

Zur numerischen Behandlung der Optimierung eines  
Polymerisationsprozesses

A. Isa, W. Römisch

Humboldt-Universität Berlin, Sektion Mathematik

1. Zur mathematischen Modellierung der Polymerisation von  
Styrol und deren Optimierung

In [5] wurde ein Modell zur radikalischen Polymerisation von Styrol angegeben, auf das in den folgenden Betrachtungen kurz eingegangen werden soll. Für eine ausführliche Darstellung des mathematischen Modells sei auf Anhang 1 (bzw. [6]) verwiesen.

Es bezeichne  $M(t)$  die Monomermenge,  $R^*(t)$  die Radikalmenge,  $T(t)$  die Reaktionstemperatur,  $I_j(t)$  die Menge des  $j$ -ten Initiators ( $j=1,2,3$ ) jeweils zum Zeitpunkt  $t \in [0, t_E]$  ( $t_E$  ist die Reaktionszeit). Gemäß [5] beschreiben dann Bilanzgleichungen des folgenden Typs den zeitlichen Verlauf des Polymerisationsprozesses:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dR^*(t)}{dt} &= f_1(R^*(t), M(t), T(t), I_1(t), I_2(t), I_3(t)) \\ \frac{dM(t)}{dt} &= f_2(R^*(t), M(t), T(t)) \\ \frac{dI_j(t)}{dt} &= k_j(T(t))I_j(t) \quad , j=1,2,3. \end{aligned} \right\} t \in [0, t_E].$$

(Dabei wurde auf die Energiebilanzgleichung verzichtet, um das Modell zunächst einfacher zu gestalten. Es ist allerdings zu beachten, daß bei der praktischen Realisierung die Temperatur nur mittelbar durch Veränderungen der Kühlwasserzufuhr beeinflußt werden kann. Zur Definition von  $f_1$ ,  $f_2$ ,  $k_j$ ,  $j=1, \dots$  vgl. Anhang 1)

Festgelegte Anfangswerte der Reaktion sind  $R^*(0) = 0$  und  $M(0) = M_0$ . Die Temperaturführung  $T(t)$ ,  $t \in [0, t_E]$ , und die Anfangswerte der Initiator Mengen  $I_j(0)$ ,  $j=1,2,3$ , sind die (Einfluß- bzw.) Steuergrößen für den Prozeßablauf. Dabei treten eine Reihe von Beschränkungen für die Steuer- und Prozeßgrößen auf, die im folgenden aufgezählt werden (vgl. Anh. 1):

- Schranken für die Initiator Mengen  $I_j(0)$ ,  $j=1,2,3$ ;
  - Schranken für den Anstieg des Temperaturverlaufs und für  $T(t_E)$ , außerdem ist  $T(0) = T_0$  festgelegt;
  - Schranken für den sog. Polymerisationsgrad  $SPZ(t_E)$  am Ende der Reaktion;
  - Beschränkung für die Umsatzgeschwindigkeit  $\frac{dU(t)}{dt}$  in Abhängigkeit vom Temperaturverlauf  $T(t)$ ,  $t \in [0, t_E]$ .
- Dabei wird unter dem (Monomer-) Umsatz  $U(t) := (M_0 - M(t))/M_0$  zum Zeitpunkt  $t \in [0, t_E]$  verstanden.
- Wir nennen nun diejenigen Steuerungen  $(T(\cdot), I_1(0), I_2(0), I_3(0))$  zulässig, die sämtliche Beschränkungen für den Prozeßverlauf realisieren, und betrachten die folgenden Optimierungsprobleme:

(I)  $U(t_E) \longrightarrow \text{Max } !$  bzgl. aller zulässigen Steuerungen und bei fester Endzeit  $t_E$ .  
 ("Umsatz-optimale Aufgabe")

(II)  $t_E \longrightarrow \text{Min } !$  bzgl. aller zulässigen Steuerungen und Reaktionszeiten, sowie bei Einhaltung einer gewissen Umsatzhöhe  $U(t_E) \geq U_E$ .  
 ("zeitoptimale Aufgabe")

Für eine geeignete mathematische Formulierung dieser Optimalsteuerungsprobleme (vgl. Kap. 2) ist noch zu beachten, daß der Temperaturverlauf  $T(\cdot)$  wenigstens eine absolutstetige Funktion (z.B. stückweise linear) sein soll. Aus diesem Grund wird die "formale" Differentialgleichung (DGL)

$$\frac{dT(t)}{dt} = v(t), \quad t \in [0, t_E], \quad T(0) = T_0,$$

zu den bisherigen Bilanzgleichungen hinzugefügt und  $v \in L_2(0, t_E)$  als Steuergröße neben dem Steuervektor  $p := (I_1(0), I_2(0), I_3(0))^T \in \mathbb{R}^3$  bzw.  $p := (I_1(0), I_2(0), I_3(0), t_E)^T \in \mathbb{R}^4$  (für Variante (I) bzw. (II)) betrachtet.

