

Angewandte Mathematik

Optimale Steuerprozesse
unter partiellen Differentialgleichungs-Restriktionen
mit linear eingehender Steuerfunktion

Inaugural-Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
der Naturwissenschaften im Fachbereich
Mathematik und Informatik
der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster

vorgelegt von
Karsten Theißen
aus Paderborn

- 2006 -

Dekan:	Prof. Dr. K. Hinrichs
Erster Gutachter:	Prof. Dr. H. Maurer
Zweiter Gutachter:	Prof. Dr. F. Tröltzsch
Tag der mündlichen Prüfung:	23.06.2006
Tag der Promotion:	23.06.2006

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Stipendiant im Graduiertenkolleg „Nichtlineare kontinuierliche Systeme und deren Untersuchung mit numerischen, qualitativen und experimentellen Methoden“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft sowie als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Numerische und Angewandte Mathematik der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster in dem DFG-Projekt „Theorie, Numerik und Sensitivitätsanalyse für optimale Steuerprozesse mit linear eingehender Steuerung“.

Herrn Prof. Dr. Helmut Maurer gilt mein herzlicher Dank für die stets wohlwollende und freundliche Betreuung dieser Arbeit sowie für viele hilfreiche Diskussionen.

Für die gründliche und kritische Durchsicht der vorliegenden Arbeit sowie für die interessanten Diskussionen und die stets hilfreichen Denkanstöße danke ich Dr. Georg Vossen und Dr. Roland Griesse.

Mein ganz besonderer Dank gilt meiner Familie, die mich während der gesamten Promotionsphase liebevoll unterstützt hat.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
1. Funktionalanalytische Grundlagen	5
1.1. Sobolev-Räume	5
1.2. Lösungsräume für parabolische Differentialgleichungen	8
1.3. Schwache Lösungen in $\mathbb{W}(0, T)$	9
2. Nichtlineare Optimierungsprobleme	11
2.1. Problemformulierung	11
2.2. Optimalitätsbedingungen	13
2.3. Innere-Punkte-Methoden	14
2.3.1. Innere-Punkte-Methoden	14
2.3.2. IPOPT (Interior Point Optimizer)	15
2.3.3. AMPL (A Modeling Language for Mathematical Programming)	16
3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen	17
3.1. Die semilineare elliptische Modellgleichung	17
3.2. Semilineare elliptische optimale Steuerprozesse mit verteilter Steuerung	19
3.2.1. Auswertung der notwendigen Optimalitätsbedingungen	23
3.2.2. Linear eingehende Steuerung	24
3.3. Umwandlung eines elliptischen optimalen Steuerprozesses in ein NLOP	26
3.3.1. Diskretisierungsschemata für elliptische Differentialgleichungen	26
3.3.1.1. Fünfpunkt-Stern	28
3.3.1.2. Neunpunkt-Stern	29
3.3.2. Identifizierung der Lagrange-Multiplikatoren im optimalen Steuerprozess	29
3.4. Semilineare elliptische Beispiele	32
3.4.1. Das Poisson-Problem mit Dirichlet-Randbedingungen	32
3.4.1.1. Beispiel eines Poisson-Problems mit verteilter Steuerung	37
3.4.1.2. Beispiel eines Poisson-Problems mit eingeschränktem Wirkungsbereich der Steuerung	40
3.4.2. Semilineare elliptische Beispiele mit einer kubischen Nichtlinearität	43
3.4.2.1. Dirichlet-Randbedingungen	43
3.4.2.2. von-Neumann-Randbedingungen	47
3.5. Total singuläre Steuerungen	48
3.6. Semilineare elliptische optimale Steuerprozesse mit Randsteuerungen	56

4. Optimale Steuerung von semilinearen parabolischen Gleichungen	63
4.1. Die semilineare parabolische Modellgleichung	63
4.2. Notwendige Optimalitätsbedingungen für semilineare parabolische Steuerprobleme	64
4.3. Umwandlung eines parabolischen optimalen Steuerprozesses in ein NLOP	66
4.3.1. Diskretisierungsschemata für parabolische Differentialgleichungen	66
4.3.2. Identifizierung der Lagrange-Multiplikatoren im optimalen Steuerprozess	70
4.4. Trackingprobleme mit verteilter Steuerung	73
4.5. Optimale Steuerung des instationären Supraleitung-Modells	75
4.6. Anwendung des Lagrange-Prinzips auf OSP mit parabolischen Restriktionen	82
4.7. Optimale Steuerung von Reaktions-Diffusions-Systemen	83
4.7.1. Reaktions-Diffusions-Modell eines Gasentladungssystems	84
4.7.2. Musterbildung bei Säugetieren	92
5. Ansteuerung stationärer Lösungen von Evolutionsgleichungen	101
5.1. Instantane Kontrolle zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen	102
5.1.1. Beschreibung der Funktionsweise einer instantanen Kontrolle	102
5.1.2. Ein einfaches Beispiel	105
5.2. Anwendungsbeispiele	108
5.2.1. Solitonenmodell	108
5.2.2. Musterbildungsmodell	109
5.2.3. Wasserstrahlschneiden	111
Zusammenfassung und Ausblick	123
A. Tabellen und Abkürzungen	125
B. Beispiel einer AMPL-Datei	127
Abbildungsverzeichnis	129
Literaturverzeichnis	131

Einleitung

Differentialgleichungen spielen eine entscheidende Rolle bei der mathematischen Modellierung phänomenologischer Prozesse aus Wirtschaft, Natur und Technik. Besonders partielle Differentialgleichungen, d. h. Gleichungen die eine Funktion und deren partielle Ableitungen enthalten, sind in wissenschaftlichen Modellen unabdingbar, um eine möglichst detailgetreue Abbildung der Realität zu schaffen. Vor allem die Naturwissenschaften Physik, Chemie, Biologie, Geologie sowie die Ingenieur- und Wirtschaftswissenschaften liefern eine große Zahl an Problemen, die durch partielle Differentialgleichungen beschrieben werden.

Oft möchte man diese Systeme von außen beeinflussen, um einen bestimmten Effekt zu erzielen. Dazu wird eine manipulierbare Zustandsgröße im System ausgewählt und als Steuergröße aufgefasst. Gesucht ist dann eine Steuerfunktion, die den Prozess unter bestimmten Zielvorgaben und Nebenbedingungen optimiert. Wir sprechen in diesem Zusammenhang von einem optimalen Steuerprozess, welcher seinen Ursprung in der klassischen Variationsrechnung besitzt. Neben den typischen Anwendungsgebieten in Industrie und Wirtschaft können optimale Steuerprozesse unter partiellen Differentialgleichungs-Restriktionen auch in unserem Alltag vorkommen. Betrachten wir beispielsweise den physikalischen Prozess des Garen einer Kartoffel auf einem Stock über einem Lagerfeuer. Die Zielvorgabe liegt darin, die Kartoffel in zehn Minuten überall auf eine mundgerechte Temperatur von beispielsweise 42 Grad Celsius zu bringen. Über das Drehen und Wenden der Kartoffel über dem Feuer können wir die Temperatur an der Oberfläche steuern. Mit der Zeit wird sich die angelegte Wärme am Rand auf das Innere der Kartoffel übertragen. Physikalisch wird dieser Aufheizprozess durch eine parabolische Differentialgleichung erster Ordnung beschrieben, die Wärmeleitungsgleichung.

Mit Hilfe der Lagrange-Funktion ist es möglich, notwendige Optimalitätsbedingungen für eine große Klasse von optimalen Steuerprozessen unter partiellen Differentialgleichungs-Restriktionen herzuleiten (vgl. beispielsweise Bergounioux/Tröltzsch [3, 4], Bonnans/Shapiro [7], Lions [43] oder Tröltzsch [68, 69]). In der letztgenannten Referenz zeigt Tröltzsch, dass man auch Optimalitätsbedingungen zweiter Ordnung erhält, wenn die Abbildung, welche einer Steuerung einen eindeutigen Zustand zuordnet, zweimal stetig Fréchet-differenzierbar ist (vgl. auch Casas/Tröltzsch/Unger [11], Mittelman/Tröltzsch [53] und Raymond/Tröltzsch [61]). Geht die Steuerung nur linear ins System ein, wird dies zumeist dadurch erreicht, dass man im Zielfunktional eine quadratische Regularisierung der Steuerfunktion hinzunimmt. In obigem Beispiel würde dies bedeuten, dass wir neben dem ursprünglichen Ziel einer homogenen Temperaturverteilung in der Kartoffel zusätzlich den dazu benötigten Energieaufwand minimierten, obwohl das Lagerfeuer mehr als genug Wärme liefert, die Kartoffel aufzuheizen. Auch wenn es für viele praktische Anwendungen durchaus sinnvoll ist, eine Energieminimierung zusätzlich zur eigentlichen Zielsetzung durchzuführen, existieren auch ebenso viele Beispiele, in denen man auf eine Regularisie-

rung verzichten möchte oder gar muss. Dies führt auf optimale Steuerprozesse mit einer linear eingehenden Steuerfunktion.

Generell treten drei verschiedene Arten von optimalen Steuerungen bei Problemen mit linear eingehender Steuerung auf. Die Steuerung ist entweder auf dem kompletten Gebiet bang-bang, d. h. sie verläuft auf den Rändern des Steuerbereichs, sie ist überall singulär (auch total singulär genannt), oder sie besteht sowohl aus bang-bang als auch aus singulären Teilstücken. Solche Steuerungen bezeichnen wir auch als bang-singulär. Da erst in jüngster Zeit hinreichende Optimalitätsbedingungen für optimale Steuerprozesse mit gewöhnlichen Differentialgleichungs-Restriktionen und linear eingehender Steuerung gezeigt wurden (vgl. Agrachev et al. [1], Milyutin/Osmolovskii [51] und Osmolovskii/Maurer [58] für bang-bang, Dmitruk [15, 16] für singuläre und Vossen [74] für bang-singuläre Steuerungen), muss man sich im Allgemeinen bei partiellen Differentialgleichungs-Restriktionen auf die Auswertung der notwendigen Optimalitätsbedingungen beschränken. Während das bang-bang-Prinzip in diesem Fall sehr ausführlich in der Literatur diskutiert wird (vgl. beispielsweise Eppler/Tröltzsch [18], Gruver/Sachs [28], Glashoff/Sachs [22], Glashoff/Weck [23], Karafiat [38], Knowles [40], Mackenroth [45], Schmidt [62], Tröltzsch [67, 68, 69]), werden singuläre bzw. bang-singuläre Steuerungen bislang nur wenig behandelt. Daher ist es ein Ziel dieser Arbeit, anhand der bekannten notwendigen Optimalitätsbedingungen durch Differentiation der Schaltbedingung explizite Darstellungen für singuläre bzw. bang-singuläre Steuerungen herzuleiten und an einer Vielzahl von Beispielen numerisch zu verifizieren (vgl. Kapitel 3 und 4).

Wir werden in dieser Arbeit direkte Methoden benutzen, um die optimalen Steuerprozesse numerisch zu behandeln. Dieser so genannte „first discretize then optimize“-Ansatz beruht auf der Idee, alle vorkommenden Integrale und Differentialgleichungen passend zu diskretisieren und dann das resultierende nichtlineare Optimierungsproblem, was eine große Zahl an Optimierungsvariablen besitzt, zu lösen. Diese Methoden wurden bereits erfolgreich in Maurer/Mittelmann [49, 50, 52] zur Lösung elliptischer Steuerprozesse mit Steuer- und Zustandsbeschränkungen benutzt. Da die numerische Behandlung solch großer Systeme extrem schwierig ist, greifen wir dabei auf den „large-scale“ Optimierungssolver IPOPT von Laird/Wächter [41, 65] zurück. Dieser beruht auf den in Kapitel 2 beschriebenden Innere-Punkte-Algorithmus, welcher sich als guter Ansatz für diese Art von Problemen herausgestellt hat. Um die numerische Lösung des Optimierungsproblems mit den notwendigen Optimalitätsbedingungen des kontinuierlichen Problems vergleichen zu können, werden wir in Kapitel 3 und 4 für verschiedene Gleichungstypen und Randbedingungen beweisen, dass nach einer passenden Skalierung die Lagrange-Multiplikatoren des Optimierungsproblems die diskrete Form der adjungierten Variablen aus dem Ursprungsproblem darstellt.

Ein wichtiges Anwendungsgebiet für optimale Steuerprozesse mit linear eingehender Steuerfunktion liegt in der Ansteuerung stationärer Zustände von nichtlinearen Evolutionsgleichungen. Hier muss auf eine Regularisierung der Steuerung verzichtet werden, um im Rahmen der numerischen Genauigkeit die stationären Zustände möglichst exakt anzusteuern. Wir werden uns in diesem Zusammenhang in Kapitel 4 vor allem mit so genannten Reaktions-Diffusions- oder genauer gesagt Aktivator-Inhibitor-Systemen beschäftigen, die eine besondere Bedeutung bei physikalischen, chemischen und biologischen Muster-

bildungsprozessen besitzen. Als ein numerisch besonders schwieriges Problem hat sich dabei ein biologisches Modell von Murray [55, 56, 47] herausgestellt, welches sich mit der Musterbildung von Säugetieren beschäftigt.

Auch bei industriellen Prozessen spielt die Ansteuerung stationärer Zustände eine wichtige Rolle. Beispielsweise möchte man beim Durchtrennen verschiedener Materialien mit einem Abrasiv-Wasserstrahlschneider ein glattes stationäres Schnittprofil erreichen. Wie in den Arbeiten von Radons [60] und Friedrich et al. [21] gezeigt wird, kann man die Dynamik dieses Prozesses durch die verallgemeinerte Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung beschreiben. Darauf aufbauend werden wir im letzten Kapitel einen optimalen Steuerprozess modellieren dessen Zielsetzung darin besteht, durch Berechnung einer dynamische Vorschubgeschwindigkeit solche glatten stationären Schnittfronten mit einer möglichst hohen Schnitttiefe anzusteuern. Da sich die numerische Behandlung dieses Prozesses mit direkten Methoden als extrem schwierig herausgestellt hat, werden wir für die Berechnung einer „optimalen“ Vorschubgeschwindigkeit auf Methoden zurückgreifen, die nur eine suboptimale Steuerung bestimmen. Der von uns benutzte Algorithmus der so genannten instantanen Kontrolle wird ebenfalls in Kapitel 5 beschrieben und basiert auf Ideen von „model-predictive-control“-Methoden für gewöhnliche Differentialgleichungen (vgl. beispielsweise Ito/Kunisch [36] oder Camacho/Bordons [10]) bzw. von „instantaneous control“-Methoden für die Burgers- und Navier-Stokes-Gleichung (vgl. Hinze et al. [31, 33, 34]).

1. Funktionalanalytische Grundlagen

Da das Lösen von Differentialgleichungen in dieser Arbeit eine bedeutende Rolle spielt, werden wir in diesem einführenden Kapitel die funktionalanalytischen Grundlagen der Räume integrierbarer Funktionen beschreiben. Ein fundamentaler Begriff bei der Betrachtung partieller Differentialgleichungen ist der so genannte Sobolev-Raum, den wir im folgenden Kapitel vorstellen werden.

1.1. Sobolev-Räume

Es sei im Folgenden $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n = 1, 2, 3$, ein beschränktes Gebiet mit Rand $\Gamma := \partial\Omega$. Für ein Ortsgebiet mit Dimension $n = 1$ besteht sein Rand nur aus zwei Punkten, so dass keine weitere Klassifizierung notwendig ist. Für $n \geq 2$ betrachte man nur Gebiete mit einem so genannten Lipschitz- oder $C^{0,1}$ -Rand. Wir sagen, Ω hat einen Lipschitz-Rand bzw. Ω ist ein Lipschitz-Gebiet, falls ein $d \in \mathbb{N}$ und offene Mengen $M_1, \dots, M_d \in \mathbb{R}^n$ existieren, so dass

1. $\Gamma \subset \bigcup_{1 \leq i \leq d} M_i$ und
2. jeder Teilrand $\Gamma \cap M_i$ als Graph einer Lipschitz-stetigen Funktion darstellbar ist.

Für eine exakte Definition eines $C^{k,1}$ -Randes ($k \in \mathbb{N}_0$) sei auf Nečas [57] verwiesen.

Für einen Randpunkt sei $x \in \Gamma$ der Vektor $v = v(x)$ der nach außen gerichtete Normalenvektor auf Γ . Die äußere Normalenableitung einer Funktion $y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ im Punkte $x \in \Gamma$ wird mit $\partial_v y(x)$ bezeichnet.

Für jedes $1 \leq p < \infty$ bezeichnen wir mit $\mathbb{L}^p(\Omega)$ den Raum aller messbaren Funktionen $y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit der Eigenschaft

$$\int_{\Omega} |y(x)|^p dx < \infty.$$

Dabei werden Funktionen, die sich nur auf einer Menge vom Maß Null unterscheiden, als gleich angesehen und derselben Äquivalenzklasse zugeordnet. Mit $\mathbb{L}^\infty(\Omega)$ bezeichnen wir den Raum der fast überall beschränkten und messbaren Funktionen $y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Die Räume $\mathbb{L}^p(\Omega)$, $1 \leq p \leq \infty$, stellen mit den folgenden Normen Banachräume dar:

$$\|y\|_{\mathbb{L}^p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |y(x)|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad \|y\|_{\mathbb{L}^\infty(\Omega)} = \operatorname{ess\,sup}_{x \in \Omega} |y(x)|.$$

An dieser Stelle soll es sup das so genannte **essentielle** oder **wirkliche Supremum** bedeuten, d. h. das Supremum der Funktion ohne die Berücksichtigung von Mengen mit Maß Null.

Im Folgenden bezeichne der Vektor natürlicher Zahlen $\zeta = (\zeta_1, \zeta_2, \zeta_3) \in \mathbb{N}_0^3$ einen so genannten **Multiindex**. Dieser wird benötigt, um anzugeben, wie häufig eine Funktion $y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ nach den jeweiligen Ortskomponenten x_1, x_2, x_3 von Ω differenziert wird. Die abkürzende Schreibweise einer **Ortsableitung** sei damit wie folgt definiert:

$$D^\zeta y := D_1^{\zeta_1} D_2^{\zeta_2} D_3^{\zeta_3} y := \frac{\partial^{|\zeta|} y}{\partial x_1^{\zeta_1} \partial x_2^{\zeta_2} \partial x_3^{\zeta_3}},$$

wobei $|\zeta| := \zeta_1 + \zeta_2 + \zeta_3$ die **Ordnung** der Ortsableitung angibt. Für Probleme mit einer Dimension $n < 3$ setzt man in der obigen Definition die nicht benötigten Komponenten im Multiindex auf Null. Besondere Multiindizes stellen die Einheitsvektoren $e_i \in \mathbb{R}^n$, $1 \leq i \leq n$, dar, weil sie die „**einfachen**“ Ableitungen

$$D_i y := D^{e_i} y = \frac{\partial y}{\partial x_i}$$

von y nach nur einer Ortskomponente definieren.

Mit $C(\bar{\Omega})$ wird der Raum aller auf dem Abschluss von Ω stetigen und reellwertigen Funktionen sowie mit $C^k(\bar{\Omega})$ ($0 \leq k \leq \infty$) der Raum aller auf $\bar{\Omega}$ k -mal stetig partiell differenzierbaren reellwertigen Funktionen bezeichnet. Versehen mit den Normen

$$\|y\|_{C(\bar{\Omega})} = \max_{x \in \bar{\Omega}} |y(x)|, \quad \|y\|_{C^k(\bar{\Omega})} = \max_{x \in \bar{\Omega}} \sum_{|\zeta| \leq k} |D^\zeta y(x)|$$

sind diese Banachräume.

Für die spätere Definition von schwachen Ableitungen benötigen wir Funktionen, die auf dem Rand von Ω den Wert Null besitzen und daher bei der partiellen Integration verschwindende Randintegrale liefern. Diese so genannten **Testfunktionen** stammen aus dem Raum

$$C_0^\infty(\Omega) := \left\{ v \in C^\infty(\Omega) \mid \text{supp}(v) := \overline{\{x \in \Omega \mid v(x) \neq 0\}} \subset \Omega \right\},$$

der Menge aller beliebig oft stetig differenzierbaren Funktionen $v : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit kompaktem Träger in Ω . Der **Träger** von v ist die kleinste abgeschlossene Teilmenge von Ω , außerhalb der v identisch verschwindet.

Mit den obigen Betrachtungen kann man nun die folgende wichtige Verallgemeinerung des klassischen Ableitungsbegriffs definieren. Darin bezeichnet $\mathbb{L}_{loc}^1(\Omega)$ die Menge aller in Ω lokal integrierbarer Funktionen, d.h. Funktionen, die auf jeder kompakten Teilmenge von Ω im Lebesgue'schen Sinne integrierbar sind.

Definition 1.1.1 (Schwache Ortsableitungen in Ω).

Es seien $y \in \mathbb{L}_{loc}^1(\Omega)$ und ein Multiindex $\zeta \in \mathbb{N}_0^3$ gegeben. Existiert eine Funktion $w \in \mathbb{L}_{loc}^1(\Omega)$, so dass

$$\int_{\Omega} y(x) D^\zeta v(x) \, dx = (-1)^{|\zeta|} \int_{\Omega} w(x) v(x) \, dx$$

für alle $v \in C_0^\infty(\Omega)$ erfüllt ist, so heißt w die *schwache Ortsableitung* der Ordnung $|\zeta|$ von y , welche wir mit $w = D^\zeta y$ bezeichnen.

Da der Raum $\mathbb{L}_{\text{loc}}^1(\Omega)$ mathematisch eher unhandlich ist, interessiert man sich besonders für schwache Ableitungen, die den Räumen $\mathbb{L}^p(\Omega)$ angehören. Dies führt uns zur

Definition 1.1.2 (Sobolev-Räume).

Es seien $1 \leq p < \infty$ und $k \in \mathbb{N}$. Mit $\mathbb{W}^{k,p}(\Omega)$ bezeichnet man den Raum aller $y \in \mathbb{L}^p(\Omega)$, für welche die schwachen Ableitungen $D^\zeta y$ für alle Multiindizes ζ mit $|\zeta| \leq k$ existieren und ebenfalls zu $\mathbb{L}^p(\Omega)$ gehören. Mit der Norm

$$\|y\|_{\mathbb{W}^{k,p}(\Omega)} := \left(\sum_{|\zeta| \leq k} \int_{\Omega} |D^\zeta y(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}$$

ist $\mathbb{W}^{k,p}(\Omega)$ ein Banachraum und wird als *Sobolev-Raum* bezeichnet. Analog wird $\mathbb{W}^{k,\infty}(\Omega)$ für $p = \infty$ eingeführt und mit der Norm

$$\|y\|_{\mathbb{W}^{k,\infty}(\Omega)} := \max_{|\zeta| \leq k} \|D^\zeta y(x)\|_{\mathbb{L}^\infty(\Omega)}$$

versehen.

Da der Fall $p = 2$ von besonderem Interesse ist, kürzt man den entsprechenden Sobolev-Raum durch

$$\mathbb{H}^k(\Omega) := \mathbb{W}^{k,2}(\Omega) \quad \forall k \in \mathbb{N}$$

ab. In der Literatur wird der Raum

$$\mathbb{H}^1(\Omega) := \mathbb{W}^{1,2}(\Omega) = \{y \in \mathbb{L}^2(\Omega) \mid D_i y \in \mathbb{L}^2(\Omega) \quad \forall i = 1, \dots, n\}$$

zusammen mit der Norm

$$\|y\|_{\mathbb{H}^1(\Omega)} := \left(\int_{\Omega} (y^2(x) + |\nabla y(x)|^2) dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

sehr häufig gebraucht. In der obigen Definition sei $|\nabla y|^2 := (D_1 y)^2 + \dots + (D_n y)^2$.

Definition 1.1.3 (Die Vervollständigung der Sobolev-Räume).

Die Vervollständigung von $C_0^\infty(\Omega)$ in $\mathbb{W}_0^{k,p}(\Omega)$ bezeichnet man mit $\mathbb{W}_0^{k,p}(\Omega)$. Dieser Raum wird mit derselben Norm wie $\mathbb{W}^{k,p}(\Omega)$ versehen und ist ein abgeschlossener Teilraum von $\mathbb{W}^{k,p}(\Omega)$. Insbesondere definiert man $\mathbb{H}_0^k(\Omega) := \mathbb{W}_0^{k,2}(\Omega)$.

Wir werden in dieser Arbeit häufig $\mathbb{H}_0^1(\Omega)$, den Raum der \mathbb{H}^1 -Funktionen mit kompaktem Träger in Ω , als Lösungsraum für elliptische Probleme mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen benutzen.

1.2. Lösungsräume für parabolische Differentialgleichungen

Ein großer Teil dieser Arbeit besteht aus der Beschreibung von Lösungen zeitabhängiger parabolischer Differentialgleichungen. Die zu behandelnden Funktionen sind dabei nicht auf einem reinen Ortsgebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n = 1, 2, 3$, sondern auf dem Raum-Zeit-Zylinder $Q := \Omega \times (0, T)$ definiert. Sie beschreiben auf dem Ortsgebiet die Dynamik der betrachteten Größen vom Anfangszeitpunkt $t_0 = 0$ bis zur Endzeit $T > 0$. Für die weiteren Betrachtungen besitze das beschränkte Gebiet Ω einen $C^{1,1}$ -Rand Γ . Der Raum der auf Q quadratisch integrierbarer Funktionen

$$\mathbb{L}^2(Q) := \left\{ y : Q \rightarrow \mathbb{R} \mid \|y\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 < \infty \right\}$$

ist mit der zugehörigen Norm

$$\|y\|_{\mathbb{L}^2(Q)} := \left(\int_0^T \left(\int_{\Omega} y^2(x, t) dx \right) dt \right)^{\frac{1}{2}}$$

ein Banachraum. Von einer klassischen Lösung parabolischer Differentialgleichungen fordert man die Existenz aller auftretenden Ableitungen und deren Stetigkeit im Inneren des Raum-Zeit-Zylinders Q , also $y \in C^{2,1}(Q)$. Für Probleme der optimalen Steuerung ist dies eine zu starke Forderung, da mögliche Steuerungen als Inhomogenitäten auf der rechten Seite zumeist in \mathbb{L}^2 -Räumen liegen. Analog zu den schwachen Ortsableitungen in Ω kann man diesen Begriff auch für Funktionen aus Q definieren.

Definition 1.2.1 (Schwache Ortsableitungen in Q).

Es seien $y \in \mathbb{L}^2(Q)$ und ein Multiindex $\zeta \in \mathbb{N}_0^3$ gegeben. Existiert eine Funktion $w \in \mathbb{L}_{loc}^1(Q)$, so dass

$$\iint_Q y(x, t) D^\zeta v(x, t) dx dt = (-1)^{|\zeta|} \iint_Q w(x, t) v(x, t) dx dt$$

für alle $v \in C_0^\infty(Q)$ erfüllt ist, so heißt w die **schwache Ortsableitung** der Ordnung $|\zeta|$ von y , welche wir mit $w = D^\zeta y$ bezeichnen.

Dadurch ergibt sich für Q ein Analogon zum Raum $\mathbb{H}^1(\Omega)$. Der Raum bestehend aus allen Funktionen $y \in \mathbb{L}^2(Q)$, deren schwache Ortsableitungen erster Ordnung wieder im Raum $\mathbb{L}^2(Q)$ liegen, heißt $\mathbb{W}_2^{1,0}(Q)$. Versehen mit der Norm

$$\|y\|_{\mathbb{W}_2^{1,0}(Q)} := \left(\|y\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|\nabla_x y\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

ist $\mathbb{W}_2^{1,0}(Q)$ ein Hilbertraum. Wir benutzen die abkürzende Schreibweise

$$\mathbb{H}^{1,0}(Q) := \mathbb{W}_2^{1,0}(Q) = \left\{ y \in \mathbb{L}^2(Q) \mid D_i y \in \mathbb{L}^2(Q) \quad \forall i = 1, \dots, n \right\}.$$

Für Funktionen $y \in \mathbb{H}^{1,0}(Q)$, deren einfache zeitliche Ableitung auch in $\mathbb{L}^2(Q)$ liegt, benutzt man den Raum

$$\mathbb{H}^{1,1}(Q) := \mathbb{W}_2^{1,1}(Q) := \{y \in \mathbb{L}^2(Q) \mid y_t, D_i y \in \mathbb{L}^2(Q) \quad \forall i = 1, \dots, n\},$$

welcher mit der Norm

$$\|y\|_{\mathbb{H}^{1,1}(Q)} := \|y\|_{\mathbb{W}_2^{1,1}(Q)} := \left(\|y\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|y_t\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|\nabla_x y\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

ein Hilbertraum ist.

Der Raum $\mathbb{H}^{1,1}(Q)$ ist leider nicht der passende Lösungsraum für einen semilinearen parabolischen Steuerprozess, da wir im Allgemeinen nicht erwarten können, dass die zeitliche Ableitung des Zustandes im Raum $\mathbb{L}^2(Q)$ liegt.

1.3. Schwache Lösungen in $\mathbb{W}(0, T)$

Man kann eine Funktion aus dem Raum $\mathbb{W}_2^{1,0}(Q)$ auch als eine „abstrakte Funktion“ betrachten, die jedem Zeitpunkt $t \in [0, T]$ eine Funktion $y(\cdot, t) \in \mathbb{H}^1(\Omega)$ zuordnet. Dieses Konzept der abstrakten Funktionen ist ein gängiges Hilfsmittel bei der Betrachtung von Evolutionsgleichungen geworden.

Wir definieren somit ganz allgemein eine Abbildung aus einem kompakten Intervall $[a, b] \subset \mathbb{R}$ in einen Banachraum X als **abstrakte Funktion**. Auch für abstrakte Funktionen kann ein Stetigkeitsbegriff eingeführt werden. Wir nennen eine abstrakte Funktion $y : [a, b] \rightarrow X$ **stetig** im Punkt t , wenn

$$\lim_{\tau \rightarrow t} \|y(\tau) - y(t)\|_X = 0$$

gilt. Der Raum aller stetigen abstrakten Funktionen wird mit $C(a, b; X)$ bezeichnet.

Unter dem Raum $\mathbb{L}^p(a, b; X)$, $1 \leq p < \infty$, versteht man den Raum aller (Äquivalenzklassen von) messbaren abstrakten Funktionen mit der Eigenschaft

$$\int_a^b \|y(t)\|_X^p dt < \infty.$$

Mit $\mathbb{L}^\infty(a, b; X)$ bezeichnen wir den Raum der (Äquivalenzklassen von) fast überall beschränkten und messbaren abstrakten Funktionen. Diese Räume sind mit den zugehörigen Normen

$$\|y\|_{\mathbb{L}^p(a,b;X)} = \left(\int_a^b \|y(t)\|_X^p dt \right)^{\frac{1}{p}}, \quad \|y\|_{\mathbb{L}^\infty(a,b;X)} = \operatorname{ess\,sup}_{[a,b]} \|y(t)\|_X$$

Banachräume. Es fällt auf, dass die Normen in $\mathbb{H}^{1,0}(Q)$ und $\mathbb{L}^2(0, T; \mathbb{H}^1(\Omega))$ identisch sind und sogar

$$\mathbb{H}^{1,0}(Q) \cong \mathbb{L}^2(0, T; \mathbb{H}^1(\Omega))$$

gilt, d. h., dass jede Funktion aus $\mathbb{H}^{1,0}(Q)$ durch Abänderung auf einer Menge vom Maß Null zu einer Funktion aus $\mathbb{L}^2(0, T; \mathbb{H}^1(\Omega))$ wird und umgekehrt. Eine Beweiskonstruktion dazu findet sich in Hille/Phillips [29] sowie weitere Informationen zu abstrakten Funktionen z.B. in Emmerich [17] oder Wloka [77]. Dies führt uns zur

Definition 1.3.1 (Der Raum $\mathbb{W}(0, T)$).

Unter $\mathbb{W}(0, T; \mathbb{H}^1(\Omega))$ oder kurz $\mathbb{W}(0, T)$ versteht man dem Raum aller Funktionen $y \in \mathbb{L}^2(0, T; \mathbb{H}^1(\Omega))$ mit (distributioneller) Ableitung $y' \in \mathbb{L}^2(0, T; \mathbb{H}^1(\Omega)^*)$, also

$$\mathbb{W}(0, T) := \left\{ y \in \mathbb{L}^2(0, T; \mathbb{H}^1(\Omega)) \mid y' \in \mathbb{L}^2(0, T; \mathbb{H}^1(\Omega)^*) \right\}.$$

Er wird versehen mit der Norm

$$\|y\|_{\mathbb{W}(0, T)} := \left(\int_0^T \left(\|y(t)\|_{\mathbb{H}^1(\Omega)}^2 + \|y'(t)\|_{\mathbb{H}^1(\Omega)^*}^2 \right) dt \right)^{\frac{1}{2}}.$$

2. Nichtlineare Optimierungsprobleme

Um die später betrachteten optimalen Steuerprozesse numerisch lösen zu können, werden wir sie zunächst durch Diskretisierungstechniken in nichtlineare Optimierungsprobleme verwandeln, für welche die Theorie von notwendigen und hinreichenden Optimalitätsbedingungen vollständig untersucht wurde. Besteht die Dynamik des ursprünglichen Steuerprozesses dabei aus gewöhnlichen Differentialgleichungen, kann man eine numerische Lösung vergleichsweise einfach durch solche Methoden berechnen. Treten im Ausgangsproblem allerdings eine oder mehrere partielle Differentialgleichungen auf, kann die Dimension des resultierenden Optimierungsproblems sehr groß werden. Neben den bekannten SQP¹-Methoden haben sich zur Lösung besonders großer nichtlinearer Systeme Innere-Punkte-Methoden als gutes Werkzeug herausgestellt. Da die Entwicklung solcher Algorithmen ein eigenes Forschungsgebiet darstellt, haben wir auf die bereits implementierten Routinen LOQO² und IPOPT³ (**I**nterior **P**oint **O**ptimizer) zurückgegriffen. Gerade der letztgenannte Solver eignet sich hervorragend zur Lösung von nichtlinearen Optimierungsproblemen mit einer großen Anzahl an Optimierungsvariablen und Nebenbedingungen.

2.1. Problemformulierung

Gegeben seien $N \in \mathbb{N}$, eine zu minimierende Funktion $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ sowie eine Menge $S \subset \mathbb{R}^N$, in der das gesuchte Minimum liegen soll. Ein allgemeines nichtlineares Optimierungsproblem in der N -dimensionalen Optimierungsvariablen y lautet

$$\begin{array}{ll} \text{minimiere} & f(y) \\ \text{unter} & y \in S. \end{array} \tag{2.1}$$

Definition 2.1.1 (Lokale Minimalstelle).

Ein Punkt $y^* \in \mathbb{R}^N$ heißt lokale Minimalstelle von (2.1), falls eine Umgebung $\mathcal{U}(y^*) \subset \mathbb{R}^N$ von y^* existiert, so dass gilt:

$$f(y^*) \leq f(y) \quad \forall y \in \mathcal{U}(y^*) \cap S.$$

Falls sogar die Bedingung

$$f(y^*) < f(y) \quad \forall y \in \mathcal{U}(y^*) \cap S, \quad y \neq y^*$$

¹Sequential Quadratic Programming

²Robert J. Vanderbei: <http://www.princeton.edu/~rvdb/>

³Andreas Wächter, Carl Laird: <http://projects.coin-or.org/Ipopt/>

2. Nichtlineare Optimierungsprobleme

erfüllt ist, nennen wir die Minimalstelle *streng*.

Häufig kann die Menge S als eine Kombination von Gleichungs- und Ungleichungsrestriktionen angegeben werden. In diesem Fall definiert man

$$S := \{y \in \mathbb{R}^N \mid g_i(y) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, k, \quad g_i(y) \leq 0 \quad \forall i = k + 1, \dots, m\}.$$

Diese Menge führt zur

Definition 2.1.2 (Standardproblem).

Gegeben seien die differenzierbare Funktion $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ und die stetig differenzierbare Abbildung $g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^m$. Dann bezeichnen wir das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} &\text{minimiere} && f(y) \\ &\text{unter} && g_i(y) = 0 \quad i = 1, \dots, k, \\ &&& g_i(y) \leq 0 \quad i = k + 1, \dots, m, \end{aligned} \tag{2.2}$$

als *Standardproblem*. Einen Punkt $y \in S \subset \mathbb{R}^N$ nennen wir *zulässig*.

Für die weiteren Betrachtungen ist es wichtig, wo ein zulässiger Punkt von (2.2) liegt. Aus diesem Grund betrachten wir die folgenden Indexmengen:

Definition 2.1.3 (Aktive Indizes).

Für einen zulässigen Punkt $y \in S \subset \mathbb{R}^N$ definieren wir die Indexmengen

$$\begin{aligned} I(y) &:= \{i \in \{k + 1, \dots, m\} \mid g_i(y) = 0\}, \\ I_a(y) &:= I(y) \cup \{1, \dots, k\}. \end{aligned}$$

Die Elemente aus $I_a(y)$ heißen *aktive Indizes*.

Im weiteren Verlauf der Arbeit sei mit dem Zeilenvektor

$$f'(y) := \left(\frac{\partial f}{\partial y_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial y_N} \right)$$

bzw. mit dem Spaltenvektor

$$\nabla f(y) := f'(y)^T$$

der Gradient einer Funktion $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ bezeichnet. Demzufolge definieren wir für eine Funktion $g : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^m$ mit die Jakobimatrix $g'(y)$ als die $m \times N$ -Matrix:

$$g'(y) := \begin{pmatrix} g'_1(y) \\ \vdots \\ g'_m(y) \end{pmatrix}.$$

2.2. Optimalitätsbedingungen

Für ein Problem der Form (2.1) werden wir hier notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung aufzeigen. Für Bedingungen zweiter Ordnung konsultiere man z. B. Fiacco [19].

Satz 2.2.1 (Notwendige Optimalitätsbedingungen)⁴

Sei $y^* \in S \subset \mathbb{R}^N$ eine lokale Minimalstelle des Standardproblems (2.2). Dann gilt:

1. Es existiert ein Vektor $(p_0, p)^T \in \mathbb{R}_0^+ \times \mathbb{R}^m \setminus \{(0, 0^m)\}$ mit

$$p_0 f'(y^*) - \sum_{i \in I_a(y^*)} p_i g'_i(y^*) = 0 \quad \text{und} \quad -p_i \geq 0 \quad \forall i \in I(y^*).$$

2. Ist y^* regulär, so ist $p_0 \neq 0$ und man kann in 1. o.B.d.A. $p_0 = 1$ setzen.
3. Ist y^* normal, so ist $p \in \mathbb{R}^m$ durch $p_0 = 1$ eindeutig bestimmt.

Einen Beweis für diesen Satz gibt Luenberger [44]. Für eine Definition von regulären bzw. normalen Punkten konsultiere man Maurer [48], Werner [76], Zowe/Kurcyusz [79] sowie ebenfalls Luenberger [44]. Für eine weitere Charakterisierung einer Minimalstelle des Standardproblems betrachte man den folgenden Satz

Satz 2.2.2 (Variationsungleichung).

Sei $y^* \in S \subset \mathbb{R}^N$ eine reguläre lokale Minimalstelle des Optimierungsproblems (2.2). Dann gilt die Variationsungleichung

$$f'(y^*)v \geq 0$$

für alle Vektoren $v \in \mathbb{R}^N$, mit der Eigenschaft:

$$\begin{aligned} g'_i(y^*)v &\leq 0 \quad \forall i \in I(y^*), \\ g'_i(y^*)v &= 0 \quad i = k+1, \dots, m. \end{aligned}$$

Ein Beweis findet sich beispielsweise in Zowe/Kurcyusz [79] oder in Maurer [48].

Definition 2.2.3 (Lagrange-Funktion).

Gegeben sei ein Optimierungsproblem der Form (2.2) mit einem regulären Punkt $y \in S \subset \mathbb{R}^N$. Mit $p \in \mathbb{R}^m$ definieren wir

$$\mathcal{L}(p, y) := f(y) - p^T g(y)$$

als die *Lagrange-Funktion* des Optimierungsproblems (2.2). Dabei heißen die Komponenten p_i , $i = 1, \dots, m$, *Lagrange-Multiplikatoren*. Einen regulären Punkt y , der die Bedingung 1. aus Satz 2.2.1 erfüllt, nennen wir einen *kritischen Punkt*.

⁴von John und Karush-Kuhn-Tucker

2.3. Anwendung von Innere-Punkte-Methoden zur numerischen Lösung nichtlinearer Optimierungsprobleme

Möchte man ein nichtlineares Optimierungsproblem der Form (2.2) numerisch lösen, gibt es dafür viele verschiedene Möglichkeiten. Eine Möglichkeit stellen Innere-Punkte-Methoden dar, deren Besonderheit in einer Ersetzung der Nebenbedingungen durch einen logarithmischen Barriereterm im Zielfunktional liegt. Damit wird sichergestellt, dass man bei jedem Iterationsschritt im zulässigen Bereich des Optimierungsproblems bleibt. Im Folgenden wollen wir kurz die Funktionsweise dieses Optimierungsverfahrens beschreiben.

