) \\ \dot{\lambda}_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -u^* x_1(t) + (u^*)^2 x_2(t) \\ u^* x_1(t) - 3(u^*)^2 x_2(t) \\ \lambda_1(t) u^* - \lambda_2 u^* \\ -\lambda_1(t)(u^*)^2 + 3\lambda_2(t)(u^*)^2 \end{pmatrix}, t \in [0, 1] \quad (\text{DGL-System})$$

(3.32)

$$x(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{Startwertbed.})$$

(3.33)

$$\lambda(1) = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (\text{Endwertbed.})$$

(3.34)

Die Randwertfunktion mit $y(t) := [x_1(t), x_2(t), \lambda_1(t), \lambda_2(t)]^T$ ergibt sich aus (3.33) und (3.34) zu:

$$r(y(0), y(1)) = \begin{pmatrix} y_1(0) - x_1(0) \\ y_2(0) - x_2(0) \\ y_3(1) - \lambda_1(1) \\ y_4(1) - \lambda_2(1) \end{pmatrix} = 0 \quad (3.35)$$

Für die Lösung des Randwertproblems wurden vier verschiedene Verfahren getestet:

- Einzelschießverfahren
- Mehrfachschießverfahren
- Differenzenverfahren
- Matlab-Verfahren bvp4c

Bei den verschiedenen Verfahren können die partiellen Ableitungen der Randwert-

funktion

$$\frac{\partial r(y(0), y(b))}{\partial y(0)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.36)$$

$$\frac{\partial r(y(0), y(b))}{\partial y(0)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.37)$$

und des DGL-Systems mit $f(t, u(t), x(t), \lambda(t)) = f(t, u(t), y(t))$

$$\frac{\partial f(t, u(t), y(t))}{\partial y} = J_f(t, u(t), y(t)) = \begin{pmatrix} -u & u^2 & 0 & 0 \\ u & -3u^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & -u \\ 0 & 0 & -u^2 & 3u^2 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

ausgenutzt werden. Das Einfeldschießverfahren beispielsweise nutzt die Ableitungen zur Berechnung der Jacobi-Matrix von

$$F(\eta) := r(y(a, \eta), y(b; \eta)) \quad (3.39)$$

wobei $t \in [a, b]$ und η die iterative Schätzung des Startwertes darstellt. Die Jacobi-Matrix $F'(\eta)$ kann entweder über einen Finiten-Differenzen-Ansatz oder über die Ableitungen aus (3.36), (3.37) und (3.38) in Kombination mit der Sensitivitäts-Differentialgleichung berechnet werden. Beide Möglichkeiten, bezogen auf das Problem aus Kapitel 1, sind in Abbildung 3.1 gegenübergestellt. Sowohl der Ansatz über die finiten Differenzen, als auch der Ansatz über die Sensitivitäts-DGL, liefern eine Lösung, die in $x^*(t)$ bzw. $u^*(t)$ ähnlich zu dem Ergebnis der direkten Verfahren ist (vgl. Abbildung 2.4). Beide Ansätze sind jedoch bzgl. der adjungierten Variable sichtbar unterschiedlich. Dies liegt daran, dass der globale Newton-Schritt des Einfeldschießverfahrens mit Sensitivitäts-DGL zu klein wird und das Verfahren deshalb die Iteration vorzeitig beendet. Da ähnliche Effekte auch beim Mehrfeldschießverfahren zu beobachten sind, sei an dieser Stelle auf den nachfolgenden Absatz für

weitere Informationen verwiesen. Im allgemeinen tritt dieses Verhalten auch bei verschiedenen Startschätzungen auf, weshalb der finite Differenzen Ansatz für diesen Anwendungsfall als geeigneter zu betrachten ist. Das Mehrfachschießverfahren