Ferner werden neue Bezeichnungen für die (Prozeß- oder) Zustandsgrößen

$x_1 := R^*$ ,  $x_2 := M$ ,  $x_3 := T$ ,  $x_{3+j} := I_j$ ,  $j=1,2,3$ , sowie neue Zustandsvariable  $x_j$ ,  $j=7,8,9$ , (nebst DGLn) zur geeigneten Formulierung der Zustandsbeschränkungen in der Gestalt  
 (\*)  $g_j(x(t_E), p) \leq 0$ ,  $j=1,2,\dots$ ,  $x := (x_1, \dots, x_9)^T$ ,

eingeführt. Auf diese Weise gelingt es, alle auftretenden Beschränkungen als Schranken für die Steuerungen  $v$  und  $p$  bzw. als Restriktionen vom Typ (\*) zu formulieren. Das entstandene gewöhnliche DGL-System der Dimension 9 erweist sich als sehr steif (die Jakobi-Matrix der rechten Seite in der Lösung besitzt für  $t > 0$ ,  $t \approx 0$  als betragskleinsten Eigenwert  $\lambda_{\min} = 0$  und als betragsgrößten Eigenwert  $\lambda_{\max} \approx -10^4$  (für eine spezielle Wahl von  $v$  und  $p$ )) und besitzt eine sehr komplizierte rechte Seite (siehe Anh. 1). Folglich erfordern die Funktional- und Gradientenberechnungen einen großen Rechenaufwand. Deshalb wurde auf eine geeignete Implementierung des verwendeten numerischen Integrationsverfahrens, eine effektive Berechnung des Gradienten (vgl. jeweils Kap. 3) und eine angepaßte Auswahl der Verfahren der nichtlinearen Optimierung großer Wert gelegt. Die Optimierungsverfahren müssen ferner für nichtkonvexe Aufgaben geeignet und "robust" sein, sowie "globale" Konvergenzeigenschaften besitzen (vgl. Kap. 4). Abschließend sei darauf hingewiesen, daß bei der vorliegenden Polymerisationsoptimierung aus technologischen Gründen für die Temperaturführung auch ein stückweise linearer Ansatz

$$T(t) := T_{j-1} + (t - t_{j-1}) \frac{T_j - T_{j-1}}{t_j - t_{j-1}}, \quad t \in [t_{j-1}, t_j], \quad j=1, \dots, m,$$

$t_0 := 0, \quad t_m := t_E,$

mit "kleinem"  $m$  sinnvoll ist, was dazu führt, die Probleme (I) und (II) so zu formulieren, daß nur ein Steuervektor der Form  $p := (I_1(0), I_2(0), I_3(0), t_1, \dots, t_m, T_1, \dots, T_m)^T \in \mathbb{R}^{2m+3}$  auftritt. Ferner gelingt es auch, alle bisherigen Schrankenrestriktionen als lineare Restriktionen für  $p$  zu formulieren (vgl. Anh. 1, (III)).

## 2. Ein Standardmodell der optimalen Steuerung

Die folgende Aufgabenklasse der optimalen Steuerung mit gewöhnlichen DGLn erweist sich als hinreichend allgemein und überschaubar, und soll deshalb allen weiteren Betrachtungen zugrunde liegen (vgl. [6], [9]):

- (1)  $J(u) := g_0(x(t_E), p) \longrightarrow \text{Min !}$  bzgl.  $u = [v, p] \in C$   
 (2)  $C := \{ u \in C_1 \mid g_j(x(t_E), p) \leq 0, j=1, \dots, d \}$   
 (3)  $C_1 := \{ u = [v, p] \in L_2^r(t_0, t_E) \times R^s \mid a^v \leq v(t) \leq b^v, \text{ f.ü. in } (t_0, t_E), a^p \leq p \leq b^p \}$   
 (4)  $\dot{x}(t) = f(t, v(t), p, x(t)), t \in [t_0, t_E], x(t_0) = x_0(p).$

Dabei seien die nachfolgenden Voraussetzungen erfüllt:

- $g_j: R^n \times R^s \longrightarrow R^1, j=0, \dots, d,$   
 $f: [t_0, t_E] \times R^r \times R^s \times R^n \longrightarrow R^n, x_0: R^s \longrightarrow R^n;$   
 $t_0, t_E \in R^1, r, s, n, d$  seien natürliche Zahlen,  
 $a^v, b^v \in R^r, a^p, b^p \in R^s;$   
 $x_0, g_j, j=0, \dots, d, f(t, \dots, \cdot), t \in [t_0, t_E],$  seien stetig differenzierbar nach allen Variablen und (4) sei eindeutig lösbar für alle auftretenden Anfangswerte  $x_0(p).$

Die obige Aufgabenklasse ist sehr eng verwandt mit der in [11] betrachteten Klasse und ähnlich der in [13, §1]. Es sei bemerkt, daß andere Aufgabenstellungen der optimalen Steuerung, z.B. Probleme mit Integralfunktionalen oder integralen Beschränkungen, mit allgemeineren (z.B. nichtlinearen) Beschränkungen für  $v$  und  $p$  und mit allgemeineren Zustandsbeschränkungen, durch Einführung geeigneter neuer Zustandsvariablen in Aufgaben des obigen Typs überführt werden können (siehe [11], [12], [13]).