2.3.1. Innere-Punkte-Methoden

Gegeben sei das nichtlineare Optimierungsproblem

$$\begin{aligned} &\text{minimiere} && f(y) \\ &\text{unter} && g_i(y) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m, \end{aligned} \tag{2.3}$$

mit einer zweimal stetig differenzierbaren Funktion $f : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ und einer zweimal stetig partiell differenzierbaren Funktion $g := (g_1, \dots, g_m)^T : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^m$ sowie einem Optimierungsvektor $y \in \mathbb{R}^N$. Man beachte, dass (2.3) eine allgemeine Schreibweise von (2.2) darstellt, in der nicht zwischen Gleichungs- und Ungleichungsrestriktionen unterschieden wird.

Durch die Einführung der Schlupfvariable $w := (w_1, \dots, w_m)^T$ kann man (2.3) äquivalent in ein Optimierungsproblem mit Gleichungsrestriktionen und einer Vorzeichenbedingung für die Schlupfvariable umwandeln:

$$\begin{aligned} &\text{minimiere} && f(y) \\ &\text{unter} && g(y) - w = 0, \\ &&& w \leq 0. \end{aligned} \tag{2.4}$$

Die Subtraktion eines logarithmischen Barriereterms im Kostenfunktional bewirkt die Elimination aller Ungleichungsrestriktionen, ohne den Charakter des Problems zu verändern:

$$\begin{aligned} &\text{minimiere} && f(y) - \mu \sum_{i=1}^m \log(-w_i) \\ &\text{unter} && g(y) - w = 0. \end{aligned} \tag{2.5}$$

Die Größe des Barriereparameters $\mu > 0$ spielt dabei eine wichtige Rolle für die Konvergenzgeschwindigkeit des Verfahrens. Die Lagrange-Funktion von (2.5) ergibt sich mit dem Lagrange-Multiplikator $p \in \mathbb{R}^m$ zu:

$$\mathcal{L}(y, w, p) = f(y) - \mu \sum_{i=1}^m \log(-w_i) - \sum_{i=1}^m p_i (g_i(y) - w_i).$$

Die Auswertung der notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung ergibt das folgende Gleichungssystem

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_y(y, w, p) &= \nabla f(y) - g'(y)^T p = 0, \\ \mathcal{L}_w(y, w, p) &= \mu W^{-1} e + p = 0, \\ \mathcal{L}_p(y, w, p) &= -g(y) + w = 0,\end{aligned}$$

wobei $W = \text{Diag}(w_1, \dots, w_m)$ und $e = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^m$ darstellen. Durch Multiplikation der zweiten Gleichung mit W erhält man das System:

$$\begin{aligned}\nabla f(y) - g'(y)^T p &= 0, \\ \mu e + W p &= 0, \\ -g(y) + w &= 0.\end{aligned}\tag{2.6}$$

Man sieht sofort, dass die erste Gleichung der dualen und die dritte Gleichung der primären Zulässigkeit entspricht. An dieser Stelle wird klar, warum man das Optimierungsproblem nur mit Gleichungsrestriktionen betrachtet, denn auf (2.6) kann man nun das Newton-Verfahren anwenden, um eine genäherte Lösung von y , p und w zu erhalten. Als zu lösendes Gleichungssystem erhält man in der k -ten Iteration des Newton-Verfahrens

$$\begin{pmatrix} H(y^k, p^k) & 0 & -g'(y^k)^T \\ 0 & P^k & W^k \\ -g'(y^k) & I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y^{k+1} - y^k \\ w^{k+1} - w^k \\ p^{k+1} - p^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\nabla f(y^k) + g'(y^k)^T p^k \\ -\mu e - W^k p^k \\ g(y^k) - w^k \end{pmatrix}, \tag{2.7}$$

wobei die Matrizen H , P^k und W^k definiert sind als:

$$\begin{aligned}H(y^k, p^k) &:= f''(y^k) - \sum_{i=1}^m g_i''(y^k) p_i^k, \\ P^k &:= \text{Diag}(p_1^k, \dots, p_m^k), \quad W^k := \text{Diag}(w_1^k, \dots, w_m^k).\end{aligned}$$

Nahezu alle Innere-Punkte-Verfahren beruhen auf der iterativen Lösung eines Gleichungssystems, welches eine ähnliche Form zu (2.7) besitzt. Wichtige Unterschiede bestehen in der Wahl der Barrierefunktion oder der Benutzung einer Meritfunktion für die Newton-Iteration.

Für weitere Grundlagen der Innere-Punkte-Methode sei auf die Bücher von Hertog, Janzen und Wright [14, 37, 78] verwiesen, während für Feinheiten der einzelnen Programme LOQO [2, 72, 73] und IPOPT [5, 65, 41] die speziellen Veröffentlichungen der Entwickler von Bedeutung sind.

2.3.2. IPOPT (Interior Point Optimizer)

Der Optimierungssolver IPOPT hat sich für unsere Zwecke als ein gutes Werkzeug zur Lösung von optimalen Steuerprozessen mit partiellen Differentialgleichungs-Restriktionen herausgestellt. Bei komplexen nichtlinearen Optimierungsproblemen hat er sich in unseren Beispielen als schneller und stabiler Löser gezeigt. Im Gegensatz zu LOQO und vielen

anderen Solvern ist IPOPT kostenlos⁵, verfügt aber trotzdem über einen ausgezeichneten Support⁶. Für die Installation braucht man neben der aktuellen Version von IPOPT noch einige weitere Routinen. Zunächst benötigt man BLAS⁷ (**B**asic **L**inear **A**lgebra **S**ubroutines), einen sparse Solver wie z.B. MA27⁸ und, falls man mit AMPL arbeiten möchte, noch die **AMPL Solver Library** (ASL)⁵. Für Installationsdetails und mögliche Parameteroptionen (z.B. Wahl des Barriereparameters oder der Konvergenztoleranz) benutze man die IPOPT-Dokumentation [41].

2.3.3. AMPL (A Modeling Language for Mathematical Programming)

Die einfachste Möglichkeit, ein Optimierungsproblem für IPOPT zu formulieren, ist das AMPL⁹-Interface. Diese kommerzielle Modellierungssprache ermöglicht es, mittels einer einfachen Syntax das Optimierungsproblem zu formulieren, dem Löser zu übergeben und dessen Ausgabe weiterzuverarbeiten. Dadurch hat man einen einfachen Zugang zu den Lagrange-Multiplikatoren und die Möglichkeit, adaptive Verfahren in nur wenigen Zeilen zu programmieren (vgl. Kapitel 5). Eine ausgezeichnete Einführung in die Syntax findet man in dem Skript von Gollmer [24], oder im offiziellen Buch von Fourer et. al. [20]. Seit Neuestem existiert eine Google-Newsgroup zum Thema AMPL unter der Adresse <http://groups.google.com/group/ampl>.

Wer die Kosten für AMPL scheut, hat noch andere Möglichkeiten der Problemeingabe für IPOPT. In der Dokumentation [41] wird beschrieben, wie man mittels eines Fortran- oder C++-Interfaces IPOPT die nötigen Informationen übermittelt. Möchte man allerdings ein Problem mit mehreren Solvern lösen oder gar Benchmark-Tests durchführen, sollte man nicht auf eine Modellierungssprache verzichten. Ohne das Programm ändern zu müssen, löst AMPL ein Optimierungsproblem durch Angabe der Option

```
option solver ipopt;
```

einmal mit dem Solver IPOPT und durch

```
option solver loqo;
```

mit LOQO, falls beide Löser auf dem Rechner installiert sind. Dies wäre natürlich mit den anderen Interfaces nicht so einfach möglich. Für alle in dieser Arbeit gezeigten numerischen Ergebnisse wurde AMPL in Kombination mit IPOPT benutzt. LOQO wurde in Einzelfällen als Vergleichsmöglichkeit eingesetzt.

⁵Download unter der IPOPT-Homepage <http://projects.coin-or.org/Ipopt>

⁶Coin-IPOPT-Digest <http://list.coin-or.org/mailman/listinfo/coin-ipopt>

⁷frei verfügbar unter Netlib <http://www.netlib.org>

⁸frei verfügbar unter der Harwell Subroutine Library <http://www.cse.clrc.ac.uk/nag/hsl/>

⁹AMPL-Homepage <http://www.ampl.com>

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

Elliptische Gleichungen stellen eine mathematische Beschreibung stationärer, d. h. zeitlich unabhängiger, naturwissenschaftlicher Phänomene dar. Neben der Simulation physikalischer Prozesse im Gleichgewichtszustand liegt ihr Hauptanwendungsgebiet in der Beschreibung von industriellen Konstruktionsteilen. Die Theorie der optimalen Steuerprozesse mit elliptischen Gleichungsrestriktionen wird genutzt, um Bauteile (z. B. Tragflächen, Stahlprofile oder Fahrzeugkarosserien) mit maximaler Aerodynamik, Härte oder Flexibilität zu entwickeln.

In diesem Kapitel werden wir uns mit der theoretischen sowie numerischen Berechnung von optimalen Steuerungen semilinear elliptischer Probleme beschäftigen. Nach der Zusammenfassung einiger allgemeiner Resultate aus diesem Bereich werden wir speziell Prozesse mit linear eingehender Steuerung betrachten. Diese Probleme führen häufig zu so genannten singulären Steuerungen, für deren Existenz wir Bedingungen und explizite Berechnungsvorschriften herleiten werden.

3.1. Die semilineare elliptische Modellgleichung

Im Folgenden betrachten wir ein beschränktes Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n = 2, 3$, mit einem Lipschitz-Rand Γ .

Definition 3.1.1 (Laplace-Operator).

Sei $y : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine zweimal stetig partiell differenzierbare Funktion. Den Differentialoperator

$$\Delta y := \sum_{i=1}^n D^{2e_i} y = \sum_{i=1}^n D_i D_i y = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 y}{\partial x_i^2}$$

nennen wir *Laplace-Operator* oder auch *Laplace-Term*.

Für Funktionen $y \in \mathbb{H}^1(\Omega)$ verstehen wir die Wirkung des Laplace-Operators im schwachen Sinne (vgl. Definition 1.1.1).

Bemerkung 3.1.2. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass wir im Folgenden auf die Angabe von Argumenten in den auftretenden Funktionen verzichten. Wird nichts

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

anderes angeben, so sind Funktionen in Differentialgleichungen immer auf den Gebieten erklärt, in denen auch die Differentialgleichung definiert ist.

Die Anzahl an unterschiedlichen semilinearen elliptischen Gleichungen ist sehr groß. Je nach auftretenden Nichtlinearitäten und Randbedingungen erhält man Probleme, für die man sowie die Theorie als auch die Numerik einzeln betrachten muss. Wir werden uns in dieser Arbeit nur mit semilinearen elliptischen Randwertproblemen der Form

$$\begin{aligned} -\Delta y + y + d(y) &= s && \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu y + b(y) &= u && \text{in } \Gamma \end{aligned} \tag{3.1}$$

auseinandersetzen. Das elliptische Randwertproblem (3.1) heißt **semilinear**, da die Gleichungen bezüglich des Differentialoperators höchster Ordnung (in diesem Fall des Laplace-Operators) linear sind. Nichtlineare Terme können nur in den Funktionen b und d auftreten, weswegen wir diese auch als die **Nichtlinearitäten** im System bezeichnen werden. Für eine spätere Herleitung von Optimalitätsbedingungen müssen wir einige Forderungen an die möglichen Nichtlinearitäten stellen. Diese halten wir fest in der folgenden

Voraussetzung 3.1.3. *Die Funktionen $d : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $b : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ seien differenzierbar bezüglich y mit $d'(y) \geq 0$ bzw. $b'(y) \geq 0$. Zusätzlich gelten die folgenden lokalen Lipschitz-Bedingungen für die Nichtlinearitäten: Für alle $y_1, y_2 \in [-M, M]$ existieren Konstanten $L_1(M), L_2(M)$, so dass gilt:*

$$\begin{aligned} |d'(y_1) - d'(y_2)| &\leq L_1(M) |y_1 - y_2|, \\ |b'(y_1) - b'(y_2)| &\leq L_2(M) |y_1 - y_2|. \end{aligned}$$

Bemerkung 3.1.4 *Aus Gründen der Übersichtlichkeit werden wir im Folgenden in Integralgleichungen auf die Angabe von Differentialen verzichten. Die jeweiligen Integrationsvariablen können an dem angegebenen Integrationsgebiet abgelesen werden.*

Unter der Voraussetzung 3.1.3 definieren wir eine Funktion $y \in \mathbb{H}^1(\Omega)$ als **schwache Lösung** des Randwertproblems (3.1), falls die **Variationsgleichung** oder **schwache Formulierung**

$$\int_{\Omega} \nabla y \cdot \nabla v + \int_{\Omega} (y + d(y)) \cdot v + \int_{\Gamma} b(y) \cdot v = \int_{\Omega} s \cdot v + \int_{\Gamma} u \cdot v \tag{3.2}$$

für alle $v \in \mathbb{H}^1(\Omega)$ erfüllt ist.

Bei der Formulierung eines optimalen Steuerprozesses mit Restriktionen der Form (3.1) werden die Funktionen s und u mögliche Steuerungen darstellen. Da wir in dieser Arbeit nur Steuerfunktionen aus dem Raum $\mathbb{L}^\infty(\Omega)$ bzw. $\mathbb{L}^\infty(\Gamma)$ zulassen werden, können wir zur Charakterisierung einer optimalen Lösung eine spezielle Form des in Tröltzsch [69] bewiesenen Satzes 4.7 benutzen.

Satz 3.1.5. *Ist die Voraussetzung 3.1.3 erfüllt, so besitzt die semilineare elliptische Randwertaufgabe (3.1) für jedes Paar $s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega)$, $u \in \mathbb{L}^\infty(\Gamma)$ genau eine schwache Lösung $y \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$.*

Eine solche durch s und u vorgegebene schwache Lösung $y \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ nennt man auch den **Zustand** des Systems (3.1). Da die Steuerfunktion $s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega)$ auf dem ganzen Ortsgebiet einen Einfluss auf den Zustand besitzt, nennt man diese eine **verteilte Steuerung**, während $u \in \mathbb{L}^\infty(\Gamma)$ als **Randsteuerung** bezeichnet wird. Wir werden in diesem Kapitel nur Optimierungsprobleme betrachten, in denen entweder eine verteilte oder eine Randsteuerung vorkommt.

Im nächsten Unterabschnitt führen wir einige Begriffe ein, die für beide Arten von Steuerungen gleichermaßen definiert werden können. Der Einfachheit halber werden wir diese Definitionen nur für verteilte Steuerungen darlegen, doch können sie nach einer Ersetzung von s und Ω durch u und Γ auch für Randsteuerungen benutzt werden. Zudem werden wir sie in analoger Weise auch im Falle von parabolischen Restriktionen gebrauchen.

3.2. Semilineare elliptische optimale Steuerprozesse mit verteilter Steuerung

Die Zielsetzung der von uns betrachteten optimalen Steuerprozesse wird es sein, eine verteilte Steuerung $s^* \in \mathbb{L}^\infty(\Omega)$ zu finden, so dass der nach Satz 3.1.5 korrespondierende Zustand $y^* \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ möglichst nah an einer vorgegebenen Wunschfunktion $z : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit $z \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ liegt. In den meisten praktischen Anwendungen wird die anzusteuende Funktion sogar in noch glatteren Räumen, wie z.B. $C^2(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ liegen. Man sucht also eine Lösung der Optimierungsaufgabe

$$\text{minimiere } J(y, s) := \frac{1}{2} \int_{\Omega} (y(x) - z(x))^2 dx \quad (3.3)$$

unter den Nebenbedingungen

$$\begin{aligned} -\Delta y + y + d(y) &= s & \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu y &= 0 & \text{in } \Gamma. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Das Funktional J nennen wir **Kosten-** oder auch **Zielfunktional**. Da in Funktionalen der Form (3.3) die Zielvorgabe darin liegt, eine gewünschte Funktion anzusteuern, bezeichnet man diese auch als **Trackingfunktionale**. Für einige Probleme ist es sinnvoll, im Zielfunktional noch eine quadratische **Regularisierung** der Steuerung zu berücksichtigen. In diesem Fall betrachtet man

$$\text{minimiere } J(y, s) = \frac{1}{2} \left(\int_{\Omega} (y(x) - z(x))^2 dx + \lambda \int_{\Omega} s(x)^2 dx \right) \quad (3.5)$$

als Kostenfunktional. Die Konstante $\lambda \geq 0$ in (3.5) bezeichnen wir als **Regularisierungsparameter**. Zudem haben wir für eine einfachere Auswertung der Optimalitätsbedingungen die Terme mit dem Faktor 0.5 multipliziert. Für (3.5) benutzen wir auch die abkürzende Schreibweise:

$$\text{minimiere } J(y, s) = \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2. \quad (3.6)$$

Dabei ist es häufig nicht möglich, beliebig in das System einzugreifen, sondern es existieren natürliche Beschränkungen für die Steuerung.

Definition 3.2.1 (Steuerbereich).

Es seien Funktionen $s_{\min}, s_{\max} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben mit $s_{\min}, s_{\max} \in \mathbb{L}^\infty(\Omega)$ und $s_{\min}(x) < s_{\max}(x)$ für alle $x \in \Omega$. Die Menge aller zulässigen Steuerungen

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega) \mid s_{\min}(x) \leq s(x) \leq s_{\max}(x) \quad \forall x \in \Omega\} \quad (3.7)$$

heißt Steuerbereich.

Zusammenfassend ergibt sich

Definition 3.2.2 (Optimaler Steuerprozess).

Das Problem

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, s) = \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\ \text{unter} \quad & -\Delta y + y + d(y) = s && \text{in } \Omega, \\ & \partial_\nu y = 0 && \text{in } \Gamma, \\ & s \in S_{ad}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

mit $\lambda \geq 0$ und einem Steuerbereich (3.7) nennen wir im Folgenden einen semilinearen elliptischen optimalen Steuerprozess mit verteilter Steuerfunktion.

Für eine Herleitung von notwendigen Optimalitätsbedingungen für (3.8) müssen wir zunächst die in Satz 3.1.5 angedeutete Abbildung näher spezifizieren.

Definition 3.2.3 (Steuerungs-Zustands-Operator).

Nach Satz 3.1.5 wird unter der Voraussetzung 3.1.3 jeder verteilten Steuerung $s \in S_{ad}$ genau ein Zustand $y \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ als Lösung der semilinearen elliptischen Gleichung in (3.8) zugeordnet. Der zugehörige Steuerungs-Zustands-Operator wird mit

$$G : S_{ad} \longrightarrow \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega}) \quad s \mapsto G(s)$$

bezeichnet. Um zu kennzeichnen, dass ein Zustand y^* in direkter Abhängigkeit zur gewählten Steuerung s^* steht, benutzen wir auch die Schreibweise $y^* := y(s^*) = G(s^*)$.

Mit Hilfe dieser Abbildung können wir den Begriff einer optimalen Steuerung von (3.8) erläutern.

Definition 3.2.4 (Optimale Steuerung).

Gegeben sei der optimale Steuerprozess (3.8). Eine Steuerung $s^* \in S_{ad}$ und ihren korrespondierenden Zustand $y^* = y(s^*)$ nennt man *global optimal*, falls gilt

$$J(y^*, s^*) \leq J(y(s), s) \quad \forall s \in S_{ad}. \quad (3.9)$$

Sie heißen *lokal optimal* im Sinne von $\mathbb{L}^r(\Omega)$ ($r > \frac{n}{2}$), wenn ein $\varepsilon > 0$ existiert, so dass die obige Ungleichung für alle $s \in S_{ad}$ erfüllt ist mit $\|s - s^*\|_{\mathbb{L}^r(\Omega)} \leq \varepsilon$.

Bemerkung 3.2.5. *Immer wenn in dieser Arbeit von Optimalität gesprochen wird, ist eine lokal optimale Lösung gemeint. In den seltenen Fällen in denen globale Optimalität vorliegt, wird dies explizit hervorgehoben.*

Durch die Injektivität des Steuerung-Zustands-Operators G sind wir in der Lage, den optimalen Steuerprozess (3.8) formal nur als Optimierungsproblem in der Variablen s aufzufassen. Wir können damit das Zielfunktional aus (3.8) umschreiben zu

$$F(s) := J(G(s), s) = \frac{1}{2} \|y(s) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2.$$

Da wir den Steuerbereich S_{ad} in (3.8) konvex gewählt haben, gilt für alle Steuerungen $s^*, s \in S_{ad}$, dass für alle $0 < \hat{\alpha} < 1$ auch ihre konvexe Linearkombination

$$r := s^* + \hat{\alpha}(s - s^*)$$

im Steuerbereich S_{ad} liegt. Ist s^* optimal, so gilt nach (3.9) für alle $0 < \alpha \leq \hat{\alpha}$

$$F(s^* + \alpha(s - s^*)) \geq F(s^*).$$

Nach Division durch α folgt im Limes $\alpha \downarrow 0$ das

Lemma 3.2.6 (Variationsungleichung).

Es sei die Voraussetzung 3.1.3 erfüllt. Jede für (3.8) optimale Steuerung $s^ \in S_{ad}$ muss der folgenden Variationsungleichung genügen:*

$$F'(s^*)(s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad}. \quad (3.10)$$

Für das obige Lemma benötigen wir eine Aussage über die Differenzierbarkeit von G . Diese liefert uns der in Tröltzsch [69] bewiesene wichtige Satz 4.15:

Satz 3.2.7. *Unter der Voraussetzung 3.1.3 ist die Abbildung $G : S_{ad} \longrightarrow \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ lokal Lipschitz-stetig und Fréchet-differenzierbar in $s^* \in S_{ad}$ mit Ableitung*

$$G'(s^*)s = y,$$

wobei $y \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ die schwache Lösung des linearisierten Randwertproblems

$$\begin{aligned} -\Delta y + y + d'(y^*)y &= s & \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu y &= 0 & \text{in } \Gamma \end{aligned} \quad (3.11)$$

mit $y^* = G(s^*)$ darstellt.

Damit können wir die für die Variationsungleichung benötigte Ableitung $F'(s^*)$ nach der Kettenregel berechnen:

$$\begin{aligned} F'(s^*)(s - s^*) &= \int_{\Omega} (G(s^*) - z) G'(s^*)(s - s^*) + \lambda \int_{\Omega} s^*(s - s^*) \\ &= \int_{\Omega} (y^* - z) y + \lambda \int_{\Omega} s^*(s - s^*) \geq 0, \end{aligned} \quad (3.12)$$

wobei $y = G'(s^*)(s - s^*)$ gemäß Satz 3.2.7 die Lösung der linearisierten Aufgabe

$$\begin{aligned} -\Delta y + y + d'(y^*)y &= s - s^* && \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu y &= 0 && \text{in } \Gamma, \end{aligned} \tag{3.13}$$

ist. Dies führt uns zur

Definition 3.2.8 (Adjungierter Zustand).

Die Lösung $p \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ der adjungierten Gleichung

$$\begin{aligned} -\Delta p + p + d'(y^*)p &= y^* - z && \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu p &= 0 && \text{in } \Gamma, \end{aligned} \tag{3.14}$$

nennen wir den **adjungierten Zustand** von (3.8).

Als Vorbereitung für die Formulierung der notwendigen Optimalitätsbedingungen beweisen wir zunächst das folgende

Lemma 3.2.9. *Ist $y \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ die schwache Lösung von (3.13) und $p \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ die schwache Lösung von (3.14), dann gilt*

$$\int_{\Omega} (y^* - z) y = \int_{\Omega} (s - s^*) p \tag{3.15}$$

für alle $s \in S_{ad}$.

Beweis: Die Variationsgleichung für (3.13) lautet mit der Testfunktion p

$$\int_{\Omega} [\nabla y \cdot \nabla p + yp + d'(y^*)yp] = \int_{\Omega} (s - s^*) p,$$

während die schwache Formulierung für (3.14) mit Testfunktion y

$$\int_{\Omega} [\nabla p \cdot \nabla y + py + d'(y^*)py] = \int_{\Omega} (y^* - z) y$$

ergibt. Da die Variationsgleichungen für alle Funktionen aus $\mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ gelten müssen und die beiden linken Seiten gleich sind, müssen auch die beiden rechten Seiten gleich sein. ■

Zusammen mit der Umformulierung der Variationsungleichung (3.12) ergibt sich aus dem obigen Lemma die Ungleichung

$$\int_{\Omega} p(s - s^*) + \lambda \int_{\Omega} s^*(s - s^*) \geq 0$$

und damit die gesuchten notwendigen Optimalitätsbedingungen.

Satz 3.2.10. *Unter der Voraussetzung 3.1.3 genügt jede optimale Steuerung s^* des optimalen Steuerprozesses (3.8) gemeinsam mit dem durch (3.14) definierten adjungierten Zustand $p \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ der Variationsungleichung:*

$$\int_{\Omega} (p + \lambda s^*) (s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad}. \tag{3.16}$$

3.2.1. Auswertung der notwendigen Optimalitätsbedingungen

Für die optimalen Steuerprozesse, die wir später betrachten wollen, werden uns keine hinreichenden Optimalitätsbedingungen vorliegen. Trotzdem sind wir in der Lage, durch die Verwandlung des optimalen Steuerprozesses in ein nichtlineares Optimierungsproblem einen Kandidaten für eine optimale Trajektorie (y^*, s^*) numerisch zu bestimmen. Für dieses Tupel möchte man zumindest die notwendigen Optimalitätsbedingungen des kontinuierlichen Problems überprüfen.

Definition 3.2.11 (kritische Trajektorie).

Genügen die Funktionen $s^* \in S_{ad}$ und $p \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ als schwache Lösung des Randwertproblems (3.14) mit $y^* = y(s^*)$ der Variationsgleichung (3.16), so bezeichnen wir die Steuerung s^* bzw. den Zustand y^* als kritisch. Das Tupel (y^*, s^*) nennen wir kritische Trajektorie.

Da die Ungleichung in (3.16) für alle Steuerungen aus dem Steuerbereich gelten muss, kann man die Positivität des Integrals direkt auf den Integranden übertragen. Mit der Definition der Schaltfunktion $\sigma : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

$$\sigma(x) := p(x) + \lambda s^*(x) \tag{3.17}$$

muss eine kritische Steuerung $s^* \in S_{ad}$ der folgenden Schaltbedingung genügen

$$s^*(x) = \begin{cases} s_{\min}(x), & \text{falls } \sigma(x) > 0, \\ \text{unbestimmt}, & \text{falls } \sigma(x) = 0, \\ s_{\max}(x), & \text{falls } \sigma(x) < 0, \end{cases} \tag{3.18}$$

um in (3.16) die Positivität des Integranden für jede zulässige Steuerung $s \in S_{ad}$ zu garantieren.

Im Falle eines regularisierten optimalen Steuerprozesses ($\lambda > 0$) kann man mit der Schaltbedingung (3.18) direkt die Struktur einer kritischen Steuerung ablesen:

$$s^*(x) = \begin{cases} s_{\min}(x), & \text{falls } \sigma(x) > 0, \\ -\frac{p(x)}{\lambda}, & \text{falls } \sigma(x) = 0, \\ s_{\max}(x), & \text{falls } \sigma(x) < 0. \end{cases} \tag{3.19}$$

Damit existiert in diesem Fall nur ein Kandidat für eine kritische Steuerung, nämlich

$$s^*(x) = \text{Proj}_{[s_{\min}(x), s_{\max}(x)]} \left\{ -\frac{p(x)}{\lambda} \right\}. \tag{3.20}$$

Die Abbildung $\text{Proj}_{[s_{\min}(x), s_{\max}(x)]}$ projiziert die im Argument angegebene Funktion auf den Steuerbereich S_{ad} . Da dieser Operator stetige Funktionen wieder in stetige abbildet, gilt sogar $s^* \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, falls $s_{\min}(x), s_{\max}(x) \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ liegen. In Tröltzsch [69] wird gezeigt, dass auf Grund des quadratischen Auftretens der Steuerfunktion im Zielfunktional von (3.8) die in (3.20) angegebene Steuerung optimal ist.

Gilt zusätzlich, dass keine Steuerbeschränkungen im Prozess vorliegen, also der Spezialfall $S_{ad} = \mathbb{L}^\infty(\Omega)$, kann man die optimale Steuerung wegen der Bedingung (3.20) direkt in die Zustandsgleichung einsetzen

$$\begin{aligned} -\Delta y + y + d(y) &= -\frac{p}{\lambda}, & -\Delta p + p + d_y(y^*)p &= y - z & \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu y &= 0, & \partial_\nu p &= 0 & \text{in } \Gamma. \end{aligned}$$

Zur Bestimmung des optimalen Zustandes y^* muss dann nur noch die Lösung des obigen Randwertproblems bestimmt werden.

3.2.2. Linear eingehende Steuerung

Betrachtet man im Prozess (3.8) ein Zielfunktional ohne Regularisierungsterm, geht die Steuerung nur noch linear in das System ein. Es liegt also ein optimaler Steuerprozess der folgenden Form vor:

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, s) = \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\ \text{unter} \quad & -\Delta y + y + d(y) = s & \text{in } \Omega, \\ & \partial_\nu y = 0 & \text{in } \Gamma, \\ & s \in S_{ad}. \end{aligned} \tag{3.21}$$

Um in diesem Fall eine Vorschrift für eine optimale bzw. kritische Steuerung zu erhalten, muss man die aus Satz 3.2.10 resultierende Variationsungleichung

$$\int_{\Omega} p(s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad} \tag{3.22}$$

auswerten. Die Schaltfunktion (3.17) ist in diesem Fall gegeben durch $\sigma = p$. Daher entscheidet das Vorzeichen der adjungierten Variablen über die Struktur einer kritischen Steuerung. In Bereichen, in denen der adjungierte Zustand verschwindet, liefert uns die Variationsungleichung (3.22) allerdings keine Bedingung für eine kritische Steuerung, da formal jede zulässige Steuerung die Variationsungleichung erfüllt. Dies führt uns zur Definition einer singulären Steuerung.

Definition 3.2.12 (Bang-bang und singuläre Steuerungen).

Sei $\Phi \subseteq \Omega$ ein Teilgebiet von Ω mit nicht leerem topologischen Inneren. Eine kritische Steuerung s^* heißt in Φ *bang-bang*, falls

$$\sigma(x) \neq 0 \quad \text{für fast alle } x \in \Phi \tag{3.23}$$

gilt. Im Gegensatz dazu bezeichnet man die Steuerung s^* als *singulär* in Φ , wenn gilt:

$$\sigma(x) \equiv 0 \quad \text{für fast alle } x \in \Phi. \tag{3.24}$$

Ist diese Beziehung für fast alle $x \in \Omega$ erfüllt, so nennt man die Steuerung auch *total singulär*. Besitzt eine kritische Steuerung in Ω sowohl bang-bang als auch singuläre Teilgebiete, ist der Begriff *bang-singulär* gebräuchlich.

Nach Auswertung der Variationsungleichung (3.22) auf Φ ergibt sich für eine bang-bang Steuerung die Bedingung

$$s^*(x) \in \{s_{\min}(x), s_{\max}(x)\} \quad \text{für fast alle } x \in \Phi.$$

Für Gebiete in denen $\sigma \equiv 0$ erfüllt ist, kann direkt keine Bedingung für s^* angegeben werden. Um in der später folgenden Schaltbedingung eine einheitliche Einteilung einer kritischen Steuerung geben zu können, bezeichnen wir mit

$$\Theta := \{x \in \Omega \mid p(x) = 0\} \tag{3.25}$$

die Menge aller Punkte aus Ω , in denen der adjungierte Zustand verschwindet. Für alle Punkte $\hat{x} \in \overset{\circ}{\Theta}$ aus dem topologischen Inneren dieser Menge existiert dann eine Umgebung $\mathcal{U}(\hat{x}) \subset \overset{\circ}{\Theta}$, in der

$$\Delta p(x) \equiv 0 \quad \forall x \in \mathcal{U}(\hat{x})$$

gilt. An dieser Stelle sei noch einmal erwähnt, dass wir für Funktionen aus dem Raum $\mathbb{H}^1(\Omega)$ den Laplace-Operator im schwachen Sinne verstehen. Es folgt nach (3.14) für den kritischen Zustand

$$y^*(x) = z(x) \quad \forall x \in \mathcal{U}(\hat{x}). \tag{3.26}$$

Im Inneren von Θ ist somit die Wunschfunktion $z(x)$ durch die Steuerung

$$s^*(x) = -\Delta z(x) + z(x) + d(z(x)) \tag{3.27}$$

exakt ansteuerbar und es ergibt sich in Analogie zu (3.18) die Schaltbedingung

$$s^*(x) = \begin{cases} s_{\min}(x), & \text{falls } \sigma(x) > 0, \\ \text{unbestimmt,} & \text{falls } x \in \partial\Theta, \\ -\Delta z(x) + z(x) + d(z(x)), & \text{falls } x \in \overset{\circ}{\Theta}, \\ s_{\max}(x), & \text{falls } \sigma(x) < 0, \end{cases} \tag{3.28}$$

für eine kritische Steuerung. Dabei ist sicherzustellen, dass in (3.27) die Zulässigkeit der singulären Steuerung gegeben ist, d. h., es muss

$$s_{\min}(x) \leq -\Delta z(x) + z(x) + d(z(x)) \leq s_{\max}(x) \quad \forall x \in \overset{\circ}{\Theta}$$

gelten. In den meisten Fällen wird eine singuläre Steuerung sogar im Inneren des Steuerbereichs liegen, allerdings existieren auch pathologische Beispiele, in denen für eine singuläre Steuerung

$$s^*(x) = \{s_{\min}(x), s_{\max}(x)\} \quad \text{für fast alle } x \in \overset{\circ}{\Theta}$$

gilt.

Wir haben am Anfang des Abschnittes die Regularität $z \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ gefordert, um die exakte Ansteuerbarkeit aus (3.26) in eben diesen Gebieten sicherstellen zu können. Die entsprechende singuläre Steuerung kann dann aus der Vorschrift (3.28) explizit bestimmt werden. Die Herleitung von singulären Steuerungen ist nicht nur für Steuerprozesse der Form (3.21) möglich. Hat man für einen elliptischen optimalen Steuerprozess mit linear eingehender Steuerung die notwendigen Optimalitätsbedingungen vorliegen, kann man durch ein ähnliches Vorgehen explizite Darstellungen von singulären Steuerungen gewinnen. Wie werden dies später exemplarisch bei einer linearen elliptischen Gleichung mit Dirichlet-Randbedingungen zeigen.

3.3. Umwandlung eines elliptischen optimalen Steuerprozesses in ein nichtlineares Optimierungsproblem

Durch eine geeignete Approximation des Zielfunktionalen sowie eine Diskretisierung der auftretenden elliptischen Differentialgleichungen ist es möglich, einen optimalen Steuerprozess der Form (3.8) in ein hochdimensionales nichtlineares Optimierungsproblem zu verwandeln. Dabei gilt es besonders zwei Dinge zu beachten. Zum Einen muss das gewählte Diskretisierungsschema in der Lage sein, die vorkommenden kontinuierlichen partiellen Differentialgleichungen numerisch zu beschreiben. Zum Anderen muss man sicherstellen, dass die adjungierten Variablen des Optimierungsproblems mit einer diskreten Form des adjungierten Zustands des kontinuierlichen Problems identifiziert werden können. Nur so ist es möglich, eine berechnete numerische Lösung mit den notwendigen Optimalitätsbedingungen des Ursprungsproblems zu vergleichen. In diesem Abschnitt werden wir uns mit beiden Aspekten beschäftigen.

3.3.1. Diskretisierungsschemata für elliptische Differentialgleichungen

Die erste Aufgabe bei der Umwandlung eines optimalen Steuerprozesses unter partiellen Differentialgleichungs-Restriktionen in ein nichtlineares Optimierungsproblem besteht darin, die auftretenden partiellen Differentialgleichungen zu diskretisieren. In der Praxis sind dazu zwei unterschiedliche Ansätze gebräuchlich. Der größte Vorteil der so genannten Finite-Elemente-Verfahren liegt in der Flexibilität der Gittergenerierung bei komplexen Grundgebieten. Lebt die Differentialgleichung auf einer vielflächigen Geometrie, kann man beispielsweise mittels Gebietszerlegungs-Verfahren immer eine Triangulierung finden und passende finite Elemente auf diesen Dreiecken definieren. Zudem ist es sehr einfach möglich, in wichtigen Bereichen durch eine Verfeinerung des Gitters eine bessere Approximation zu erreichen, ohne die Art der benutzten finiten Elemente zu ändern.

Bei (klassischen) Finite-Differenzen-Verfahren wird das kontinuierliche Gebiet Ω durch eine diskrete Menge von Punkten ersetzt. In jedem dieser Gitterpunkte wird der (kontinuierliche) Differentialoperator durch einen Differenzenoperator ersetzt, der nur auf den

Gitterpunkten erklärt ist. Um den nur auf den inneren Gitterpunkten lebenden Differenzenoperator mit den Rand verknüpfen zu können, muss darauf geachtet werden, auch die Randbedingungen passend zu diskretisieren. Ist die elliptische Differentialgleichung allerdings auf einer komplexen Geometrie definiert, so besteht ein großer Nachteil der Finite-Differenzen-Verfahren darin, dass man den Differenzenoperator in der Nähe des Randes sehr umständlich beschreiben muss. Da wir uns in dieser Arbeit nur mit einfachen Grundgebieten auseinandersetzen, werden wir uns bei der Approximation der Differentialgleichungen auf Finite-Differenzen-Verfahren beschränken. Die meisten der in dieser Arbeit beschriebenen Verfahren findet man auch in den grundlegenden Büchern von Strikwerda [63] und Trefethen [66]. Zur Beschreibung der Gitterpunkte auf denen die Differenzenoperatoren wirken sollen, werden wir Indexmengen benutzen, die in der Tabelle 3.1 festgehalten sind.

Tabelle 3.1 Indexmengen für diskrete elliptische 2D-Probleme

$$\begin{aligned}
 D(\Omega) &:= \{1, \dots, N-1\} \times \{1, \dots, N-1\} \\
 DLR(\Gamma) &:= \{0\} \times \{0, \dots, N\} \\
 DRR(\Gamma) &:= \{N\} \times \{0, \dots, N\} \\
 DUR(\Gamma) &:= \{1, \dots, N-1\} \times \{0\} \\
 DOR(\Gamma) &:= \{1, \dots, N-1\} \times \{N\} \\
 DNLR(\Omega) &:= \{1\} \times \{1, \dots, N-1\} \\
 DNRR(\Omega) &:= \{N-1\} \times \{1, \dots, N-1\} \\
 DNUR(\Omega) &:= \{2, \dots, N-2\} \times \{1\} \\
 DNOR(\Omega) &:= \{2, \dots, N-2\} \times \{N-1\} \\
 D(\Gamma) &:= DLR(\Gamma) \cup DRR(\Gamma) \cup DOR(\Gamma) \cup DUR(\Gamma) \\
 DN(\Omega) &:= DNLR(\Omega) \cup DNRR(\Omega) \cup DNOR(\Omega) \cup DNUR(\Omega) \\
 DIN(\Omega) &:= D(\Omega) \setminus \{DNLR(\Omega) \cup DNRR(\Omega) \cup DNOR(\Omega) \cup DNUR(\Omega)\}
 \end{aligned}$$

Für die Beschreibung eines elliptischen Differenzen-Verfahrens reicht es aus, die Diskretisierung des Laplace-Operators zu behandeln. Aus diesem Grund betrachten wir an dieser Stelle nur die sehr einfache lineare elliptische Differentialgleichung

$$-\Delta y = s \quad \text{in } \Omega \tag{3.29}$$

mit einer rechten Seite $s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega)$. Die Differentialgleichung (3.29) nennt man auch die Poisson-Gleichung.