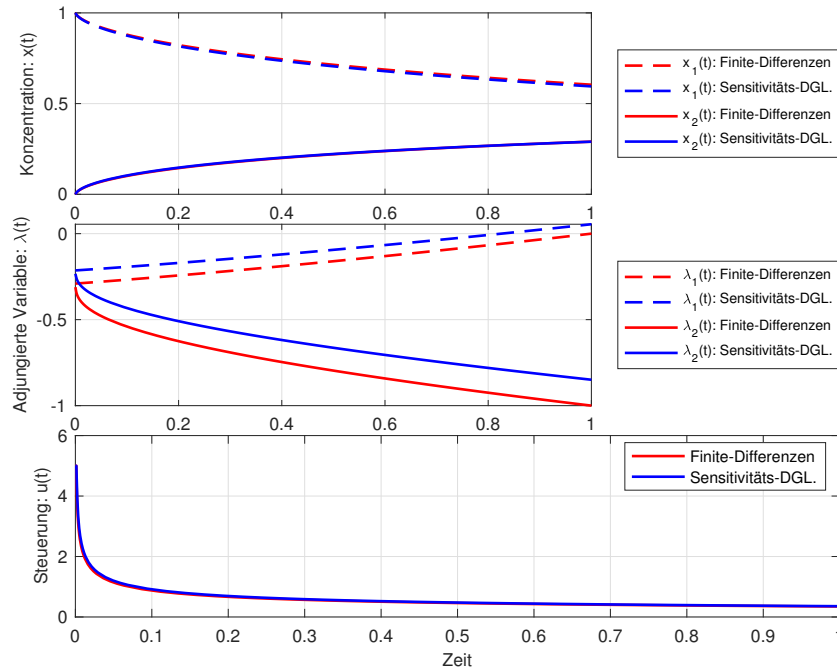


Abbildung 3.1: Indirektes Verfahren: Einzelschießverfahren

ren, dargestellt in Abbildung 3.2, besitzt bei $N = 10$ Stufen in der Lösung, welche die Stetigkeitsbedingungen an die Mehrzielknoten verletzen.² Erst ab $N = 25$ sind die Ergebnisse glatt und weisen keine Stufen mehr auf. Das Verhalten lässt sich mit einer ungünstigen Wahl der Startschätzung begründen. Die verwendete Implementierung des Mehrfachschießverfahrens nutzt zusätzlich für die globale Konvergenz des Newton-Schritts eine Armijo-Schrittweitensteuerung. Die Wahl der Startschätzung der Mehrzielknoten war für $N = 10$ so ungünstig, dass die Armijo-Regel für eine der folgenden Iterationen keine Schrittweite im Rahmen der Maschinengenauigkeit gefunden hat, welche einen hinreichenden Abstieg sicherstellen würde. Aus diesem Grund wird das Verfahren frühzeitig abgebrochen und erzeugt die Treppen innerhalb der Lösung. Diese Beobachtung lässt sich bestätigen, wenn ein anderer Startwert für $N = 10$ gewählt wird, bei welchem die Schrittweitensteuerung die folgenden Newton-Schritte ausreichend dämpfen kann (vgl. Abbildung 3.3).

²Hinweis: Zwischen den einzelnen Stufen gibt es keine Verbindungspunkte, Matlab interpoliert beim Plotten automatisch zwischen zwei Stufen.