Wir betrachten 2 typische Beispiele:

- (i) Im Gütefunktional oder in den Restriktionen tritt ein Ausdruck der Gestalt  $A := \int_{t_0}^{t_E} h(t, v(t), p, x(t)) dt$  auf.  
 In diesem Fall definiert man durch die DGL  $\dot{x}_{n+1}(t) = h(t, v(t), p, x(t)), x_{n+1}(t_0) = 0$ , eine neue Zustandsvariable  $x_{n+1}$ , nimmt diese zu  $x$  und die DGL zu (4) hinzu und erhält:  $A = x_{n+1}(t_E).$   
 (ii) Zur Behandlung einer Zustandsbeschränkung des Typs  $h(t, v(t), p, x(t)) \leq 0, t \in [t_0, t_E],$  definiert man (vgl. [11, S. 160], [12, chapt. 6,7]) eine neue Zustandsvariable  $x_{n+1}$  durch die DGL

$$\dot{x}_{n+1}(t) = \max^2 \{ 0, h(t, v(t), p, x(t)) \}, x_{n+1}(t_0) = 0,$$

und erhält als äquivalente Beschränkung  $x_{n+1}(t_E) \leq 0$  (oder  $x_{n+1}(t_E) = 0$ ).

Auch Optimalsteuerungsprobleme mit freier Anfangs- und (oder) Endzeit  $t_0, t_E$  können in Probleme des obigen Typs mit festem Intervall  $[t'_0, t'_E]$  überführt werden, indem man die Transformation

$$t(\tau) := t_0 + (\tau - t'_0) \frac{t_E - t_0}{t'_E - t'_0}, \tau \in [t'_0, t'_E],$$

durchführt,

sowie  $t_0$  und (oder)  $t_E$  in den Steuervektor  $p$  aufnimmt.

(4) hat dann die Gestalt

$$\dot{x}(\tau) = \frac{t_E - t_0}{t'_E - t'_0} f(t(\tau), v(t(\tau)), p, x(\tau)), \tau \in [t'_0, t'_E], x(t'_0) = x_0(p).$$

In die Restriktionsmenge  $C_1$  gehen lediglich Schranken für  $v$  und  $p$  ein. Es kann sich aber durchaus problemabhängig als notwendig erweisen, allgemeinere lineare Restriktionen für  $v$  bzw.  $p$  mit in  $C_1$  (und nicht erst in  $C$ ) aufzunehmen. Jedoch kann sich dann das verwendete Optimierungsverfahren, das evtl. für lineare Restriktionen modifiziert ist (vgl. Kap. 4), im Ablauf komplizierter gestalten.

Selbstverständlich können in die Formulierung von  $C$  Gleichungs- und Ungleichungsrestriktionen getrennt eingehen. In manchen Anwendungsfällen können die auftretenden Steuerfunktionen durch eine endliche Anzahl von Parametern charakterisiert werden (vgl. z.B. Kap. 1, [11], [12]), die mit in den Steuervektor  $p$  aufgenommen werden können. In diesen Fällen ist  $r=0$  zu setzen und das obige Steuerungsproblem stellt eine Aufgabe der nichtlinearen Optimierung in  $R^s$  dar (vgl. auch [2]).

### 3. Zur Diskretisierung von Steuerungsproblemen und Berechnung des Gradienten

Bei der numerischen Behandlung von Optimalsteuerungsproblemen für stetige Prozesse muß in jedem Fall eine Diskretisierung bzw. Finitisierung vorgenommen werden, die sowohl

Steuer- als auch Zustandsvariable betrifft. Dabei werden wir uns auf das in [9] dargestellte Konzept der "problemabhängigen Diskretisierung" orientieren und verweisen ansonsten auf [7, chapt. 9], [13] und die Literatur in [9].

Für eine geeignete Diskretisierung der Zustandsvariablen ist zu beachten, daß beim heutigen Entwicklungsstand meist ein vorhandenes Programm (-system), ein Code, zur automatischen Integration von (4) eingesetzt wird (bzw. werden muß). Dabei beruht die Auswahl des Codes auf gewissen Eigenschaften von (4), z.B. nicht-steif oder steif u.ä. Solche Codes wählen in jedem Integrationsschritt ausgehend von einem vom Nutzer vorgegebenen Toleranzparameter  $\delta$  (z.B. einer Schranke für den lokalen oder globalen Diskretisierungsfehler) und dem lokalen Verhalten der DGL (4) (also auch abhängig von  $u$ !) das spezielle Integrationsverfahren und die Schrittweiten automatisch aus. Als Ergebnis wird ein sog. "variables Integrationsverfahren" realisiert und das Gitter für die Zustandsvariablen problemabhängig erzeugt. Dies führt in der Konsequenz zu i.a. unterschiedlichen Formeln und Gittern für verschiedene Steuerungen.