Zur Vereinfachung beschränken wir uns im Weiteren auf das Gebiet $\Omega := (0, 1) \times (0, 1)$, mit einem äquidistanten Gitter in N Diskretisierungspunkten für beide Ortsrichtungen. Bei einer solchen Diskretisierung ergeben sich mit der festen Schrittweite $h := \frac{1}{N}$ die äquidistanten Gitterpunkte:

$$x_{i,j} := (i \cdot h, j \cdot h) \quad \forall (i, j) \in D(\Omega) \cup D(\Gamma).$$

Die Zustandsvariablen $y_{i,j} := y(x_{i,j})$ sowie die rechten Seiten $s_{i,j} := s(x_{i,j})$ stellen die diskrete Approximation der kontinuierlichen Funktionen auf dem Gitter dar. Um die Differenzenoperatoren definieren zu können, führt man zunächst einige abkürzende Shift-Operatoren ein:

$$Zy_{i,j} := y_{i+1,j}, \quad Ky_{i,j} := y_{i,j+1}, \quad Iy_{i,j} := y_{i,j}.$$

Die Inversen dieser Operatoren stellen den spiegelbildlichen Schritt dar, also:

$$Z^{-1}y_{i,j} := y_{i-1,j}, \quad K^{-1}y_{i,j} := y_{i,j-1}, \quad I^{-1}y_{i,j} := Iy_{i,j} = y_{i,j}.$$

Diese Shift-Operatoren wirken nicht nur auf den Zustand y , sondern auch auf alle weiteren im Problem auftretenden diskretisierten Funktionen. Für die erste Ortskomponente können wir nun folgende Operatoren definieren:

$$\begin{aligned} \mu^+ &:= \frac{1}{2}(I + Z), & \mu^- &:= \frac{1}{2}(I + Z^{-1}), & \mu^0 &:= \frac{1}{2}(Z + Z^{-1}), \\ \delta^+ &:= \frac{1}{h}(Z - I), & \delta^- &:= \frac{1}{h}(I - Z^{-1}), & \delta^0 &:= \frac{1}{2h}(Z - Z^{-1}), \\ \delta^\times &:= \frac{1}{h^2}(Z - 2I + Z^{-1}). \end{aligned}$$

Die Operatoren μ^+, μ^-, μ^0 nennt man die vorwärts-, rückwärts- und zentraler Mittelungsoperatoren, sowie $\delta^+, \delta^-, \delta^0$ die entsprechenden Differenzenoperatoren erster Ordnung. Entsprechend dazu wird δ^\times als der zentrale Differenzenoperator zweiter Ordnung bezeichnet. Um zu kennzeichnen, dass die jeweiligen Operatoren auf die erste Komponente wirken, wurde der Index nach oben gestellt. Analog kann man nun die Operatoren für die zweite Ortskomponente mit unteren Indizes definieren:

$$\begin{aligned} \mu_+ &:= \frac{1}{2}(I + K), & \mu_- &:= \frac{1}{2}(I + K^{-1}), & \mu_0 &:= \frac{1}{2}(K + K^{-1}), \\ \delta_+ &:= \frac{1}{h}(K - I), & \delta_- &:= \frac{1}{h}(I - K^{-1}), & \delta_0 &:= \frac{1}{2h}(K - K^{-1}), \\ \delta_\times &:= \frac{1}{h^2}(K - 2I + K^{-1}). \end{aligned}$$

3.3.1.1. Fünfpunkt-Stern

Das einfachste Diskretisierungsschema zur numerische Berechnung einer elliptischen Gleichung ist die Fünfpunkt-Formel, oder auch Fünfpunkt-Stern genannt. Dabei wird der Laplace-Operator mittels eines zentralen Differenzenoperators zweiter Ordnung in beiden Ortsrichtungen approximiert. Für die Gleichung (3.29) ergibt sich damit ein lineares Gleichungssystem in den Variablen $y_{i,j}$:

$$-(\delta^\times + \delta_\times) y_{i,j} = s_{i,j} \quad \forall (i, j) \in D(\Omega). \quad (3.30)$$

Da wir zu einem späteren Zeitpunkt die explizite Darstellung der obigen Gleichung in Shift-Operatoren benötigen werden, schreiben wir (3.30) an dieser Stelle um:

$$-h^{-2}(Z + Z^{-1} + K + K^{-1} - 4I) y_{i,j} = s_{i,j} \quad \forall (i, j) \in D(\Omega). \quad (3.31)$$

Diese Fünfpunkt-Formel ist ein Differenzen-Verfahren der Ordnung 2 (vgl. z.B. Großmann/Roos [27]) und genügt zur Berechnung der meisten einfachen Beispiele im Bereich der Optimalsteuerung elliptischer Differentialgleichungen.

3.3.1.2. Neunpunkt-Stern

Falls die Diskretisierung des Fünfpunkt-Sterns das kontinuierliche Problem nicht genau genug approximieren kann, muss man auf Differenzen-Verfahren höherer Ordnung zurück greifen. Solche Verfahren erhält man dadurch, dass mittels einer Taylor-Entwicklung die Terme niedriger Ordnung durch Hinzunahme passend gewichteter Punkte eliminiert werden. Für die Poisson-Gleichung (3.29) führt eine Gewichtung von neun Punkten zu einem Schema der Form

$$-\left[\alpha(\delta^\times + \delta_\times) + \frac{\gamma}{h^2}I + \frac{\beta}{h^2}(KZ + KZ^{-1} + K^{-1}Z + K^{-1}Z^{-1})\right]y_{i,j} = s_{i,j} \quad \forall (i,j) \in D(\Omega), \quad (3.32)$$

für dessen Konsistenz $\gamma = -4\beta$ und $\alpha + 2\beta = 1$ gelten muss. Diese Schar von Schemata heißt für alle zulässigen Werte für α, β, γ **kompakt**, da sie nur „benachbarte“ ($i \pm 1, j \pm 1$) Gitterpunkte für die Approximation des Laplace-Operators benutzt. Für $\alpha = 1$ und $\beta = 0$ ergibt sich der bereits bekannte Fünfpunkt-Stern. Eine höhere Ordnung kann sich nur ergeben, wenn man auch die rechte Seite passend gewichtet. Wählt man z.B. speziell $\alpha = \frac{2}{3}$ und $\beta = \frac{1}{6}$ und definiert

$$s_{i,j} := \frac{1}{12}(s(x_{i-1,j}) + s(x_{i+1,j}) + s(x_{i,j-1}) + s(x_{i,j+1}) + 8s(x_{i,j})),$$

ergibt sich unter der Voraussetzung $y \in C^6(\bar{\Omega})$ ein Verfahren der Ordnung 4 für die Poisson-Gleichung (3.29).

Da in praktischen Problemen solche glatten Funktionen eher selten sind und Diskretisierungs-Verfahren höherer Ordnung die benötigte Rechenzeit stark erhöhen, sollte man diese nur benutzen, falls es die Gleichungen unbedingt erfordern. Bei allen in dieser Arbeit behandelten elliptischen Beispielen reichte der Fünfpunkt-Stern auf einem feinen Gitter aus, um eine gute Approximation der partiellen Differentialgleichungen zu erhalten.

3.3.2. Identifizierung der Lagrange-Multiplikatoren im optimalen Steuerprozess

Um aus dem optimalen Steuerprozess (3.8) ein Optimierungsproblem zu erhalten, müssen wir neben einer Diskretisierung der Nebenbedingungen noch das Zielfunktional

$$J(y, s) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} (y(x) - z(x))^2 dx + \frac{\lambda}{2} \int_{\Omega} s(x)^2 dx$$

approximieren. Wir benutzen dazu aus Gründen der Einfachheit eine Trapezsumme mit einer einfachen Gewichtung aller Summanden. Zusammen mit der Fünfpunkt-Stern-Diskretisierung für die elliptische Differentialgleichung ergibt sich für den optimalen Steuerprozess (3.8) das folgende nichtlineare Optimierungsproblem

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

$$\begin{aligned}
&\text{minimiere} && 0.5 h^2 \sum_{(i,j) \in \mathcal{D}(\Omega)} ((y_{i,j} - z_{i,j})^2 + \lambda s_{i,j}^2) \\
&\text{unter} && -(\delta^\times + \delta_\times) y_{i,j} + y_{i,j} + d(y_{i,j}) - s_{i,j} = 0 \quad (i,j) \in \mathcal{D}(\Omega), \quad (3.33) \\
&&& \delta^+ y_{i,j} = 0 \quad (i,j) \in \text{DLR}(\Gamma), \quad \delta^- y_{i,j} = 0 \quad (i,j) \in \text{DRR}(\Gamma), \\
&&& \delta_+ y_{i,j} = 0 \quad (i,j) \in \text{DUR}(\Gamma), \quad \delta_- y_{i,j} = 0 \quad (i,j) \in \text{DOR}(\Gamma), \\
&&& (s)_{i,j} \in DS_{ad},
\end{aligned}$$

in den Optimierungsvariablen $(y_{i,j}, s_{i,j})^T \in \mathbb{R}^{2N^2+2}$. Den diskreten Steuerbereich bezeichnen wir mit

$$DS_{ad} := \left\{ (s)_{i,j} \in \mathbb{R}^{(N-1)^2} \mid (s_{\min})_{i,j} \leq s_{i,j} \leq (s_{\max})_{i,j}, \quad \forall (i,j) \in \mathcal{D}(\Omega) \right\}.$$

Satz 3.3.1. *Die Lagrange-Multiplikatoren $p_{i,j}$ in den notwendigen Bedingungen des Optimierungsproblems (3.33) sind mit der Skalierung $\tilde{p}_{i,j} = h^{-2} p_{i,j}$ eine Lösung der diskreten adjungierten Zustandsgleichung (3.14), falls diese mit dem Fünfpunkt-Stern approximiert wird. Zudem erhält man mit der vorgestellten Skalierung die diskrete Form der Variationsungleichung (3.12) des kontinuierlichen Problems (3.8).*

Beweis: Zunächst formulieren wir das Problem (3.33) äquivalent um, indem wir die Randbedingungen mit dem Faktor h^{-1} skalieren:

$$\begin{aligned}
\frac{\delta^+}{h} y_{i,j} = 0, \quad (i,j) \in \text{DLR}(\Gamma), & \quad \frac{\delta^-}{h} y_{i,j} = 0, \quad (i,j) \in \text{DRR}(\Gamma), \\
\frac{\delta_+}{h} y_{i,j} = 0, \quad (i,j) \in \text{DUR}(\Gamma), & \quad \frac{\delta_-}{h} y_{i,j} = 0, \quad (i,j) \in \text{DOR}(\Gamma).
\end{aligned}$$

Für dieses ergibt sich mit $p_0 = 1$ die folgende Lagrange-Funktion:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}(y, p, s) &= 0.5 h^2 \sum_{(i,j) \in \mathcal{D}(\Omega)} ((y_{i,j} - z_{i,j})^2 + \lambda s_{i,j}^2) \\
&- \sum_{(i,j) \in \text{DLR}(\Gamma)} p_{i,j} \left(\frac{\delta^+}{h} y_{i,j} \right) - \sum_{(i,j) \in \text{DRR}(\Gamma)} p_{i,j} \left(\frac{\delta^-}{h} y_{i,j} \right) \\
&- \sum_{(i,j) \in \text{DUR}(\Gamma)} p_{i,j} \left(\frac{\delta_+}{h} y_{i,j} \right) - \sum_{(i,j) \in \text{DOR}(\Gamma)} p_{i,j} \left(\frac{\delta_-}{h} y_{i,j} \right) \\
&- \sum_{(i,j) \in \mathcal{D}(\Omega)} p_{i,j} \left(-(\delta^\times + \delta_\times) y_{i,j} + y_{i,j} + d(y_{i,j}) - s_{i,j} \right).
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Um die Auswertung der notwendigen Optimalitätsbedingungen $\mathcal{L}_y(y^*, p, s^*) = 0$ besser verstehen zu können, leiten wir zunächst nur einen Summanden nach den Zustandsvariablen ab. Differenziert man beispielsweise in (3.34) den Term für den linken Rand nach der

Variablen $y_{0,j}$ ergibt sich

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dy_{0,j}} \left(- \sum_{(i,j) \in \text{DLR}(\Gamma)} p_{i,j} \left(\frac{\delta^+}{h} y_{i,j} \right) \right) = \frac{d}{dy_{0,j}} \left(- \sum_{(i,j) \in \text{DLR}(\Gamma)} p_{i,j} \frac{y_{i+1,j} - y_{i,j}}{h^2} \right) \\ & = \frac{d}{dy_{0,j}} \left(- \sum_{j \in \{0, \dots, N\}} p_{0,j} \frac{y_{1,j} - y_{0,j}}{h^2} \right) \\ & = \sum_{j \in \{0, \dots, N\}} h^{-2} p_{0,j} = \sum_{(i,j) \in \text{DLR}(\Gamma)} h^{-2} p_{i,j} \end{aligned}$$

sowie für $y_{1,j}$

$$\frac{d}{dy_{1,j}} \left(- \sum_{j \in \{0, \dots, N\}} p_{0,j} \frac{y_{1,j} - y_{0,j}}{h^2} \right) = \sum_{j \in \{0, \dots, N\}} -h^{-2} p_{0,j} = \sum_{(i,j) \in \text{DLR}(\Gamma)} -h^{-2} p_{i,j}. \quad (3.35)$$

Für alle weiteren Indizes $(i, j) \in \text{D}(\Omega) \cup \text{D}(\Gamma)$ ergibt sich der Wert Null. Aus der Fünfpunkt-Stern-Diskretisierung betrachte man zunächst nur den Term

$$\sum_{(i,j) \in \text{D}(\Omega)} p_{i,j} (\delta^\times y_{i,j}) = \sum_{(i,j) \in \text{D}(\Omega)} p_{i,j} \frac{y_{i+1,j} - 2y_{i,j} + y_{i-1,j}}{h^2}. \quad (3.36)$$

Differenziert man diesen nach $y_{0,j}$ erhält man

$$\sum_{j \in \{1, \dots, N-1\}} h^{-2} p_{1,j} = \sum_{(i,j) \in \text{DNLR}(\Gamma)} h^{-2} p_{i,j} \quad (3.37)$$

bzw.

$$\sum_{j \in \{1, \dots, N-1\}} h^{-2} (-2p_{1,j} + p_{2,j}) = \sum_{(i,j) \in \text{DNLR}(\Gamma)} h^{-2} (-2p_{i,j} + p_{i+1,j}) \quad (3.38)$$

bei Differentiation von (3.36) nach $y_{1,j}$. Ergänzt man (3.37) mit den passenden Summanden aus (3.35), erhält man die skalierte Bedingung für den linken Rand der diskretisierten adjungierten Gleichung:

$$0 = \sum_{j \in \{1, \dots, N-1\}} h^{-2} (p_{1,j} - p_{0,j}) = \sum_{j \in \{1, \dots, N-1\}} h^{-1} \delta^+ p_{0,j}.$$

Ebenso bekommt man in (3.38) durch Ergänzung der geeigneten Terme aus (3.35)

$$0 = \sum_{j \in \{1, \dots, N-1\}} h^{-2} (p_{0,j} - 2p_{1,j} + p_{2,j}) = \sum_{j \in \{1, \dots, N-1\}} \delta^\times p_{1,j}$$

und somit den richtigen Term des Fünfpunkt Sterns für den adjungierten Zustand am linken Nebenrand $\text{DNLR}(\Omega)$. Wiederholt man dieses Vorgehen für alle Ränder, ergibt

die Auswertung der notwendigen Bedingung $\mathcal{L}_y(y^*, p, s^*) = 0$ nach einer Skalierung von $\tilde{p}_{i,j} = h^{-2}p_{i,j}$:

$$\begin{aligned} (\delta^\times + \delta_\times) \tilde{p}_{i,j} - \tilde{p}_{i,j} - d'(y_{i,j})\tilde{p}_{i,j} + y_{i,j}^* - z_{i,j} &= 0 \quad (i, j) \in D(\Omega), \\ h\delta^+ \tilde{p}_{i,j} &= 0, \quad (i, j) \in \text{DLR}(\Gamma), & h\delta^- \tilde{p}_{i,j} &= 0, \quad (i, j) \in \text{DRR}(\Gamma), \\ h\delta_+ \tilde{p}_{i,j} &= 0, \quad (i, j) \in \text{DUR}(\Gamma), & h\delta_- \tilde{p}_{i,j} &= 0, \quad (i, j) \in \text{DOR}(\Gamma), \end{aligned}$$

die Fünfpunkt-Formel der adjungierten Gleichung (3.14). Man beachte, dass die Adjungierte im Inneren des Gitters mit dem Faktor h^{-2} skaliert ist, während am Rand nur eine Skalierung mit h^{-1} vorliegt.

Die Auswertung der Differentiation der Lagrange-Funktion nach $s_{i,j}$ für alle $(i, j) \in D(\Omega)$ liefert uns nach obiger Skalierung die diskretisierte Form der Variationsungleichung (3.12) des kontinuierlichen Problems:

$$\left(\sum_{(i,j) \in D(\Omega)} \lambda s_{i,j}^* + \tilde{p}_{i,j} \right) (s_{i,j} - s_{i,j}^*) \geq 0 \quad \forall s_{i,j} \in DS_{ad}. \quad \blacksquare$$

Mit der im Beweis von Satz 3.3.1 benutzten Skalierung $\tilde{p}_{i,j} = h^{-2}p_{i,j}$ kann man die numerisch berechneten Lagrange-Multiplikatoren aus dem Optimierungsproblem mit der adjungierten Variablen aus dem kontinuierlichen Problem in Beziehung setzen.

3.4. (Semi-)lineare elliptische Beispiele

In diesem Abschnitt möchten wir die numerisch berechneten Lösungen einiger linearer und semilinearer elliptischer optimaler Steuerprozesse mit linear oder quadratisch eingehender Steuerfunktion vorstellen. Wie bereits erwähnt, ist es möglich, die in den vorherigen Kapiteln gezeigten Ergebnisse auch für andere elliptische Randwertprobleme zu benutzen. Wir werden zunächst exemplarisch vorstellen, wie sich die Ergebnisse auf Poisson-Probleme mit Dirichlet-Randbedingungen übertragen lassen und diese dann an zwei Beispielen verifizieren. Im Anschluss betrachten wir ein semilineares elliptisches Beispiel mit Dirichlet-Randbedingungen sowie ein Problem der Form (3.8) mit einer komplizierten Wunschfunktion $z(x)$.

3.4.1. Das Poisson-Problem mit Dirichlet-Randbedingungen

Soweit nicht anders erwähnt, gelten für die vorkommenden Funktionen und Mengen dieselben Voraussetzungen wie in Abschnitt 3.2. Im Folgenden betrachten wir ein Problem der Form:

$$\begin{aligned}
 \text{minimiere} \quad & J(y, s) := \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\
 \text{unter} \quad & -\Delta y = s && \text{in } \Omega, \\
 & y = 0 && \text{in } \Gamma, \\
 & s \in S_{ad}.
 \end{aligned} \tag{3.39}$$

Diese Art von linearen elliptischen Steuerprozessen ist schon lange bekannt. Bereits 1968 gab Lions in der französischen Originalfassung von [43] neben vielen anderen Problemklassen die Optimalitätsbedingungen für den Steuerprozess (3.39) an. Ausführlich wurden die folgenden notwendigen Bedingungen u. a. in Tröltzsch [69] hergeleitet.

Satz 3.4.1 (Notwendige Optimalitätsbedingungen).

Ist $(y^*, s^*) = (y(s^*), s^*)$ eine optimale Trajektorie des Problems (3.39), dann existiert genau eine schwache Lösung $p \in \mathbb{H}_0^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ der adjungierten Gleichung

$$\begin{aligned}
 -\Delta p &= y^* - z && \text{in } \Omega, \\
 p &= 0 && \text{in } \Gamma,
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

so dass die Variationsungleichung

$$\int_{\Omega} (p + \lambda s^*) (s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad} \tag{3.41}$$

erfüllt ist. Umgekehrt ist jede Steuerung $s^* \in S_{ad}$ optimal, welche mit dem zugehörigem Zustand $y^* = y(s^*)$ und der Lösung p von (3.40) die Variationsungleichung (3.41) erfüllt.

Die Rückrichtung des obigen Satzes gilt nur auf Grund des in diesem Fall speziellen Steuerungs-Zustands-Operators $G : S_{ad} \rightarrow \mathbb{H}_0^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$. Für das linear elliptische Poisson-Problem (3.39) ist dieser stetig und linear und somit das Zielfunktional

$$F(s) := J(G(s), s) = \frac{1}{2} \|y(s) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2$$

für alle $\lambda \geq 0$ konvex. Daher genügt es für eine optimale Lösung nur die notwendigen Optimalitätsbedingungen zu überprüfen.

Da die Bedingung (3.41) mit der Variationsungleichung (3.16) im semilinearen Fall übereinstimmt, ergibt sich für regularisierte Steuerprozesse ($\lambda > 0$) eine zu (3.17) kongruente Schaltfunktion sowie identische Schalt- und Projektionsbedingungen (3.19) und (3.20). Für ein Poisson-Problem mit linear eingehender Steuerfunktion ($\lambda = 0$) erhält man auf Grund der geänderten Zustandsgleichung die Schaltbedingung

$$\boxed{
 s^*(x) = \begin{cases} s_{\min}(x), & \text{falls } \sigma(x) > 0, \\ \text{unbestimmt}, & \text{falls } x \in \partial\Theta, \\ -\Delta z(x), & \text{falls } x \in \overset{\circ}{\Theta}, \\ s_{\max}(x), & \text{falls } \sigma(x) < 0, \end{cases} \tag{3.42}$$

für eine optimale Steuerung.

Mit der aus Abschnitt 3.3.2 bekannten Diskretisierung des Zielfunktional und dem Fünfpunkt-Stern resultiert aus (3.39) das Optimierungsproblem

$$\begin{aligned}
 & \text{minimiere} && 0.5 h^2 \sum_{(i,j) \in D(\Omega)} ((y_{i,j} - z_{i,j})^2 + \lambda s_{i,j}^2) \\
 & \text{unter} && -(\delta^\times + \delta_\times) y_{i,j} - s_{i,j} = 0 && (i,j) \in D(\Omega), \\
 & && y_{i,j} = 0 && (i,j) \in D(\Gamma), \\
 & && (s)_{i,j} \in DS_{ad},
 \end{aligned} \tag{3.43}$$

in den Variablen $(y_{i,j}, s_{i,j})^T \in \mathbb{R}^{2N^2+2}$ mit diskretem Steuerbereich

$$DS_{ad} := \left\{ (s)_{i,j} \in \mathbb{R}^{(N-1)^2} \mid (s_{\min})_{i,j} \leq s_{i,j} \leq (s_{\max})_{i,j}, \quad \forall (i,j) \in D(\Omega) \right\}.$$

Der Beweis über die Identifizierung der Lagrange-Multiplikatoren muss an dieser Stelle leicht verändert wiederholt werden. Auf Grund des Auftretens von Dirichlet-Randbedingungen ergeben sich Änderungen in der Beweisführung, für die wir noch weitere Indexmengen zur Spezifikation der Eckpunkte des Nebenrandes benötigen.

Satz 3.4.2. *Die Lagrange-Multiplikatoren $p_{i,j}$ in den notwendigen Bedingungen des Optimierungsproblems (3.43) sind mit der Skalierung $\tilde{p}_{i,j} = h^{-2} p_{i,j}$ eine Lösung der diskreten adjungierten Zustandsgleichung (3.40), falls diese mit dem Fünfpunkt-Stern approximiert wird. Zudem erhält man mit der vorgestellten Skalierung die diskrete Form der Variationsungleichung (3.41) des kontinuierlichen Problems (3.39).*

Beweis: Zunächst formulieren wir das Problem (3.43) äquivalent um, indem die homogenen Dirichlet-Randbedingungen in die Fünfpunkt-Stern-Diskretisierung des Laplace-Terms eingesetzt wird. Damit kann man (3.43) umschreiben zu:

$$\begin{aligned}
 & \text{minimiere} && 0.5 h^2 \sum_{(i,j) \in D(\Omega)} ((y_{i,j} - z_{i,j})^2 + \lambda s_{i,j}^2) \\
 & \text{unter} && -(Z + K - 4I) y_{i,j} h^{-2} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DNLUE}(\Omega), \\
 & && -(Z^{-1} + K^{-1} - 4I) y_{i,j} h^{-2} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DNROE}(\Omega), \\
 & && -(Z + K^{-1} - 4I) y_{i,j} h^{-2} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DNLOE}(\Omega), \\
 & && -(Z^{-1} + K - 4I) y_{i,j} h^{-2} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DNRUE}(\Omega), \\
 & && -(Z + K + K^{-1} - 4I) y_{i,j} h^{-2} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DNLKE}(\Omega), \\
 & && -(Z^{-1} + K + K^{-1} - 4I) y_{i,j} h^{-2} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DNRKE}(\Omega), \\
 & && -(Z + Z^{-1} + K^{-1} - 4I) y_{i,j} h^{-2} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DNOR}(\Omega), \\
 & && -(Z + Z^{-1} + K - 4I) y_{i,j} h^{-2} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DNUR}(\Omega), \\
 & && -(\delta^\times + \delta_\times) y_{i,j} - s_{i,j} = 0, && (i,j) \in \text{DIN}(\Omega), \\
 & && y_{i,j} = 0, && (i,j) \in D(\Gamma), \\
 & && (s)_{i,j} \in DS_{ad}.
 \end{aligned}$$

Für dieses Optimierungsproblem ergibt sich mit $p_0 = 1$ die folgende Lagrange-Funktion:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}(y, p, s) = & 0.5 h^2 \sum_{(i,j) \in D(\Omega)} \left((y_{i,j} - z_{i,j})^2 + \lambda s_{i,j}^2 \right) - \sum_{(i,j) \in D(\Gamma)} p_{i,j} y_{i,j} \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DIN}(\Omega)} p_{i,j} \left(-(\delta^\times + \delta_\times) y_{i,j} - s_{i,j} \right) \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DNLUE}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z + K - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right) \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DNROE}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z^{-1} + K^{-1} - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right) \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DNLOE}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z + K^{-1} - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right) \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DNRUE}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z^{-1} + K - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right) \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DNLKE}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z + K + K^{-1} - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right) \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DNRKE}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z^{-1} + K + K^{-1} - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right) \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DNOR}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z + Z^{-1} + K^{-1} - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right) \\
 & - \sum_{(i,j) \in \text{DNUR}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z + Z^{-1} + K - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right).
 \end{aligned}$$

Differenziert man zunächst nur den Summanden

$$- \sum_{(i,j) \in D(\Gamma)} p_{i,j} y_{i,j},$$

der aus der Randbedingung resultiert, nach allen $y_{i,j}$ mit $(i, j) \in D(\Gamma)$, ergeben sich durch die Auswertung der notwendigen Bedingung erster Ordnung

$$\frac{d}{dy_{i,j}} \left(- \sum_{(i,j) \in D(\Gamma)} p_{i,j} y_{i,j} \right) = 0$$

die diskretisierten Randbedingungen für die adjungierte Zustandsgleichung:

$$p_{i,j} = 0 \quad \forall (i, j) \in D(\Gamma).$$

Exemplarisch betrachte man für den reduzierten Fünfpunkt-Stern den Summanden

$$- \sum_{(i,j) \in \text{DNLKE}(\Omega)} p_{i,j} \left(-h^{-2} (Z + K + K^{-1} - 4I) y_{i,j} - s_{i,j} \right), \quad (3.44)$$

der für die Diskretisierung des linken Nebenrandes (ohne Eckpunkte) verantwortlich ist. Differenziert man (3.44) nach $y_{0,j}$, erhält man Null, da man genau diese Terme auf Grund der homogenen Dirichlet-Randbedingungen aus dem Fünfpunkt-Stern entfernt hat. Das Ableiten von (3.44) nach $y_{1,j}$ ergibt

$$\sum_{j \in \{2, \dots, N-2\}} h^{-2} (p_{1,j+1} + p_{1,j-1} - 4p_{1,j}) \quad (3.45)$$

sowie

$$\sum_{j \in \{2, \dots, N-2\}} h^{-2} p_{1,j} \quad (3.46)$$

bei Differentiation nach $y_{2,j}$. Für den Fünfpunkt-Stern der adjungierten Gleichung fehlen in (3.45) noch zwei Summanden. Den ersten erhält man, indem der Term

$$- \sum_{(i,j) \in \text{DIN}(\Omega)} p_{i,j} (-(\delta^\times + \delta_\times) y_{i,j} - s_{i,j})$$

nach $y_{1,j}$ differenziert wird, was

$$\sum_{j \in \{2, \dots, N-2\}} h^{-2} p_{2,j} \quad (3.47)$$

ergibt. Ergänzt man nun (3.45) mit (3.47) und der Nullsumme

$$\sum_{j \in \{2, \dots, N-2\}} h^{-2} p_{0,j},$$

folgt die Fünfpunkt-Stern-Diskretisierung der adjungierten Zustandsgleichung für alle $(i, j) \in \text{DNLKE}(\Omega)$:

$$\sum_{j \in \{2, \dots, N-2\}} h^{-2} (p_{0,j} + p_{1,j+1} + p_{1,j-1} + p_{2,j} - 4p_{1,j}) = (\delta^\times + \delta_\times) p_{i,j}.$$

Der für die Diskretisierung in $\text{DNLKE}(\Omega)$ nicht benutzte Term (3.46) wird benötigt, um den Fünfpunkt-Stern auf den Diskretisierungspunkten $(3, j)$ für alle $j \in \{2, \dots, N-2\}$ zu vervollständigen.

Wiederholt man dieses Vorgehen für alle Ränder, ergibt die Auswertung der notwendigen Bedingung $\mathcal{L}_{y_{i,j}}(y_{i,j}, p_{i,j}, s_{i,j}) = 0$ nach einer Skalierung von $\tilde{p}_{i,j} = h^{-2} p_{i,j}$:

$$\begin{aligned} (\delta^\times + \delta_\times) \tilde{p}_{i,j} + y_{i,j} - z_{i,j} &= 0 & (i, j) \in \text{D}(\Omega), \\ \tilde{p}_{i,j} &= 0 & (i, j) \in \text{D}(\Gamma). \end{aligned} \quad (3.48)$$

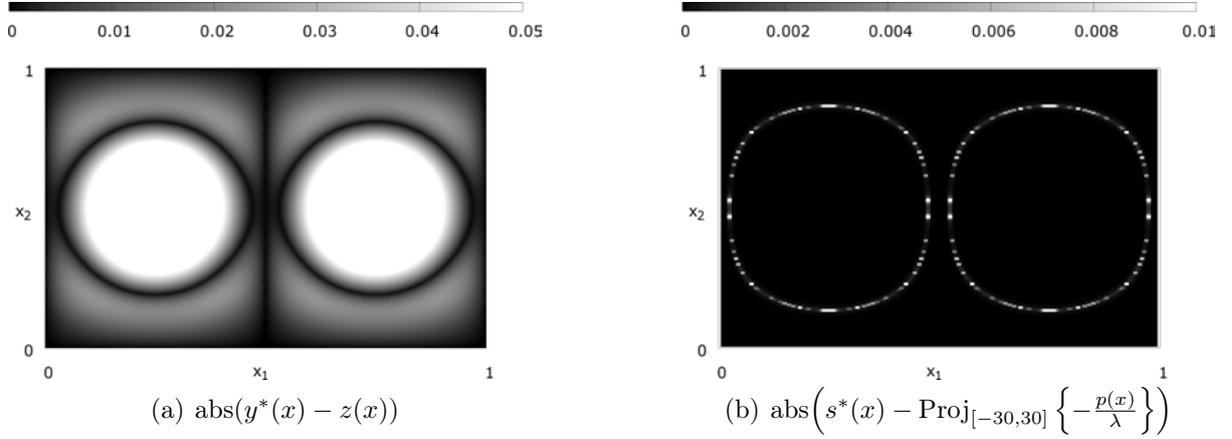
Dies entspricht der Fünfpunkt-Formel der adjungierten Gleichung (3.40).

Die Auswertung der Differentiation der Lagrange-Funktion nach $s_{i,j}$ für alle $(i, j) \in \text{D}(\Omega)$ liefert uns nach obiger Skalierung

$$\left(\sum_{(i,j) \in \text{D}(\Omega)} \lambda s_{i,j}^* + \tilde{p}_{i,j} \right) (s_{i,j} - s_{i,j}^*) \geq 0 \quad \forall s_{i,j} \in \text{DS}_{ad},$$

was der diskretisierten Form der Variationsungleichung (3.41) des kontinuierlichen Problems entspricht. ■

Abbildung 3.1.: Vergleiche des berechneten Zustands mit dem Wunschzustand (a) sowie der berechneten Steuerung mit der Projektionsbedingung (b) für (3.49) mit $\lambda = 10^{-5}$



3.4.1.1. Beispiel eines Poisson-Problems mit verteilter Steuerung

Zunächst betrachten wir ein einfaches Beispiel, welches mit dieser Wunschfunktion unter anderem in Borzi/Kunisch [8] vorgestellt wurde. Es handelt sich hierbei um ein Poisson-Problem der Form (3.39). Wir werden die numerischen Lösungen des regularisierten mit dem unregularisierten Fall vergleichen und die vorher vorgestellten notwendigen Optimalitätsbedingungen nachprüfen. Gegeben sei der folgende optimale Steuerprozess:

$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && J(y, s) := \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\
 &\text{unter} && -\Delta y = s && \text{in } \Omega, && (3.49) \\
 &&& y = 0 && \text{in } \Gamma, \\
 &&& s \in S_{ad},
 \end{aligned}$$

mit dem Grundgebiet $\Omega := (0, 1) \times (0, 1)$, der Wunschfunktion $z(x) := \sin(2\pi x_1) \cdot \sin(\pi x_2)$ und dem Steuerbereich

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega) \mid -30 \leq s(x) \leq 30 \quad \forall x \in \Omega\}. \quad (3.50)$$

Im regularisierten Fall mit $\lambda = 10^{-5}$ geht die Steuerung nichtlinear in das Problem ein und man erwartet angesichts der Projektionsbedingung (3.20) eine auf ganz Ω stetige optimale Steuerung s^* . Wie man in den Abbildungen 3.1(b) sowie 3.2(c),(d) feststellen kann, stimmt die durch die direkte Methode berechnete optimale Steuerung mit der Auswertung der Projektionsbedingung überein. Numerische Ungenauigkeiten entstehen nur dort, wo die Projektionsabbildung den adjungierten Zustand restringiert. Die in Abbildung 3.2(f) gezeigte Vorzeichenabbildung stellt auf Ω die Bereiche, in denen der adjungierte Zustand

negativ (bzw. positiv) ist, mit schwarz (bzw. weiß) dar. Ist das topologische Innere der Menge Θ nicht leer, wird dieser Bereich durch die Vorzeichenabbildung grau gekennzeichnet. Dies ist vor allem für optimale Steuerprozesse mit linear eingehender Steuerung von Interesse, da in diesen Gebieten singuläre Steuerungen erwartet werden.

Wir haben gesehen, dass die durch AMPL/IPOPT bestimmte optimale Lösung die notwendigen Optimalitätsbedingungen des kontinuierlichen Problems gut approximiert. Hinreichende Optimalitätsbedingungen sind angesichts der Linearität des Problems und der damit verbundenen Konvexität des Zielfunktional für die vorgestellte Lösung erfüllt.

Wie in Abbildung 3.1(a) konstatiert werden kann, ist der Wunschzustand in der Nähe seiner Extrema sowie am Rande des Grundgebietes nicht gut ansteuerbar. Während Ersteres durch die restriktive Wirkung des Steuerbereiches (3.50) erklärt werden kann, ist Letzteres nur durch das Vorhandensein eines Regularisierungsparameters zu begründen. Wir werden sehen, dass man im unregularisierten Problem tatsächlich in der Lage ist, den Wunschzustand besser zu erreichen.

Betrachten wir somit das Problem (3.49) mit $\lambda = 0$. In diesem Fall kann man in der Nähe des Randes $x_2 = 0$ und $x_2 = 1$ wegen des Verzichts einer Regularisierung den gewünschten Zustand exakt ansteuern (vgl. Abbildung 3.3(a)). Auf Grund der Randbedingung $p|_{\Gamma} = 0$ ist in diesem Bereich $p \equiv 0$ eine potentielle Lösung der adjungierten Zustandsgleichung (3.40), falls es möglich ist, durch eine passende Steuerung s^* die exakte Ansteuerbarkeit $y^* = z$ zu gewährleisten. Deshalb liegt im grau gekennzeichneten Gebiet $\overset{\circ}{\Theta}$ aus Abbildung 3.4(d) eine singuläre Steuerung vor, die der Schaltbedingung (3.42)

$$s^*(x) = -\Delta z(x) = 5\pi^2 \sin(2\pi x_1) \sin(\pi x_2) \quad \forall x \in \overset{\circ}{\Theta}$$

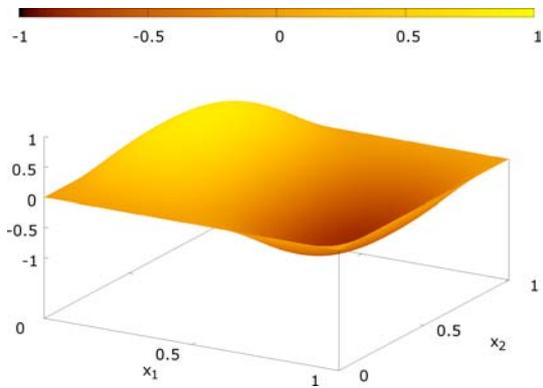
genügt (vgl. 3.3(b)). Man kann an der angesprochenen Vorzeichenabbildung auch verifizieren, dass die Schaltbedingung (3.42) auf ganz Ω erfüllt ist.

Um sicherzustellen, dass die durch AMPL/IPOPT berechneten Lagrange-Multiplikatoren auch wirklich eine diskrete Lösung der adjungierten Zustandsgleichung (3.40) darstellen, haben wir die adjungierte Zustandsgleichung

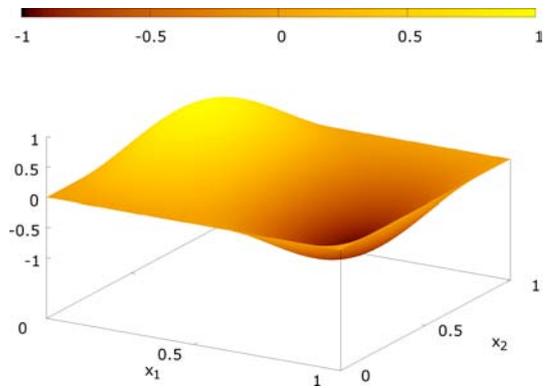
$$\begin{aligned} -\Delta p &= y^* - z && \text{in } \Omega, \\ p &= 0 && \text{in } \Gamma, \end{aligned}$$

mit dem optimalen Zustand y^* aus 3.4(a) gelöst und in Abbildung 3.4(e) mit p_{indirekt} bezeichnet. Durch die Übereinstimmung mit den in Abbildung 3.4(f) dargestellten zusammengesetzten Lagrange-Multiplikatoren des Optimierungsproblems (3.43) wurde damit nicht nur gezeigt, dass diese eine Lösung der adjungierten Gleichung darstellen, sondern zudem noch verifiziert, dass die im Beweis von Satz 3.4.2 hergeleitete Skalierung der Lagrange-Multiplikatoren korrekt ist. Wir werden deswegen im Folgenden die zusammengesetzten skalierten Lagrange-Multiplikatoren ebenfalls mit p bezeichnen.