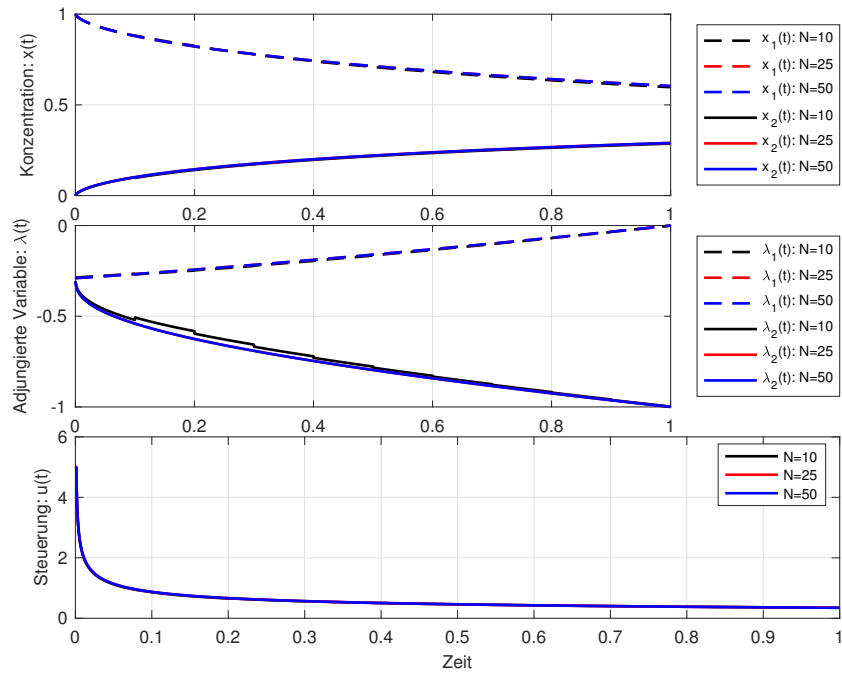


Abbildung 3.2: Indirektes Verfahren: Mehrfachschießverfahren

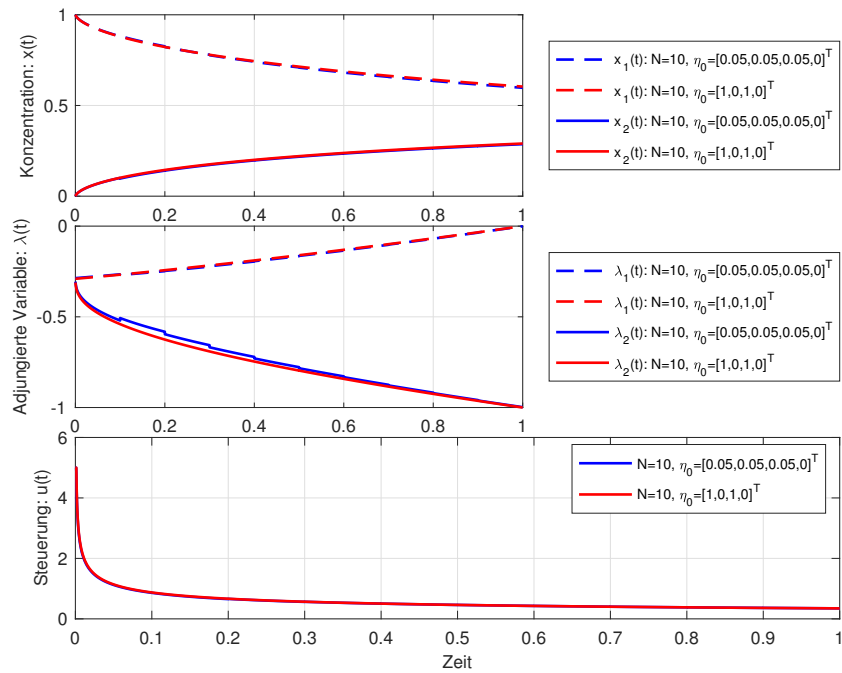


Abbildung 3.3: Mehrfachschießverfahren ($N = 10$): Vergleich verschiedener Start-schätzungen

Die stärkste Abhängigkeit von der Wahl der Startschätzung und Gitterpunktanzahl hat das Differenzenverfahren aufgezeigt, wobei die Startschätzung für aussagekräftige Lösungen bereits sehr nah an der Zieltrajektorie liegen musste. Zu diesen Zweck wurde das Ergebnis eines direkten Verfahrens aus Kapitel 2 für die Initialisierung der Startschätzung genutzt. Das Differenzenverfahren beruht auf der Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems. Der entsprechende Löser findet für $N = 25$ keine Lösung. Ab $N \geq 50$ sind die Ergebnisse sehr ähnlich und decken sich auch mit den vorherigen Lösungen der anderen Verfahren (vgl. Abbildung 3.4).