Für die vorliegende Polymerisationsaufgabe wurde aus verschiedenen Gründen das implizite Euler-Verfahren in einer Implementierung nach [4] (vgl. [6]) verwendet. Einerseits erscheint es für nichtlineare steife DGLn mit wenig glatter rechter Seite aus theoretischen Gründen gut geeignet. Andererseits hat die verwendete Implementierung in Vergleichsrechnungen bei der Polymerisationsaufgabe mit den BDF-Verfahren (bis zur 3. bzw. 6. Ordnung) in verschiedenen Implementierungen (Gear bzw. Rübner-Petersen) bzgl. Rechenzeit (Anzahl der Funktions- und Jacobi-Matrix-Aufrufe!) und Genauigkeit gut abgeschnitten (vgl. [6]).

Für die Finitisierung der Steuervariablen wird, "heuristisch" motiviert, ein festes Gitter vorgegeben und dies evtl. abhängig vom Erfolg der Optimierung ("adaptiv") "geeignet" verfeinert. Außerdem erscheint ein Ansatz mit stückweise konstanten Steuerungen als "problem-angepaßt" und günstig.

Dieser Zugang führt zu folgendem Typ von Diskretisierung für die stetigen Steuerungsprobleme aus Kap. 2 (wobei die Beschränkung auf das implizite Euler-Verfahren nicht wesentlich ist, vgl. [9]):

$$J_D(u; \delta, h) := g_0(x_N, p) \longrightarrow \text{Min !} \quad \text{bzgl. } u \in C_D(\delta, h)$$

$$C_D(\delta, h) := \{ u \in C_1(h) \mid g_j(x_N, p) \leq 0, j=1, \dots, d \}$$

$$C_1(h) := \{ u = [v, p] \in C_1 \mid v \in H_G \}$$

$$H_G := \{ v \in L_2^r(t_0, t_E) \mid v(t) = v^j \in \mathbb{R}^r, t \in (\tilde{t}_{j-1}, \tilde{t}_j], j=1, \dots, m \}$$

$$G := \{ t_0 = \tilde{t}_0 < \tilde{t}_1 < \dots < \tilde{t}_m = t_E \}, h := \max_{1 \leq j \leq m} |\tilde{t}_j - \tilde{t}_{j-1}|$$

$$x_1 = x_{1-1} + h_1 f(t_1, v(t_1), p, x_1), l=1, \dots, N, x_0 = x_0(p).$$

(dabei sind  $N, x_1, h_1 := t_1 - t_{1-1}$  von  $\delta$  und  $u$  abhängig!)

Als wesentliche Frage ergibt sich nun das Problem der Stabilität der diskretisierten Probleme für  $\delta, h \rightarrow 0$  bzgl. des stetigen Originalproblems (im Sinne der nichtlinearen parametrischen Optimierung). Wir verweisen dabei auf die Bemerkungen und die Literatur in [9] (vgl. auch [2] für  $r=0$ ) und nehmen die Stabilität als erfüllt an.

Ein weiteres wesentliches Problem bei der numerischen Behandlung der entstandenen diskreten Optimalsteuerungsprobleme besteht in der Berechnung des Gradienten, der für die Realisierung von Verfahren der nichtlinearen Optimierung meist benötigt wird. Dazu nehmen wir an, daß der verwendete Integrations-Code bei nur sehr kleinen Änderungen von  $u$  dieselben Näherungen  $x_1$  und Schrittweiten  $h_1, l=1, \dots, N$ , erzeugt. Dann gilt im vorliegenden Fall für den Gradienten (falls derselbe existiert) nach [9, Kap. 4]:

$$J_D'(\cdot; \delta, h) = [J_{D, v}' , J_{D, p}'] : C_D(\delta, h) \longrightarrow H_G \times \mathbb{R}^d$$

$$J_{D, v}'(u)(t) = (\tilde{t}_j - \tilde{t}_{j-1})^{-1} \sum_{l=1}^N h_l \left( \frac{\partial f}{\partial v} \Big|_1 \right)^T z_1, \quad t \in (\tilde{t}_{j-1}, \tilde{t}_j], j=1, \dots, m, t_1 \in (\tilde{t}_{j-1}, \tilde{t}_j]$$

$$J_{D, p}'(u) = \sum_{l=1}^N h_l \left( \frac{\partial f}{\partial p} \Big|_1 \right)^T z_1 + \left( \frac{\partial x_0}{\partial p}(p) \right)^T z_0 + \left( \frac{\partial g_0}{\partial p}(x_N, p) \right)^T$$

$$\begin{aligned} (I - h_N \left( \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_N \right)^T) z_N &= \left( \frac{\partial g}{\partial x} g_0(x_N, p) \right)^T \\ (I - h_1 \left( \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_1 \right)^T) z_1 &= z_{1+1}, \quad l = N-1, \dots, 1, \\ z_0 &= z_1 \end{aligned}$$

("induzierte" diskrete duale Gleichung)

Dabei bezeichnet z.B.  $\frac{\partial f}{\partial x} \Big|_1 = \frac{\partial f}{\partial x} \Big| (t_1, v(t_1), p, x_1)$ . Die Gra-

dienten der Funktionale  $J_{D,j}(u) := g_j(x_N, p)$ ,  $j=1, \dots, d$ , d.h. der Restriktionsfunktionen, ergeben sich analog durch Ersetzung von  $g_0$  durch  $g_j$ ,  $j=1, \dots, d$ .

