

Zur numerischen Behandlung eines Problems der optimalen Steuerung von Polymerisationsprozessen

W. Römisch, Humboldt-Universität Berlin, Sekt. Mathematik

1. Einleitung

In [4] wurde eine Aufgabe zur Optimierung der Styrol-Polymerisation gestellt. Dabei wird der Polymerisationsprozeß durch die Bilanzgleichungen, einem System gewöhnl. DGLn für die Initiator-, Radikal- und Monomermengen, beschrieben. Dieses DGL-System (der Dimension 5) erweist sich als enorm "steif" und die Berechnung eines Wertes der rechten Seite ist sehr aufwendig. Zielstellung der Optimierung ist die Maximierung des Umsatzes an Polymeren bzw. die Minimierung der Endzeit bei festem Umsatz. Steuergrößen sind die Temperaturführung und die Initiatoranfängsmengen. Dabei liegen eine Reihe von Beschränkungen für den Prozeßverlauf vor, z.B. Nebenbedingungen für die Temperaturführung, die Umsatzgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Temperatur und für den Polymerisationsgrad. Alle diese Beschränkungen können entweder als lineare Restriktionen für die Steuergrößen bzw. als Restriktionen für den Endzustand oder aber als allgemeine Zustandsbeschränkungen formuliert werden. Deshalb ist es möglich (vgl. [5], Kap.2), die in [4] enthaltene Aufgabenstellung in das "Standardmodell" der optimalen Steuerung aus Kap.2 einzuordnen.

Die im folgenden Kapitel formulierte allgemeine Aufgabe (P) der optimalen Steuerung ähnelt der Problemstellung in [9],[10]. In Bemerkung 1 wird darauf hingewiesen, wie noch allgemeinere Aufgaben durch geeignete Transformationen in (P) überführt werden können. Da (P) als Minimumproblem in einem Banachraum formuliert wird, ist es natürlich, daß zur numerischen Behandlung von (P) Minimierungsverfahren für Funktionale in Banachräumen verwendet werden (vgl. [1],[16]). Die Verwendung von iterativen Abstiegsverfahren erscheint für die vorliegende chemische Aufgabe besonders günstig, da wegen der sehr aufwendigen Berechnung der Werte des Gütefunktional gesichert sein muß, daß auch bereits nach wenigen Iterationsschritten eine kostengünstigere Steuerung erhalten wird. Der für Minimierungsverfahren vom Gradiententyp benötigte Gradient des Funktionals in (P) wird ebenfalls in Kap.2 angegeben. In Kap.3 werden die vorgeschlagenen bzw. verwendeten numerischen Verfahren beschrieben bzw. auf die jeweilige Literatur hingewiesen.

2. Ein Standardmodell der optimalen Steuerung

Wir betrachten nun das folgende Modell (P) für optimale Steuerungsprobleme mit dem Gütefunktional J und dem Restriktionsbereich C :

$$J(u) \longrightarrow \inf_{u \in C} J \quad (P)$$

$$J(u) := g_0(x(t_1), p) \quad , \quad u = [v, p] \in C \quad , \quad (1)$$

$$C := \{ u \in C_1 \mid g(x(t_1), p) \leq 0 \} \quad (2)$$

$$C_1 := \{ u = [v, p] \in L_2^r(t_0, t_1) \times \mathbb{R}^s \mid a^v \leq v(t) \leq b^v \text{ , f.ü. in } (t_0, t_1) \text{ , } a^p \leq p \leq b^p \} \quad (3)$$

$$\dot{x}(t) = f(t, v(t), p, x(t)) \quad , \quad t \in [t_0, t_1] \text{ , } x(t_0) = x_0(p) \quad (4)$$

wobei

$$g_0 : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \longrightarrow \mathbb{R}^1$$

$$g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^s \longrightarrow \mathbb{R}^d$$

$$f : [t_0, t_1] \times \mathbb{R}^r \times \mathbb{R}^s \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$$

$$x_0 : \mathbb{R}^s \longrightarrow \mathbb{R}^n$$

$t_0, t_1 \in \mathbb{R}^1$; r, s, n, d natürliche Zahlen; $a^v, b^v \in \mathbb{R}^r$;
 $a^p, b^p \in \mathbb{R}^s$; g_0, g, f, x_0 seien stetig differenzierbar
nach allen Variablen und (4) sei für alle auftretenden Anfangswerte $x_0(p)$ eindeutig lösbar.