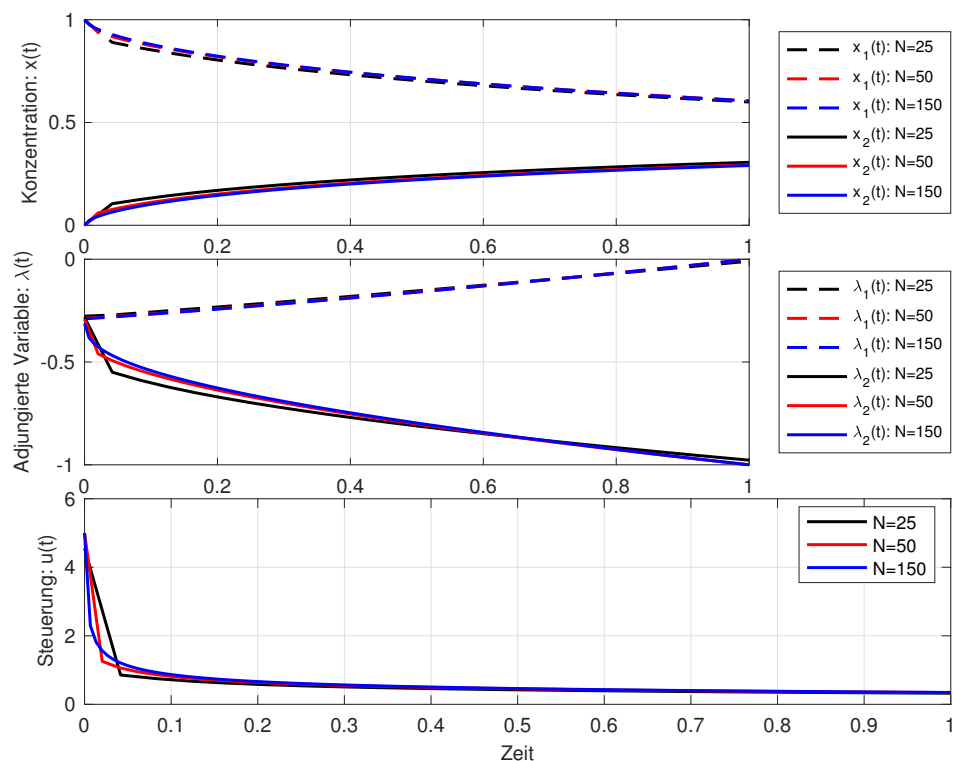


Abbildung 3.4: Indirektes Verfahren: Differenzenverfahren

Das Matlab-Verfahren *bvp4c* zur Lösung von Randwertproblemen nutzt die dreistufige Kollokationsformel *Lobatto-IIIA* in Kombination mit einer Finiten-Differenzen-Implementierung. [2] Es besitzt für jede betrachtete Anzahl von Mehrzielknoten nahezu identische Lösungen (vgl. Abbildung 3.5), weshalb eine Erhöhung der Anzahl keine erhebliche Auswirkung auf das Ergebnis aufzeigt. Ein möglicher Grund ist die von Matlab auf das Verfahren abgestimmte Ermittlung der Startschätzung.

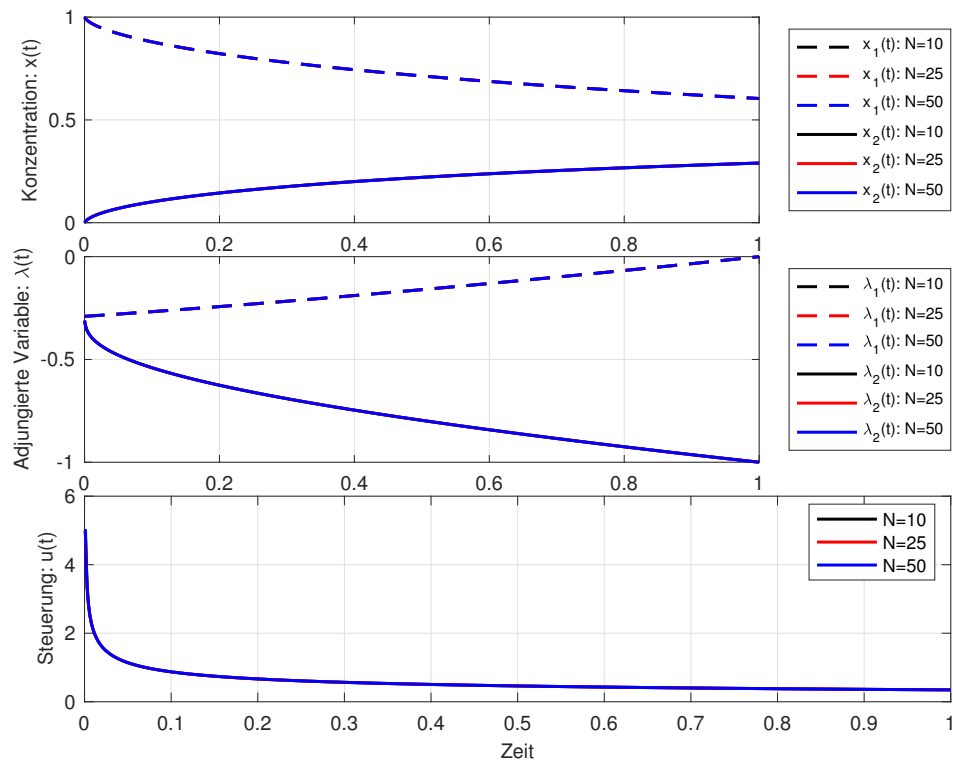


Abbildung 3.5: Indirektes Verfahren: bvp4c (Matlab-Verfahren)

Alles in allem zeigt sich, dass wie bei den direkten Verfahren, grundsätzlich alle untersuchten Methoden unter gewissen Voraussetzungen eine sinnvolle Lösung berechnen und deshalb bei Gegenüberstellung in Abbildung 3.6 kaum zu unterscheiden sind. Die Konzentration von $x_1(t)$ wird kontinuierlich abgebaut und die von $x_2(t)$ gleichmäßig erhöht. Die Steuerung stabilisiert sich im Laufe der Zeit. Des Weiteren wird in Abbildung 3.6 ersichtlich, dass die Annahme (3.25), welche besagt $\lambda_1 > \lambda_2$, überall erfüllt ist. Durch $\lambda_2(t) < 0, \forall t \in [0, 1]$ gilt sogar immer die strengere Eigenschaft $\lambda_1 > 3\lambda_2$, weshalb die Hamilton-Funktion immer ein globales Minimum für $u(t) \in \mathbb{R}, t \in (0, T]$ besitzt.