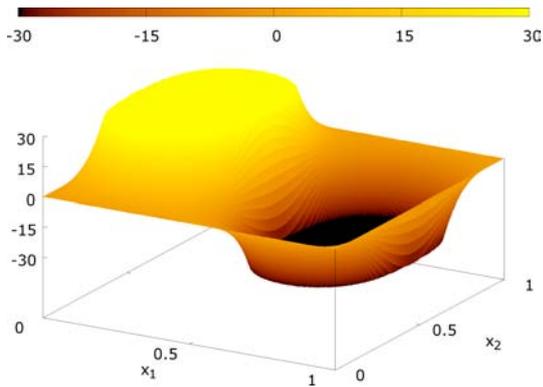
Abbildung 3.2.: Numerische Lösung von (3.49) mit $\lambda = 10^{-5}$



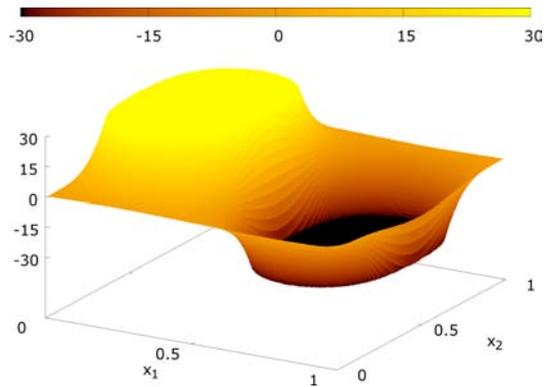
(a) Zustand $y^*(x)$



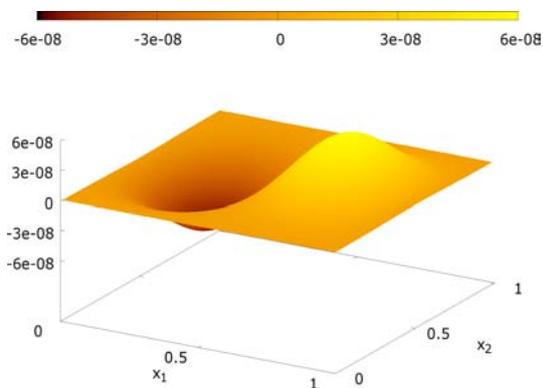
(b) gewünschter Zustand $z(x)$



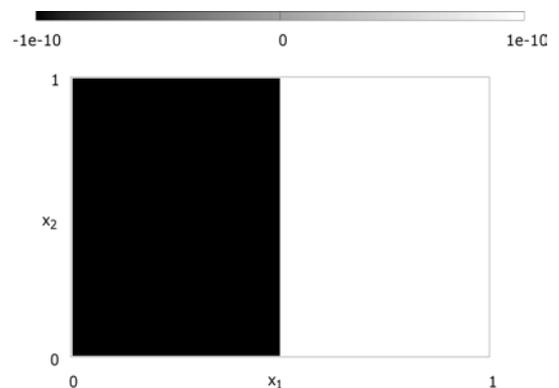
(c) Steuerung $s^*(x)$



(d) $\text{Proj}_{[-30,30]} \left\{ -\frac{p(x)}{\lambda} \right\}$

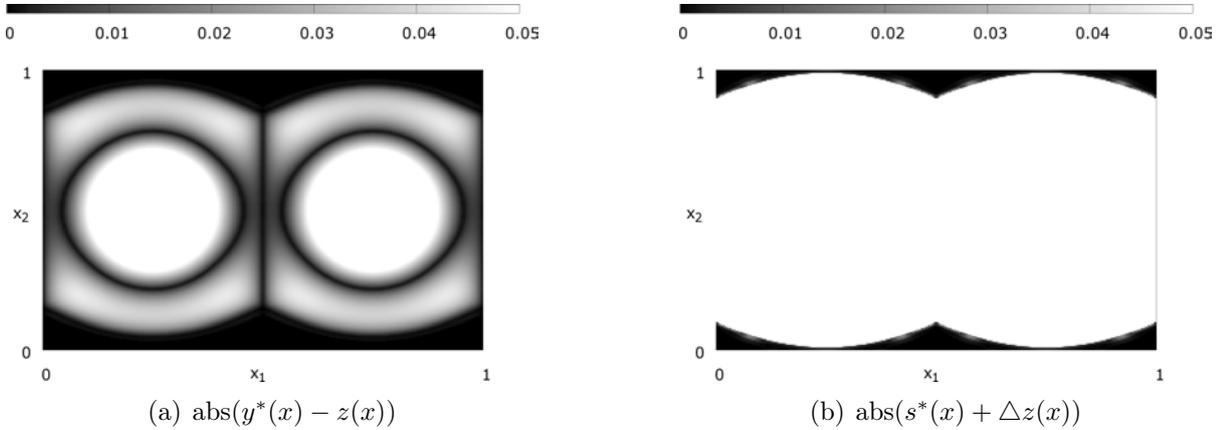


(e) skaliertes adj. Zustand $p(x)$



(f) Vorzeichenabbildung von $p(x)$

Abbildung 3.3.: Vergleiche des berechneten Zustands mit dem Wunschzustand (a) sowie der berechneten Steuerung mit der Projektionsbedingung (b) für (3.49) mit $\lambda = 0$



3.4.1.2. Beispiel eines Poisson-Problems mit eingeschränktem Wirkungsbereich der Steuerung

In diesem Beispiel betrachten wir den bereits bekannten optimalen Steuerprozess (3.49) mit $\lambda = 0$. Allerdings schränken wir durch die Funktion $B : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

$$B(x) := \begin{cases} 1, & \text{falls } (x_1 - 0.5)^2 + (x_2 - 0.5)^2 < 0.1, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

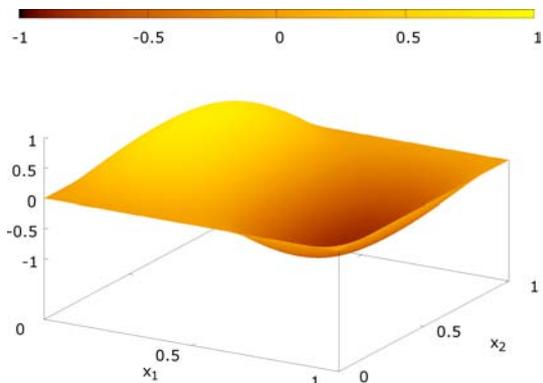
den Wirkungsbereich der verteilten Steuerung auf eine Kreisscheibe mit Mittelpunkt $(0.5, 0.5)$ und Radius $r = 0.1$ ein. Es ergibt sich somit ein Steuerprozess der Form

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, s) := \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\ \text{unter} \quad & -\Delta y = B s && \text{in } \Omega, \\ & y = 0 && \text{in } \Gamma, \\ & s \in S_{ad}, \end{aligned} \tag{3.51}$$

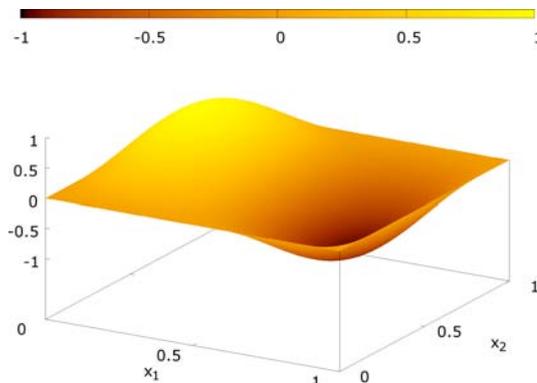
mit Grundgebiet $\Omega := (0, 1) \times (0, 1)$ und Steuerbereich (3.50). Allerdings ändern wir im Vergleich zu (3.49) die Wunschfunktion $z(x) := \sin(4\pi x_1) \cdot \sin(2\pi x_2)$ leicht ab.

Es ist festzuhalten, dass eine $\mathbb{L}^2(\Omega)$ -Funktion durch Multiplikation mit der Beschränkungsfunktion B immer noch im Raum $\mathbb{L}^2(\Omega)$ liegt und wir somit die vorangegangenen Ergebnisse ohne Anpassung benutzen können. Auf Grund der Linearität des Problems (3.51) wird auch in diesem Fall eine kritische Trajektorie hinreichende Optimalitätsbedingungen erfüllen und eine optimale Lösung darstellen. Trotz des relativ großen Steuerbereiches ist es in keinem Teilgebiet der Kreisscheibe möglich, den gewünschte Zustand exakt anzusteuern. Daraus resultiert eine reine bang-bang Steuerung auf der Kreisscheibe, wie man in Abbildung 3.5(c) erkennen kann. Diese erfüllt mit dem adjungierten Zustand aus Abbildung 3.5(d),(f) die Schaltbedingung (3.42).

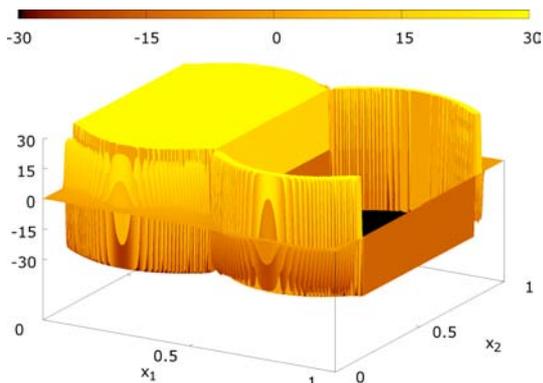
Abbildung 3.4.: Numerische Lösung von (3.49) mit $\lambda = 0$



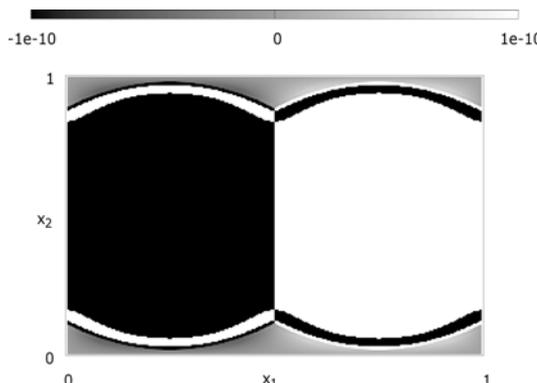
(a) Zustand $y^*(x)$



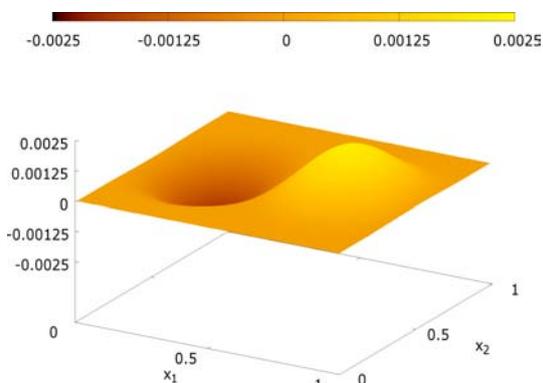
(b) gewünschter Zustand $z(x)$



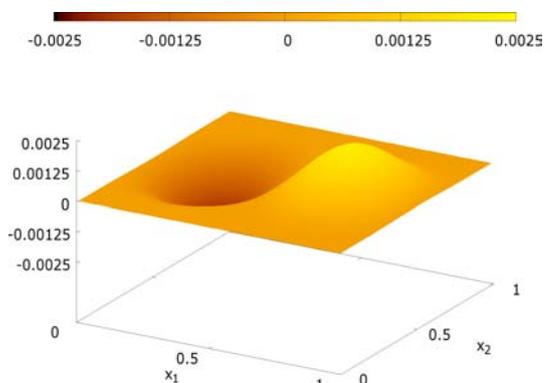
(c) Steuerung $s^*(x)$



(d) Vorzeichenabbildung $p(x)$



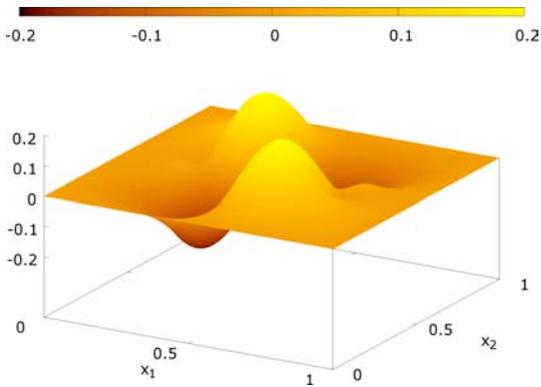
(e) $p_{\text{indirekt}}(x)$



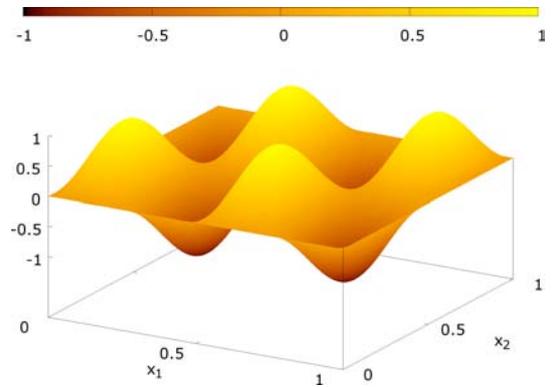
(f) skaliertes adj. Zustand $p(x)$

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

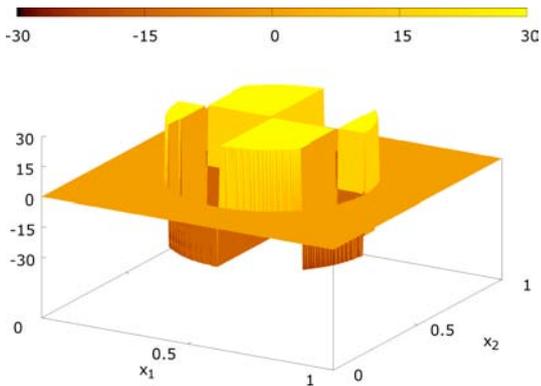
Abbildung 3.5.: Numerische Lösung von (3.51)



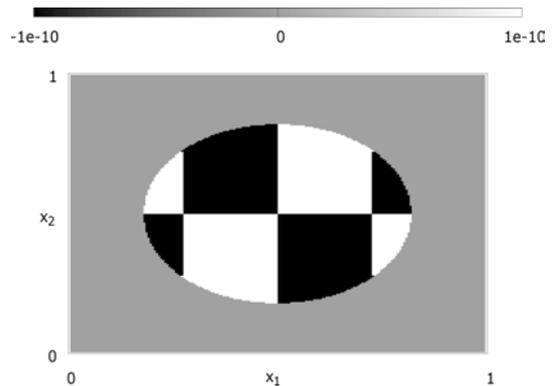
(a) Zustand $y^*(x)$



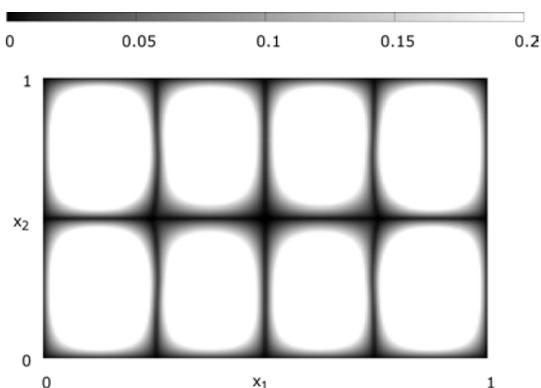
(b) gewünschter Zustand $z(x)$



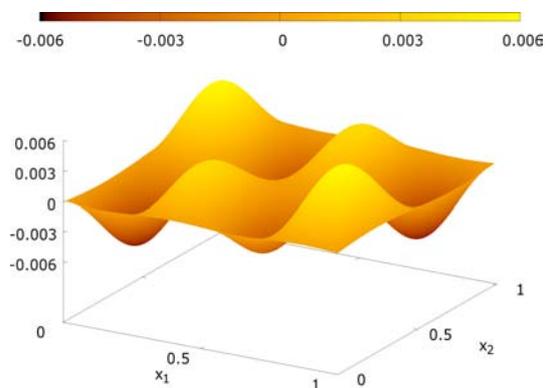
(c) Steuerung $s^*(x)$



(d) Vorzeichenabbildung $B(x)p(x)$



(e) $\text{abs}(y^*(x) - z(x))$



(f) adjungierter Zustand $p(x)$

3.4.2. Semilineare elliptische Beispiele mit einer kubischen Nichtlinearität

Nach den einfachen linearen Einführungsbeispielen wollen wir uns in diesem Abschnitt mit semilinearen elliptischen Steuerproblemen beschäftigen, die eine kubische Nichtlinearität in der Zustandsgleichung besitzen. Diese Nichtlinearitäten haben den Vorteil, dass sie durch ihr Monotonieverhalten automatisch die Voraussetzung 3.1.3 erfüllen. Wir wollen an dieser Stelle sowohl den regularisierten als auch den unregularisierten Fall mit homogenen Dirichlet- oder von-Neumann-Randbedingungen betrachten.

3.4.2.1. Dirichlet-Randbedingungen

Einen Steuerprozess mit einer kubischen Nichtlinearität y^3 in der semilinearen elliptischen Zustandsgleichung findet man sehr häufig in der Literatur. Zum Beispiel wurde das folgende vereinfachte Ginzburg-Landau-Modell der Supraleitung von Ito/Kunisch in [35] zur Optimalsteuerung benutzt:

$$\begin{aligned} -\Delta y - y + y^3 &= s && \text{in } \Omega, \\ y &= 0 && \text{in } \Gamma. \end{aligned} \tag{3.52}$$

Da die Nichtlinearität $d(y) = -y + y^3$ nicht für alle Ortsgebiete die Voraussetzung 3.1.3 erfüllt, beschränken wir uns in den folgenden Beispielen auf die Form

$$\begin{aligned} -\Delta y + y + y^3 &= s && \text{in } \Omega, \\ y &= 0 && \text{in } \Gamma, \end{aligned} \tag{3.53}$$

welche in Tröltzsch [69] vorgestellt wird.

Im Beispiel (3.54) haben wir bewusst den Steuerbereich so gewählt, dass man den gewünschten Zustand nur auf einigen Teilgebieten exakt ansteuern kann, während er in anderen Gebieten nicht erreichbar ist. Mit anderen Steuerbeschränkungen findet man dieses Beispiel auch in Hintermüller/Ulbrich [30]. Es sei im Folgenden der Steuerprozess

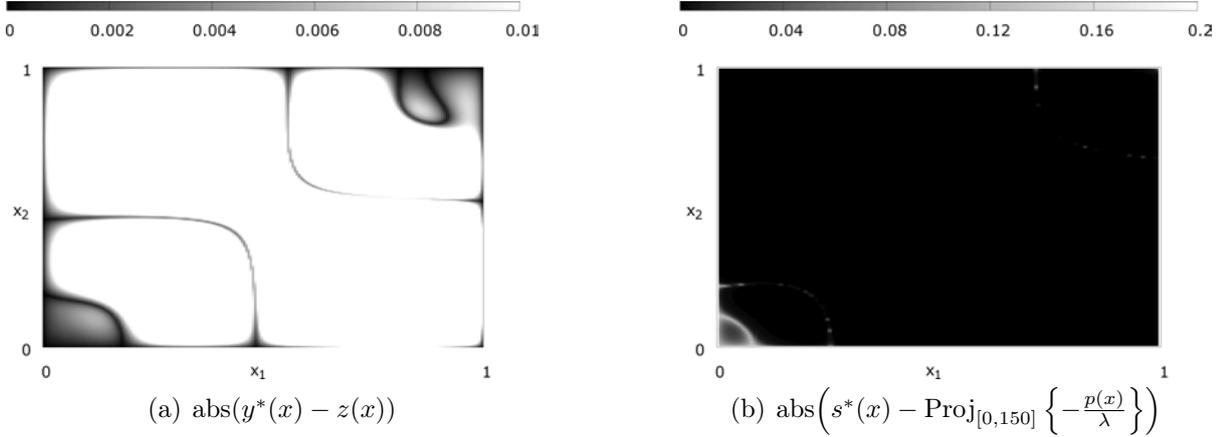
$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, s) := \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\ \text{unter} \quad & -\Delta y + y + y^3 = s && \text{in } \Omega, \\ & y = 0 && \text{in } \Gamma, \\ & s \in S_{ad}, \end{aligned} \tag{3.54}$$

mit $\Omega := (0, 1) \times (0, 1)$, $z(x) := \frac{1}{6} \sin(2\pi x_1) \cdot \sin(2\pi x_2) \cdot \exp(2x_1)$ und dem Steuerbereich

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega) \mid 0 \leq s(x) \leq 150 \quad \forall x \in \Omega\} \tag{3.55}$$

gegeben. Die obere Steuergrenze $s_{\max} = 150$ wurde bewusst so hoch angesetzt, damit im unregularisierten Fall auch singuläre Teilflächen auftreten können.

Abbildung 3.6.: Vergleiche von Zustand (a) und Steuerung (b) von (3.54) mit $\lambda = 10^{-6}$



Genau genommen fällt das Problem (3.54) auf Grund der vorkommenden Dirichlet-Randbedingungen nicht in die Klasse der optimalen Steuerprozesse, welche wir in Kapitel 3.2 eingeführt haben. Hier ergeben sich in den folgenden notwendigen Optimalitätsbedingungen, die u.a. in Bonnans/Shapiro [7] hergeleitet werden, auch homogene Dirichlet-Randbedingungen für den adjungierten Zustand.

Im optimalen Steuerprozess (3.54) müssen für eine kritische Trajektorie (y^*, s^*) mit entsprechender schwacher Lösung $p \in \mathbb{H}_0^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ die Gleichung

$$\begin{aligned} -\Delta p + p + 3(y^*)^2 p &= y^* - z && \text{in } \Omega, \\ p &= 0 && \text{in } \Gamma, \end{aligned} \tag{3.56}$$

sowie die Variationsungleichung

$$\int_{\Omega} (p + \lambda s^*) (s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad} \tag{3.57}$$

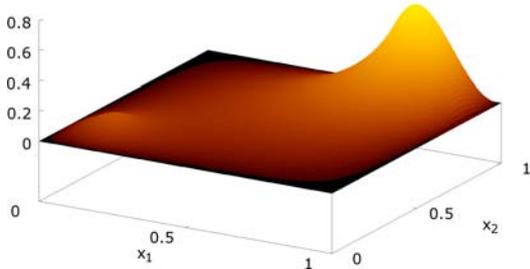
erfüllt sein. Eine Änderung von homogenen von-Neumann-Randbedingungen in homogene Dirichlet-Randbedingungen hat damit keine Auswirkung auf die Berechnung der Projektions- und Schaltbedingung (3.19) und (3.20), da die Variationsungleichungen beider Probleme übereinstimmen. Im regularisierten Fall ($\lambda = 10^{-6}$) stimmt die numerisch bestimmte optimale Steuerung mit der bekannten Projektionsbedingung überein (Abbildung 3.7).

Ohne Regularisierungsterm im Zielfunktional lässt sich der Wunschzustand $z(x)$ in einigen Bereichen des Grundgebietes durch die singuläre Steuerung

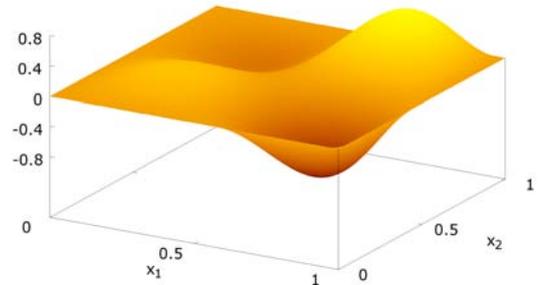
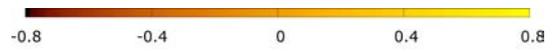
$$\begin{aligned} s^*(x) &= -\Delta z(x) + z(x) + z^3(x) \\ &= (4 - 8\pi^2)z(x) + \frac{4\pi}{3} \cos(2\pi x_1) \cdot \sin(2\pi x_2) \cdot \exp(2x_1) + z(x) + z^3(x) \end{aligned}$$

exakt ansteuern (siehe Abbildung 3.8).

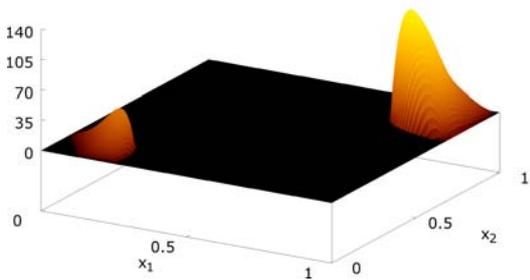
Abbildung 3.7.: Numerische Lösung von (3.54) mit $\lambda = 10^{-6}$



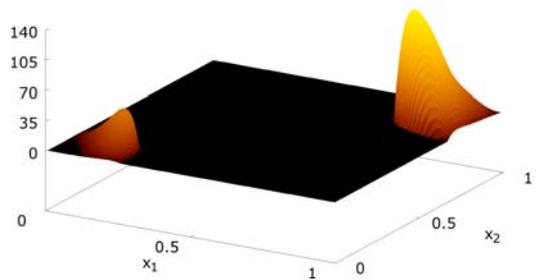
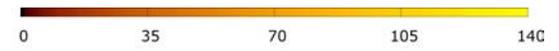
(a) Zustand $y^*(x)$



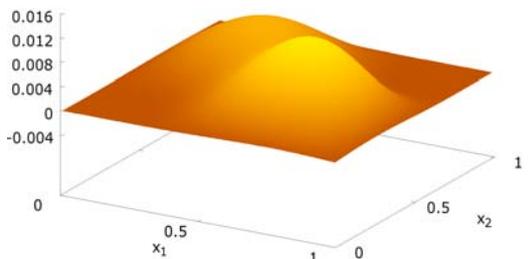
(b) gewünschter Zustand $z(x)$



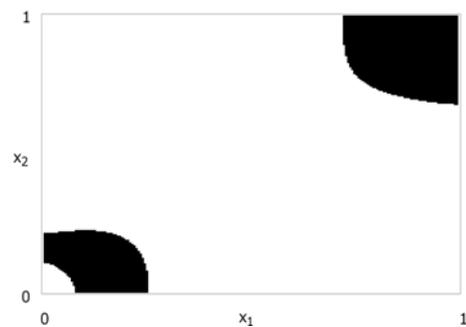
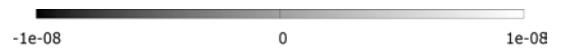
(c) Steuerung $s^*(x)$



(d) $\text{Proj}_{[0,150]} \left\{ -\frac{p(x)}{\lambda} \right\}$



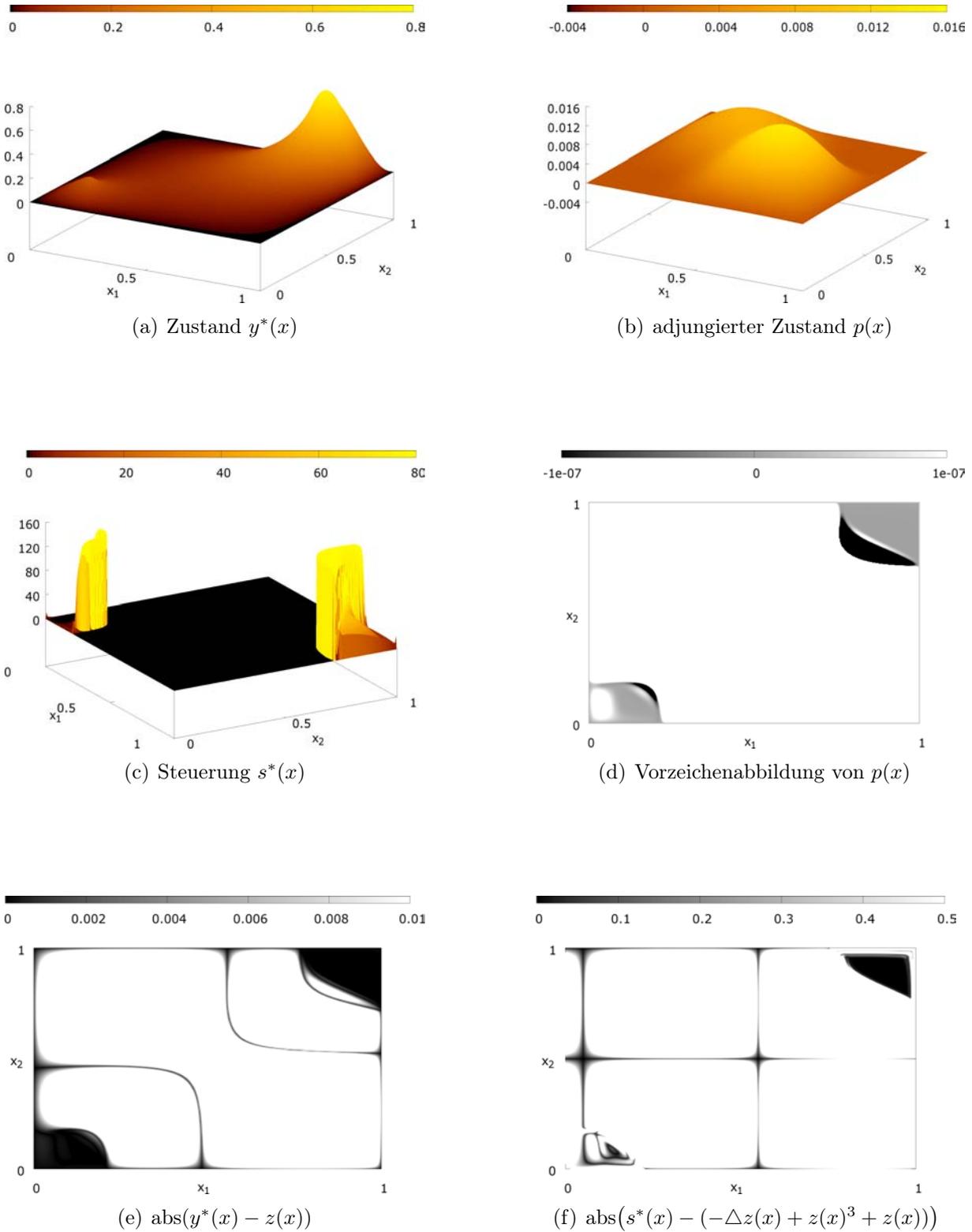
(e) adjungierter Zustand $p(x)$



(f) Vorzeichenabbildung von $p(x)$

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

Abbildung 3.8.: Numerische Lösung von (3.54) mit $\lambda = 0$



3.4.2.2. von-Neumann-Randbedingungen

Das folgende Beispiel eines semilinearen elliptischen Steuerprozesses mit kubischer Nichtlinearität und von-Neumann-Randbedingungen fällt in die Klasse der in (3.8) definierten Probleme. Um zu demonstrieren, dass die numerische Berechnung von singulären Teilflächen auch für komplexere Wunschfunktionen möglich ist, definieren wir auf dem Einheitsquadrat $\Omega := (0, 1) \times (0, 1)$ für das Problem

$$\begin{aligned}
 \text{minimiere} \quad & J(y, s) := \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\
 \text{unter} \quad & -\Delta y + y + y^3 = s && \text{in } \Omega \\
 & \partial_\nu y = 0 && \text{in } \Gamma \\
 & s \in S_{ad},
 \end{aligned} \tag{3.58}$$

mit Steuerbereich

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega) \mid -100 \leq s(x) \leq 100 \quad \forall x \in \Omega\} \tag{3.59}$$

die Wunschfunktion als

$$z(x) := \sin(\exp(1 - x_2^2) \pi (x_1^2 + x_2^2)) \cdot \cos(\exp(x_1^2) \pi x_2^2). \tag{3.60}$$

Man sieht in Abbildung 3.11, dass für $\lambda = 0$ durch diese Wahl der Zielfunktion facettenreiche singuläre und bang-bang Teilflächen entstehen. Der durch MAPLE berechnete Laplace-Operator von z (hier der Übersicht halber in den Ortsvariablen $v := x_1$ und $w := x_2$ geschrieben)

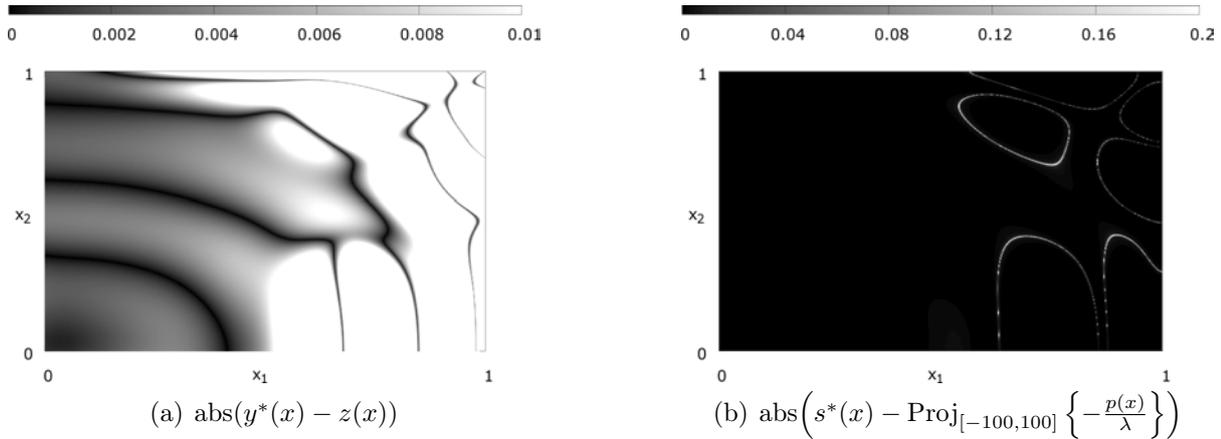
$$\begin{aligned}
 \Delta z(v, w) = & \sin\left(e^{1-w^2} \pi (v^2 + w^2)\right) \cdot \left[\cos\left(e^{v^2} \pi w^2\right) \cdot \left(-4\pi^2 (1 + w^4 + (v^2 - 2) w^2)\right) \right. \\
 & \cdot (v^2 + w^2) \cdot \left(e^{1-w^2}\right)^2 - 4\pi^2 \left(e^{v^2}\right)^2 w^2 (1 + w^2 v^2) \left. \right) - 4\pi \sin\left(e^{v^2} \pi w^2\right) e^{v^2} \\
 & \cdot \left(w^2 v^2 + \frac{1}{2} + \frac{w^2}{2}\right) \left. \right] + 4\pi \left[\left(w^2 - \frac{1}{2}\right) (w^2 + v^2 - 2) \cos\left(e^{v^2} \pi w^2\right) \right. \\
 & \left. + 2\pi (w + 1) \sin\left(e^{v^2} \pi w^2\right) e^{v^2} w^2 (w - 1) \right] \cdot \cos\left(e^{1-w^2} \pi (v^2 + w^2)\right) e^{1-w^2},
 \end{aligned}$$

findet sich im Fall einer singulären Steuerung

$$s^*(x) = -\Delta z(x) + z(x) + z^3(x)$$

in den grau gezeichneten Bereichen der Abbildung 3.11(d) in 3.11(c),(f) wieder.

Abbildung 3.9.: Vergleiche von Zustand (a) und Steuerung (b) von (3.58) mit $\lambda = 10^{-6}$



3.5. Total singuläre Steuerungen

Wir konnten feststellen, dass für verschiedene elliptische Problemklassen die Wahl des Regularisierungsparameters $\lambda = 0$ bewirken kann, dass singuläre Steuerungen auftreten. Die Frage ist nun, ob singuläre Steuerungen auch auf dem kompletten Gebiet Ω entstehen können. Wir werden in diesem Abschnitt sehen, dass unter gewissen Voraussetzungen der Steuerbereich so gewählt werden kann, dass immer eine total singuläre Steuerung für den Steuerprozess optimal ist.

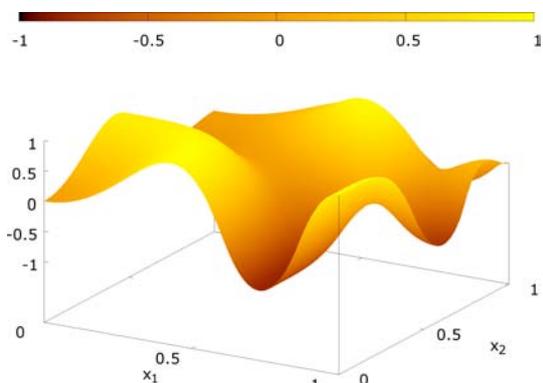
Zuerst betrachten wir ein konstruiertes Beispiel, bei dem die optimale Lösung explizit berechnet werden kann. Der Steuerbereich dieser aus Tröltzsch [69] stammenden Testaufgabe wurde ein wenig abgeändert, um die Wirkungsweise einer singulären Steuerung besser veranschaulichen zu können. Wir definieren auf dem Einheitsquadrat $\Omega := (0, 1) \times (0, 1)$ mit

$$\begin{aligned} &\text{minimiere} && J(y, s) := \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\ &\text{unter} && -\Delta y = s + e_\Omega && \text{in } \Omega, && (3.61) \\ &&& y = 0 && \text{in } \Gamma, \\ &&& s \in S_{ad} \end{aligned}$$

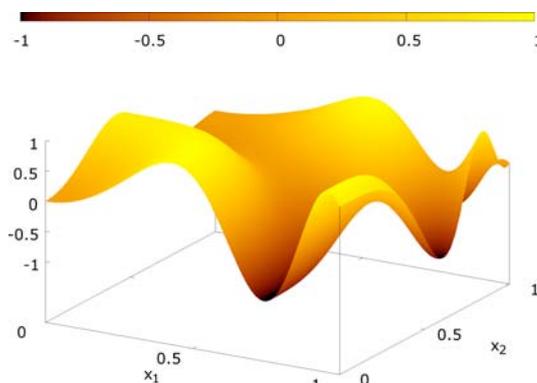
das so genannte Schachbrett-Problem. Ziel dieses Beispiels ist es, eine reine bang-bang Steuerung im Schachbrettmuster zu erzeugen. Solche konstruierten Beispiele helfen, die Genauigkeit der numerischen Verfahren zu überprüfen, da man die exakte optimale Lösung berechnen kann. Der Ausdruck e_Ω in der Zustandsgleichung dient dabei als Ausgleichsterm, um das Schachbrettmuster festlegen zu können. Durch die Unabhängigkeit des Terms $e_\Omega(x)$ von den Funktionen y und s beeinflusst er weder die adjungierte Gleichung (3.40) noch die Variationsungleichung (3.41). Als Steuerbereich für (3.61) wählen wir:

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega) \mid -500 \leq s(x) \leq 500 \quad \forall x \in \Omega\}. \quad (3.62)$$

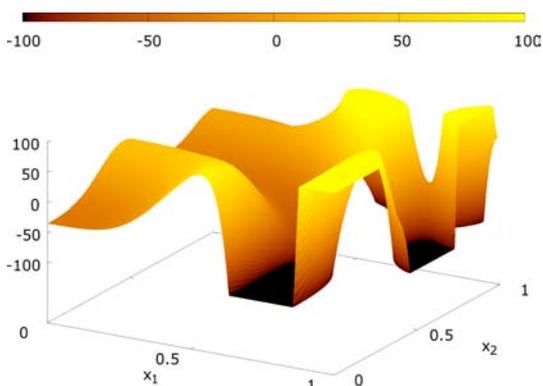
Abbildung 3.10.: Numerische Lösung von (3.58) mit $\lambda = 10^{-6}$



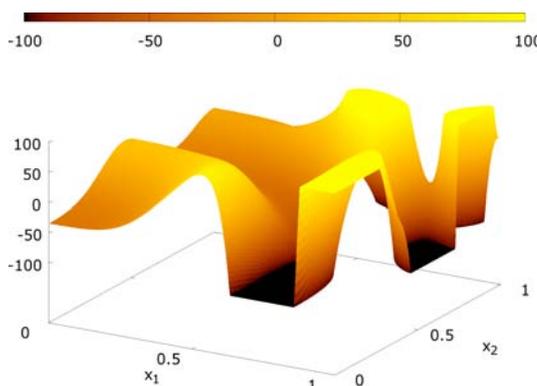
(a) Zustand $y^*(x)$



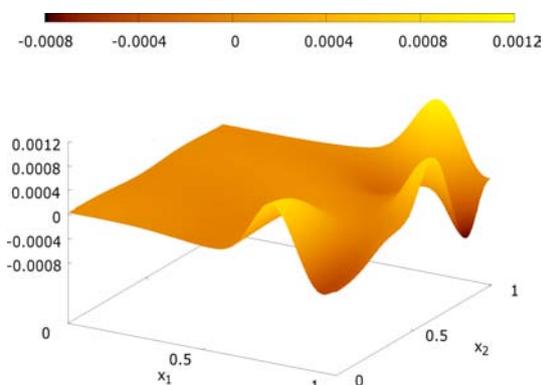
(b) gewünschter Zustand $z(x)$



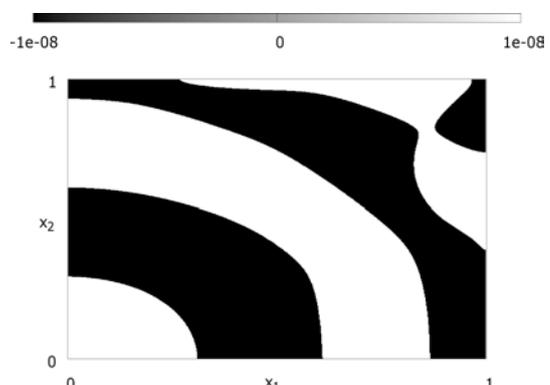
(c) Steuerung $s^*(x)$



(d) $Proj_{[-100,100]} \left\{ -\frac{p(x)}{\lambda} \right\}$



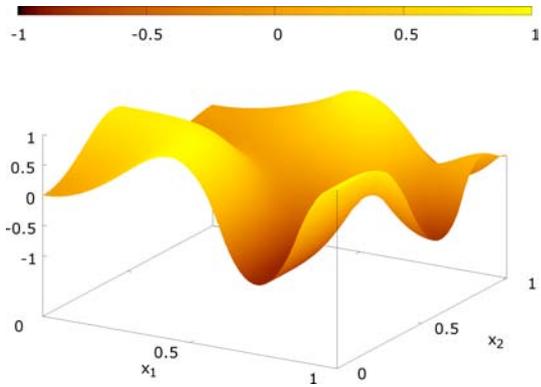
(e) adjungierter Zustand $p(x)$



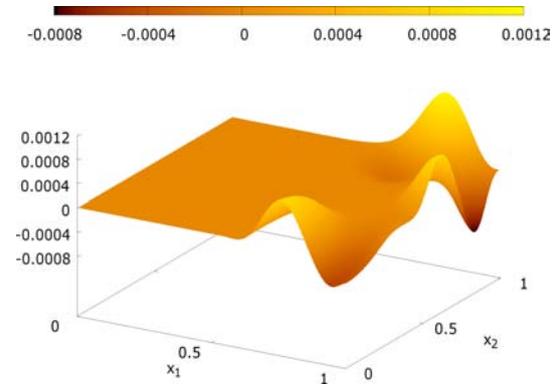
(f) Vorzeichenabbildung von $p(x)$

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

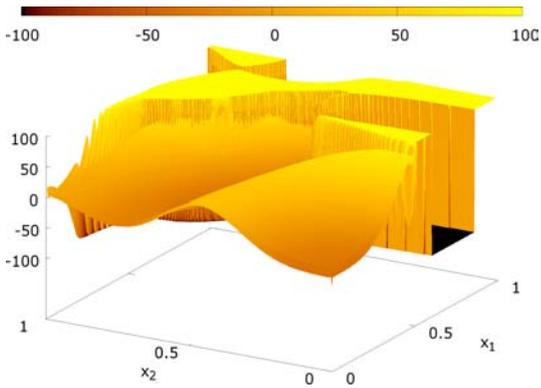
Abbildung 3.11.: Numerische Lösung von (3.58) mit $\lambda = 0$