Zur Berechnung der Gradienten müssen also die Jakobi-Matrizen

$\frac{\partial f}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial f}{\partial v}$ ,  $\frac{\partial f}{\partial p}$ ,  $\frac{\partial x}{\partial p}$ ,  $\frac{\partial g}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial g}{\partial p}$ ,  $j=0, \dots, d$ , gegeben sein und

$x_1$ ,  $h_1$ ,  $l=1, \dots, N$ , im Verlaufe der Integration von (4) gespeichert werden. (Bei Verwendung allgemeinerer Integrationsverfahren muß auch eine Speicherung der Information über die verwendeten Formeln erfolgen.) Dann müssen zur Berechnung der dualen Variablen  $z_1$ ,  $l=0, \dots, N$ , lediglich  $N$  lineare Gleichungssysteme (mit insgesamt  $N$  Aufrufen der Jakobi-Matrix  $\frac{\partial f}{\partial x}$ ) gelöst werden. Dies ist in jedem Fall ein geringerer Aufwand als die automatische Integration der stetigen dualen DGL mit Hilfe eines Codes. Hinzu kommt, daß bei letzterem Vorgehen der Gradient von  $J_D$  nur approximativ berechnet wird (zumal meist auch Interpolationen der Werte  $x_1$ ,  $l=0, \dots, N$ , erforderlich sind) und folglich i.a. kein hinreichender Abstieg gewährleistet ist.

Bei Verwendung gleicher Gitter für Steuer- und Zustandsvariable vereinfacht sich die Berechnung von  $J_{D,v}(u)$  wesentlich; dieser Fall wurde in [13] für verschiedene explizite Integrationsverfahren (mit fest vorgegebenen Schrittweiten) behandelt. Dies erscheint jedoch für die vorliegende Aufgabe nicht als praktikabel. Möglich wäre allerdings, das Gitter für die Zustandsvariablen als Verfeinerung von  $G$  zu erzeugen.

#### 4. Bemerkungen zur Auswahl der Optimierungsverfahren, zu deren numerischen Realisierung und zu den Ergebnissen

Als Zugang zur numerischen Behandlung der Optimalsteuerungsprobleme in Kap.2 wird eine Diskretisierung im Sinne von Kap. 3 und damit eine Überführung in endlich-dimensionale nichtlineare Optimierungsprobleme vorgeschlagen (siehe auch [11], [13]). Im folgenden werden nun einige Bemerkungen zur Auswahl von geeigneten Verfahren der nichtlinearen Optimierung (nebst konkreten Vorschlägen) zur approximativen Lösung dieser diskreten Steuerungsprobleme angeführt.

Dabei seien also zunächst  $G$  und  $\delta$  (vgl. Kap.3) fest gewählt. Die nichtlinearen Optimierungsprobleme besitzen dann die Dimension  $s+mr$ , d.h. diese wächst für  $r \geq 1$  mit  $m$  schnell an. Deshalb muß für  $r \geq 1$  ein Verfahren gewählt werden, das für "große" Probleme geeignet ist. Aus diesem Grund werden die Fälle  $r=0$  (und  $s$  nicht "zu groß", d.h.  $s \leq 50$ ) und  $r \geq 1$  unterschieden. Ein weiteres wesentliches Kriterium für die Auswahl ist, daß das Verfahren aus Aufwandsgründen (bei Steuerungsproblemen besonders!) mit einer geringen Anzahl von Funktions- und Gradientenaufrufen auskommt.

Einheitlich für beide vorzuschlagende Varianten ist eine "adaptive" Kopplung von Diskretisierungs- und Minimierungsmethoden, d.h. bei fortschreitendem Erfolg der Minimierung werden  $\delta$  und (oder)  $h$  geeignet verkleinert.

##### Fall $r=0$ :

Es wird ein Verfahren mit variabler Metrik für nichtlineare Restriktionen, das sog. Han/Powell-Verfahren (siehe [8] bzw. auch [10, S.22]), vorgeschlagen. Das Verfahren beruht auf der schrittweisen Minimierung einer konvexen quadratischen Zielfunktion bzgl. der linearisierten Restriktionen, wobei die Matrix der quadratischen Zielfunktion geeignet aufdatiert wird. Die Lösungen der konvexen quadratischen Teilprobleme liefern die Abstiegerichtungen und die Abstiegschrittweiten werden durch quadratische Interpolation einer nicht-differenzierbaren Straffunktion erhalten. Powell zeigt für das Verfahren unter geeigneten Voraussetzungen globale und lokal

Überlineare Konvergenzeigenschaften.