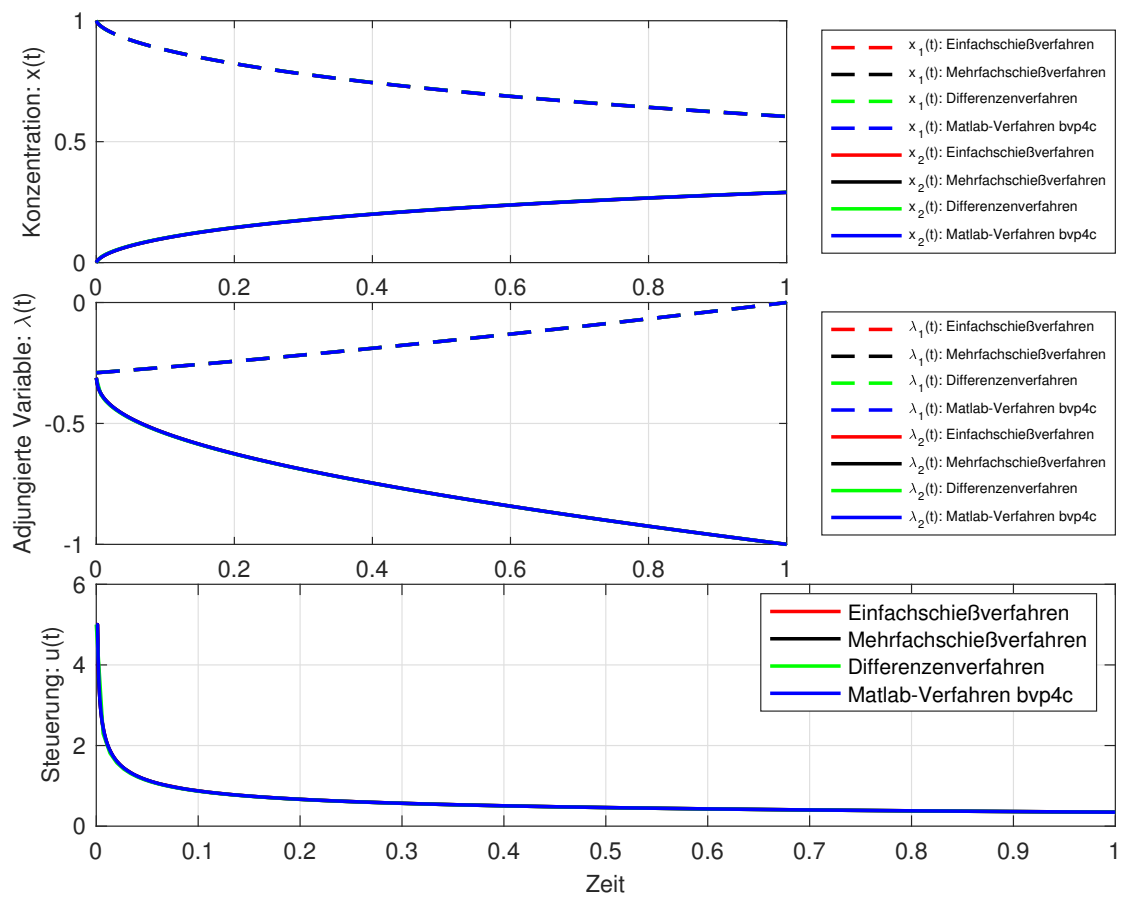


Abbildung 3.6: Indirekte Verfahren: Vergleich

4 Fazit

Dieses Projekt beschäftigte sich mit der Modellierung der Reaktionsgleichung



welche innerhalb eines Plug Flow Tube Reactors über eine Steuerung beeinflusst werden konnte. Ziel war es eine Steuerung zu ermitteln, welche die Konzentration des Reaktionsproduktes A_2 maximiert. Für diesen Zweck wurden grundsätzlich zwei verschiedene Ansätze untersucht.

Ein Ansatz nutzt direkte Lösungsmethoden, d.h. das Optimalsteuerungsproblem wird im ersten Schritt auf ein endlichdimensionales Optimierungsproblem zurückgeführt. Zu diesem Zweck wird das Differentialgleichungssystem zu Beginn diskretisiert und dann ein Optimierungsverfahren zur Maximierung der Konzentration $x_2(t)$ verwendet. Für die Diskretisierung wurden drei verschiedene Verfahren ausprobiert: Das explizite Euler-, das implizite Radau2A- und das Matlab-Verfahren *ODE23s*. Alle drei Methoden lieferten gute Ergebnisse, wobei das explizite Euler-Verfahren Vorteile im Hinblick auf den Berechnungsaufwand aufzeigte. Das Radau2A-Verfahren und *ODE23s* hingegen liefern selbst bei einer sehr geringen Anzahl von Optimierungsstellen bereits sehr gute Ergebnisse.