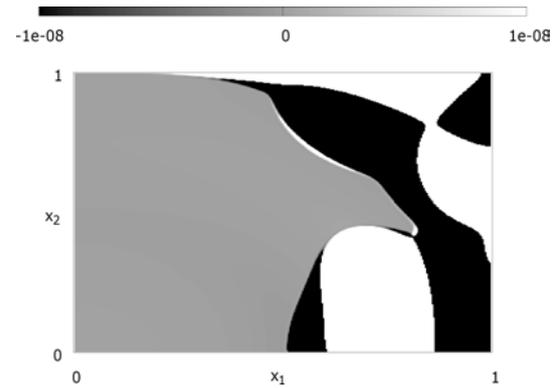
(a) Zustand $y^*(x)$



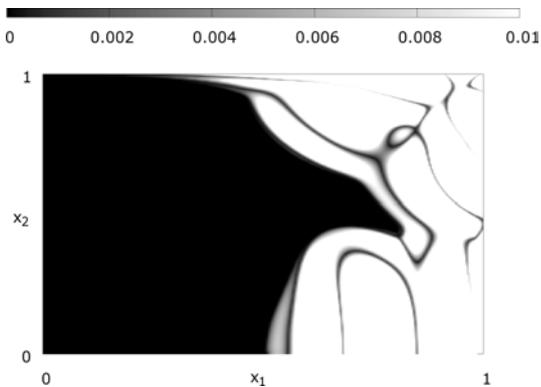
(b) adjungierter Zustand $p(x)$



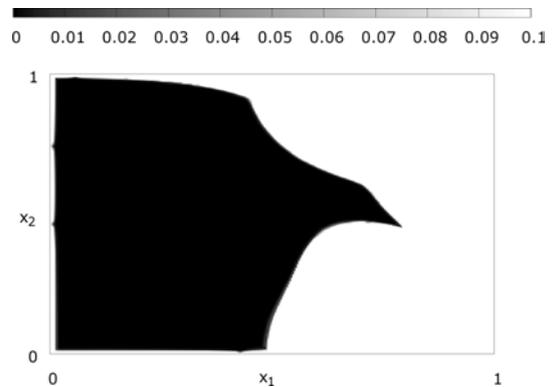
(c) Steuerung $s^*(x)$



(d) Vorzeichenabbildung von $p(x)$

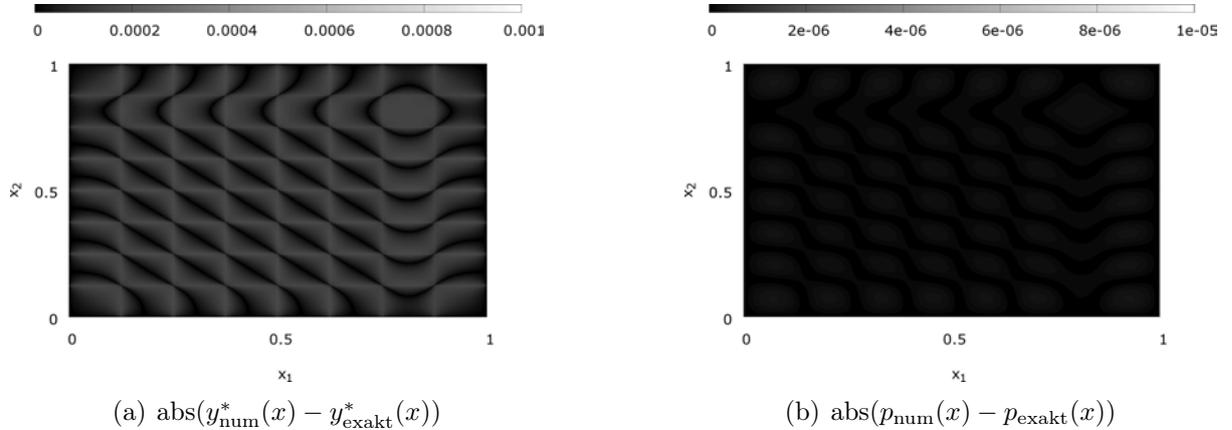


(e) $\text{abs}(y^*(x) - z(x))$



(f) $\text{abs}(s^*(x) - (-\Delta z(x) + z(x)^3 + z(x)))$

Abbildung 3.12.: Vergleiche der numerisch berechneten Zustände von (3.61) zu ihren exakten Werten (3.64) und (3.63)



Um das Schachbrettmuster in der Steuerfunktion zu erhalten, muss man einen adjungierten Zustand konstruieren, der auf allen Kanten der 64 Teilgebiete das Vorzeichen wechselt, damit wegen der Schaltbedingung

$$s^*(x) = -\text{sign}(p(x))$$

die gewünschte bang-bang Steuerung entsteht. Ein geeigneter adjungierter Zustand ist durch die Funktion

$$p(x) := \frac{1}{128\pi^2} \sin(8\pi x_1) \sin(8\pi x_2) \quad (3.63)$$

gegeben, wobei die Skalierung zur einfacheren Darstellung des Laplace-Operator Δp gewählt wurde. Für y^* definiert man die Funktion

$$y^*(x) := \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2), \quad (3.64)$$

welche homogene Randwerte besitzt und der Poisson-Gleichung

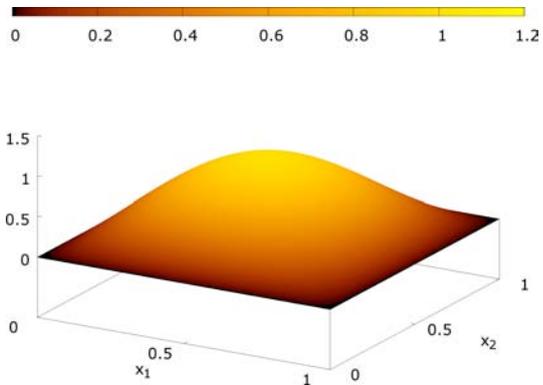
$$-\Delta y = 2\pi^2 y$$

genügt. Damit nun die gewünschte Schachbrettsteuerung diesen Zustand ansteuert, muss man den Ausgleichsterm e_Ω passend wählen. Er wird eine Kombination aus der total singulären Steuerung des Steuerprozesses

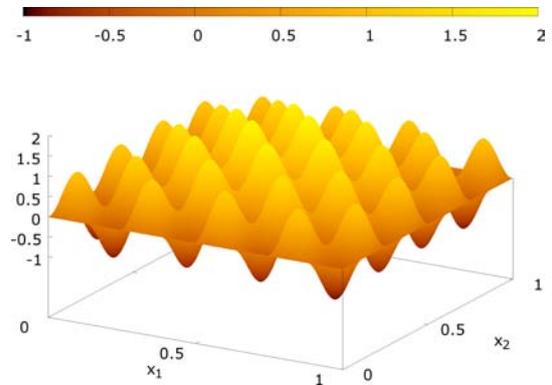
$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, s) := \frac{1}{2} \|y(x) - \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2)\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ \text{unter} \quad & -\Delta y = s \quad \text{in } \Omega, \\ & y = 0 \quad \text{in } \Gamma, \\ & s \in S_{ad} \end{aligned} \quad (3.65)$$

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

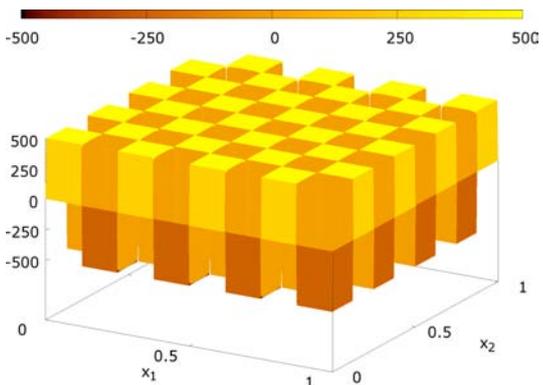
Abbildung 3.13.: Numerische Lösung von (3.61)



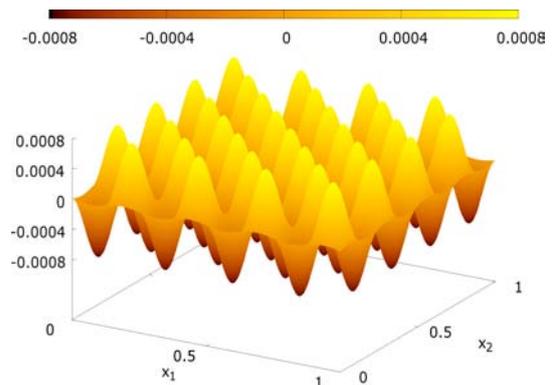
(a) Zustand $y^*(x)$



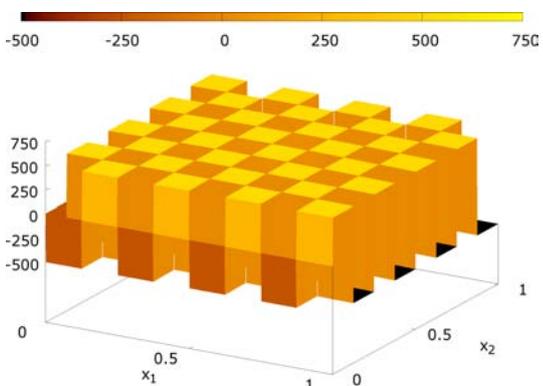
(b) gewünschter Zustand $z(x)$



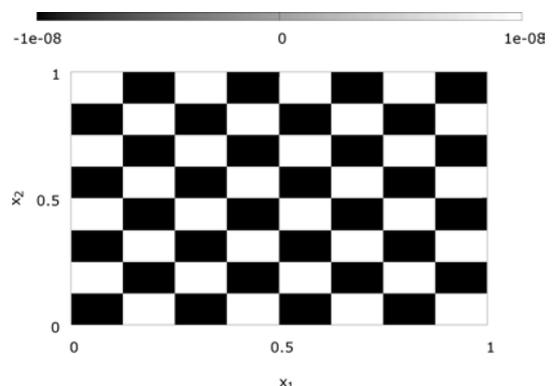
(c) Steuerung $s^*(x)$



(d) skaliertes adj. Zustand $\tilde{p}(x)$



(e) Ausgleichsfunktion $e_\Omega(x)$



(f) Vorzeichenabbildung von $\tilde{p}(x)$

und einem Kompensationsterm für die bang-bang Steuerung sein:

$$\begin{aligned} e_{\Omega}(x) &= -\Delta y^*(x) - s^*(x) \\ &= 2\pi^2 \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) + 500 \operatorname{sign}(-\sin(8\pi x_1) \sin(8\pi x_2)). \end{aligned}$$

Nun fehlt nur noch eine passende Definition für den „gewünschten Zustand“ z . Der Laplace-Operator des adjungierten Zustandes wird zu

$$\Delta p(x) = \frac{2(8\pi)^2}{128\pi^2} \sin(8\pi x_1) \sin(8\pi x_2) = \sin(8\pi x_1) \sin(8\pi x_2)$$

berechnet, womit sich als geeigneter Zielzustand

$$\begin{aligned} z(x) &:= y^*(x) + \Delta p(x) \\ &= \sin(\pi x_1) \sin(\pi x_2) + \sin(8\pi x_1) \sin(8\pi x_2) \end{aligned} \tag{3.66}$$

ergibt, durch den auch die Randbedingung $p|_{\Gamma} = 0$ erfüllt ist. Man stellt in den Abbildungen 3.12 und 3.13 fest, dass die durch AMPL/IPOPT berechnete numerische Lösung eine sehr gute Approximation der Testaufgabe liefert.

Als Vorbereitung für die folgende Betrachtung über die Konstruktion von total singulären Steuerungen betrachte man das Problem (3.65) mit einem allgemeinen Steuerbereich:

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^{\infty}(\Omega) \mid s_{\min} \leq s(x) \leq s_{\max} \quad \forall x \in \Omega\}. \tag{3.67}$$

Man erkennt in Abbildung 3.14, dass sich für verschieden gewählte Steuerbereiche völlig unterschiedliche optimale Steuerungen für den Prozess (3.65) einstellen. Während sich für relativ kleine Steuerschranken in Abbildung 3.14(a),(b) und (c),(d) noch bang-bang Steuerungen als optimale Lösung für (3.65) ergeben, entstehen bei größeren Steuerbereichen in Abbildung 3.14(e),(f) bereits singuläre Teilflächen. Dies liegt an dem Umstand, dass durch größere Steuerbereiche in einzelnen Gebieten der gewünschten Zustand exakt angesteuert werden kann. Vergrößert man die Steuerbereiche noch mehr, so entsteht sogar eine total singuläre Steuerung für (3.65) mit Zielfunktionswert $J(y^*, s^*) = 0$ (vgl. Abbildung 3.15).

Dieser Sachverhalt ist nicht nur für das Schachbrett-Problem erfüllt. Für jedes Problem der Form (3.8) mit $\lambda = 0$ und $d \equiv 0$, dessen Wunschzustand $z \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ homogene von-Neumann-Randbedingungen und einen beschränkten Laplace-Operator Δz besitzt, lässt sich ein Steuerbereich angeben, so dass optimal Steuerung von (3.8) total singulär ist. Definiert man den Steuerbereich (3.67) durch die konstanten Steuerschranken

$$s_{\max} := \|\Delta z + z\|_{\mathbb{L}^{\infty}(\Omega)} < \infty, \quad s_{\min} := -s_{\max}, \tag{3.68}$$

dann ist die speziell gewählte Steuerung

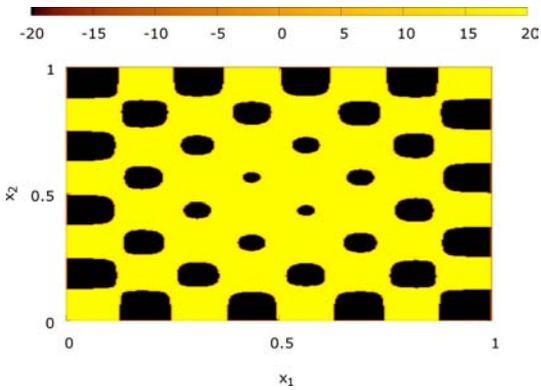
$$s^*(x) := -\Delta z(x) + z(x) \tag{3.69}$$

zulässig. Setzt man diese in die Zustandsgleichung aus (3.8) ein, ergibt sich für alle $x \in \Omega$:

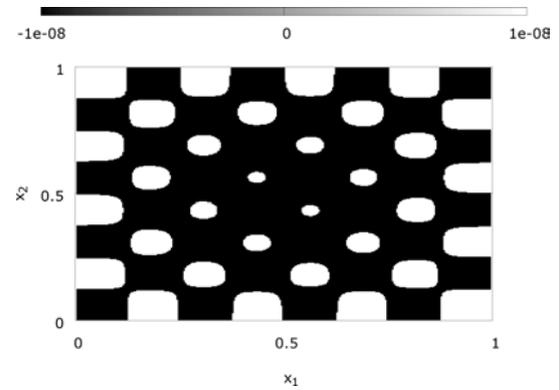
$$\begin{aligned} -\Delta y(x) + y(x) &= s^*(x) \\ \Rightarrow -\Delta y(x) + y(x) &= -\Delta z(x) + z(x). \end{aligned} \tag{3.70}$$

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

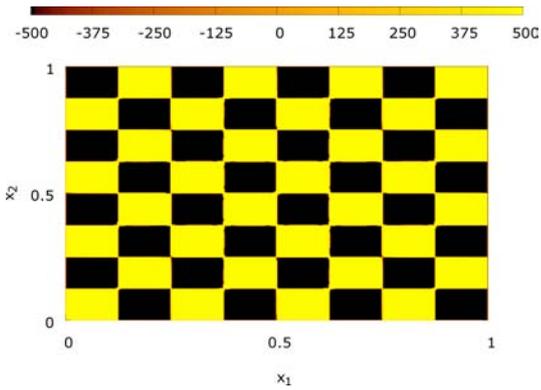
Abbildung 3.14.: Steuerung und Vorzeichen des adjungierten Zustandes für (3.65) mit verschiedenen Steuerschranken $-s_{\min} = s_{\max} = c$



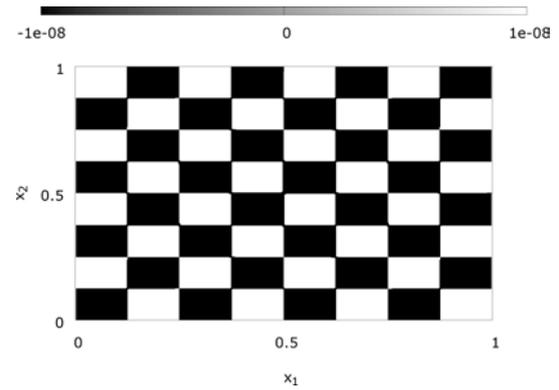
(a) 2D-Aufsicht von $s^*(x)$ mit $c = 20$



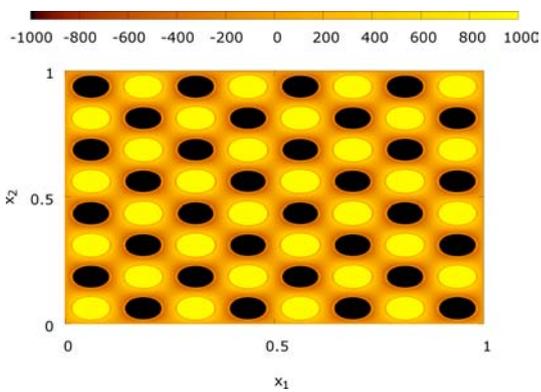
(b) Vorzeichenabbildung $p(x)$ mit $c = 20$



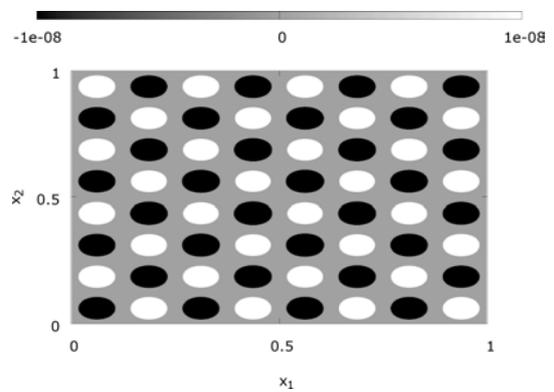
(c) 2D-Aufsicht von $s^*(x)$ mit $c = 500$



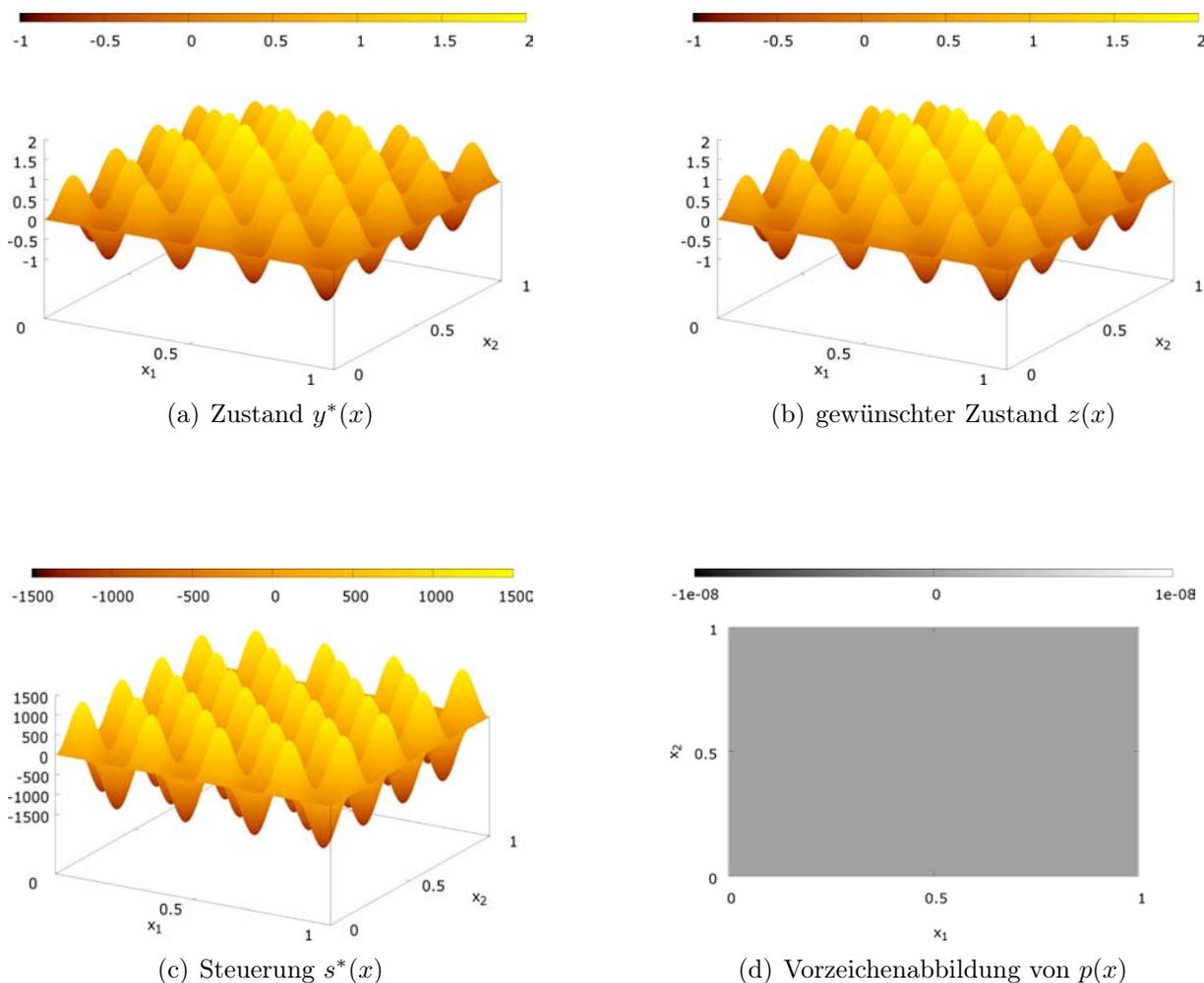
(d) Vorzeichenabbildung $p(x)$ mit $c = 500$



(e) 2D-Aufsicht von $s^*(x)$ mit $c = 1000$



(f) Vorzeichenabbildung $p(x)$ mit $c = 1000$

Abbildung 3.15.: Numerische Lösung von (3.65) mit $-s_{\min} = s_{\max} = 5000$ 

Da die Funktionen y^* und z dieselben Randbedingungen besitzen, gilt die Gleichheit beider Funktionen auf ganz $\bar{\Omega}$. In diesem Fall genügt die konstante Funktion $p \equiv 0$ sowohl der adjungierten Zustandsgleichung

$$\begin{aligned} -\Delta p(x) + p(x) &= y^*(x) - z(x) \\ \Rightarrow -\Delta p(x) + p(x) &= 0 \end{aligned} \tag{3.71}$$

als auch der Randbedingung $\partial_\nu p|_\Gamma = 0$.

Man hat also eine total singuläre Steuerung gefunden, welche zulässig ist und zusammen mit $p \equiv 0$ die notwendigen Optimalitätsbedingungen erfüllt. Wegen der Eindeutigkeit des Steuerungs-Zustands-Operators ist diese Steuerung der einzig mögliche Kandidat für ein Minimum mit Zielfunktionswert $J(y^*, s^*) = 0$ und somit ein eindeutiges globales Minimum.

Wir haben die Existenz einer total singulären Steuerung an dieser Stelle nur für spezielle Steuerprozesse der Form (3.8) aufgezeigt. Allerdings konnte man bei der Herleitung von Schaltbedingungen erkennen, dass diese für eine große Klasse von Steuerprozessen iden-

tisch sind. Aus diesem Grund möchten wir noch einige Schlussfolgerungen festhalten in der

Bemerkung 3.5.1.

1. Die total singuläre Steuerung aus (3.69) ist mit demselben Steuerbereich auch für einen Steuerprozess (3.8) mit Dirichlet-Randbedingungen $y|_{\Gamma} = 0$ optimal, falls auch $z|_{\Gamma} = 0$ gilt.
2. Die total singuläre Steuerung $s^* := -\Delta z$ ist für das unregularisierte Poisson-Problem (3.39) mit Steuerbereich

$$S_{ad} := \left\{ s \in \mathbb{L}^{\infty}(\Omega) \mid -\|\Delta z\|_{\mathbb{L}^{\infty}(\Omega)} \leq s(x) \leq \|\Delta z\|_{\mathbb{L}^{\infty}(\Omega)} \quad \forall x \in \Omega \right\}$$

unter homogenen Dirichlet- oder von-Neumann-Randbedingungen optimal, falls der gewünschte Zustand z denselben Randbedingungen genügt.

Die Aussagen in Bemerkung 3.5.1 gelten natürlich nur für Steuerprozesse mit Wunschfunktionen $z \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$, die einen beschränkten Laplace-Operator Δz besitzen. In den obigen Aussagen haben wir uns auf die Betrachtung von elliptischen Steuerprozessen beschränkt, die keine Nichtlinearität aufweisen. Wie man im konstruierten Beispiel (3.61) gesehen hat, können Inhomogenitäten den singulären Anteil der Steuerung auslöschen und nur eine bang-bang Steuerung zulassen. Dies ist aber eher selten der Fall, so dass man auch für die meisten unregularisierten semilinearen Steuerprozesse der Form (3.8) einen Steuerbereich S_{ad} so konstruieren kann, dass eine total singuläre Steuerung optimal ist.

3.6. Semilineare elliptische optimale Steuerprozesse mit Randsteuerungen

In diesem Abschnitt wollen wir Schalt- und Projektionsbedingungen für semilineare elliptische Probleme mit einer Randsteuerung herleiten. Dabei ist die Vorgehensweise sehr ähnlich zum Falle einer verteilten Steuerung. Mit den Funktionen $u_{\min}, u_{\max} : \Gamma \rightarrow \mathbb{R}$, für die $u_{\min}, u_{\max} \in \mathbb{L}^{\infty}(\Gamma)$ und $u_{\min}(x) < u_{\max}(x)$ für alle $x \in \Gamma$ gelten soll, definieren wir die Menge der zulässigen Steuerungen als:

$$U_{ad} := \{u \in \mathbb{L}^{\infty}(\Gamma) \mid u_{\min}(x) \leq u(x) \leq u_{\max}(x) \quad \forall x \in \Gamma\}. \quad (3.72)$$

Nach Satz 3.1.5 wird dem Randwertproblem

$$\begin{aligned} -\Delta y + y &= 0 && \text{in } \Omega, \\ \partial_{\nu} y + b(y) &= u && \text{in } \Gamma, \\ u &\in U_{ad}, \end{aligned} \quad (3.73)$$

unter der Voraussetzung 3.1.3 jeder Randsteuerung $u \in U_{ad}$ genau ein Zustand $y \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ zugeordnet. Den zugehörigen Steuerungs-Zustands-Operator bezeichnen wir mit

$$G : U_{ad} \longrightarrow \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega}), \quad u \mapsto G(u).$$

Um zu kennzeichnen, dass ein Zustand y^* in direkter Abhängigkeit zur gewählten Steuerung u^* steht, benutzen wir auch hier die Schreibweise $y^* := y(u^*) := G(u^*)$. Diese Abbildung ist wie im Falle einer verteilten Steuerung lokal Lipschitz-stetig und Fréchet-differenzierbar in $u^* \in U_{ad}$ mit Ableitung

$$G'(u^*)u = y,$$

wobei $y \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ die schwache Lösung des linearisierten Randwertproblems

$$\begin{aligned} -\Delta y + y &= 0 && \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu y + b_y(y^*)y &= u && \text{in } \Gamma \end{aligned} \tag{3.74}$$

mit $y^* = G(u^*)$ darstellt. In Tröltzsch [69] werden auch für Probleme der Form

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, u) := \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|u\|_{\mathbb{L}^2(\Gamma)}^2 \\ \text{unter} \quad & \begin{aligned} -\Delta y + y &= 0 && \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu y + b(y) &= u && \text{in } \Gamma, \\ & u \in U_{ad}, \end{aligned} \end{aligned} \tag{3.75}$$

notwendige Optimalitätsbedingungen hergeleitet. Die adjungierte Zustandsgleichung ergibt sich zu

$$\begin{aligned} -\Delta p + p &= y^* - z && \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu p &= 0 && \text{in } \Gamma, \end{aligned} \tag{3.76}$$

deren Lösung ebenfalls im Raum $\mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ liegt. Eine kritische Steuerung $u^* \in U_{ad}$ von (3.75) muss mit dem durch $y^* \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ festgelegten adjungierten Zustand $p \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ der Variationsungleichung

$$\int_{\Gamma} (p + \lambda u^*) (u - u^*) \geq 0 \quad \forall u \in U_{ad} \tag{3.77}$$

genügen. Wie in Abschnitt 3.2 erhält man im Fall $\lambda > 0$ aus (3.77) eine Projektionsabbildung für eine kritische Steuerung

$$u^*(x) = \text{Proj}_{[u_{\min}(x), u_{\max}(x)]} \left\{ -\frac{p(x)|_{\Gamma}}{\lambda} \right\}. \tag{3.78}$$

Für einen nicht regularisierten Steuerprozess ergibt sich mit Hilfe der Schaltfunktion $\sigma : \Gamma \longrightarrow \mathbb{R}$

$$\sigma(x) := p(x) \tag{3.79}$$

und (3.77) die folgende Schaltbedingung

$$u^*(x) = \begin{cases} u_{\min}(x), & \text{falls } \sigma(x) > 0, \\ \text{unbestimmt}, & \text{falls } \sigma(x) = 0, \\ u_{\max}(x), & \text{falls } \sigma(x) < 0, \end{cases} \quad (3.80)$$

für eine kritische Steuerung $u^* \in U_{ad}$ von (3.75) mit $\lambda = 0$. In diesem Fall definieren wir mit

$$\Theta := \{x \in \Gamma \mid p(x) = 0\} \quad (3.81)$$

die Menge der Punkte aus Γ , in denen der adjungierte Zustand und somit auch die Schaltfunktion (3.79) verschwindet.

Für alle $x \in \Gamma \setminus \bar{\Theta}$ berechnet sich die kritische Steuerung je nach Vorzeichen des adjungierten Zustandes am Rand zu einer der beiden Steuerschranken. Für Punkte aus dem topologischen Inneren der Menge (3.81) existiert nach (3.80) zunächst keine Bedingung für eine kritische Steuerung u^* . Da diese zudem nur auf dem Rand des Grundgebietes definiert ist, kann man für eine explizite Berechnung der singulären Steuerung nicht einfach die adjungierte Zustandsgleichung auswerten, weil diese nur in Ω definiert ist. Man müsste eine differenzierbare Fortsetzung von der Lösung von (3.76) auf Γ finden, um eine singuläre Steuerung über den Ausdruck

$$\partial_v y^* = u^* - b(y^*) \quad (3.82)$$

mit dem adjungierten Zustand in Beziehung zu setzen. Dafür ist sicherzustellen, dass die Normalenableitung der Spur des Laplace-Terms des adjungierten Zustandes zumindest im schwachen Sinne $\Delta p \in \mathbb{H}^1(\Gamma)$ existiert. Dies kann im Allgemeinen durch eine Funktion $p \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ nicht erfüllt werden, so dass die nachfolgenden Betrachtungen und Beispiele nur als Heuristik und Denkanstoß zu betrachten sind.

Nehmen wir also im Weiteren an, dass der Ausdruck

$$\partial_v \Delta p(x) \quad \forall x \in \Gamma \quad (3.83)$$

existiert und wohldefiniert ist. Da zusätzlich mindestens die Regularität $z, p, y^* \in \mathbb{H}^1(\Omega) \cap C(\bar{\Omega})$ vorliegt, können wir

$$-\partial_v \Delta p(x) + \partial_v p(x) = \partial_v y^*(x) - \partial_v z(x) \quad \forall x \in \Gamma \quad (3.84)$$

als eine mögliche differenzierbare Fortsetzung der adjungierten Zustandsgleichung (3.76) auf den Rand annehmen. Mit (3.82) und der Randbedingung des adjungierten Zustandes ergibt sich wegen

$$u^*(x) = b(y^*(x)) + \partial_v z(x) - \partial_v \Delta p(x) \quad \forall x \in \overset{\circ}{\Theta} \quad (3.85)$$

eine notwendige Bedingung einer kritischen Steuerung von (3.75) in den Gebieten, wo der adjungierte Zustand verschwindet. Man sieht, dass man die Bedingung (3.83) eigentlich

nur für Punkte $x \in \overset{\circ}{\Theta}$ benötigt und zudem ausnutzen kann, dass dort $p(x) = 0$ gilt. Um diese Vermutung numerisch nachzuprüfen, betrachten wir das folgende Beispiel

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, u) := \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|u\|_{\mathbb{L}^2(\Gamma)}^2 \\ \text{unter} \quad & -\Delta y + y = 0 && \text{in } \Omega, \\ & \partial_\nu y = u && \text{in } \Gamma, \\ & u \in U_{ad}, \end{aligned} \tag{3.86}$$

mit $\Omega := (0, 1) \times (0, 1)$, der Wunschfunktion $z(x) := \sin(4\pi x_1) \sin(2\pi x_2)$ und einem Steuerbereich der Form (3.80) mit $-u_{\min}(x) = u_{\max}(x) \equiv 5$.

Man erkennt in Abbildung 3.16(c)-(f), dass die gezeigte numerische Lösung die Projektionsbedingung (3.78) für $\lambda = 10^{-5}$ erfüllt. Für den unregularisierten Fall wurde in der Abbildung 3.17(c)-(f) der adjungierte Zustand skaliert, damit er zusammen mit der Steuerung in einem Bild geplottet werden konnte. Die jeweilige Skalierung ist unterhalb des Bildes angegeben. Man erkennt, dass die numerische Lösung der Vorzeichenbedingung

$$u^*(x) = \begin{cases} u_{\min}(x), & \text{falls } p(x) > 0, \\ u_{\max}(x), & \text{falls } p(x) < 0, \end{cases} \tag{3.87}$$

in allen Punkten $x \in \Gamma \setminus \bar{\overset{\circ}{\Theta}}$ genügt. Die für dieses Beispiel angenommene singuläre Steuerung

$$u^*(x) = \partial_\nu z(x) - \partial_\nu \Delta p(x) \quad \forall x \in \overset{\circ}{\Theta} \tag{3.88}$$

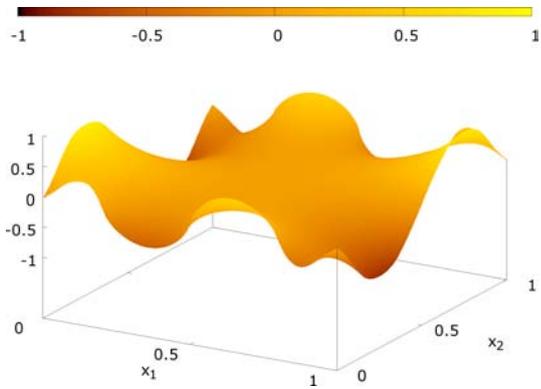
wurde in 3.17(c)-(f) blau gepunktet abgebildet. Dabei wurde der heuristische Term $\partial_\nu \Delta p$ durch einen geeigneten Differenzenoperator numerisch approximiert. Man erkennt, dass die Steuerung in (3.88) für Punkte $x \in \overset{\circ}{\Theta}$ exakt mit der von AMPL/IPOPT berechneten Lösung übereinstimmt. Damit erfüllt sie die Schaltbedingung

$$u^*(x) = \begin{cases} u_{\min}(x), & \text{falls } \sigma(x) > 0, \\ \text{unbestimmt}, & \text{falls } x \in \partial\overset{\circ}{\Theta}, \\ \partial_\nu z(x) - \partial_\nu \Delta p(x), & \text{falls } x \in \overset{\circ}{\Theta}, \\ u_{\max}(x), & \text{falls } \sigma(x) < 0, \end{cases} \tag{3.89}$$

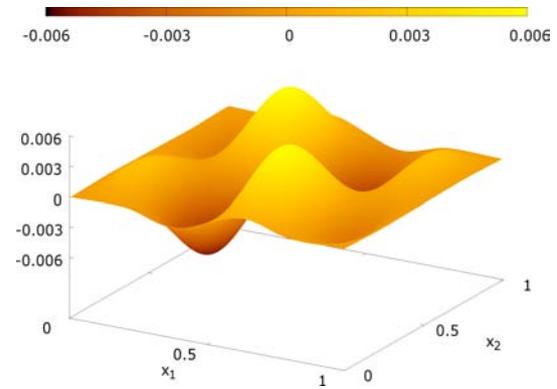
auf ganz Γ . Alles deutet darauf hin, dass die Vermutung (3.83) in diesem Fall zutrifft und somit kann das hier vorgestellte Beispiel als Denkanstoß für weitere Untersuchungen dienen.

3. Optimale Steuerung von semilinearen elliptischen Gleichungen

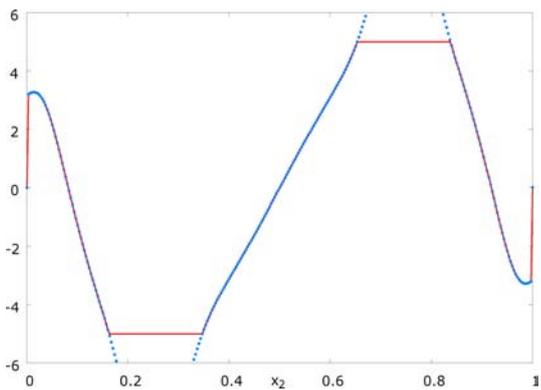
Abbildung 3.16.: Numerische Lösung von (3.86) mit $\lambda = 10^{-5}$



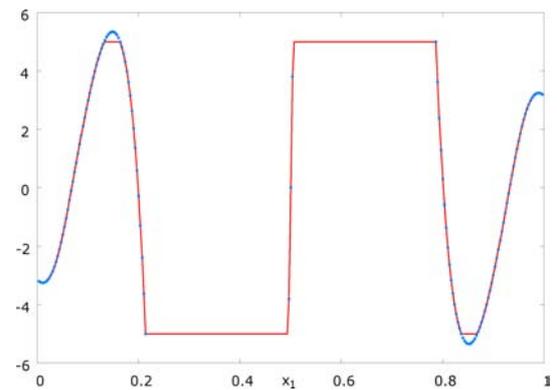
(a) Zustand $y^*(x)$



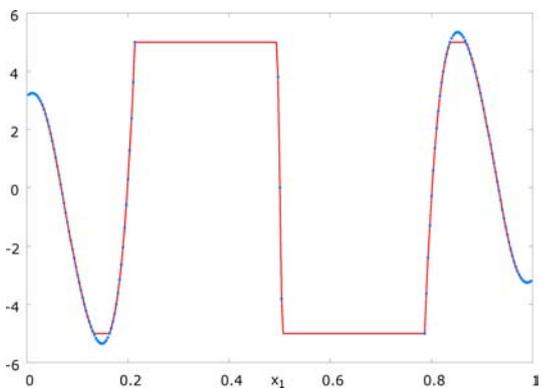
(b) adjungierter Zustand $p(x)$



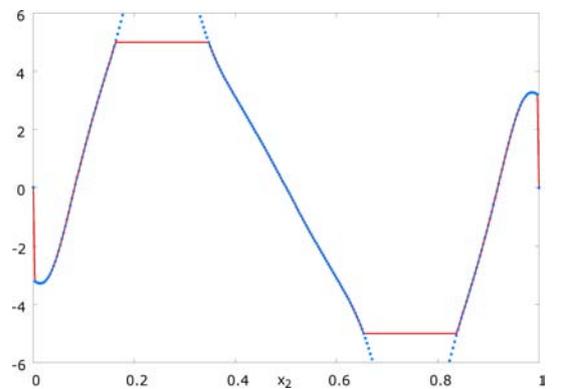
(c) Linker Rand ($x_1 = 0$): $u^*(x)$ und $-\frac{p(x)}{\lambda}$



(d) Oberer Rand ($x_2 = 1$): $u^*(x)$ und $-\frac{p(x)}{\lambda}$

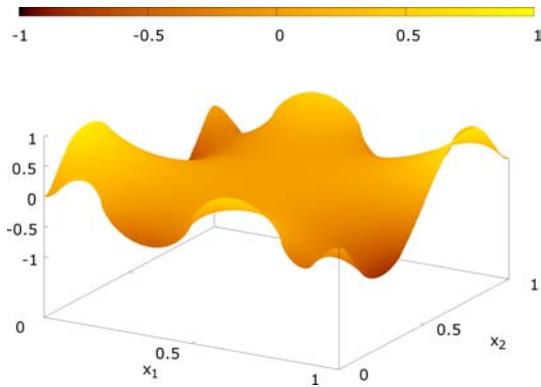


(e) Unterer Rand ($x_2 = 0$): $u^*(x)$ und $-\frac{p(x)}{\lambda}$

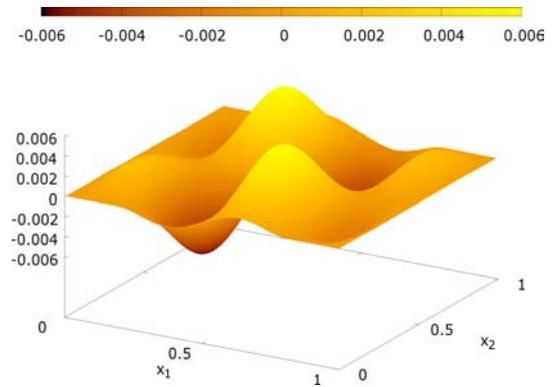


(f) Rechter Rand ($x_1 = 1$): $u^*(x)$ und $-\frac{p(x)}{\lambda}$

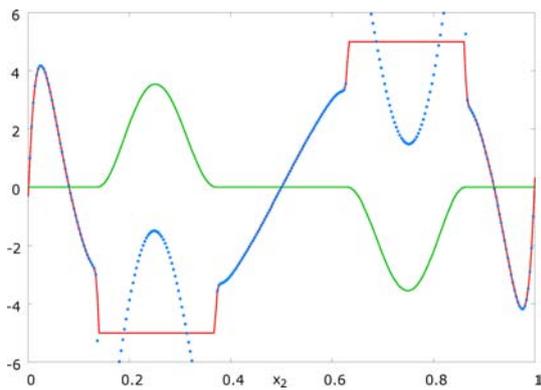
Abbildung 3.17.: Numerische Lösung von (3.86) mit $\lambda = 0$



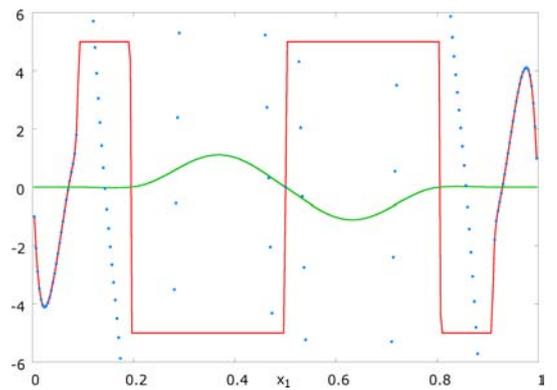
(a) Zustand $y^*(x)$



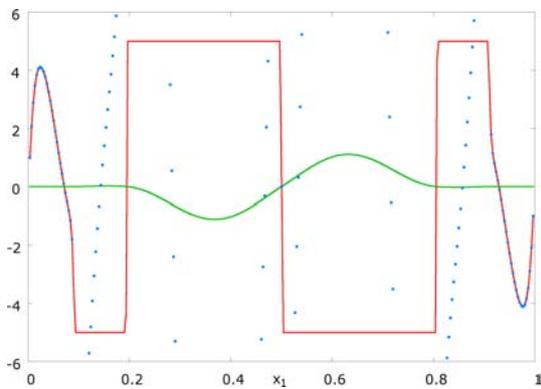
(b) adjungierter Zustand $p(x)$



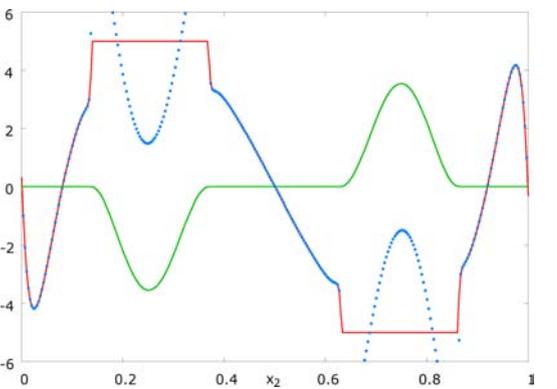
(c) LR: $u^*(x)$, $-\partial_v \Delta p(x) + \partial_v z(x)$ und $10^5 \cdot p$



(d) OR: $u^*(x)$, $-\partial_v \Delta p(x) + \partial_v z(x)$ und $10^3 \cdot p$



(e) UR: $u^*(x)$, $-\partial_v \Delta p(x) + \partial_v z(x)$ und $10^3 \cdot p$



(f) RR: $u^*(x)$, $-\partial_v \Delta p(x) + \partial_v z(x)$ und $10^5 \cdot p$

4. Optimale Steuerung von semilinearen parabolischen Gleichungen

Parabolische Differentialgleichungen beschreiben im Gegensatz zu elliptischen Gleichungen instationäre Prozesse. Durch Hinzunahme einer weiteren Variablen kann der Zustand auf dem Ortsgebiet zu jedem Zeitpunkt t beschrieben werden. Aus diesem Grund betrachten wir die dynamische Veränderung der Gleichung auf dem Raum-Zeit-Zylinder $Q := \Omega \times (0, T)$. Das geläufigste Beispiel einer parabolischen Differentialgleichung ist die Wärmeleitungsgleichung, welche die Wärmeverteilung eines Körpers in einem gegebenen Raum-Zeit-Zylinder beschreibt. Ebenfalls werden chemische Reaktions- oder Diffusionsprozesse sowie viele weitere physikalische oder biologische dynamische Probleme mit einer parabolischen Zustandsgleichung beschrieben. Zur Lösung solcher Gleichungen betrachtet man ein Anfangs-Randwertproblem, wo neben den Bedingungen auf dem Rand $\Sigma := \Gamma \times (0, T)$ noch eine Anfangsbedingung y_0 für den Zustand y zum Zeitpunkt $t = 0$ gegeben ist.