In umfangreichen Vergleichstests mit den meisten wesentlichen Codes der nichtlinearen Optimierung (in [10]) hat dieser Code (VFO2AD bzw. VMCON) von Powell (vgl. [2]) seine außergewöhnliche Effizienz nachgewiesen, speziell bzgl. der Anzahl von Funktions- und Gradientenaufrufen.

In [2] ist dieses gesamte Vorgehen implementiert und mit gutem Erfolg getestet worden.

Fall  $r > 1$ :

Es wird ein verallgemeinertes Strafverfahren nach Fletcher [3] zur Behandlung der Zustandsbeschränkungen (in  $C_D(d, h)$ ) vorgeschlagen, wobei schrittweise die Hilfsfunktion

$$g_0(x_N, p) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^d r_j \max^2 \{ 0, y_j + g_j(x_N, p) \} \quad (r, y \in \mathbb{R}^d)$$

über  $C_1(h)$  mit Hilfe eines modifizierten Verfahrens der konjugierten Gradienten (nach Best/Ritter [1]) minimiert wird (in  $C_1(h)$  treten nur Schrankenrestriktionen auf!). Dabei werden die Verschiebungs- und Strafparameter  $y$  und  $r$  gemäß [3, chapt.4] adaptiv verändert. Dieses Vorgehen ist für "große" Probleme geeignet (keine Speicherung einer Matrix notwendig!) und es sind gute Konvergenzeigenschaften bekannt ([1], [3]).

In [6] wurde das gesamte Vorgehen für den Fall  $r > 1$  implementiert. Allerdings wird dort noch das Verfahren der bedingten Gradienten zur Minimierung über  $C_1(h)$  verwendet. [6] enthält ein FORTRAN-Programm, das auf einer ES 1022 getestet und an der Polymerisationsaufgabe aus Kap. 1 (Probleme (I) und (II)) erprobt wurde. Anhang 2 enthält einige Ergebnisse für eine spezielle Rezeptur und sowohl für die Umsatz-optimale, als auch für die zeitoptimale Aufgabenvariante (I) bzw. (II). Dabei wurde jeweils nach  $1^h$  Rechenzeit auf der ES 1022 die Optimierung abgebrochen. Die Ergebnisse zeigen, daß es speziell gelungen ist, ausgehend von einer vom Auftraggeber vorgegebenen Anfangsnäherung für  $T(\cdot)$  bzw.  $I_j(0)$ ,  $j=1,2,3$ , mit nur geringen Umsatzverlusten die Beschränkungen für den Polymerisationsgrad  $SPZ(t_E)$  einzuhalten.

#### Literatur:

- [1] Best, M.J.; K. Ritter: A class of accelerated conjugate direction methods for linearly constrained minimization problems; Math. Comp. 30(1976), 478-504.
- [2] Doschkinow, P.: Numerische Behandlung von Optimalsteuerungsproblemen mit Hilfe von effektiven Verfahren der nichtlinearen Optimierung; Humboldt-Universität Berlin, Sektion Mathematik, Diplomarbeit 1981.
- [3] Fletcher, R.: An ideal penalty function for constrained optimization; J. Inst. Maths Applics 15(1975), 319-342.
- [4] Friedli, A.: Verallgemeinerte Runge-Kutta-Verfahren zur Lösung steifer Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen; Technische Hochschule Zürich, Dissertation 1979.
- [5] Hernig, G.: Mathematisches Modell der radikalischen Polymerisation von Styrol in Masse; VEB Chemische Werke Buna, Schkopau, Manuskript 1977.
- [6] Isa, A.; W. Römisch: Zur Modellierung und numerischen Behandlung der Optimierung von Polymerisationsprozessen; Zwischenbericht für VEB Chemische Werke Buna, Juli 1980.  
Algorithmus und Programm zur numerischen Behandlung von Optimalsteuerungsproblemen - Anwendung auf die Optimierung von Polymerisationsprozessen; Abschlußbericht für VEB Chem. Werke Buna, April 1981.
- [7] Polak, E.: An historical survey of computational methods in optimal control; SIAM Review 15(1973), 553-584.
- [8] Powell, M.J.D.: A fast algorithm for nonlinearly constrained optimization calculations; in: Numerical Analysis, Lecture Notes in Mathematics vol. 630, Springer 1978, 144-157.
- [9] Römisch, W.: Remarks on the numerical treatment of optimal control problems; Berichte des IX. IKM Weimar 1981, Heft 2, 82-86.
- [10] Schittkowi, K.: Nonlinear Programming Codes; Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems vol. 183, Springer 1980.
- [11] Sargent, R.W.H.; Sullivan, G.R.: The development of an efficient optimal control package; in: Optimization Techniques; Lecture Notes in Control and Information Sciences vol. 7, Springer 1978, 158-168.
- [12] Sargent, R.W.H.; Sullivan, G.R.: The formulation of optimal control problems as nonlinear programmes; Imperial College, London, preprint 1977.
- [13] Грачёв, Н.И.; Ю.Г. Евтушенко: Библиотека программ решения задач оптимального управления; ЖВМФ 19(1979).