Bemerkung 1:

- a) Weitere Aufgabenstellungen der optimalen Steuerung, z.B. mit Integralfunktionalen, nichtlinearen Restriktionen für v und p , Zustandsbeschränkungen im gesamten Intervall $[t_0, t_1]$ u.ä., lassen sich durch geeignete Einführung neuer Zustandsvariablen x_j , $j=n+1, \dots$, in die Gestalt (P) transformieren (vgl. [9], S.160, [10], Kap.6). Gleiches gelingt für Probleme mit freier Endzeit t_E (speziell: für zeitoptimale Aufgaben), indem man das Problem von $[t_0, t_E]$ durch $t := t_0 + \frac{\tau - t_0}{t_1 - t_0} (t_E - t_0)$, $\tau \in [t_0, t_1]$, auf ein festes Intervall $[t_0, t_1]$ transformiert und t_E mit in den Parametervektor p aufnimmt.
- b) Ein Spezialfall von (P) liegt vor, wenn keine Steuerfunktionen v auftreten (d.h. $r=0$). In diesem Fall stellt (P) eine Aufgabe der nichtlinearen Optimierung im \mathbb{R}^s dar und kann entsprechend numerisch behandelt werden (vgl. Kap.3). Dieser Fall tritt z.B. auch bei solchen Aufgaben auf, bei denen die zulässigen Steuerfunktionen durch eine endliche Anzahl von Parametern charakterisiert werden können, z.B. durch eine feste Anzahl l möglicher Sprungstellen und zugehöriger Funktionswerte (vgl. auch [9], Kap.3, [10]). Diese $2l$ Parameter können zu p hinzugefügt und die Steuerfunktionen in der Gestalt $v(t, p)$ formuliert werden.

Bemerkung 2:

In der in [4] dargelegten Polymerisationsaufgabe soll die Temperatur T eine stückweise lineare Funktion sein. Deshalb wird als Steuergröße \dot{T} verwendet und die formale DGL $\dot{T}(t)=v(t)$, $T(0)=T_0$, zu den vorliegenden Bilanzgleichungen hinzugefügt. Außerdem werden wie in Bem.1a) angedeutet 3 weitere Zustandsvariable eingeführt, um die Beschränkungen für die Umsatzgeschwindigkeit und den Polymerisationsgrad in der erforderlichen Gestalt formulieren zu können. Aus technologischen Gründen erscheint es ferner als durchaus sinnvoll, für \dot{T} lediglich eine geringe Anzahl von Sprungstellen zuzulassen, so daß der Fall in Bem.1b) Anwendung finden kann.

Darstellung des Gradienten von J : (vgl. [10]; [16], S.258ff.)

$$J' : C \longrightarrow L_2^r(t_0, t_1) \times R^s$$

$$J'(u) = [J'_v(u), J'_p(u)] \quad , \quad u = [v, p] \in C \quad ,$$

$$J'_v(u)(t) = - \left(\frac{\partial f}{\partial v}(t, v(t), p, x(t)) \right)^T z(t) \quad , \quad t \in [t_0, t_1] \quad ,$$

$$J'_p(u) = - \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial f}{\partial p}(t, v(t), p, x(t)) \right)^T z(t) dt - \left(\frac{\partial x_0}{\partial p}(p) \right)^T z(t_0) + \frac{\partial g_0}{\partial p}(x(t_1), p)$$

$$\dot{z}(t) = - \left(\frac{\partial f}{\partial x}(t, v(t), p, x(t)) \right)^T z(t) \quad , \quad t \in [t_0, t_1] \quad ,$$

$$z(t_1) = - \frac{\partial g_0}{\partial x}(x(t_1), p)$$

$$\dot{x}(t) = f(t, v(t), p, x(t)) \quad , \quad t \in [t_0, t_1] \quad , \quad x(t_0) = x_0(p) \quad .$$