In diesem Kapitel werden einige theoretische und numerische Aspekte zur Lösung von optimalen Steuerprozessen unter einer parabolischen Dynamik behandelt. Dabei werden wir zunächst eine semilineare parabolische Modellgleichung beschreiben und zusammenfassen wie eine numerische Approximation solcher Gleichungen möglich ist. Die Lösungsräume parabolischer Steuerprozesse sowie notwendige und hinreichende Optimalitätsbedingungen wurden bereits ausführlich in Tröltzsch [69] beschrieben, so dass wir uns hier auf eine Zusammenfassung der dort vorgestellten Ergebnisse beschränken können. Danach werden wir uns mit dem linearen Auftreten von Steuerfunktionen im Prozess beschäftigen, die uns wie im elliptischen Fall auf singuläre Steuerungen führen werden.

4.1. Die semilineare parabolische Modellgleichung

Man betrachte im Folgenden ein beschränktes $C^{1,1}$ -Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n = 1, 2$, mit Rand Γ . Zudem sei eine feste Endzeit $T > 0$ gegeben, so dass der Raum-Zeit Zylinder $Q := \Omega \times (0, T)$ wohldefiniert ist. Das semilineare parabolische Anfangs-Randwertproblem definieren wir als

$$\begin{aligned} y_t - \Delta y + d(y) &= s && \text{in } Q := \Omega \times (0, T), \\ \partial_\nu y + b(y) &= u && \text{in } \Sigma := \Gamma \times (0, T), \\ y(\cdot, 0) &= y_0 && \text{in } \Omega, \end{aligned} \tag{4.1}$$

wobei die Funktionen d und b die Nichtlinearitäten des Systems sowie s bzw. u potentiell auftretende verteilte bzw. Randsteuerungen darstellen. Der stationäre Anfangszustand des dynamischen Prozesses ist für den Zeitpunkt $t = 0$ für alle $x \in \Omega$ mit $y_0(x)$ gegeben.

Da wir als Steuerungen wieder \mathbb{L}^∞ -Funktionen zulassen möchten, stellt sich die Frage, unter welchen Voraussetzungen an die Nichtlinearitäten für das Tupel (s, u, y_0) eine eindeutige Lösung der Zustandsgleichung (4.1) existiert. Diese werden angegeben in

Voraussetzung 4.1.1. *Für die Nichtlinearitäten $d : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ bzw. $b : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ gelten dieselben Voraussetzungen wie in Voraussetzung 3.1.3. Zudem sei die Anfangsverteilung y_0 aus $C(\bar{\Omega})$ fest vorgegeben.*

Unter dieser Voraussetzung definieren wir für ein vorgegebenes Tripel (s, u, y_0) eine Funktion $y \in \mathbb{H}^{1,0}(Q) \cap \mathbb{L}^\infty(Q)$ als **schwache Lösung** des Anfangs-Randwertproblems (4.1), falls die **Variationsgleichung** bzw. **schwache Formulierung**

$$- \iint_Q yv_t + \iint_Q (\nabla y \nabla v + d(y)v) + \iint_\Sigma b(y)v = \iint_Q sv + \iint_\Sigma uv + \int_\Omega y_0 v(\cdot, 0)$$

für alle Testfunktionen $v \in \mathbb{H}^{1,1}(Q)$ erfüllt ist, die der zusätzliche Bedingung $v(\cdot, T) = 0$ genügen. Zur Charakterisierung einer optimalen Lösung benutzen wir einen Spezialfall des in Tröltzsch [69] bewiesenen Satzes 5.6.

Satz 4.1.2. *Unter der Voraussetzung 4.1.1 besitzt das Anfangs-Randwertproblem (4.1) für jedes Tripel $s \in \mathbb{L}^\infty(Q)$, $u \in \mathbb{L}^\infty(\Sigma)$, $y_0 \in C(\bar{\Omega})$ genau eine schwache Lösung $y \in \mathbb{W}(0, T) \cap C(\bar{Q})$.*

4.2. Notwendige Optimalitätsbedingungen für semilineare parabolische Steuerprobleme

Mit $\mathbb{W}(0, T) \cap C(\bar{Q})$ haben wir den passenden Lösungsraum für die Betrachtung von semilinearen parabolischen Steuerprozessen der Art

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, s, u) := \frac{\alpha}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \frac{\beta}{2} \|y - z_\Sigma\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 \\ & + \frac{\gamma}{2} \|y(\cdot, T) - z_T\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \frac{\mu}{2} \|u\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 \\ \text{unter} \quad & y_t - \Delta y + d(y) = s && \text{in } Q, \\ & \partial_\nu y + b(y) = u && \text{in } \Sigma, \\ & y(\cdot, 0) = y_0 && \text{in } \Omega, \end{aligned} \tag{4.2}$$

4.2. Notwendige Optimalitätsbedingungen für semilineare parabolische Steuerprobleme

mit $\alpha, \beta, \gamma, \lambda, \mu \geq 0$ und den zulässigen Steuerbereichen

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(Q) : s_{\min}(x, t) \leq s(x, t) \leq s_{\max}(x, t) \text{ in } Q\},$$

$$U_{ad} := \{u \in \mathbb{L}^\infty(\Sigma) : u_{\min}(x, t) \leq u(x, t) \leq u_{\max}(x, t) \text{ in } \Sigma\},$$

gefunden. Dabei seien die Beschränkungsfunktionen

$$s_{\min}, s_{\max} \in \mathbb{L}^\infty(Q), \quad u_{\min}, u_{\max} \in \mathbb{L}^\infty(\Sigma),$$

mit $s_{\min}(x, t) < s_{\max}(x, t)$ für alle $(x, t) \in Q$ und $u_{\min}(x, t) < u_{\max}(x, t)$ für alle $(x, t) \in \Sigma$ sowie die Anfangsverteilung und Wunschzustände

$$y_0, z_T \in C(\bar{\Omega}), \quad z_\Sigma \in C(\Sigma), \quad z \in C(Q)$$

fest vorgegeben. In der Regel wird man die Steuerbeschränkungen zeitinvariant wählen. Falls man einen stetigen Wunschzustand auf dem Gebietszylinder $\hat{Q} := (0, T] \times \bar{\Omega}$ ansteuern möchte, ist es zudem sinnvoll, z_Σ und z_T als stetige Fortsetzung von z auf den entsprechenden Rändern von Q vorzugeben.

Definition 4.2.1 (Optimale Steuerungen).

Gegeben sei ein optimaler Steuerprozess der Form (4.2) und es gelte $q > \frac{n}{2}$ sowie $p > n+1$. Ein Paar von Steuerungen $(s^*, u^*) \in S_{ad} \times U_{ad}$ und ihren nach Satz 4.1.2 korrespondierenden Zustand $y^* = y(s^*, u^*)$ nennt man *global optimal*, falls gilt

$$J(y^*, s^*, u^*) \leq J(y(s, u), s, u) \quad \forall (s, u) \in S_{ad} \times U_{ad}.$$

Das Paar $(s^*, u^*) \in S_{ad} \times U_{ad}$ heißt *lokal optimal* im Sinne von $\mathbb{L}^q(Q) \times \mathbb{L}^p(\Sigma)$, wenn ein $\varepsilon > 0$ existiert, so dass die obige Ungleichung für alle $(s, u) \in S_{ad} \times U_{ad}$ erfüllt ist mit

$$\|s - s^*\|_{\mathbb{L}^q(Q)} + \|u - u^*\|_{\mathbb{L}^p(\Sigma)} \leq \varepsilon.$$

Auch im parabolischen Fall sprechen wir, solange nichts anderes erwähnt wird, immer nur von lokaler Optimalität.

Wie im elliptischen Fall kann man durch die Einführung des richtigen Steuerung-Zustands-Operators notwendige Optimalitätsbedingungen über die Betrachtung der adjungierten Variablen einführen. Wir formulieren direkt die in Tröltzsch [69] vorgestellten Optimalitätsbedingungen für den allgemeinen Fall, d. h. wir lassen sowohl eine verteilte als auch eine Randsteuerung im System zu.

Satz 4.2.2 (Notwendige Optimalitätsbedingungen).

Unter der Voraussetzung 4.1.1 genügt jedes optimale Steuerungs paar (s^*, u^*) des Problems (4.2) zusammen mit dem zugehörigen optimalen adjungierten Zustand $p \in \mathbb{W}(0, T) \cap \mathbb{L}^\infty(Q)$ als Lösung der adjungierten Gleichung

$$\begin{aligned} -p_t - \Delta p + d_y(y^*) p &= \alpha (y^* - z) && \text{in } Q, \\ \partial_\nu p + b_y(y^*) p &= \beta (y^* - z_\Sigma) && \text{in } \Sigma, \\ p(\cdot, T) &= \gamma (y^*(\cdot, T) - z_T) && \text{in } \Omega, \end{aligned} \tag{4.3}$$

den Variationsungleichungen

$$\iint_Q (p + \lambda s^*) (s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad} \quad (4.4)$$

und

$$\iint_\Sigma (p + \mu u^*) (u - u^*) \geq 0 \quad \forall u \in U_{ad}. \quad (4.5)$$

Da wir in diesem Kapitel nur noch semilineare parabolische Probleme mit einer rein verteilten Steuerung betrachten möchten, sei besonders darauf hingewiesen, dass in diesem Fall die Lösung der adjungierten Gleichung (4.3) eine höhere Regularität besitzt, nämlich $p \in \mathbb{W}(0, T) \cap C(\bar{Q})$. Steuerungen und Zustände, die den notwendigen Optimalitätsbedingungen genügen, nennen wir auch im parabolischen Fall kritisch.

4.3. Umwandlung eines parabolischen optimalen Steuerprozesses in ein nichtlineares Optimierungsproblem

Wie in Abschnitt 3.3, werden wir an dieser Stelle Diskretisierungsschemata für die zu behandelnden Differentialgleichungen vorstellen. Diese werden benötigt, um den parabolischen Steuerprozess in ein Optimierungsproblem zu verwandeln. Zudem werden wir auch im parabolischen Fall die Identifizierung der Lagrange-Multiplikatoren des Optimierungsproblems mit dem adjungierten Zustand im optimalen Steuerprozess durchführen.

4.3.1. Diskretisierungsschemata für parabolische Differentialgleichungen

Auch bei der optimalen Steuerung von parabolischen Prozessen muss man sich zunächst Gedanken um die numerische Approximation der partiellen Differentialgleichungen machen. Da bei parabolischen Differentialgleichungen die Ableitungsordnungen in Zeit und Ort unterschiedlich sind, ist eine gesonderte Betrachtung der Zeit- und Ortsdiskretisierung notwendig, weswegen eine direkte Übernahme der Ergebnisse aus Abschnitt 3.3.1 nicht möglich ist.

Für viele parabolische Probleme mit einem 1D- oder 2D-Ortsgebiet reichen Finite-Differenzen-Verfahren für eine adäquate numerische Approximation der kontinuierlichen Differentialgleichungen aus. Bei der Lösung von optimalen Steuerprozessen mit parabolischen Differentialgleichungs-Restriktionen kann es besonders bei großen Zeitintervallen zu hohen Rechenzeiten kommen. Aus diesem Grund benötigt man zur Steuerung parabolischer Dynamiken besonders schnelle Finite-Differenzen-Verfahren, da in jedem Optimierungsschritt das aus der Diskretisierung resultierende Gleichungssystem gelöst werden muss.

Bei den in dieser Arbeit betrachteten parabolischen Problemen kommt es in erster Linie auf die Kombination der Differenzenoperatoren der zeitlichen Ableitung y_t mit dem Laplace-Operator Δy an. Aus diesem Grund beschränken wir uns an dieser Stelle auf die Beschreibung von Diskretisierungsschemata für die Wärmeleitungsgleichung

$$y_t - D \Delta y = s \quad \text{in } Q \quad (4.6)$$

mit einer Inhomogenität $s \in \mathbb{L}^\infty(Q)$. Die Diffusionskonstante D bestimmt dabei, wie schnell sich die Wärme im System ausbreitet. Zur Vereinfachung betrachten wir zur Beschreibung von Diskretisierungs-Verfahren für die Gleichung (4.6) einen 1D-Raum-Zeit-Zylinder $Q := (0, 1) \times (0, T)$ mit äquidistanten **Schrittweiten** $h_x := \frac{1}{N_x}$ und $h_t := \frac{T}{N_t}$, wobei N_x und N_t die Anzahl der Diskretisierungspunkte in Orts- und Zeitrichtung darstellen. Mit den Indextmengen aus Tabelle 4.1 definieren wir die Gitterpunkte als

Tabelle 4.1 Indextmengen für diskrete parabolische 1D-Probleme

$$\begin{aligned} D(Q) &:= \{1, \dots, N_x - 1\} \times \{1, \dots, N_t - 1\} \\ D0(Q) &:= \{1, \dots, N_x - 1\} \times \{0, \dots, N_t - 1\} \\ DAB(0) &:= \{0, \dots, N_x\} \times \{0\} \\ DEB(T) &:= \{0, \dots, N_x\} \times \{N_t\} \\ DLR(\Sigma) &:= \{0\} \times \{1, \dots, N_t - 1\} \\ DRR(\Sigma) &:= \{N_x\} \times \{1, \dots, N_t - 1\} \\ DNLR0(Q) &:= \{1\} \times \{0, \dots, N_t - 1\} \\ DNRR0(Q) &:= \{N_x - 1\} \times \{0, \dots, N_t - 1\} \\ D(\Sigma) &:= DLR(\Sigma) \cup DRR(\Sigma) \\ DN0(Q) &:= DNLR0(Q) \cup DNRR0(Q) \\ DIN0(Q) &:= D0(Q) \setminus DN0(Q) \\ D(\bar{Q}) &:= D(Q) \cup D(\Sigma) \cup DAB(0) \cup DEB(T) \end{aligned}$$

$$(x_i, t_j) := (i \cdot h_x, j \cdot h_t) \quad \forall (i, j) \in D(\bar{Q}).$$

Die Zustandsvariablen $y_{i,j} := y(x_i, t_j)$ sowie die rechten Seiten $s_{i,j} := s(x_i, t_j)$ werden die diskreten Analoga der kontinuierlichen Funktionen auf diesem Gitter repräsentieren. Um die Differenzenoperatoren definieren zu können, führt man wiederum einige abkürzende Shift-Operatoren ein, die aber diesmal auf Ort (K) und Zeit (Z) wirken:

$$K y_{i,j} := y_{i+1,j}, \quad Z y_{i,j} := y_{i,j+1}, \quad I y_{i,j} := y_{i,j}.$$

Für die Inversen dieser Operatoren definieren wir wie im elliptischen Fall:

$$K^{-1} y_{i,j} := y_{i-1,j}, \quad Z^{-1} y_{i,j} := y_{i,j-1}, \quad I^{-1} y_{i,j} := I y_{i,j} = y_{i,j}.$$

Diese Shift-Operatoren wirken nicht nur auf den Zustand y , sondern auch auf alle anderen im Problem auftretenden diskretisierten Funktionen. Für die Ortskomponente i können wir nun folgende Operatoren definieren:

$$\begin{aligned}\mu_+ &:= \frac{1}{2} (I + K), & \mu_- &:= \frac{1}{2} (I + K^{-1}), & \mu_0 &:= \frac{1}{2} (K + K^{-1}), \\ \delta_+ &:= \frac{1}{h_x} (K - I), & \delta_- &:= \frac{1}{h_x} (I - K^{-1}), & \delta_0 &:= \frac{1}{2h_x} (K - K^{-1}), \\ \delta_\times &:= \frac{1}{h_x^2} (K - 2I + K^{-1}).\end{aligned}$$

Hier bedeutet der untere Index, dass der Operator auf die Ortskomponente wirkt. Gleichbedeutend definieren wir mit oberem Index die Shift-Operatoren, die auf die Zeitkomponente j wirken.

$$\begin{aligned}\mu^+ &:= \frac{1}{2} (I + Z), & \mu^- &:= \frac{1}{2} (I + Z^{-1}), & \mu^0 &:= \frac{1}{2} (Z + Z^{-1}), \\ \delta^+ &:= \frac{1}{h_t} (Z - I), & \delta^- &:= \frac{1}{h_t} (I - Z^{-1}), & \delta^0 &:= \frac{1}{2h_t} (Z - Z^{-1}), \\ \delta^\times &:= \frac{1}{h_t^2} (Z - 2I + Z^{-1}).\end{aligned}$$

Die Bezeichnungen dieser Operatoren sind identisch zu ihren elliptischen Gegenstücken in Kapitel 3.3.1.

Mit den oben definierten Operatoren ergibt sich das wohl einfachste finite Differenzenschema für die Gleichung (4.6) indem man einen einfachen Euler-Schritt für die Zeitableitung (δ^+) und einen zentralen Differenzenoperator zweiter Ordnung (δ_\times) zur Approximation des Laplace-Terms benutzt:

$$(\delta^+ - D\delta_\times) y_{i,j} = s_{i,j} \quad \forall (i, j) \in D_0(Q). \quad (4.7)$$

Dieses Verfahren wird **rein explizites Schema** genannt, da die Näherungswerte $y_{i,j+1}$ explizit in jedem Iterationsschritt berechnet werden können. Der größte Nachteil des auch **Vorwärts-Euler** genannten Verfahrens (4.7) ist seine **bedingte Stabilität**, da man für eine Diskretisierung dieser Art das Verhältnis

$$h_t \leq \frac{h_x^2}{2D}$$

einhalten muss. Um das Verfahren stabil zu halten, muss für jede Verfeinerung der räumlichen Auflösung eine quadratische Verkleinerung des Zeitschritts erfolgen, was für parabolische Probleme mit großem Zeitintervall ein hohes Maß an zusätzliche Rechenzeit bedeutet. Als ein Verfahren erster Ordnung ist es für die meisten Probleme zu ungenau und kann nichtlineare Systeme nicht gut genug approximieren. Aus diesen Gründen wird es in der Praxis so gut wie nie eingesetzt.

Ebenfalls ein Verfahren erster Ordnung erhält man, indem man die zentrale Differenz des Laplace-Terms um einen Zeitschritt nach vorne verschiebt (**Rückwärts-Euler**):

$$(\delta^+ - DZ\delta_\times) y_{i,j} = s_{i,j} \quad \forall (i, j) \in D_0(Q). \quad (4.8)$$

Dies bringt den Vorteil einer unbedingten Stabilität, allerdings auf Kosten der Lösung eines (tridiagonalen) Gleichungssystems. In der Praxis spielt das rein implizite Schema (4.8) nur eine untergeordnete Rolle. Der Gewinn an Stabilität und Genauigkeit durch eine mögliche höhere Ortsdiskretisierung steht in keinem Verhältnis zum erhöhten Rechenaufwand. Gerade bei der Lösung von optimalen Steuerprozessen, in denen in jedem Optimierungsschritt die Nebenbedingungen ausgewertet werden müssen, ist dieses Verfahren zu rechenintensiv.

In der Praxis hat sich für die meisten Probleme eine Mischung aus den beiden erwähnten Verfahren durchgesetzt. Dabei wird versucht, die unbedingte Stabilität der impliziten Verfahren beizubehalten und gleichzeitig höhere Approximationsordnungen zu erhalten. In der Praxis hat sich für einfache parabolische Differentialgleichungen besonders das so genannte Crank-Nicolson-Verfahren (CN) bewährt, welches eine Mittelung des Vorwärts- und Rückwärts-Euler-Schemas darstellt:

$$(\delta^+ - D\mu^+\delta_\times) y_{i,j} = s_{i,j} \quad \forall (i, j) \in D0(Q). \quad (4.9)$$

Hier sorgt der Mittelungsoperator μ^+ für eine gleiche Gewichtung der expliziten sowie impliziten Approximation des Laplace-Terms. Durch eine andere Wahl der Näherungswerte für die rechte Seite

$$s_{i,j} : \approx s(x_i, t_j + 0.5h_t) \quad (4.10)$$

kann die Approximationsordnung 2 erreicht werden. Da in einem optimalen Steuerprozess die Funktion s einer verteilten Steuerung entspricht, und somit nicht explizit vorliegt, kann in diesem Fall die Näherung (4.10) nicht durchgeführt werden. Eine alternative Näherung wie zum Beispiel die Mittelung

$$s_{i,j} \approx \mu^+ s_{i,j}$$

würde keine höhere Approximationsordnung liefern. Zudem würden die impliziten Terme der rechten Seite für einen stark erhöhten Rechenaufwand zur Lösung des Optimierungsproblems sorgen, weswegen in dieser Arbeit auf eine Mittelung der Inhomogenität verzichtet wurde.

Um ein Schema höherer Ordnung zu erhalten, kann man ähnlich zum elliptischen Fall mehr Diskretisierungspunkte zur Approximation des Laplace-Terms benutzen. In diesem Fall nimmt man die fünf (unterschiedlich gewichteten) Punkte

$$(i, j), (i + 1, j), (i + 2, j), (i - 1, j), (i - 2, j),$$

um die zweite Ortsableitung für die Näherung $y_{i,j+1}$ zu berechnen. Diese Punkte stehen nur auf dem inneren Gitter $DIN(Q)$ zur Verfügung, da auf dem Nebenrand $DN(Q)$ die Punkte $(i + 2, j)$ und $(i - 2, j)$ nicht existieren. Aus diesem Grund kann dort nur ein einfacher Crank-Nicolson-Schritt durchgeführt werden. Das Schema

$$\begin{aligned} \left(\delta^+ - D\mu^+ \left(\frac{4}{3}\delta_\times(h_x) - \frac{1}{3}\delta_\times(2h_x) \right) \right) y_{i,j} &= s_{i,j} & \forall (i, j) \in DIN0(Q) \\ (\delta^+ - D\mu^+\delta_\times) y_{i,j} &= s_{i,j} & \forall (i, j) \in DN0(Q) \end{aligned} \quad (4.11)$$

nennt man auch ein Crank-Nicolson-Schema vierter Ordnung (CN4), falls die rechten Seiten passend approximiert werden. Das Argument h_x bzw. $2h_x$ bei den Shift-Operatoren bedeutet, dass man den Differenzenoperator einmal bezüglich der Punkte $(i+1, j)$, $(i-1, j)$ und einmal bezüglich $(i+2, j)$, $(i-2, j)$ auswertet.

Die hier erwähnten Verfahren unterscheiden sich wesentlich in Konsistenz- und Stabilitätseigenschaften. Um diese zu definieren, müssen die auftretenden Funktionen allerdings hinreichend glatt sein.

Das Crank-Nicolson-Verfahren vierter Ordnung hat sich auch ohne eine Mittelung der rechten Seite für die Lösung vieler optimaler Steuerprozesse mit parabolischen Restriktionen als ein gutes Diskretisierungs-Verfahren herausgestellt. Es ist sehr robust und benötigt durch seine hohe Approximationsordnung nicht viele Zeitdiskretisierungspunkte, um eine gute Ortsauflösung zu gewährleisten. Nahezu alle parabolischen Probleme in dieser Arbeit wurden mit einem Crank-Nicolson-Verfahren zweiter oder vierter Ordnung gelöst.

4.3.2. Identifizierung der Lagrange-Multiplikatoren im optimalen Steuerprozess

Durch das Auftreten von Zeit- und Ortsableitungen ist im Falle eines parabolischen optimalen Steuerprozesses eine andere Skalierung der Lagrange-Multiplikatoren als beim Auftreten von elliptischen Restriktionen zu erwarten. Um die diskrete Form des Steuerprozesses (4.2) zu erhalten, approximieren wir das Zielfunktional durch eine Trapezsumme mit einfacher Gewichtung aller Summanden und benutzen das Vorwärts-Euler-Schema (4.7) zur Diskretisierung der parabolischen Differentialgleichung. Wie bereits erwähnt, ist das rein explizite Schema kein effizientes Verfahren zur Lösung von parabolischen Problemen. Es reicht aber an dieser Stelle aus, um die Art der Skalierung für die Lagrange-Multiplikatoren zu bestimmen. Wir werden an späterer Stelle auch auf die resultierende Skalierung bei der Verwendung von semi-impliziten Verfahren (Crank-Nicolson) eingehen. Insgesamt erhalten wir als Diskretisierung von (4.2) das folgende nichtlineare Optimierungsproblem in den Variablen $(y_{i,j}, s_{i,j}, u_{i,j})^T \in \mathbb{R}^{(N_x+1)(N_t+1)} \times \mathbb{R}^{(N_x-1)N_t} \times \mathbb{R}^{2(N_t-1)}$:

$$\begin{aligned}
 \text{minimiere} \quad & J(y_{i,j}, s_{i,j}, u_{i,j}) := h_x h_t \sum_{(i,j) \in D(Q)} \left(\frac{\alpha}{2} (y_{i,j} - z_{i,j})^2 + \frac{\lambda}{2} s_{i,j}^2 \right) \\
 & + h_t \sum_{(i,j) \in D(\Sigma)} \left(\frac{\beta}{2} (y_{i,j} - z_{i,j}^\Sigma)^2 + \frac{\mu}{2} u_{i,j}^2 \right) + h_x \sum_{(i,j) \in DEB(T)} \frac{\gamma}{2} (y_{i,j} - z_{i,j}^T)^2 \\
 \text{unter} \quad & (\delta^+ - \delta_\times) y_{i,j} + d(y_{i,j}) - s_{i,j} = 0, & (i,j) \in D_0(Q), \\
 & \delta_+ y_{i,j} + b(y_{i,j}) - u_{i,j} = 0, & (i,j) \in DLR(\Sigma), \\
 & \delta_- y_{i,j} + b(y_{i,j}) - u_{i,j} = 0, & (i,j) \in DRR(\Sigma), \\
 & y_{i,j} - (y_0)_{i,j} = 0, & (i,j) \in DAB(0), \\
 & s \in DS_{ad}, \\
 & u \in DU_{ad}.
 \end{aligned} \tag{4.12}$$

Es seien $z_{i,j}^\Sigma, z_{i,j}^T, (s_{\max})_{i,j}, (s_{\min})_{i,j}, (u_{\max})_{i,j}, (u_{\min})_{i,j}$ und $(y_0)_{i,j}$ die diskreten Analoga zu $z_\Sigma, z_T, s_{\max}, s_{\min}, u_{\max}, u_{\min}$ und y_0 . Die diskreten Steuerbereiche bezeichnen wir mit

$$DS_{ad} := \left\{ (s)_{i,j} \in \mathbb{R}^{(N_x-1)N_t} \mid (s_{\min})_{i,j} \leq s_{i,j} \leq (s_{\max})_{i,j}, \quad \forall (i,j) \in D_0(Q) \right\}$$

und

$$DU_{ad} := \left\{ (u)_{i,j} \in \mathbb{R}^{2(N_t-1)} \mid (u_{\min})_{i,j} \leq u_{i,j} \leq (u_{\max})_{i,j}, \quad \forall (i,j) \in D(\Sigma) \right\}.$$

An dieser Stelle werden wir eine Indexverschiebung in der Zeitkomponente anwenden, um mit möglichst wenig Schreibaufwand die Skalierung für die Lagrange-Multiplikatoren zu erhalten. Eine Indexverschiebung bedeutet in diesem Zusammenhang eine Umbenennung der Lagrange-Multiplikatoren, die später passend für die Identifizierung der adjungierten Variablen im Steuerprozess interpretiert werden müssen.

Satz 4.3.1. *Die Lagrange-Multiplikatoren $p_{i,j}$ in den notwendigen Bedingungen des Optimierungsproblems (4.12) sind mit der Skalierung $\tilde{p}_{i,j} := \frac{p_{i,j}}{h_x}$ eine Lösung der diskreten adjungierten Zustandsgleichung (4.3), falls diese mit der Vorwärts-Euler-Diskretisierung approximiert wird. Zudem erhält man mit der vorgestellten Skalierung die diskrete Form der Variationsungleichungen (4.4) und (4.5) des kontinuierlichen Problems (4.2).*

Beweis: Für eine passende Identifizierung der Lagrange-Multiplikatoren muss man zunächst die Zustandsgleichungen folgendermaßen umskalieren:

$$\begin{aligned} (Z - I - h_t \delta_\times) y_{i,j} + h_t d(y_{i,j}) - h_t s_{i,j} &= 0, & (i,j) \in D_0(Q), \\ \frac{h_t}{h_x} \delta_+ y_{i,j} + \frac{h_t}{h_x} b(y_{i,j}) - \frac{h_t}{h_x} u_{i,j} &= 0, & (i,j) \in \text{DLR}(\Sigma), \\ \frac{h_t}{h_x} \delta_- y_{i,j} + \frac{h_t}{h_x} b(y_{i,j}) - \frac{h_t}{h_x} u_{i,j} &= 0, & (i,j) \in \text{DRR}(\Sigma), \\ y_{i,j} - (y_0)_{i,j} &= 0, & (i,j) \in \text{DAB}(0). \end{aligned}$$

Damit ergibt sich die folgende Lagrange-Funktion für das Optimierungsproblem (4.12):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(y, p, s, u) &= h_x h_t \sum_{(i,j) \in D(Q)} \left(\frac{\alpha}{2} (y_{i,j} - z_{i,j})^2 + \frac{\lambda}{2} s_{i,j}^2 \right) + h_x \sum_{(i,j) \in \text{DEB}(T)} \frac{\gamma}{2} (y_{i,j} - z_{i,j}^T)^2 \\ &+ h_t \sum_{(i,j) \in D(\Sigma)} \left(\frac{\beta}{2} (y_{i,j} - z_{i,j}^\Sigma)^2 + \frac{\mu}{2} u_{i,j}^2 \right) - \sum_{(i,j) \in \text{DAB}(0)} p_{i,j} (y_{i,j} - y_{i,j}^0) \\ &- \sum_{(i,j) \in D_0(Q)} p_{i,j+1} ((Z - I - h_t \delta_\times) y_{i,j} + h_t d(y_{i,j}) - h_t s_{i,j}) \\ &- \sum_{(i,j) \in \text{DLR}(\Sigma)} p_{i,j} \left(\frac{h_t}{h_x} \delta_+ y_{i,j} + \frac{h_t}{h_x} b(y_{i,j}) - \frac{h_t}{h_x} u_{i,j} \right) \\ &- \sum_{(i,j) \in \text{DRR}(\Sigma)} p_{i,j} \left(\frac{h_t}{h_x} \delta_- y_{i,j} + \frac{h_t}{h_x} b(y_{i,j}) - \frac{h_t}{h_x} u_{i,j} \right). \end{aligned}$$

4. Optimale Steuerung von semilinearen parabolischen Gleichungen

Man beachte die Indexverschiebung $j \mapsto j + 1$ für $p_{i,j}$ in der Indexmenge $D_0(Q)$. Dieses Vorgehen hat zwei Auswirkungen. Nun ergänzen die Multiplikatoren aus der Bedingung

$$0 = \frac{d}{dy_{i,0}} \left(- \sum_{(i,j) \in DAB(0)} p_{i,j} (y_{i,j} - y_{i,j}^0) \right) = - \sum_{(i,j) \in DAB(0)} p_{i,j}$$

die fehlenden Terme für die Vorwärts-Euler-Diskretisierung für $j = 0$ in (4.13)(i), und die für die Diskretisierung der Differentialgleichung überflüssigen Terme

$$0 = \frac{d}{dy_{i,N_t}} \left(- \sum_{(i,j) \in D_0(Q)} p_{i+1,j} Z y_{i,j} \right) = \sum_{i \in \{1, \dots, N_x - 1\}} -p_{i,N_t}$$

liefern uns zusammen mit

$$0 = \frac{d}{dy_{i,N_t}} \left(h_x \sum_{(i,j) \in DEB(T)} \frac{\gamma}{2} (y_{i,j} - z_{i,j}^T)^2 \right) = h_x \sum_{(i,j) \in DEB(T)} \gamma (y_{i,j} - z_{i,j}^T)$$

die passende Endbedingung (4.13)(iv). Die ungewöhnliche Skalierung $\frac{h_t}{h_x}$ der Randbedingungen wird benötigt, um wie im Beweis des Satzes 3.3.1 die Lagrange-Multiplikatoren der Randbedingungen mit den geeigneten Kandidaten des Differenzenschemas auszutauschen. Insgesamt liefert uns die Auswertung der notwendigen Optimalitätsbedingung $\mathcal{L}_y(y^*, p, s^*, u^*) = 0$ das folgende Gleichungssystem:

$$\begin{aligned} (Z - I + h_t \delta_\times) p_{i,j} - h_t d_y(y_{i,j}^*) p_{i,j} + h_x h_t \alpha (y_{i,j}^* - z_{i,j}) &= 0, \quad (i,j) \in D(Q), \\ -\frac{h_t}{h_x} \delta_+ p_{i,j} - \frac{h_t}{h_x} b_y(y_{i,j}^*) p_{i,j} + h_t \beta (y_{i,j}^* - z_{i,j}^\Sigma) &= 0, \quad (i,j) \in DLR(\Sigma), \\ -\frac{h_t}{h_x} \delta_- p_{i,j} - \frac{h_t}{h_x} b_y(y_{i,j}^*) p_{i,j} + h_t \beta (y_{i,j}^* - z_{i,j}^\Sigma) &= 0, \quad (i,j) \in DRR(\Sigma), \\ -p_{i,j} + h_x \gamma (y_{i,j}^* - z_{i,j}^T) &= 0, \quad (i,j) \in DEB(T). \end{aligned} \tag{4.13}$$

Durch die Skalierung $\tilde{p}_{i,j} := \frac{p_{i,j}}{h_x}$ und Division der ersten drei Gleichungen in (4.13) durch $-h_t$ erhält man

$$\begin{aligned} -(\delta^+ + \delta_\times) \tilde{p}_{i,j} + d_y(y_{i,j}^*) \tilde{p}_{i,j} &= \alpha (y_{i,j}^* - z_{i,j}), \quad (i,j) \in D(Q), \\ \delta_+ \tilde{p}_{i,j} + b_y(y_{i,j}^*) \tilde{p}_{i,j} &= \beta (y_{i,j}^* - z_{i,j}^\Sigma), \quad (i,j) \in DLR(\Sigma), \\ \delta_- \tilde{p}_{i,j} + b_y(y_{i,j}^*) \tilde{p}_{i,j} &= \beta (y_{i,j}^* - z_{i,j}^\Sigma), \quad (i,j) \in DRR(\Sigma), \\ \tilde{p}_{i,j} &= \gamma (y_{i,j}^* - z_{i,j}^T), \quad (i,j) \in DEB(T) \end{aligned} \tag{4.14}$$

und somit die Vorwärts-Euler-Diskretisierung von (4.2). Die Auswertungen der Ableitungen

$$\mathcal{L}_s(y^*, p, s^*, u^*) = \sum_{(i,j) \in D(\Omega)} (h_t h_x \lambda s_{i,j}^* + h_t p_{i,j}),$$

$$\mathcal{L}_u(y^*, p, s^*, u^*) = \sum_{(i,j) \in D(\Sigma)} \left(h_t \mu u_{i,j}^* + \frac{h_t}{h_x} p_{i,j} \right),$$

ergeben mit der obigen Skalierung und Division durch h_t

$$\begin{aligned} \left(\sum_{(i,j) \in D0(\Omega)} \lambda s_{i,j}^* + \tilde{p}_{i,j} \right) (s_{i,j} - s_{i,j}^*) &\geq 0 \quad \forall s_{i,j} \in DS_{ad} \\ \left(\sum_{(i,j) \in D(\Sigma)} \mu u_{i,j}^* + \tilde{p}_{i,j} \right) (u_{i,j} - u_{i,j}^*) &\geq 0 \quad \forall u_{i,j} \in DU_{ad} \end{aligned}$$

die diskrete Form der Variationsungleichungen (4.4) und (4.5). ■

Die Skalierung $\tilde{p}_{i,j} := \frac{p_{i,j}}{h_x}$ ergibt sich auch bei der Verwendung semi-impliziter Verfahren zur Diskretisierung der Zustandsgleichung in (4.2). Die numerische Approximation der Randbedingungen muss allerdings dem verwendeten Diskretisierungsschema angepasst werden, um einen Austausch der Lagrange-Multiplikatoren am Nebenrand gewährleisten zu können. Beispielsweise müssten bei einer Crank-Nicolson-Diskretisierung der Differentialgleichung in (4.2)

$$(\delta^+ - \mu^+ \delta_x) y_{i,j} + d(y_{i,j}) - s_{i,j} = 0 \quad \forall (i,j) \in D0(Q)$$

die Zustandsgleichungen wie folgt umformuliert werden

$$\begin{aligned} (Z - I - h_t \mu^+ \delta_x) y_{i,j} + h_t d(y_{i,j}) - h_t s_{i,j} &= 0, & (i,j) \in D0(Q), \\ \frac{h_t}{h_x} \delta_+ \mu^+ y_{i,j} + \frac{h_t}{h_x} b(y_{i,j}) - \frac{h_t}{h_x} u_{i,j} &= 0, & (i,j) \in DLR(\Sigma), \\ \frac{h_t}{h_x} \delta_- \mu^+ y_{i,j} + \frac{h_t}{h_x} b(y_{i,j}) - \frac{h_t}{h_x} u_{i,j} &= 0, & (i,j) \in DRR(\Sigma), \\ y_{i,j} - (y_0)_{i,j} &= 0, & (i,j) \in DAB(0), \end{aligned}$$

um die Beweisführung aus Satz 4.3.1 wiederholen zu können. Dabei ist der Differenzenoperator $\delta_+ \mu^+ y_{i,j}$ eine ungewöhnliche, aber wohldefinierte Möglichkeit die Normalenableitung zu bestimmen.