Anhang 1: Formulierung des mathematischen Modells der Optimierung der Styrol-Polymerisation

Nachfolgend wird das in [5] bzw. Kap. 1 dargestellte Modell in Form einer speziellen Aufgabe des Standardmodells aus Kap. 2 formuliert. Wir beginnen dabei mit der Umsatzoptimalen Aufgabe (I) und gehen anschließend auf die Änderungen bei den anderen Aufgabenvarianten ein.

(I)  $r:=1, s:=3, n:=9, d:=4; t_0:=0;$   
 $g_0(x,p) := (x_2 - 0.02 M_0)^2$   
 $g_1(x,p) := x_3 - T_E, \quad g_j(x,p) := x_{j+5}, \quad j=2,3,4;$   
 $a^V := 0, \quad b^V := 20; \quad a^P := (0,0,0)^T;$   
 $f(t,v,p,x) := (f_1(x), f_2(x), v, f_4(x), \dots, f_9(x))^T,$   
 $x_0(p) := (0, M_0, T_0, p_1, p_2, p_3, 0, 0, 0)^T;$   
 $f_1(x) := Q(x) - k_a(x_3) \frac{x_2^2 \varphi(x_2)}{\sqrt{x_2 x_3}}$   
 $f_2(x) := -(k_w(x_3) + k_u(x_3)) \frac{x_1 x_2}{\sqrt{x_2 x_3}} - k_t(x_3) \frac{x_2^2}{\sqrt{x_2 x_3}}$   
 $f_j(x) := -k_{j-3}(x_3) x_j, \quad j=4,5,6,$   
 $f_7(x) := \max^2 \{0, -\frac{100}{M_0} f_2(x) - 15 - 0.5(x_3 - 353.15)\}$   
 $f_8(x) := Q(x)(\beta(x) - \alpha(x)d_2)$   
 $f_9(x) := Q(x)(\alpha(x)d_1 - \beta(x))$   
 (Polymerisationsgrad  $SPZ(t) := \frac{x_8(t)d_1 + x_9(t)d_2}{x_8(t) + x_9(t)}$ )  
 wobei  
 $Q(x) := \sum_{j=4}^6 k_{j-3}(x_3) f_{j-3}(x_3) x_j + k_t(x_3) \frac{x_2^2}{\sqrt{x_2 x_3}}$   
 $\alpha(x) := \frac{k_u(x_3) x_2 + [k_a(x_3) - 0.5k_c(x_3)] x_1 \varphi(x_2)}{k_a(x_3) x_1 \varphi(x_2)}$   
 $\beta(x) := \frac{2k_u(x_3) x_2 + 2k_a(x_3) x_1 \varphi(x_2) + k_w(x_3) x_2}{k_a(x_3) x_1 \varphi(x_2)}$   
 $v(x_2, x_3) := RH(x_3) + (1 - RH(x_3)) \frac{x_2}{M_0}$

$$RH(x_3) := (r_1 - r_2(x_3 - 273.15)) / (r_3 - r_4(x_3 - 273.15))$$

$$\varphi(x_2) := g_1 + \frac{1 - g_1}{g_3} \exp\left(\left(\frac{M_0}{x_2}\right)^{g_2} \ln g_3\right)$$

$$k_j(x_3) := \exp(a_j - \frac{b_j}{x_3})$$

$$f_j(x_3) := 2\left(1 + \exp(\bar{a}_j - \frac{\bar{b}_j}{x_3})\right)^{-1} \quad j=1,2,3$$

$$k_a(x_3) := \exp(aa - \frac{ba}{x_3}), \quad k_t(x_3) := \exp(at - \frac{bt}{x_3})$$

$$k_u(x_3) := \exp(au - \frac{bu}{x_3}), \quad k_v(x_3) := \exp(av - \frac{bv}{x_3})$$

$$k_w(x_3) := \exp(aw - \frac{bw}{x_3}), \quad k_c(x_3) := k_a(x_3) / (1 + k_v(x_3))$$

$$M_0 := 8.3769749; \quad T_0 := 333.15, \quad T_E := 393.15 \text{ (} ^\circ\text{K)};$$

$$r_1 := 0.9238, \quad r_2 := 0.0008766, \quad r_3 := 1.087, \quad r_4 := 0.0007$$

$$g_1 := 0.014973, \quad g_2 := 1.15065, \quad g_3 := 0.236674$$

$$a_1 := 40.171, \quad b_1 := 14805.2; \quad \bar{a}_1 := 3.0502, \quad \bar{b}_1 := 1158.36$$

$$a_2 := 40.379, \quad b_2 := 15963.4; \quad \bar{a}_2 := 8.9883, \quad \bar{b}_2 := 3090.63$$

$$a_3 := 44.106, \quad b_3 := 17474.2; \quad \bar{a}_3 := 4, \quad \bar{b}_3 := 1207.27$$

$$aa := 30.05, \quad ba := 1127.3; \quad at := 17.608, \quad bt := 11494.7$$

$$au := 21.271, \quad bu := 5423.67; \quad av := 10.208, \quad bv := 3989.5$$

$$aw := 25.84, \quad bw := 4041.3$$

$t_E, b^P, d_1, d_2$  sind von der konkreten Rezeptur abhängig.