Der zweite Ansatz verwendet indirekte Lösungsmethoden, d.h. zu Beginn wird über das Pontryaginsche Minimumsprinzip die optimale Steuerung $u^*(t)$ in Abhängigkeit der Zustandsvariable $x(t)$ und der adjungierten Variable $\lambda(t)$ aufgestellt. Anschließend wird mit den gewonnenen Informationen ein Randwertproblem abgeleitet, welches über gängige Verfahren lösbar ist. Für die Lösung des Randwertproblems wurden vier verschiedene Verfahren ausprobiert: Das Einfachschieß-, das Mehrfachschieß-, das Differenzen- und das Matlab-Verfahren *bvp4c*. Alle vier Methoden lieferten unter gewissen Voraussetzungen ebenfalls gute Ergebnisse, wiesen jedoch eine starke Abhängigkeit von der Startschätzung auf. Des Weiteren wird

in Abbildung 3.6 ersichtlich, dass die Annahme (3.25), welche $\lambda_1 > \lambda_2$ fordert, gerechtfertigt ist. Diese stellt die Regularität der Hamilton-Funktion und somit die zulässige Anwendung des Pontryaginschen Minimumsprinzips sicher.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sowohl die direkten, als auch die indirekten Lösungsmethoden sinnvolle Ergebnisse berechnen. Der Reaktant A_1 bzw. $x_1(t)$ wird kontinuierlich abgebaut, wohingegen die Konzentration des Produktes $x_2(t)$ gleichmäßig steigt. Am Ende zeichnet sich ein Gleichgewicht ab. Die optimale Steuerung $u^*(t)$ weist keine Sprünge auf. Die Analyse der Steifheit und die sinnvollen Ergebnisse des expliziten Euler-Verfahrens implizieren ein nicht steifes Problem, womit die Verwendung verschiedenster Verfahren gerechtfertigt ist.

A Steuerbereich $U = [0, 1]$

Nach Kapitel 1 besitzt die Steuerung $u(t)$ die Form:

$$u(t) = \exp\left(\frac{-\alpha}{\vartheta(t)}\right), \quad \alpha > 0 \quad (\text{A.1})$$

Mit Umstellung nach der Temperatur folgt:

$$u(t) = \exp\left(\frac{-\alpha}{\vartheta(t)}\right) \quad | \quad \ln() \quad (\text{A.2})$$

$$\ln(u(t)) = \frac{-\alpha}{\vartheta(t)} \quad | \quad \cdot \vartheta(t) \quad (\text{A.3})$$

$$\ln(u(t)) \cdot \vartheta(t) = -\alpha \quad | \quad : \ln(u(t)) \quad (\text{A.4})$$

$$\vartheta(t) = \frac{-\alpha}{\ln(u(t))} \quad (\text{A.5})$$

Durch die Forderung $\alpha > 0$, muss die Steuerung für sinnvolle Temperaturwerte immer aus dem Intervall $(0, 1)$ kommen. Aus diesem Grund sind nachfolgend die Ergebnis aller numerischen Verfahren mit dem geänderten Steuerbereich $U = [0, 1]$ aufgezeigt.