4.4. Trackingprobleme mit verteilter Steuerung

Für eine explizite Berechnung von singulären Steuerungen in parabolischen optimalen Steuerprozessen werden wir uns auf Trackingprobleme der Form (4.2) mit einer rein verteilten Steuerfunktion beschränken:

$$\begin{aligned}
 \text{minimiere} \quad J(y, s) &:= \frac{\alpha}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \frac{\beta}{2} \|y - z_\Sigma\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 \\
 &\quad + \frac{\gamma}{2} \|y(\cdot, T) - z_T\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 \\
 \text{unter} \quad &y_t - \Delta y + d(y) = s && \text{in } Q, \\
 &\partial_\nu y + b(y) = 0 && \text{in } \Sigma, \\
 &y(\cdot, 0) = y_0 && \text{in } \Omega.
 \end{aligned} \tag{4.15}$$

Falls die Steuerung dabei nichtlinear ins System eingeht ($\lambda > 0$), ergibt sich aus (4.4) die folgende Projektionsbedingung für eine kritische Steuerung:

$$s^*(x, t) = \text{Proj}_{[s_{\min}(x, t), s_{\max}(x, t)]} \left\{ -\frac{p(x, t)}{\lambda} \right\}. \tag{4.16}$$

Im unregularisierten Fall kann man wiederum Bedingungen für bang-bang und singuläre Steuerungen herleiten. Für die weiteren Folgerungen betrachten wir ein Problem der Form (4.15) mit $\alpha > 0$, $\lambda = 0$ und einer genügend glatten Wunschfunktion $z \in \mathbb{W}(0, T) \cap C(\bar{Q})$. Es sei als Analogon zu Θ im elliptischen Fall

$$\Psi := \{(x, t) \in Q \mid p(x, t) = 0\} \tag{4.17}$$

die Menge der Punkte aus Q , in der der adjungierte Zustand verschwindet. Ist das topologische Innere dieser Menge nicht leer, so existiert für alle Punkte $(\bar{x}, \bar{t}) \in \overset{\circ}{\Psi}$ eine Umgebung $\mathcal{U}(\bar{x}, \bar{t}) \subset \overset{\circ}{\Psi}$, in der gilt:

$$\Delta p(x, t) = 0 \quad \text{und} \quad p_t(x, t) = 0 \quad \forall (x, t) \in \mathcal{U}(\bar{x}, \bar{t}).$$

Damit existiert nach (4.3) eine kritische Trajektorie $(s^*, y^*) \in S_{ad} \times \mathbb{W}(0, T) \cap C(\bar{Q})$, durch die der Wunschzustand exakt erreicht werden kann:

$$y^*(x, t) = z(x, t) \quad \forall x \in \mathcal{U}(\bar{x}, \bar{t}).$$

Da z als genügend regulär vorausgesetzt war, erhält man aus der Zustandsgleichung in (4.15) die folgende Bedingung für eine kritische Steuerung s^* für alle Punkte $(x, t) \in \overset{\circ}{\Psi}$:

$$s^*(x, t) = y_t^*(x, t) - \Delta y^*(x, t) + d(y^*(x, t)) = z_t(x, t) - \Delta z(x, t) + d(z(x, t)). \tag{4.18}$$

Dies entspricht auf dem kompletten Raum-Zeit-Zylinder der folgenden Schaltbedingung für eine kritische Steuerung $s^* \in S_{ad}$ des Problems (4.15) mit $\alpha > 0$ und $\lambda = 0$:

$$\boxed{
 s^*(x, t) = \begin{cases} s_{\min}(x, t), & \text{falls } p(x, t) > 0, \\ \text{unbestimmt}, & \text{falls } (x, t) \in \partial\Psi, \\ z_t(x, t) - \Delta z(x, t) + d(z(x, t)), & \text{falls } (x, t) \in \overset{\circ}{\Psi}, \\ s_{\min}(x, t), & \text{falls } p(x, t) < 0. \end{cases} \tag{4.19}
 }$$

Auch in diesem Fall muss noch sichergestellt werden, dass die in (4.18) berechnete singuläre Steuerung zulässig ist, was bedeutet, dass gilt:

$$s_{\min}(x, t) \leq z_t(x, t) - \Delta z(x, t) + d(z(x, t)) \leq s_{\max}(x, t) \quad \forall (x, t) \in \overset{\circ}{\Psi}.$$

4.5. Optimale Steuerung des instationären Supraleitung-Modells

Erweitert man das in Abschnitt 3.4.2.1 vorgestellte stationäre Modell der Supraleitung mit einer zeitlichen Dynamik, so erhält man das instationäre Modell:

$$\begin{aligned} y_t - \Delta y + y + y^3 &= s && \text{in } Q, \\ \partial_\nu y + y &= 0 && \text{in } \Sigma. \end{aligned} \tag{4.20}$$

Eine mögliche Zielsetzung der Steuerung s kann sein, den Zustand unter der in (4.20) angegebenen nichtlinearen Dynamik in $\Omega \times (0, T]$ in die Nähe einer (zum Beispiel) konstanten Zielfunktion zu bringen. Es ergibt sich ein semilineares parabolisches Problem mit einem quadratischen Trackingfunktional der Form

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad J(y, s) &:= \frac{1}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \frac{1}{2} \|y - z_\Sigma\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 \\ &\quad + \frac{1}{2} \|y(\cdot, T) - z_T\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 \\ \text{unter} \quad &y_t - \Delta y + y + y^3 = s && \text{in } Q, \\ &\partial_\nu y + y = 0 && \text{in } \Sigma, \\ &y(\cdot, 0) = 0 && \text{in } \Omega, \\ &s \in S_{ad} && \text{in } Q, \end{aligned} \tag{4.21}$$

wobei der Steuerbereich durch

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(Q) : -1.5 \leq s(x, t) \leq 1.5 \text{ in } Q\}$$

vorgegeben ist. Man startet im Zeitpunkt $t_0 = 0$ mit einer homogenen Anfangsverteilung $y(x, 0) = 0$ und möchte auf dem Ortsgebiet $\bar{\Omega} := [-0.25, 0.25]$ zu jedem Zeitpunkt $t \in (0, T]$ den Zustand y möglichst gut an den konstanten Wert $z(x, t) \equiv c := 0.1$ annähern. Dabei ist die Wunschfunktion so gewählt, dass sie keinen stationären Zustand des Systems darstellt und somit die Steuerung bis zur Endzeit $T := 0.2$ nachregulieren wird, um eine gute Annäherung zu erreichen.

Die Voraussetzung 4.1.1 ist mit $d(y) = y^3 + y$, $b(y) = y$ sowie den konstanten Funktionen

$$z(x, t) \equiv 0.1, \quad s_{\min}(x, t) \equiv -1.5, \quad s_{\max}(x, t) \equiv 1.5$$

erfüllt. Die adjungierte Differentialgleichung ergibt sich nach (4.3) zu

$$\begin{aligned} -p_t - \Delta p + (3y^2 + 1)p &= y^* - c && \text{in } Q, \\ \partial_\nu p + p &= y^* - c && \text{in } \Sigma, \\ p(\cdot, T) &= y^*(\cdot, T) - c && \text{in } \Omega, \end{aligned} \tag{4.22}$$

4. Optimale Steuerung von semilinearen parabolischen Gleichungen

Abbildung 4.1.: Numerische Lösung von (4.21) mit $\lambda = 10^{-6}$ und $c = 0.1$

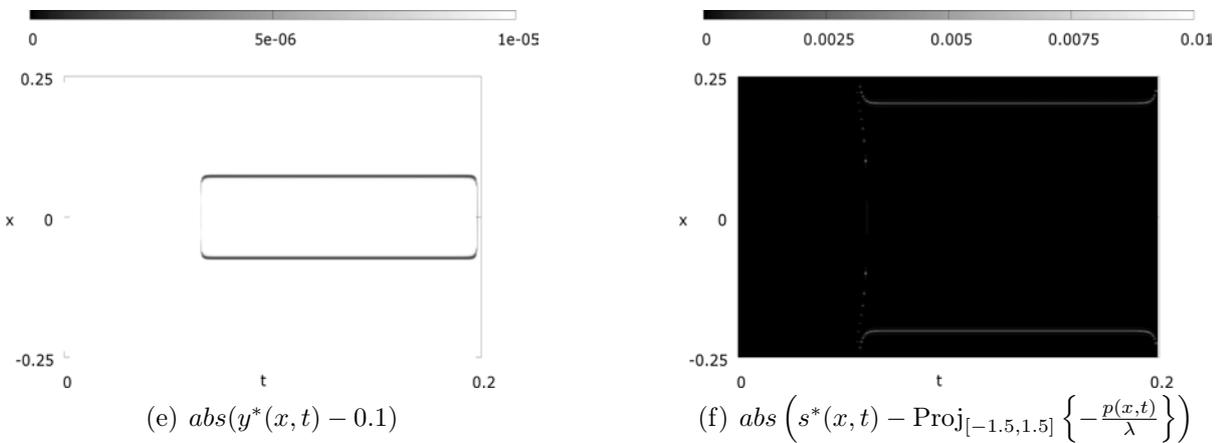
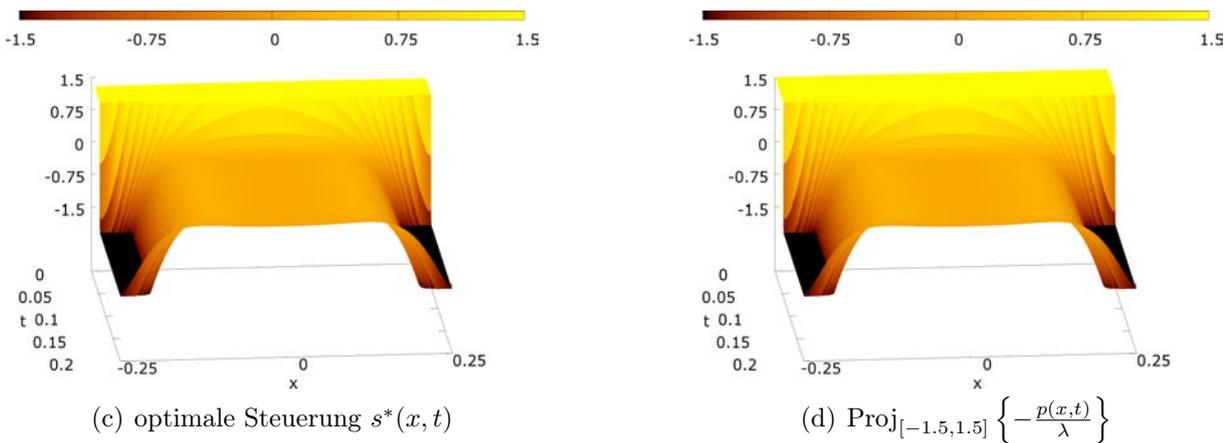
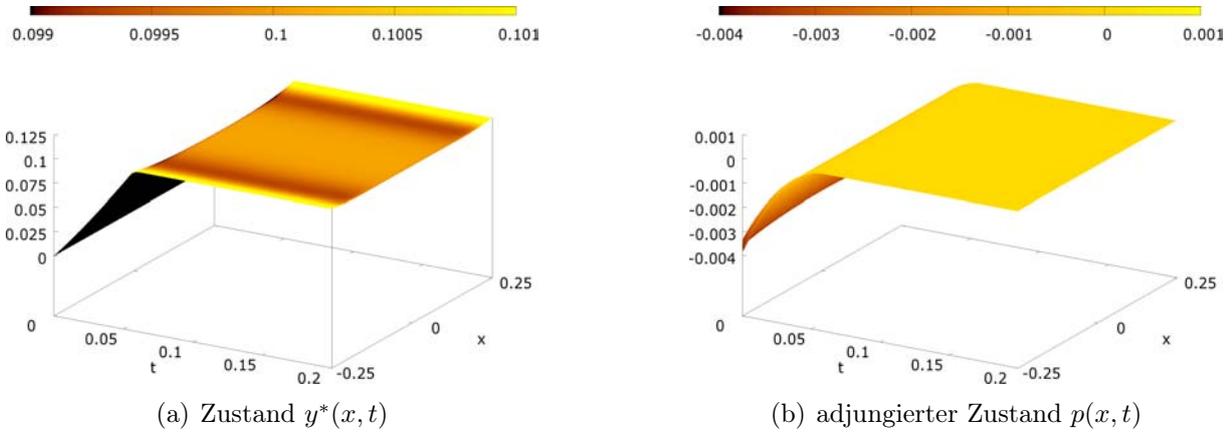
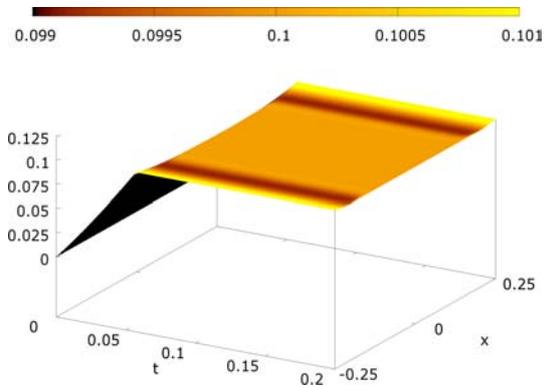
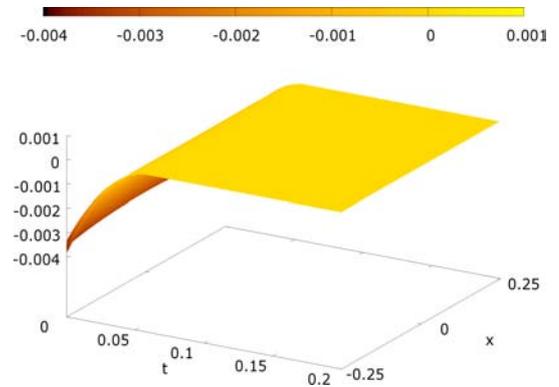


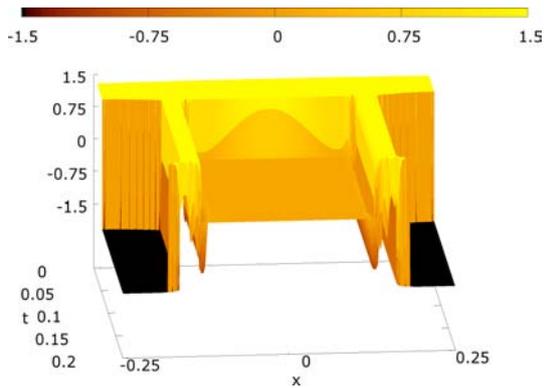
Abbildung 4.2.: Numerische Lösung von (4.21) mit $\lambda = 0$ und $c = 0.1$



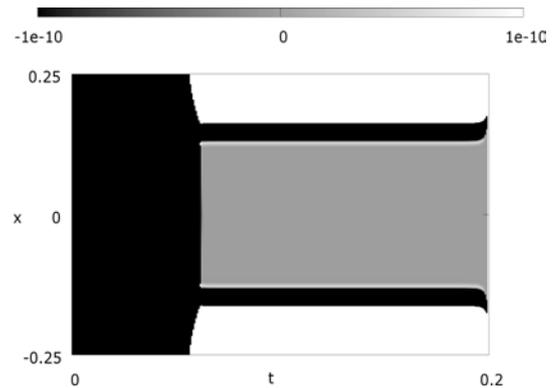
(a) Zustand $y^*(x, t)$



(b) skalierter adj. Zustand $p(x, t)$



(c) optimale Steuerung $s^*(x, t)$



(d) Vorzeichen von $p(x, t)$



(e) $abs(y^*(x, t) - 0.1)$



(f) $abs(s^*(x, t) - 0.101)$

4. Optimale Steuerung von semilinearen parabolischen Gleichungen

deren Lösung $p \in \mathbb{W}(0, T) \cap C(\bar{Q})$ zusammen mit der korrespondierenden kritischen Steuerung $s^* \in S_{ad}$ der Variationsungleichung

$$\iint_Q (p + \lambda s^*) (s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad} \quad (4.23)$$

genügen muss. Wie in den Abbildungen 4.1(c),(d) und (f) zu erkennen ist, erhält man im Fall $\lambda > 0$ die erwartete Projektionsfunktion (4.16) als optimale Steuerung. Im Falle einer linear eingehenden Steuerung ($\lambda = 0$) können bang-bang sowie singuläre Teilflächen auftreten. Je nachdem wie groß die Endzeit T gewählt wurde, ist es möglich, in einem kleinen Bereich den gewünschten Zustand exakt anzusteuern. Wie in Abbildung 4.2(d) zu sehen ist, existiert für $T = 0.2$ eine Menge Ψ mit $\overset{\circ}{\Psi} \neq \emptyset$. In diesem grau gekennzeichneten Bereich ergibt sich eine exakte Ansteuerbarkeit des Wunschzustandes durch die singuläre Steuerung:

$$s^*(x, t) = z_t(x, t) - \Delta z(x, t) + z(x, t) + z^3(x, t) \equiv c + c^3 \quad \forall (x, t) \in \overset{\circ}{\Psi}.$$

In manchen praktischen Anwendungen scheint eine Bestrafung auf dem kompletten Ort-Zeit-Zylinder $\bar{\Omega} \times (0, T]$ eine zu große Forderung zu sein. Beispielsweise existieren industrielle Produktionsprozesse, bei denen man nur auf dem Rand und/oder zum Endzeitpunkt sicherstellen muss, dass der Zustand einer gewünschten Wärmeverteilung entspricht. Für eine solche Problemstellung scheint ein optimaler Steuerprozess der Form

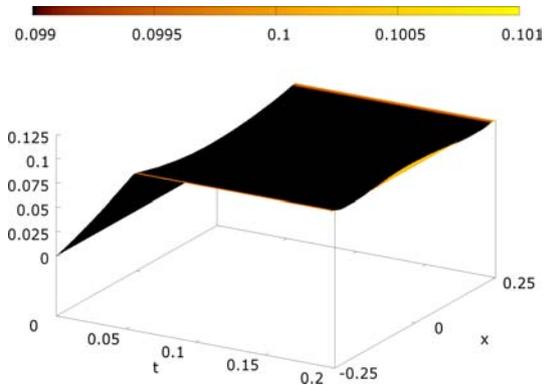
$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, s) := \frac{1}{2} \|y(\cdot, T) - c\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{2} \|y - c\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \frac{\lambda}{2} \|s\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 \\ \text{unter} \quad & y_t - \Delta y + y + y^3 = s && \text{in } Q, \\ & \partial_\nu y + y = 0 && \text{in } \Sigma, \\ & y(\cdot, 0) = 0 && \text{in } \Omega, \\ & s \in S_{ad} && \text{in } Q \end{aligned} \quad (4.24)$$

besser geeignet. Vergleicht man die numerischen Ergebnisse von (4.24) mit der Lösung von (4.21) unter demselben Parametersatz, so erkennt man in den gewünschten Gebieten eine bessere Annäherung von y an den Wunschzustand. Die Auswertung der notwendigen Optimalitätsbedingungen ergibt für (4.24) die adjungierte Gleichung

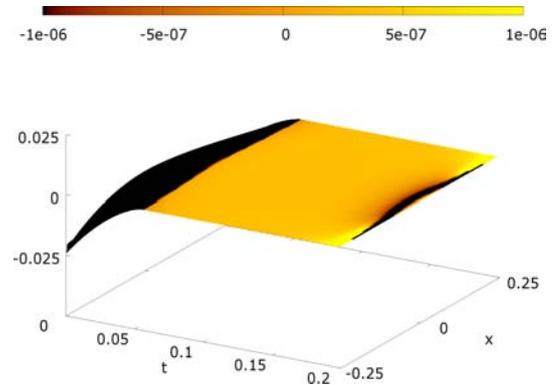
$$\begin{aligned} -p_t - \Delta p + (3y^2 + 1)p &= 0 && \text{in } Q, \\ \partial_\nu p + p &= y^* - c && \text{in } \Sigma, \\ p(x, T) &= y^*(\cdot, T) - c && \text{in } \Omega, \end{aligned} \quad (4.25)$$

sowie die Variationsungleichung (4.23). Durch das Fehlen der Inhomogenität $y^* - c$ in der adjungierten Zustandsgleichung aus (4.25) ergibt sich im unregularisierten Fall für Punkte $(x, t) \in \overset{\circ}{\Psi}$ keine Bedingung für eine kritische Steuerung. Diese Menge wird i. A. nicht leer sein, da $p \equiv 0$ eine stationäre Lösung der Zustandsgleichung darstellt und man bei ausreichend großen Endzeiten in der Lage ist, den Zustand am Rand nahe genug an die

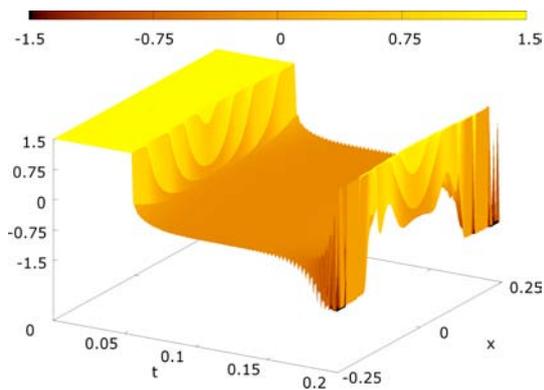
Abbildung 4.3.: Numerische Lösung von (4.24) mit $\lambda = 10^{-6}$ und $c = 0.1$



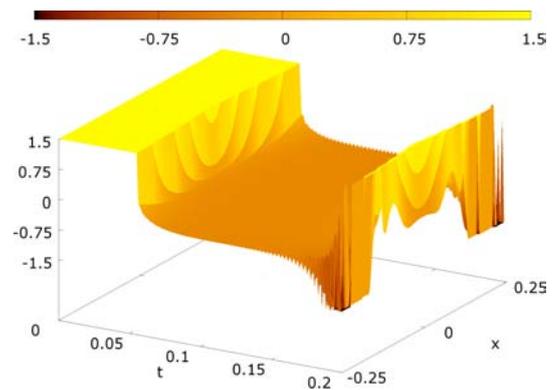
(a) Zustand $y^*(x, t)$



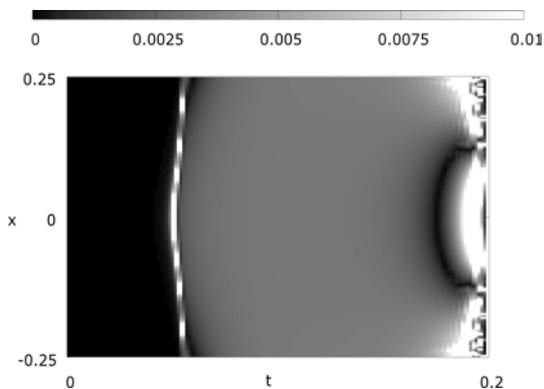
(b) adjungierter Zustand $p(x, t)$



(c) optimale Steuerung $s^*(x, t)$



(d) $\text{Proj}_{[-1.5, 1.5]} \left\{ -\frac{p(x, t)}{\lambda} \right\}$



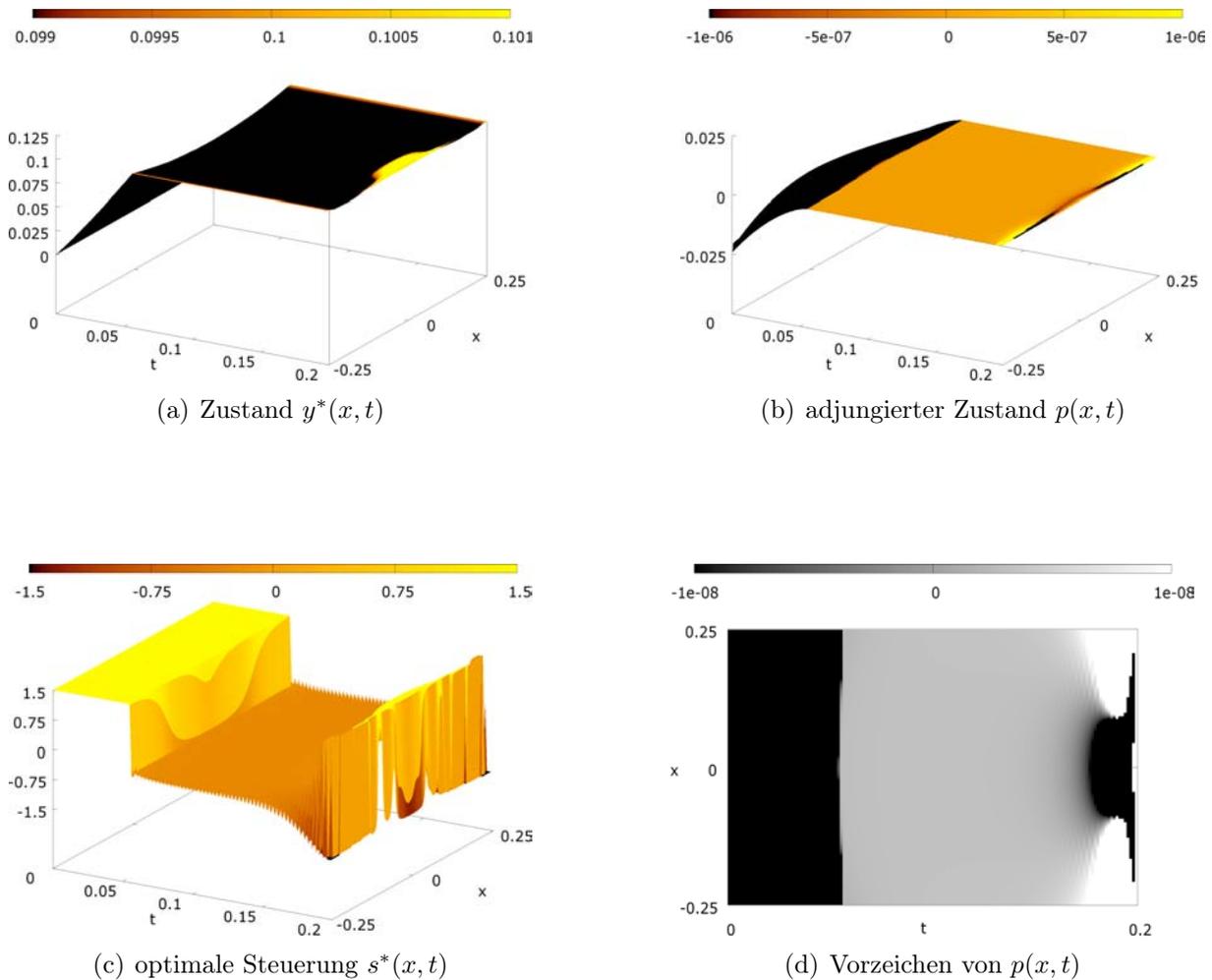
(e) $\text{abs} \left(s^*(x, t) - \text{Proj}_{[-1.5, 1.5]} \left\{ -\frac{p(x, t)}{\lambda} \right\} \right)$



(f) Vorzeichen von $p(x, t)$

4. Optimale Steuerung von semilinearen parabolischen Gleichungen

Abbildung 4.4.: Numerische Lösung von (4.24) mit $\lambda = 0$ und $c = 0.1$



Wunschfunktion $c = 0.1$ anzunähern (vgl. dazu die Abbildungen 4.3(b) und 4.4(b),(d)). Dies führt zu nicht eindeutigen kritischen Steuerungen, die alle den notwendigen Optimalitätsbedingungen mit demselben Zielfunktionswert genügen. Dieses Phänomen kennt man bereits von der optimalen Steuerung gewöhnlicher Differentialgleichungen. Genau aus diesem Grund ergeben sich bei der numerischen Lösung von (4.24) sowohl im regularisierten wie auch im unregularisierten Fall Unregelmäßigkeiten am Rande der Steuerfunktion (vgl. Abbildungen 4.3(c),(d) und 4.4(c)).

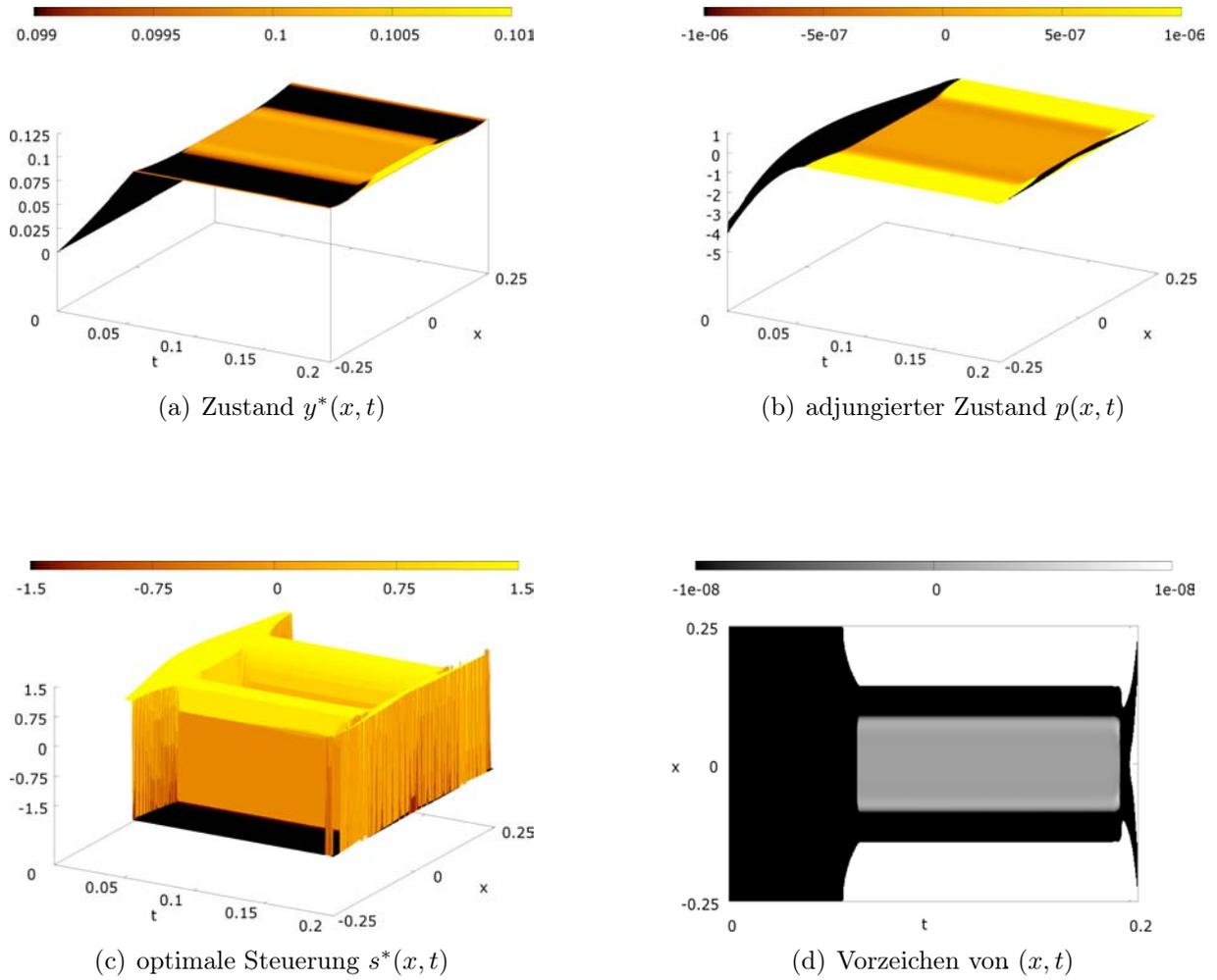
Will man solche Effekte vermeiden und gleichzeitig sicherstellen, dass man am Rand eine gewünschte Wärmeverteilung erreicht, bietet es sich an, das Problem (4.21) mit einem zustandsgewichteten Trackingfunktional zu betrachten. Mit den Konstanten

$$\alpha := 10^{-5}, \quad \beta = \gamma := 1$$

gewichtet man das Zielfunktional aus (4.21) wie in (4.15) vorgestellt

$$J(y, s, u) := \frac{\alpha}{2} \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \frac{\beta}{2} \|y - z_{\Sigma}\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \frac{\gamma}{2} \|y(\cdot, T) - z_T\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \quad (4.26)$$

Abbildung 4.5.: Lösung von (4.21) mit Zielfunktional (4.26) und $\lambda = 0$



und erhält durch (4.3) die folgende adjungierte Gleichung:

$$\begin{aligned}
 -p_t - \Delta p + (3y^2 + 1)p &= 10^{-5}(y^* - c) && \text{in } Q, \\
 \partial_\nu p + p &= y^* - c && \text{in } \Sigma, \\
 p(\cdot, T) &= y^*(\cdot, T) - c && \text{in } \Omega.
 \end{aligned}
 \tag{4.27}$$

Man erkennt in Abbildung 4.5, dass durch das so abgeänderte Zielfunktional die Wärmeverteilung am Rand deutlich näher an $c = 0.1$ liegt, ohne Irregularitäten am Rand zu erhalten.

4.6. Anwendung des Lagrange-Prinzips auf optimale Steuerprozesse mit semilinearen parabolischen Gleichungsrestriktionen

Für eine Reihe von praktische Problemstellungen können die notwendigen Optimalitätsbedingungen nicht wie in Abschnitt 4.2 hergeleitet werden, da die Voraussetzung 4.1.1 nicht erfüllt ist. In den seltensten Fällen werden die auftretenden Nichtlinearitäten einer Monotoniebedingung auf dem kompletten Raum-Zeit-Zylinder genügen. Durch die Umwandlung des optimalen Steuerprozesses in ein nichtlineares Optimierungsproblem kann allerdings ein diskreter Kandidat für eine kritischen Steuerung berechnet werden. Mit Hilfe des hier vorgestellten Lagrange-Prinzips kann man zumindest formale Optimalitätsbedingungen für das kontinuierliche Problem herleiten, die dann mit der numerisch berechneten Steuerfunktion verglichen werden können. Exemplarisch betrachten wir das Problem (4.2), für welches sich die folgende Lagrange-Funktion ergibt:

$$L(y, s, u, p) = J(y, s, u) - \iint_Q (y_t - \Delta y + d(y) - s) p - \iint_\Sigma (\partial_\nu y + b(y) - u) p. \quad (4.28)$$

Die Anfangsbedingung $y(\cdot, 0) = y_0$ sowie auftretende Steuerbeschränkungen werden wir nicht an die Lagrange-Funktion ankoppeln, sondern explizit mitführen. Man geht weiter davon aus, dass die adjungierte Variable der Randbedingungen mit den Randwerten des adjungierten Zustandes p übereinstimmt. Als notwendige Optimalitätsbedingungen ergeben sich:

$$\begin{aligned} L_y(y^*, s^*, u^*, p)y &= 0 & \forall y \text{ mit } y(\cdot, 0) = 0, \\ L_s(y^*, s^*, u^*, p)(s - s^*) &\geq 0 & \forall s \in S_{ad}, \\ L_u(y^*, s^*, u^*, p)(u - u^*) &\geq 0 & \forall u \in U_{ad}. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Die Anfangsbedingung für die Testfunktion y ergibt sich daraus, dass mit y^* auch $y^* + y$ die Anfangsbedingung $(y^* + y)(\cdot, 0) = y_0$ erfüllen muss. Wertet man die erste Bedingung aus, so erhält man durch Anwendung der Green'schen Formeln und partieller Integration für alle hinreichend glatten Testfunktionen y die Bedingung:

$$\begin{aligned} 0 = L_y(y^*, s^*, u^*, p)y &= \alpha \iint_Q (y^* - z) y + \beta \iint_\Sigma (y^* - z_\Sigma) y \\ &+ \gamma \int_\Omega (y^*(\cdot, T) - z_T) y(\cdot, T) + \iint_Q p_t y \\ &- \int_\Omega p(\cdot, T) y(\cdot, T) + \int_\Omega p(\cdot, 0) y(\cdot, 0) + \iint_Q \Delta p y \\ &+ \iint_\Sigma \partial_\nu y \cdot p - \iint_\Sigma \partial_\nu p \cdot y - \iint_Q d_y(y^*) p y \\ &- \iint_\Sigma \partial_\nu y \cdot p - \iint_\Sigma b_y(y^*) p y. \end{aligned} \quad (4.30)$$

Nach Umsortieren der Integranden und Einsetzen der Anfangsbedingung $y(\cdot, 0) = 0$ ergibt sich die folgende adjungierte Zustandsgleichung:

$$\begin{aligned} -p_t - \Delta p + d_y(y^*)p &= \alpha(y^* - z) && \text{in } Q, \\ \partial_\nu p + b_y(y^*)p &= \beta(y^* - z_\Sigma) && \text{in } \Sigma, \\ p(\cdot, T) &= \gamma(y^*(\cdot, T) - z_T) && \text{in } \Omega. \end{aligned} \quad (4.31)$$

Die Auswertung der zweiten Ungleichung in (4.29) ergibt die folgende Variationsungleichung für eine verteilte Steuerung:

$$L_s(y^*, s^*, u^*, p)(s - s^*) = \iint_Q (\lambda s^* + p)(s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad}. \quad (4.32)$$

Gleichermaßen erhält man nach Auswertung der dritten Ungleichung in (4.29) die folgende Variationsungleichung für eine Randsteuerung:

$$L_u(y^*, s^*, u^*, p)(u - u^*) = \iint_\Sigma (\mu u^* + p)(u - u^*) \geq 0 \quad \forall u \in U_{ad}. \quad (4.33)$$

4.7. Optimale Steuerung von Reaktions-Diffusions-Systemen

Die optimale Steuerung von Reaktions-Diffusions-Systemen gewinnt eine immer größere Bedeutung in verschiedenen naturwissenschaftlichen Disziplinen. Unter anderem werden in Griesse [25, 26] und Lebiedz/Brandt-Pollmann [9, 42] einige Optimalsteuerungsprobleme von chemischen Reaktions-Diffusions-Prozessen vorgestellt. Wir werden uns in diesem Abschnitt vor allem mit einem physikalischen sowie einem biologischen Modell beschäftigen. Die dabei zu Grunde liegenden Dynamiken werden durch ein so genanntes **Aktivator-Inhibitor-System** beschrieben, welches aus dem folgenden zweikomponentigen gekoppelten Reaktions-Diffusions-System besteht:

$$\begin{aligned} y_t - D_1 \Delta y + F(y, w) &= 0 && \text{(Aktivator-Gleichung)}, \\ w_t - D_2 \Delta w + G(y, w) &= 0 && \text{(Inhibitor-Gleichung)}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Der **Aktivator** y ist dabei die treibende Kraft im dynamischen System. Zwar ist seine Diffusionskonstante kleiner als die des **Inhibitors** w ($0 < D_1 < D_2$), d. h. der Aktivator diffundiert langsamer, jedoch besitzt er einen größeren Einfluss in den **Reaktionstermen** $F(y, w)$ und $G(y, w)$. Diese Eigenschaft haben alle Aktivator-Inhibitor-Systeme gemein. Die meisten Reaktions-Diffusions-Systeme besitzen nur einige wenige (oder nur eine) stabile stationäre Lösungen. Es werden im Allgemeinen noch weitere instabile stationäre Lösungen für das Aktivator-Inhibitor-System existieren, doch der Zustand (y, w) wird immer bestrebt sein, in eine stabile stationäre Lösung zu laufen. Da dies ohne äußere Einflüsse geschieht, nennt man die resultierenden Strukturen auch **selbstorganisiert** und ihre Repräsentanten heißen **Muster**.