Bemerkung 3:

- Zur Berechnung des Gradienten müssen vom Anwender die partiellen Ableitungen (bzw. Jacobi-Matrizen) von f, g_0, x_0 bereitgestellt werden. In vielen Anwendungsbeispielen ist dabei lediglich die analytische Berechnung von $\frac{\partial f}{\partial x}$ problematisch.
- In der Anwendung werden die beiden DGL-Systeme für x und z numerisch integriert und der Gradient näherungsweise an gewissen Stützstellen berechnet. Dabei erweist es sich als günstig, daß im Fall einer steifen DGL für x auch die duale DGL für z dasselbe Steifheitsverhalten aufweist und folglich mit einem einheitlichen Integrationsverfahren gearbeitet werden kann.
- Für die erste in Kap.3 vorgeschlagene Verfahrensvariante ($r=0$) werden auch die Gradienten der Funktionale $J_j(p) := g_j(x(t_1), p)$, $j=1, \dots, d$, benötigt, die analog zu oben berechnet werden können. Bei der zweiten Verfahrensvariante wird anstelle von J iterativ eine Ersatzfunktion folgender Typs minimiert:

$$J(u; \lambda, r) := J(u) + r \sum_{j=1}^d \max^2\{0, \lambda_j + g_j(x(t_1), p)\}$$

Die Berechnung des Gradienten bzgl. u muß gegenüber oben entsprechend modifiziert werden.

3. Bemerkungen zur numerischen Behandlung

Im folgenden sollen für die Fälle $r=0$ bzw. $r \geq 1$ Vorgehensweisen zur numerischen Behandlung von (P) vorgeschlagen werden.

Fall 1 ($r=0$):

Das nichtlineare Optimierungsproblem (P) wird mit einem Verfahren mit variabler Metrik für nichtlineare Restriktionen nach POWELL [7] in der Implementierung des Programms VFO2AD in [8] iterativ gelöst (vgl. auch Bem.3c)).

Dieses Verfahren hat in umfangreichen Vergleichstests mit den wichtigsten anderen Codes der nichtlinearen Optimierung eine hervorragende Effektivität und Zuverlässigkeit bewiesen; besonders bzgl. der Anzahl der Aufrufe des Gütefunktionalen, der Restriktionen und ihrer Gradienten, die unabhängig von der Dimension und dem Typ der Beschränkungen ist und wesentlich unter allen Vergleichswerten liegt. (vgl. [12]) Für größere Dimensionen $s > 50$ steigt die Rechenzeit jedoch stärker an.

Es empfiehlt sich, das POWELL'sche Verfahren adaptiv mit den Diskretisierungsmethoden zur approximativen Berechnung des Gradienten zu koppeln (vgl. [11]).

Fall 2 ($r \geq 1$):

(P) wird mit einer adaptiven Kopplung (im Sinne von [11]) von Abstiegs-, Diskretisierungs- und modifizierten Strafverfahren behandelt. Wir verwenden dabei eine Strafverschiebungs-Technik (siehe [3], S.148) zur Behandlung der nichtlinearen Restriktionen in der Implementierung von [2], S.6-10, und minimieren die Ersatzfunktion (vgl. Bem.3c)) über C_1 iterativ mit einem Verfahren der bedingten Gradienten (vgl. [1], S.106, [16], S.251/252). Als Abstiegsverfahren könnten allerdings auch Verfahren mit größerer Konvergenzgeschwindigkeit, wie z.B. das Verfahren der konjugierten Gradienten für lineare Restriktionen nach RITTER verwendet werden. Die adaptive Kopplung wird so gestaltet, daß der Gesamtalgorithmus selbständig, in Abhängigkeit vom Erfolg der Konvergenz, seine Parameter (Diskretisierungs-Schrittweite, Bewichtung des Strafterms) verändert.