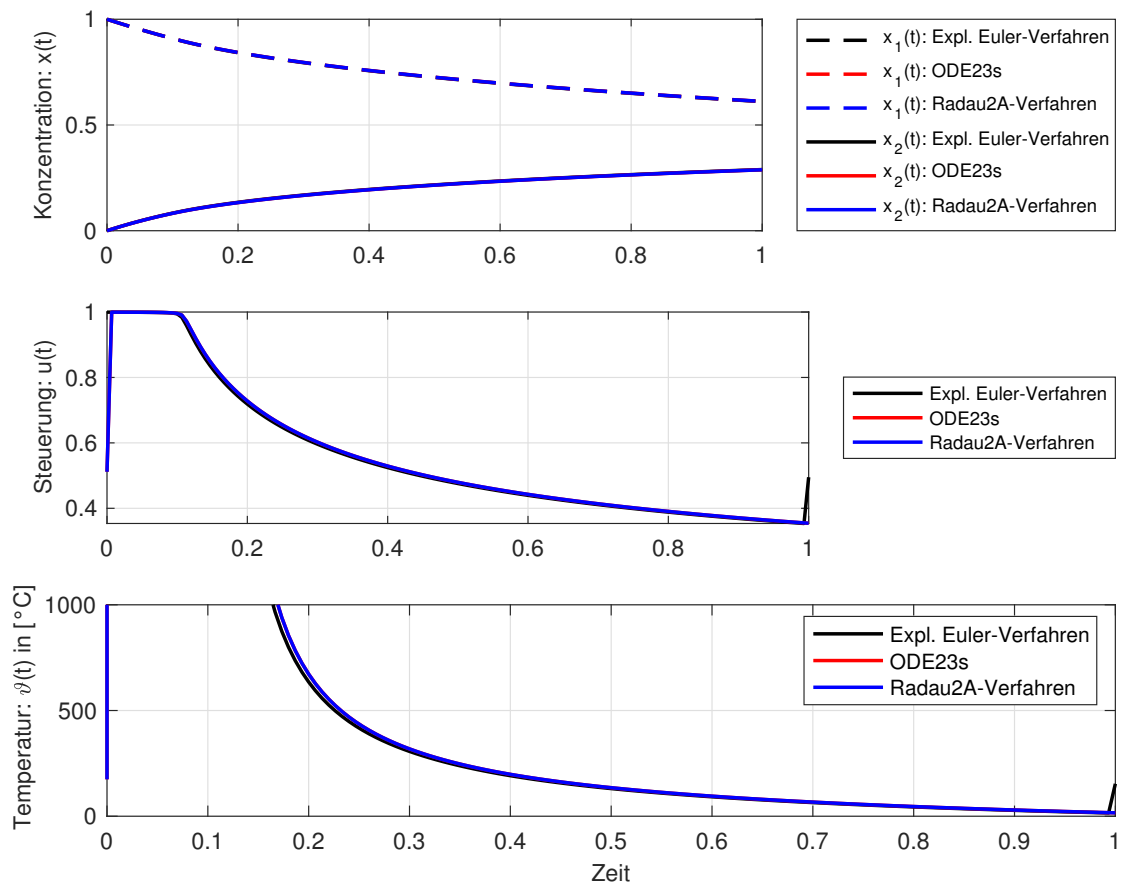


Abbildung A.1: Direkte Verfahren mit $U = [0, 1]$ und $\alpha = 300$: Vergleich

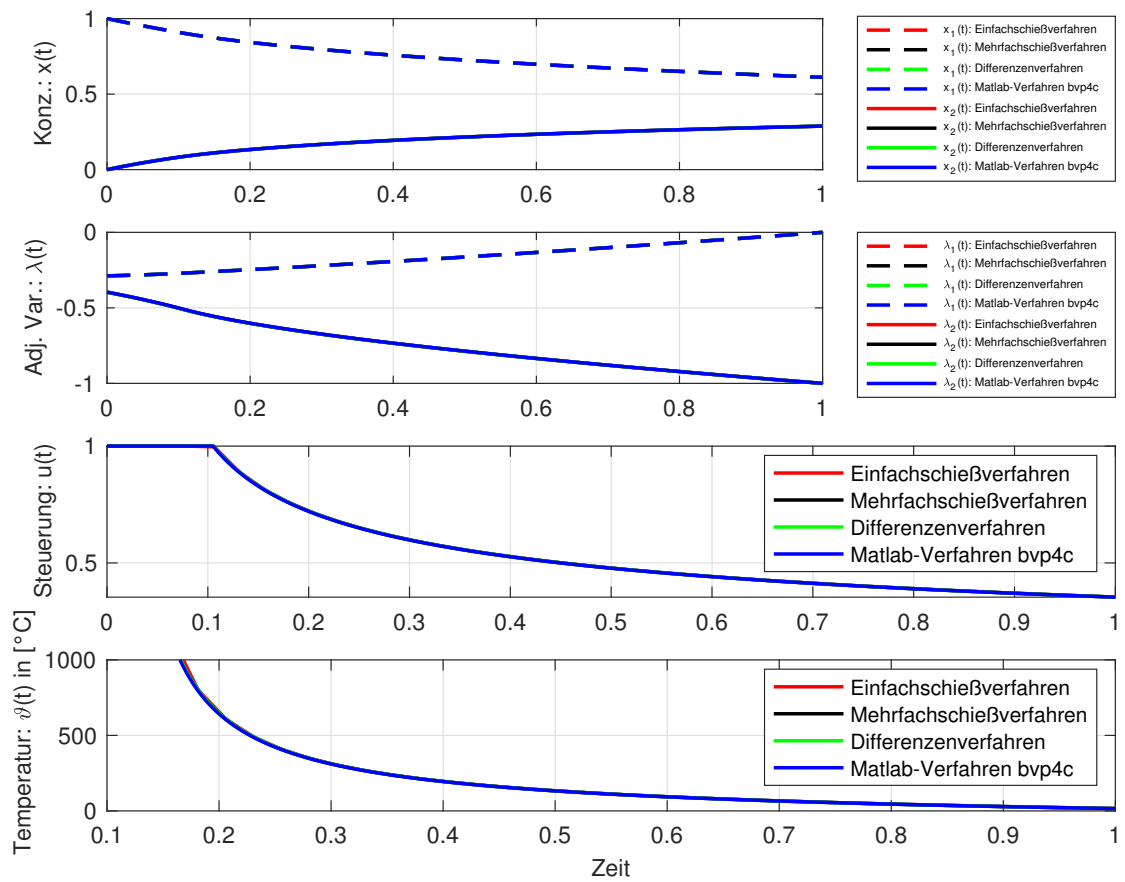


Abbildung A.2: Indirekte Verfahren mit $U = [0, 1]$ und $\alpha = 300$: Vergleich