Von den für die Optimierung benötigten Ableitungen von  $x_0, g_j, j=0, \dots, 4$ , und  $f$  (vgl. Kap. 3) stellt nur die Berechnung der Jakobi-Matrix  $\frac{\partial f}{\partial x}$  eine wesentliche Schwierigkeit dar. Diese wurde in [6] angegeben.

(II) (Änderungen im Vergleich zu (I))

$$s := 4, \quad d := 5; \quad a^P := (0,0,0,0)^T;$$

$$g_0(x,p) := p_4, \quad g_5(x,p) := x_2 - 0.02 M_0;$$

$f(t,v,p,x)$  aus (I) wird mit  $p_4/t_E$  multipliziert.

(III) (stückweise linearer Ansatz für die Temperaturführung; Änderungen im Vergleich zu (I) bei zeitoptimaler Aufg.)

$$r := 0, \quad s := 2m+3, \quad n := 8; \quad (m \text{ fest gewählt})$$

$$g_0(x,p) := p_{m+3}, \quad g_1(x,p) := x_2 - 0.02 M_0,$$

$$g_j(x,p) := x_{j+4} \quad , \quad j=2,3,4 ;$$

lineare Restriktionen für p:

$$a^p \leq (p_1, p_2, p_3)^T \leq b^p \quad ,$$

$$0 \leq p_{m+3+j} - p_{m+3+j-1} \leq 20(p_{j+3} - p_{j+3-1}) \quad , \quad j=2, \dots, m,$$

$$0 \leq p_{m+4} - T_0 \leq 20p_4 \quad , \quad p_{2m+3} \leq T_E \quad , \quad p_{m+3} \leq t_E \quad .$$

$f(t,v,p,x)$  aus (I) wird mit  $p_{m+3}/t_E$  multipliziert, es wird die 3. Komponente von  $f$  gestrichen und die Komponenten werden neu nummeriert.

#### Anhang 2: Ergebnisse bei der Optimierung der Styrol-Polymerisation

Optimierungsrechnungen wurden durchgeführt für eine Rezeptur, für die als wesentliche Restriktion  $d_1 \leq \text{SPZ}(t_E) \leq d_2$ , mit  $d_1 := 1100$ ,  $d_2 := 1200$ , erfüllt sein soll.

(I) Zielkriterium:  $U(t_E) \approx 0.98$

$$b_1^p := 0.0070199 \quad , \quad b_2^p := 0 \quad , \quad b_3^p := 0.0084356 \quad ; \quad t_E := 7 \quad \langle h \rangle ;$$

Anfangsnäherung

"optimierte" Steuerung

$$p_1 := b_1^p$$

$$p_1 = 0.0059178$$

$$p_3 := b_3^p$$

$$p_3 = 0.00711125$$

$$T(1.5) := 363.15$$

$$T(1.5) = 358.44$$

$$T(5.0) := 368.15$$

$$T(5.0) = 368.36$$

$$T(7.0) := 393.15$$

$$T(7.0) = 390.75$$

$$U(7) = 0.98883$$

$$U(7) = 0.97177$$

$$\text{SPZ}(7) = 965.7$$

$$\text{SPZ}(7) = 1101.23$$

(der Temperaturverlauf ist jeweils stückweise linear, mit den angeführten "Knickstellen")

(II) Zielkriterium: Minimierung der Reaktionszeit

$$b_1^p := 0.0059178 \quad , \quad b_2^p := 0 \quad , \quad b_3^p := 0.00711125 \quad , \quad b_4^p := t_E := 7.5 \quad ;$$

Anfangsnäherung: obige "optimierte" Steuerung, wobei

$$T(t) := 390.75, \quad t \in [7, 7.5], \quad p_4 := 7.5 ;$$

$$(U(7.5) = 0.98612, \quad \text{SPZ}(7.5) = 1067.23)$$

"optimierte" Steuerung:

$$p_1 = 0.005078 \quad , \quad p_3 = 0.0061025 \quad , \quad p_4 = 7.04035 \quad ,$$

$$T(1.408) = 356.82 \quad ; \quad T(3.75) = 369.25 \quad , \quad T(4.69) = 372.02 \quad ,$$

$$T(6.571) = 390.45 \quad , \quad T(7.04) = 390.74 \quad ;$$

$$U(7.04) = 0.9786 \quad , \quad \text{SPZ}(7.04) = 1148.02 \quad .$$