Die Lösung der beiden DGL-Systeme für x und z erfolgt dabei (mit Blick auf die Anwendung für den steifen Fall) mit dem impliziten Euler-Verfahren, wobei Fehlerschätzung, Schrittweitensteuerung, Steuerung des Aufrufes neuer Jakobi-Matrizen, Abbruchtest bei der iterativen Lösung der impliziten Verfahrensgleichung usw. nach einem neueren einheitlichen Gesamtkonzept von SHAMPINE [13], [14], [15] implementiert wurden (vgl. [5], Kap.3). Auf Integrationsverfahren mit höhe-

rer Konsistenzordnung wurde (zunächst) verzichtet, da die in die rechte Seite der DGL eingehenden Steuerfunktionen unstetig sind und deshalb i.a. keine höhere Ordnung als die des Euler-Verfahrens erwartet werden kann.

Literatur

- [1] Daniel, J.W.: The approximate minimization of functionals; Prentice-Hall, Inc., Englewood-Cliffs 1971.
- [2] Großmann, C. u.a.: Programmpaket "Nichtlineare Optimierung"; TU Dresden, Sektion Mathematik 1977.
- [3] Großmann, C.; A.A.Kaplan: Strafmethode und modifizierte Lagrangefunktionen in der nichtlinearen Optimierung; Teubner-Text, Teubner, Leipzig 1979.
- [4] Hennig, G.: Mathematisches Modell der radikalischen Polymerisation von Styrol in Masse; Manuskript, Schkopau 1977.
- [5] Isa, A.; W. Römisch: Zur Modellierung und numerischen Behandlung der Optimierung von Polymerisationsprozessen; Zwischenbericht für VEB Chemische Werke Buna, Juli 1980.
- [6] Polak, E.: An historical survey of computational methods in optimal control; SIAM Review 15(1973)2, 553-584.
- [7] Powell, M.J.D.: A fast algorithm for nonlinearly constrained optimization calculations; in: Numerical Analysis, Proceedings, Lecture Notes in Mathematics vol.630, Springer 1978, 144-157.
- [8] Powell, M.J.D.: Constrained optimization by a variable metric method; University of Cambridge, Report DAMTP 77 / NA 6.
- [9] Sargent, R.W.H.; G.R. Sullivan: The development of an efficient optimal control package; in: Optimization Techniques, Proceedings, Part 2, Lecture Notes in Control and Information Sciences vol.7, Springer 1978, 158-168.
- [10] Sargent, R.W.H.; G.R. Sullivan: The formulation of optimal control problems as nonlinear programmes; Preprint, Imperial College, London 1977.
- [11] Schittkowski, K.: An adaptive precision method for nonlinear optimization problems; SIAM J. Control and Optimization 17(1979)1, 82-98.
- [12] Schittkowski, K.: A numerical comparison of 13 nonlinear programming codes with randomly generated test problems; erscheint in: Numerical Optimization of Dynamical Systems (ed. Dixon, Szegö), North-Holland Publ.Comp.
- [13] Shampine, L.F.: Implementation of implicit formulas for the solution of ODE's; SIAM J. Scientific, Sta-

tistical Computing 1(1980).

- [14] Shampine, L.F.: Evaluation of implicit formulas for the solution of ODE's; BIT 19(1979)4.
- [15] Shampine, L.F.: Efficient use of implicit formulas with predictor-corrector error estimate; Sandia Laboratories, Albuquerque, New Mexico; Report SAND 79-2172.
- [16] Василев, Ф.П.: Лекции по методам решения экстремальных задач; Изд. Моск. унив. 1974.

erschienen in:

Numerische Behandlung mathematischer Modellgleichungen, Vorträge auf der 1. Tagung zu Problemen der Angewandten Mathematik 1980; Akad. der Wissensch. der DDR, ZIMM, Report R-09/80, Berlin 1980, 86-91.