B Zweifach stetige Differenzierbarkeit von $H(u)$

Einfache stetige Differenzierbarkeit

Der Nachweis der einfachen Differenzierbarkeit von $H(u)$ erfolgt anhand einer Existenzuntersuchung des Differentialquotienten:

$$\text{Z. } \forall u_0 \in U \exists H_u(u_0) := \lim_{u \rightarrow u_0} \frac{H(u) - H(u_0)}{u - u_0}$$

Beweis. Sei $u_0 \in U$ beliebig aber fest, so gilt:

$$H_u(u_0) = \lim_{u \rightarrow u_0} \frac{H(u) - H(u_0)}{u - u_0} \quad (\text{B.1})$$

$$= \lim_{u \rightarrow u_0} \frac{(-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot x_1 \cdot (u - u_0) + (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 \cdot (u^2 - u_0^2)}{(u - u_0)} \quad (\text{B.2})$$

$$= \lim_{u \rightarrow u_0} \frac{(-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot x_1 \cdot (u - u_0) + (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 \cdot (u - u_0) \cdot (u + u_0)}{(u - u_0)} \quad (\text{B.3})$$

$$= \lim_{u \rightarrow u_0} (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot x_1 + (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 \cdot (u + u_0) \quad (\text{B.4})$$

$$= (-\lambda_1 + \lambda_2) \cdot x_1 + 2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 u_0 \quad (\text{B.5})$$

□

Die Stetigkeit der ersten Ableitung lässt sich anhand des ϵ - δ Kriteriums zeigen:

$$\text{Z. } \forall \epsilon > 0 \exists \delta > 0 : \forall u \in U : |u - u_0| < \delta \Rightarrow |H_u(u) - H_u(u_0)| < \epsilon$$

Beweis. Sei $\epsilon > 0$, $\delta := \frac{\epsilon}{|2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2|} > 0$, $|u - u_0| < \delta$, sowie $u \in U$. Dann gilt:

$$|H_u(u) - H_u(u_0)| = |(2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2) \cdot |u - u_0|| \quad (\text{B.6})$$

$$< |(2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2) \cdot \delta| = \epsilon \quad (\text{B.7})$$

□

Zweifache stetige Differenzierbarkeit

Analog zum vorherigen Abschnitt lässt sich die zweifache stetige Differenzierbarkeit zeigen. Zunächst wird wieder die Existenz des Differentialquotienten untersucht:

$$\text{Z. } \forall u_0 \in U \exists H_{uu}(u_0) := \lim_{u \rightarrow u_0} \frac{H_u(u) - H_u(u_0)}{u - u_0}$$

Beweis. Sei $u_0 \in U$ beliebig aber fest. Es gilt:

$$H_{uu}(u_0) = \lim_{u \rightarrow u_0} \frac{H_u(u) - H_u(u_0)}{u - u_0} \quad (\text{B.8})$$

$$= \lim_{u \rightarrow u_0} \frac{2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 \cdot (u - u_0)}{(u - u_0)} \quad (\text{B.9})$$

$$= \lim_{u \rightarrow u_0} 2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 = 2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 \quad (\text{B.10})$$

□

Anschließend lässt sich mittels ϵ - δ -Kriterium die Stetigkeit der zweiten Ableitung zeigen:

$$\text{Z. } \forall \epsilon > 0 \exists \delta > 0 : \forall u \in U : |u - u_0| < \delta \Rightarrow |H_{uu}(u) - H_{uu}(u_0)| < \epsilon$$

Beweis. Sei $\epsilon > 0$, $\delta > 0$ beliebig aber fest, $|u - u_0| < \delta$ mit $u \in U$. Dann gilt:

$$|H_{uu}(u) - H_{uu}(u_0)| = |2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2 - 2 \cdot (\lambda_1 - 3\lambda_2) \cdot x_2| = 0 < \epsilon \quad (\text{B.11})$$

□

Literatur

- [1] Prof. Dr. Dirk Lebiedz, Prof. Dr. Matthias Gerdt und Prof. Dr. Roland Herzog. *Numerik und Optimale Steuerung von gewöhnlichen Differentialgleichungen (Dynamische Systeme)*. Skript. 2021.
- [2] MathWorks. *bvp4c - Solve boundary value problem*. Zugriff: 07.08.2021, 16:00 Uhr. URL: <https://de.mathworks.com/help/matlab/ref/bvp4c.html>.
- [3] MathWorks. *ode23s - Solve stiff differential equations*. Zugriff: 07.08.2021, 17:00 Uhr. URL: <https://de.mathworks.com/help/matlab/ref/ode23s.html>.