4.7.1. Reaktions-Diffusions-Modell eines Gasentladungssystems

Als ein erstes musterbildendes System möchten wir hier einen physikalischen Prozess mit selbstorganisierten Strukturen vorstellen. Es handelt sich dabei um ein vereinfachtes Modell eines planaren Gleichspannungs-Gasentladungssystems, in dem sich Solitonen ausbilden. Dieses wird unter anderem in den Arbeiten von Liehr et al. [6] sowie Purwins et al. [59] vorgestellt. Als **Solitonen** bezeichnet man formstabile Strukturen, die durch ein nichtlineares Medium propagieren. Die Dynamik des Prozesses wird durch ein **Aktivator-Inhibitor-System** der folgenden Form beschrieben:

$$\begin{aligned}
 y_t - \sigma D \Delta y + y^3 - \delta y + w &= 0 && \text{in } Q, \\
 \tau w_t - D \Delta w - y + w &= 0 && \text{in } Q, \\
 \partial_\nu y + (\sigma D)^{-1} y &= 0 && \text{in } \Sigma, \\
 \partial_\nu w + D^{-1} w &= 0 && \text{in } \Sigma, \\
 y(\cdot, 0) &= 0 && \text{in } \Omega, \\
 w(\cdot, 0) &= 0 && \text{in } \Omega.
 \end{aligned} \tag{4.35}$$

In diesem Fall gibt D die Diffusionskonstante des Systems an und die Konstante $0 < \sigma \ll 1$ stellt die unterschiedliche Diffundiergeschwindigkeit von Aktivator und Inhibitor dar ($D_y = \sigma D_w$). Der kubische Term y^3 in der Aktivator-Gleichung ist der Grund für die dominante Stellung des Aktivators in den Reaktionstermen ($0 < \delta < 1$). Befindet sich das System (4.35) in der instabilen stationären Lösung ($y \equiv 0, w \equiv 0$) und stört man den Aktivator an nur einer Stelle, so läuft es selbstorganisiert in eine stabile stationäre Lösung, das so genannte Solitonen-Muster. Für die Simulation aus Abbildung 4.6 haben wir die Parameter

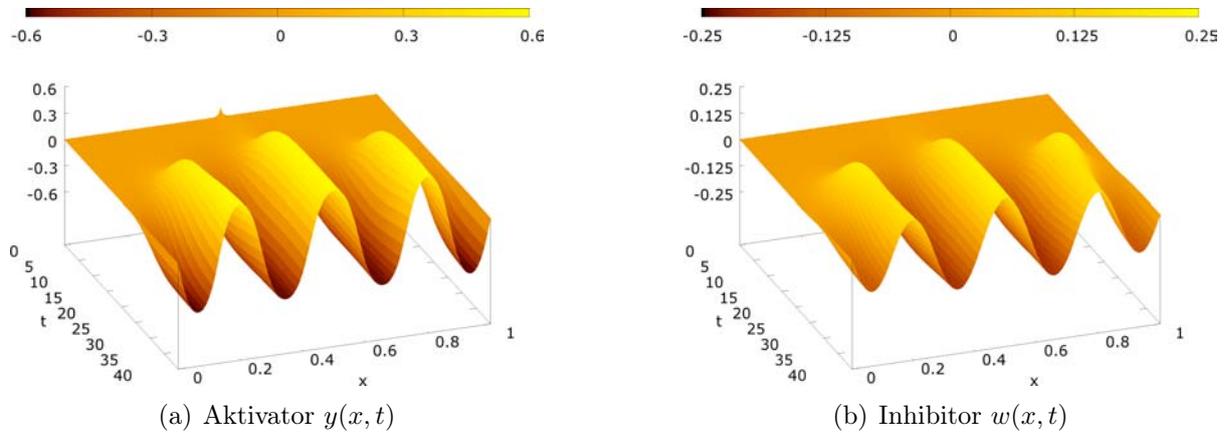
$$\tau := 1, \quad D := 0.005, \quad \delta := 0.8, \quad \sigma := 0.1 \tag{4.36}$$

auf dem Grundgebiet $\Omega := (0, 1)$ sowie die Endzeit $T = 40$ gewählt. In der Realität wird der Aktivator nicht nur an einer einzigen Stelle gestört sein, sondern auf den Zustandsgleichungen wird für alle Zeitpunkte ein weißes Rauschen liegen. Wie man in Abbildung 4.7 erkennen kann, stellt sich dabei jedoch unter demselben Parametersatz das gleiche Muster heraus. Da die Auswirkungen des Rauschens in den Abbildungen 4.7(a),(b) nicht gut zu sehen sind, haben wir für ein besseres Verständnis in 4.7(c),(d) den Aktivator und Inhibitor nochmal im Zeitintervall $t \in [0, 4]$ abgebildet.

Der Begriff weißes Rauschen hat in den verschiedenen naturwissenschaftlichen Disziplinen eine unterschiedliche Bedeutung. Wir werden in dieser Arbeit nur den mathematischen Begriff benutzen. In der Wahrscheinlichkeitstheorie oder Statistik bezeichnet **weißes Rauschen** einen stochastischen Prozess von unkorrelierten Zufallsvariablen mit Erwartungswert Null und konstanter Varianz. Ein Spezialfall stellt dabei das **Gauß'sche weiße Rauschen** dar, bei dem die Zufallsvariablen normalverteilt sind. Immer wenn in dieser Arbeit von einem **weißen Rauschen** von $z\%$ (Abkürzung r_z) die Rede ist, soll damit ein Gauß'sches weißes Rauschen mit einer Varianz von $\frac{z}{100}$ gemeint sein.

In der Inhibitor-Gleichung steht vor der zeitlichen Ableitung die **Driftkonstante** τ , die im Falle $\tau \gg 1$ durch die Verschiebung der Zeitskalen von Aktivator und Inhibitor eine Be-

Abbildung 4.6.: Ausbildung von selbstorganisierten Strukturen in Form von drei Solitonen im Gasentladungssystem (4.35) nach einer kleinen Störung des Aktivators mit den Daten aus (4.36)



wegung der Solitonen bewirkt. Wie man an den Gleichungen sieht, spielt diese Konstante keine Rolle falls sich das System in einer stationären Lösung befindet. Legt man allerdings ein weißes Rauschen von $z = 5\%$ auf die Aktivatorgleichung

$$\begin{aligned} y_t - \sigma D \Delta y + y^3 - \delta y + w + r_z &= 0, \\ \tau w_t - D \Delta w - y + w &= 0, \end{aligned} \quad (4.37)$$

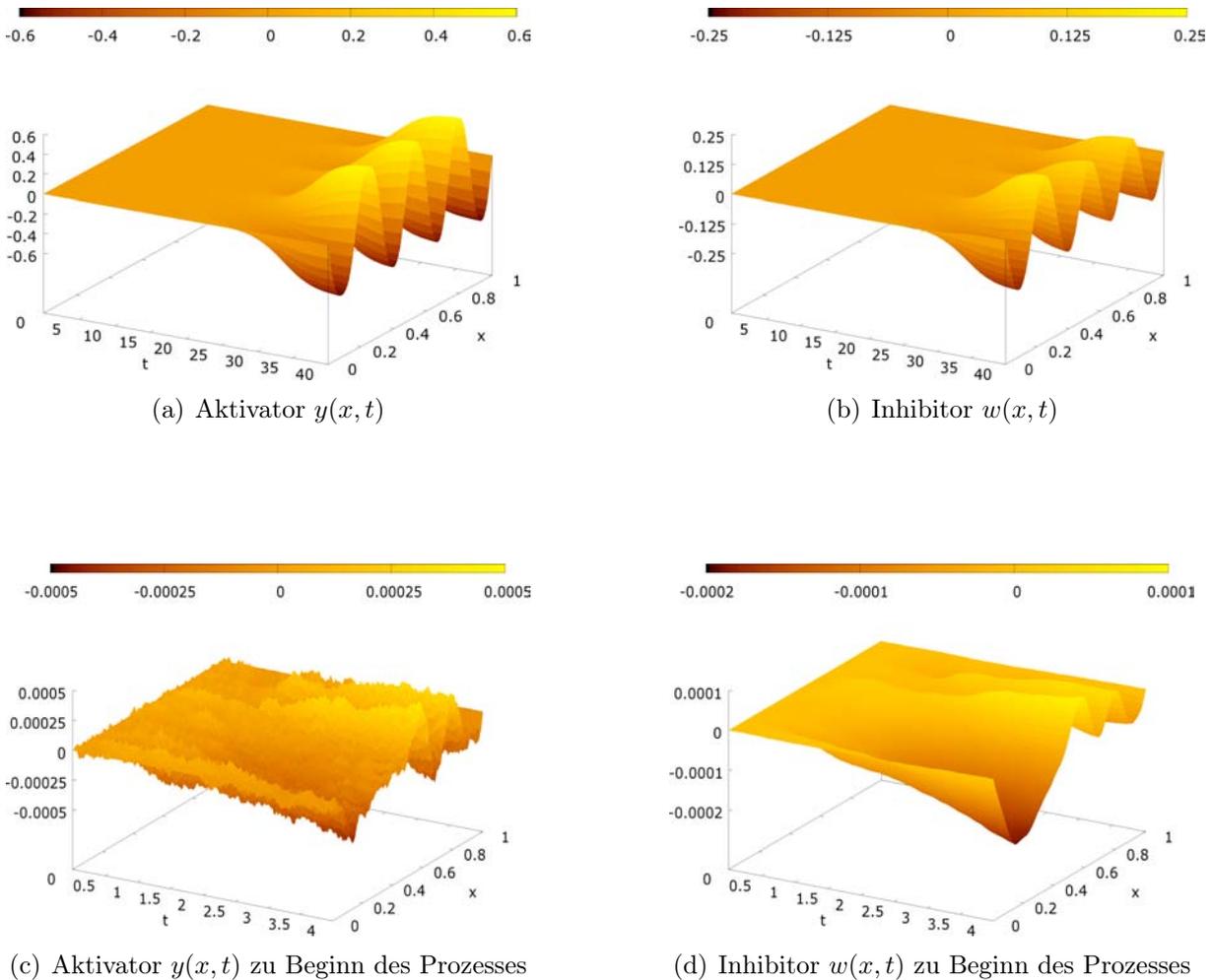
und betrachtet als Anfangsbedingung den stationären Zustand aus Abbildung 4.6, so beginnen die Solitonen für $\tau = 10$ zu driften und können sogar kollidieren (Abbildung 4.8).

In komplexeren 2D- oder 3D-Systemen ist in der Physik gerade dieses Driftverhalten der Solitonen von großem Interesse. Sowohl im reellen Experiment, als auch in der numerischen Simulation konnten Drift-Bifurkations-Phänomene beobachtet werden. Bei einem System mit Bifurkations-Verhalten kann man nicht vorhersagen, wie sich die Lösung des Differentialgleichungssystems unter Rauschen verhalten wird. Im Falle des Gasentladungssystem bedeutet dies, dass man nicht entscheiden kann, was passiert, falls (beispielsweise) zwei isolierte Solitonen aufeinander treffen. Es ist möglich, dass

- die Solitonen zu einem einzelnen Soliton verschmelzen.
- die Solitonen kollidieren und damit zerstört werden.
- die Solitonen sich an ihren Ausläufern ankoppeln und gemeinsam driften, bis sie sich irgendwann wieder teilen und in verschiedene Richtungen auseinander laufen. In seltenen Fällen können sie nach der Verkettung auch verschmelzen oder kollidieren.

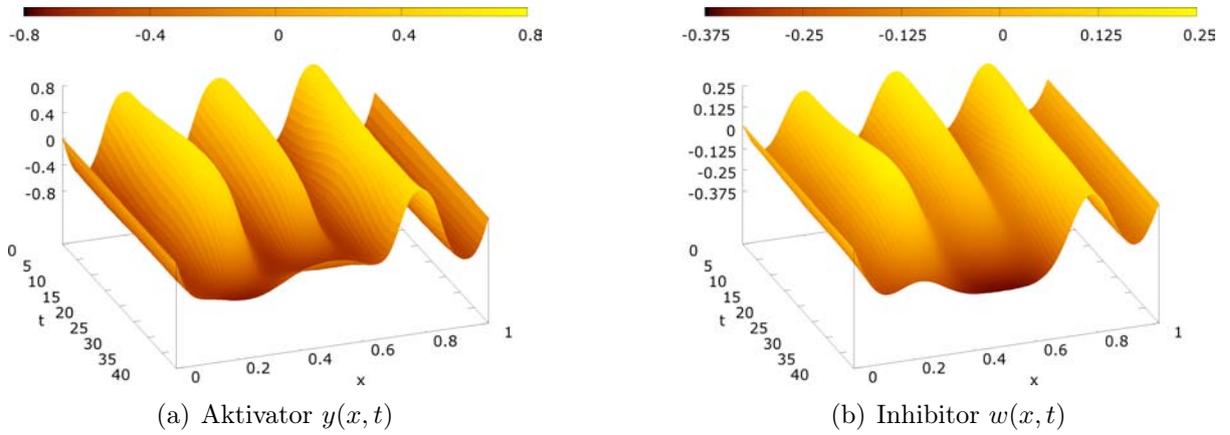
Eine Wunschvorstellung besteht darin, dieses „Entscheidungsverhalten“ der Solitonen beeinflussen zu können. Es ist nicht zufriedenstellend, wenn bei einem langwierig vorbereiteten physikalischen Experiment zwei aufeinander treffende Solitonen sofort vernichtet

Abbildung 4.7.: Ausbildung von selbstorganisierten Strukturen in Form von drei Solitonen im Gasentladungssystem (4.37) unter einem Rauschen von $z = 0.1\%$ mit den Daten aus (4.36)



werden. Aus diesem Grund möchte man durch eine gezielte Steuerung des Systems, z. B. durch ein Anheben oder Absenken der Stromstärke, nur eine Verschmelzung oder Verknüpfung der Solitonen zulassen. Leider lässt sich aus Sicht der optimalen Steuerung ein solches Ziel nicht erreichen. Weder kann man ein Zielfunktional modellieren, welches ein solches Verhalten der Solitonen bewirken würde, noch weiß man, welche Größe im System einen Einfluss darauf besitzt. Aus diesen Gründen war bei diesem Modell leider keine interdisziplinäre Kooperation möglich. Da das System aber auch aus mathematischer Sicht interessant ist, haben wir versucht, einen optimalen Steuerprozess zu modellieren, der einen tieferen Einblick in die optimale Steuerung von Aktivator-Inhibitor-Systemen mit linear eingehender Steuerung gibt.

Bei der Suche eines geeigneten Zielfunktional für einen optimalen Steuerprozess, stößt man unweigerlich auf die dominante Stellung der Muster. Wie bereits erwähnt, sind Muster von Aktivator-Inhibitor-Systemen nichts anderes als stabile stationäre Lösungen, die

Abbildung 4.8.: Zerstörung zweier Solitonen durch Kollision für $\tau = 10$


bevorzugt angenommen werden. Weil ein natürlicher Prozess immer leichten Störungen unterliegt, kann das Muster aus drei Solitonen in Abbildung 4.7 als der natürliche Zustand des Systems (4.35) angesehen werden, da sich dieser selbstorganisiert unter Rauschen einstellt. Ein mathematisches Ziel kann man sich nun darin setzen, den Prozess aus dem Muster heraus wieder in die instabile stationäre Lösung ($y \equiv 0, w \equiv 0$) zu steuern. Im Steuerprozess ist dies beispielsweise durch eine \mathbb{L}^2 -Bestrafung des Aktivators y und Inhibitors w ($\xi \geq 0$) im Zielfunktional zu realisieren:

$$\begin{aligned}
 J(y, w, s) := & \frac{1}{2} \left(\|y\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|y\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \|y(\cdot, T)\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\
 & + \frac{\xi}{2} \left(\|w\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|w\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \|w(\cdot, T)\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right). \quad (4.38)
 \end{aligned}$$

Wir wählen eine verteilte Steuerfunktion in der Aktivator-Gleichung, um von außen in den Prozess eingreifen zu können. Physikalisch ist dies zwar unrealistisch, da es bedeuten würde, dass man zu jedem Zeitpunkt an jedem Ortspunkt einen direkten Einfluss auf den Aktivator besitzt, doch aus mathematischer Sicht entstehen durch dieses Vorgehen interessante singuläre Steuerungen. Zusammen mit den konstanten Steuerschranken $-s_{\min} = s_{\max} = 1$ und dem resultierenden Steuerbereich

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(Q) : s_{\min} \leq s(x, t) \leq s_{\max} \text{ in } Q\},$$

ergibt sich der folgende optimale Steuerprozess:

$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && (4.38) \\
 \\
 &\text{unter} && y_t - \sigma D \Delta y + y^3 - \delta y + w = s && \text{in } Q, && (4.39) \\
 &&& w_t - D \Delta w - y + w = 0 && \text{in } Q, \\
 &&& \partial_v y + (\sigma D)^{-1} y = 0 && \text{in } \Sigma, \\
 &&& \partial_v w + D^{-1} w = 0 && \text{in } \Sigma, \\
 &&& y(\cdot, 0) = y_0 && \text{in } \Omega, \\
 &&& w(\cdot, 0) = w_0 && \text{in } \Omega, \\
 &&& s \in S_{ad} && \text{in } Q.
 \end{aligned}$$

Als Anfangsbedingung (y_0, w_0) benutzen wir das Muster aus Abbildung 4.7. Wir betrachten für den optimalen Steuerprozess ebenfalls den Parametersatz (4.36), beschränken uns allerdings auf eine Endzeit von $T := 1.5$.

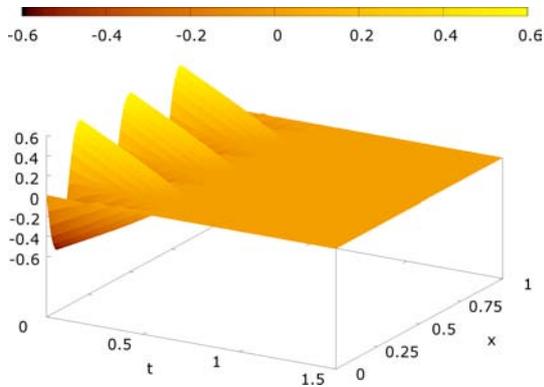
Bei der Herleitung von formalen notwendigen Optimalitätsbedingungen für dieses gekoppelte Steuerproblem durch Anwendung des Lagrange-Prinzips aus Kapitel 4.6 wird ersichtlich werden, warum wir in (4.39) die Randbedingungen skaliert haben. Zunächst betrachtet man die Lagrange-Funktion des Problems (4.39)

$$\begin{aligned}
 L(y, w, s, p, q) &= J(y, w, s) - \iint_Q (y_t - \sigma D \Delta y + y^3 - \delta y + w - s) p \\
 &\quad - \iint_\Sigma (\sigma D \partial_v y + y) p - \iint_Q (w_t - D \Delta w - y + w) q \\
 &\quad - \iint_\Sigma (D \partial_v w + w) q,
 \end{aligned}$$

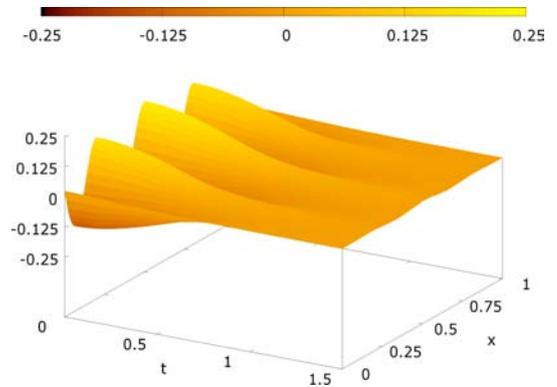
für die wir die Anfangsbedingungen und Steuerbeschränkungen explizit mitführen. Dabei sollen p bzw. q die adjungierten Variablen des Aktivators bzw. Inhibitors darstellen, wobei man davon ausgeht, dass die Adjungierten der Randbedingungen der Fortsetzung der Adjungierten im Inneren des Ort-Zeit-Zylinders entsprechen. Mit dem gleichen Formalismus wie in (4.29)-(4.32) ergeben sich die Bedingungen

$$\begin{aligned}
 0 = L_y(y^*, w^*, s^*, p, q)y &= J_y(y^*, w^*, s^*)y + \iint_Q p_t y - \int_\Omega p(\cdot, T)y(\cdot, T) + \int_\Omega p(\cdot, 0)y(\cdot, 0) \\
 &\quad + \sigma D \iint_Q \Delta p y + \sigma D \iint_\Sigma \partial_v y \cdot p - \sigma D \iint_\Sigma \partial_v p \cdot y \\
 &\quad - \iint_Q (3y^{*2} - \delta) p y - \sigma D \iint_\Sigma \partial_v y \cdot p - \iint_\Sigma p y + \iint_Q q y
 \end{aligned}$$

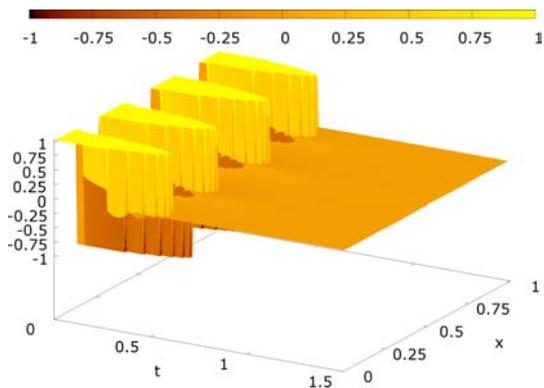
Abbildung 4.9.: Numerische Lösung von (4.39) mit $\xi = 0$



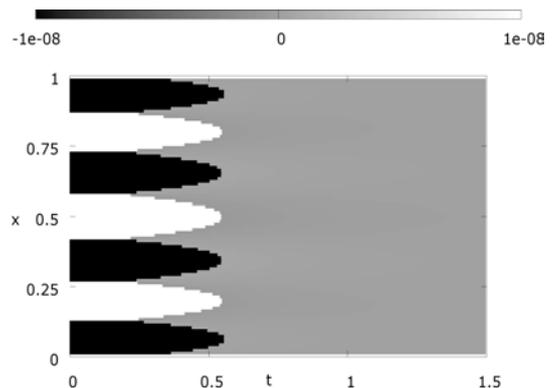
(a) Aktivator $y^*(x, t)$



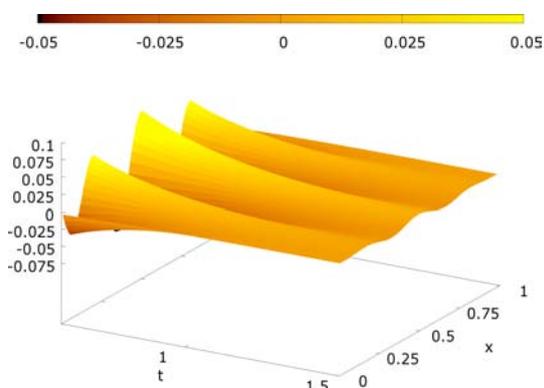
(b) Inhibitor $w^*(x, t)$



(c) optimale Steuerung $s^*(x, t)$



(d) Vorzeichen von $p(x, t)$



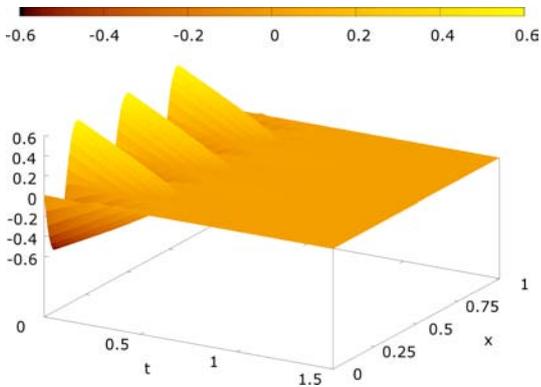
(e) $s^*(x, t)$ am Ende des Prozesses



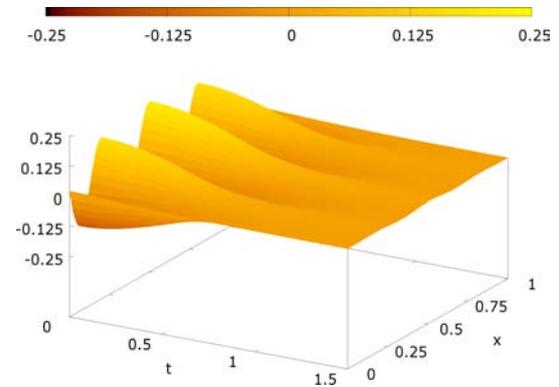
(f) Vorzeichen von $q(x, t)$

4. Optimale Steuerung von semilinearen parabolischen Gleichungen

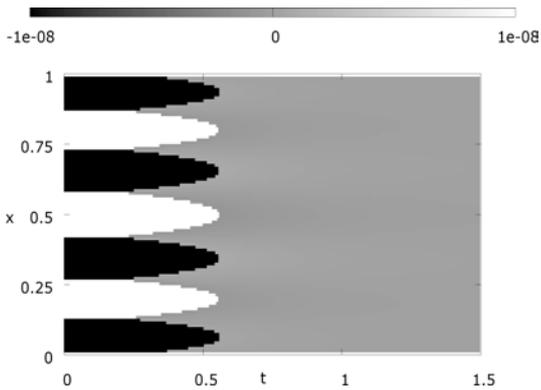
Abbildung 4.10.: Numerische Lösung von (4.39) mit $\xi = 1$



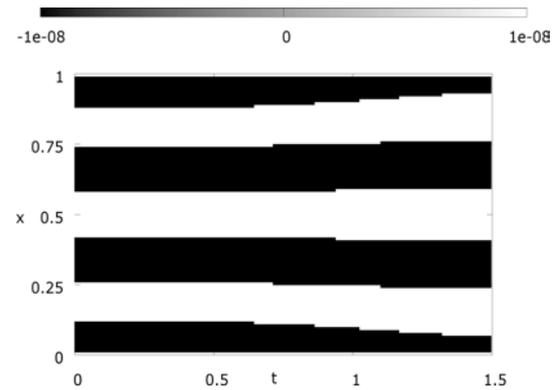
(a) Aktivator $y^*(x,t)$



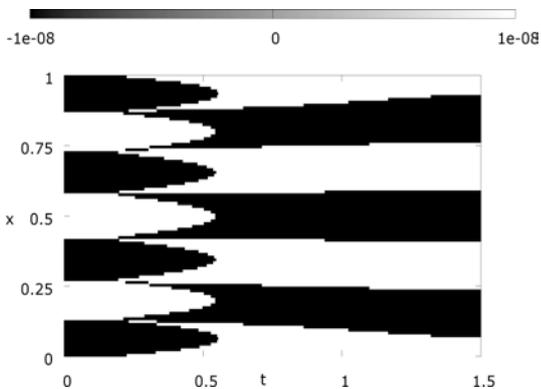
(b) Inhibitor $w^*(x,t)$



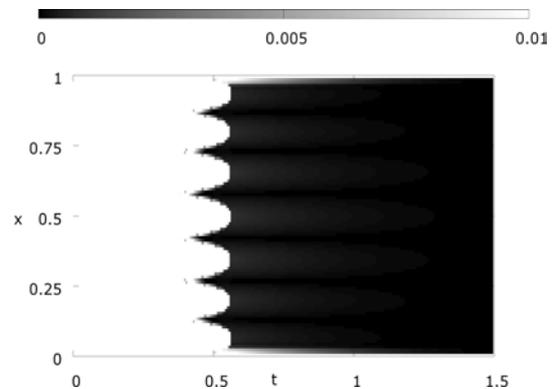
(c) Vorzeichen von $p(x,t)$



(d) Vorzeichen von $q(x,t)$



(e) Vorzeichen des Aktivators $y^*(x,t)$



(f) $\text{abs}(s^*(x,t) - s_{\text{sing}}(x,t))$

$$\begin{aligned}
 0 = L_w(y^*, w^*, s^*, p, q)w &= J_w(y^*, w^*, s^*)w + \iint_Q q_t w - \int_{\Omega} q(\cdot, T)w(\cdot, T) + \int_{\Omega} w(\cdot, 0)q(\cdot, 0) \\
 &+ D \iint_Q \Delta q w + D \iint_{\Sigma} \partial_v w \cdot q - D \iint_{\Sigma} \partial_v q \cdot w \\
 &- \iint_Q q w - D \iint_{\Sigma} \partial_v w \cdot q - \iint_{\Sigma} q w - \iint_Q p w
 \end{aligned}$$

und damit die adjungierten Gleichungen:

$$\begin{aligned}
 -p_t - \sigma D \Delta p + (3y^{*2} - \delta) p - q &= y^* && \text{in } Q, \\
 -q_t - D \Delta q + q + p &= \xi w^* && \text{in } Q, \\
 \partial_v p + p(\sigma D)^{-1} &= y^*(\sigma D)^{-1} && \text{in } \Sigma, \\
 \partial_v q + q D^{-1} &= \xi w^* D^{-1} && \text{in } \Sigma, \\
 p(\cdot, T) &= y^*(\cdot, T) && \text{in } \Omega, \\
 q(\cdot, T) &= \xi w^*(\cdot, T) && \text{in } \Omega.
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

An dieser Stelle kann man erkennen, dass das Lagrange-Prinzip auch dabei hilft, ein korrektes Modell zu bilden. Die roten markierten Terme fallen nur weg, wenn man die Randbedingungen in (4.39) richtig skaliert. Die blauen Summanden verschwinden durch eine passende Wahl von Testfunktionen (vgl. (4.29)). Für die verteilte Steuerung erhält man die Variationsungleichung:

$$L_s(y^*, w^*, s^*, p, q)(s - s^*) = \iint_Q p(s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad}. \tag{4.41}$$

Definiert man die Menge der Punkte, in denen der adjungierte Zustand p verschwindet, wie in (4.17) mit Ψ , dann ist für alle Punkte $(x, t) \in \overset{\circ}{\Psi}$ die Bedingung

$$y^*(x, t) = -q(x, t) \tag{4.42}$$

erfüllt. Setzt man die Bedingung (4.42) in die zweite Gleichung von (4.40) ein, ergibt sich:

$$y_t^*(x, t) + D \Delta y^*(x, t) - y^*(x, t) - \xi w^*(x, t) = 0, \quad \forall (x, t) \in \overset{\circ}{\Psi}.$$

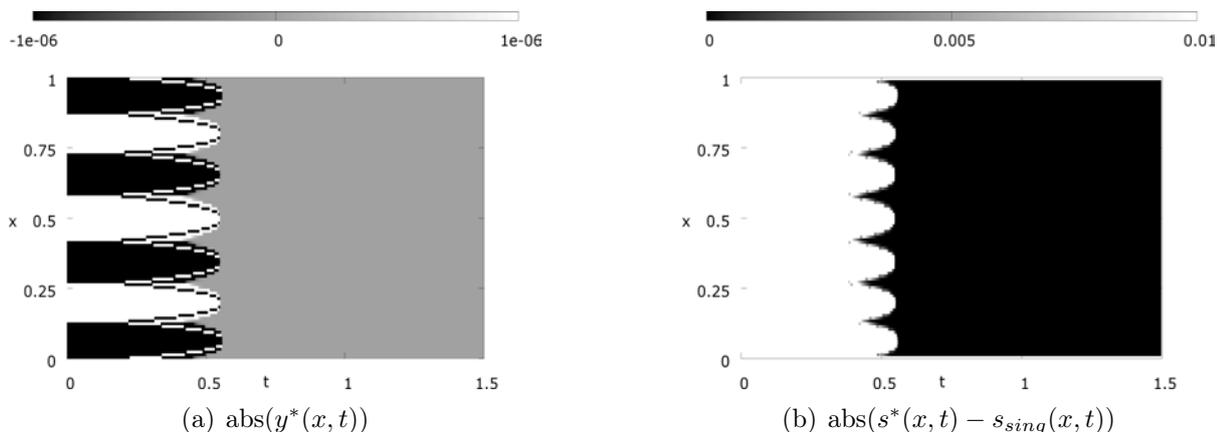
Subtrahiert man diese neu gewonnene Gleichung von der bekannten Aktivator-Gleichung, erhält man eine Bedingung für die singuläre Steuerung für alle Punkte $(x, t) \in \overset{\circ}{\Psi}$:

$$s^*(x, t) = -D(1 + \sigma)\Delta y^*(x, t) + y^{*3}(x, t) + (1 - \delta)y^*(x, t) + (1 + \xi)w^*(x, t). \tag{4.43}$$

Für den Spezialfall, dass die Adjungierte des Inhibitors in einem Teilgebiet $\Xi \subset \overset{\circ}{\Psi}$ verschwindet, ergibt sich aus (4.42):

$$y^*(x, t) \equiv 0 \quad \forall (x, t) \in \overset{\circ}{\Xi}.$$

Abbildung 4.11.: Vergleiche von Zustand (a) und Steuerung (b) für (4.39)



Demzufolge lautet die Bedingung für eine singuläre Steuerung in diesem Bereich:

$$s^*(x, t) = (1 + \xi)w^*(x, t) \quad \forall (x, t) \in \overset{\circ}{\Xi}. \quad (4.44)$$

Aus praktischen Gesichtspunkten würde es reichen, im Zielfunktional nur den Aktivator zu minimieren ($\xi = 0$), um das ganze System in den Nullpunkt zu steuern. Man kann in Abbildung 4.9(a),(b) erkennen, dass durch die starke Kopplung des Aktivators mit dem Inhibitor dieser ebenfalls in den stationären Zustand $w \equiv 0$ gelangt, wenn $y \equiv 0$ durch die Steuerung gewährleistet ist. Genau dies geschieht durch die singuläre Steuerung. Sobald es gelingt, den Aktivator in den Nullpunkt zu steuern, gleicht man nur noch den Einfluss des Inhibitors in der Zustandsgleichung durch eine geeignete Steuerung aus. Diese singuläre Steuerung dürfte man so erwarten und konnte dem System angesehen werden.

Überraschend ist allerdings die singuläre Steuerung in den Punkten $(x, t) \in \overset{\circ}{\Psi} \setminus \overset{\circ}{\Xi}$, die nur aus der Kopplung beider adjungierter Zustandsgleichungen sowie der Korrelation zwischen Inhibitor-Adjungierter und Aktivator entsteht. Die Existenz dieser singulären Steuerung war nur durch ein Studium der notwendigen Optimalitätsbedingungen zu entdecken und wurde numerisch in Abbildung 4.11(b) verifiziert.

Wie bereits erwähnt, wird der Fall $\xi > 0$ aus physikalischen Gesichtspunkten keine neuen Erkenntnisse bringen, allerdings bestärkt er die eben getätigten Aussagen. Minimiert man den Inhibitor im Zielfunktional gleichberechtigt mit $\xi = 1$, so sieht man, dass seine Adjungierte nur in Nullmengen von Q verschwindet. Das bedeutet, dass keine Teilmenge $\Xi \subset \overset{\circ}{\Psi}$ mit $\overset{\circ}{\Xi} \neq \emptyset$ existiert, in der der Aktivator komplett verschwindet (vgl. Abbildung 4.10 (e)+(f)). In diesem Fall ist eine Auswertung der Optimalitätsbedingungen unabdingbar.

4.7.2. Musterbildung bei Säugetieren

Die Musterbildung hat im Tierreich eine lange Tradition. Fische, Schlangen, Katzen, fast jede Spezies besitzen gemusterte Repräsentanten. Jahrhundertlang galt die Musterbildung als ein evolutionärer Prozess, „den die Natur eben so eingerichtet hat“, aber nie-

mand ist auf die Idee gekommen, dass diese Ausbildung von Streifen, Punkten und Spiralen mathematischen Gesetzmäßigkeiten unterliegen könnte. Erst im Jahre 1952 (nur zwei Jahre vor seinem Tod) postulierte der vielseitige Alan Turing [71], dass für die Ausbildung von Mustern bei Schmetterlingen vermutlich zwei miteinander reagierende Chemikalien verantwortlich sind, da er bei einigen Chemotaxis-Experimenten in verschiedenen Reaktions-Diffusions-Systemen ganz ähnliche Muster beobachtet hat. Zwar fehlten Turing noch einige Feinheiten in seinem Modell, doch kam seine Vorstellung der Musterbildung dem heutigen Stand der Forschung relativ nah. Er vermutete, dass unter dem Fell der Säugetiere (oder unter der Haut der anderen Tierklassen) eine dünne Schicht liegt, in der während der embryonalen Phase des Tieres ein durch die Mutter initiiertes Reaktions-Diffusions-Prozess zweier Chemikalien abläuft. Diese Phase, in der ein Lebewesen Gestalt und Muster ausbildet, nennt man auch **Morphogenese**.

Lange Zeit ruhte diese Idee Turings, bis Ende der siebziger Jahre Kauffman et al. [39] erste praktische Versuche am Embryo einer Fruchtfliege durchführten. Danach haben sich bis in die heutige Zeit viele anerkannte Mathematiker und Biologen mit der mathematischen Modellierung von Musterbildungsprozessen im Tierreich auseinander gesetzt, wie z.B. Maini [47, 46] oder Murray [47, 55, 56]. Insbesondere Murray versucht in seinen Büchern einer Vielzahl von biologischen Phänomenen mathematisches Leben einzuhauchen. Bezüglich der Musterbildung bei Säugetieren unterstützt er voll und ganz Turings Theorie eines chemischen Reaktions-Diffusions-Prozesses während der Morphogenese. Da in der Praxis die Funktionsweise von Turings Theorie noch nicht nachvollzogen werden konnte, ist diese unter Biologen höchst umstritten.

In diesem Kapitel möchte ich das Murray-Modell zur Beschreibung der Musterbildung bei Säugetieren, hier im Speziellen von Großkatzen behandeln. Es handelt sich dabei um ein **Aktivator-Inhibitor-System** der Form (4.34), bei dem kompliziertere Reaktionsterme als im vorherigen Solitonen-Beispiel vorliegen. Diese sind gegeben durch

$$F(y, w) = k_1 - k_2 y - \frac{k_5 y w}{k_6 + k_7 y + k_8 y^2},$$

$$G(y, w) = k_3 - k_4 w - \frac{k_5 y w}{k_6 + k_7 y + k_8 y^2},$$

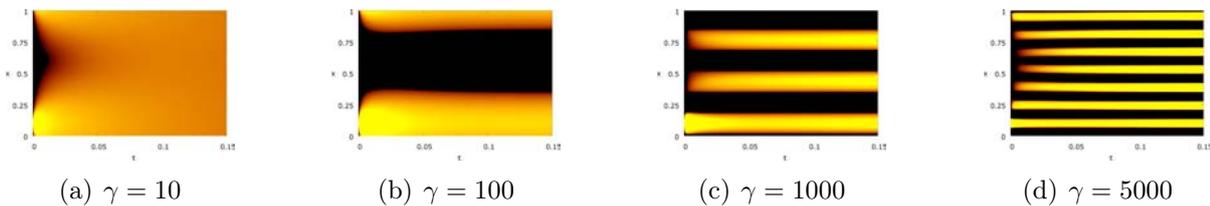
einer konstanten **Produktion**, einer linearen **Zersetzung** und einer nichtlinearen **Reaktion**. Der Reaktionsterm ist durch eine Wahl von nur positiven Termen wohldefiniert. Durch eine passende Skalierung kann man das System umschreiben zu

$$y_t - \Delta y - \gamma \left(a - y - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) = 0,$$

$$w_t - D \Delta w - \gamma \left(\delta (b - w) - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) = 0,$$
(4.45)

wobei $a, b, \gamma, \rho, \delta, K$ und D positive Konstanten darstellen. Der so genannte **Längenparameter** γ ist bei einer festgelegten Diffusionskonstanten $D > 1$ ein Maß für die Größe des betrachteten Embryos. Mittels einer linearen Stabilitätsanalyse zeigt Murray [56], dass die Systemparameter a, b, ρ, δ, K entscheiden, ob eine so genannte Turing-Instabilität im System vorliegt, während γ, D und die Geometrie des Embryos die Art des entstehenden Musters festlegen.

Abbildung 4.12.: Verschiedene Lösungen der Aktivatorgleichung aus (4.45) für $D = 7$ unter dem Parametersatz (4.46)



Definition 4.7.1 (Turing-Instabilität).

Ein Reaktions-Diffusions-System nennt man *diffusionsgetrieben instabil* bzw. *Turing-instabil*, wenn ohne Diffusion jeder homogene Stationärzustand gegenüber kleinen Störungen stabil, unter Berücksichtigung von Diffusion jedoch instabil ist.

Wie in Murray [56] gezeigt, liefert der Parametersatz

$$a = 102, \quad b = 78, \quad \delta = 1.5, \quad \rho = 12.125, \quad K = 0.125 \quad (4.46)$$

Turing-Instabilität für (4.45). Eine stationäre konstante Lösung des Systems (c_y, c_w) berechnet sich mit diesen Parametern zu

$$y \equiv 24 =: c_y, \quad w \equiv 26 =: c_w. \quad (4.47)$$

Murray behauptet nun, dass für Raubkatzen (und auch für viele andere Säugetiere) genau dieser Reaktions-Diffusions-Prozess entscheidend für ihre Musterbildung ist. In den von uns durchgeführten numerischen Experimenten konnten nur durch Variation des Längensparameters γ u. a. die charakteristischen Muster von Leoparden, Geparden, Jaguars und Tigern reproduziert werden, wenn man die stationäre Lösung (4.47) an einer Stelle des 2D-Grundgebietes Ω störte. Flecken im Fell definieren sich dabei durch die Teilflächen, in denen der Aktivator einen Wert größer als die stationäre Lösung c_y besitzt.

Als optimalen Steuerprozess betrachten wir das 1D-Aktivator-Inhibitor Modell, bei dem sich ebenfalls für eine feste Diffusionskonstante und verschiedene Längensparameter unterschiedliche Muster ergeben. In der in Abbildung 4.12 gezeigten Aufsicht des Aktivators liegt dieser in den schwarzen Bereichen unter dem Schwellenwert von 24, in den anderen liegt der Aktivator darüber. Ähnlich zum Solitonen-Modell werden wir als Zielvorgabe für den optimalen Steuerprozess festlegen, aus dem Muster heraus in den instabilen stationären Zustand (c_y, c_w) zu gelangen. Durch die starke Kopplung des Inhibitors an den Aktivator ist auch in diesem Modell eine Minimierung des Inhibitors nicht zwangsläufig nötig. Da ein Fell keinen ausgezeichneten Rand besitzt, benutzen wir für unseren 1D-Steuerprozess periodische Randbedingungen dritter Art. Dabei ist darauf zu achten, dass man wie im Solitonen-Modell die Randbedingung des Inhibitors passend mit der Diffusionskonstante skaliert. Als Anfangsbedingung wählt man das für die Parameter (4.46), $\gamma = 1000$, $D = 7$ festgelegte Muster (vgl. Abb. 4.12 (c)). Als erstes Beispiel betrachten wir eine verteilte Steuerfunktion s , die in ganz Q auf den Aktivator wirken kann. Auf das Ursprungsmodell übertragen ist dies natürlich eine unrealistische Bedingung, da man

nicht zur jeder Zeit an jeder Stelle des Fells in die Aktivatorgleichung eingreifen kann. Zusammen mit den konstanten Steuerschranken $s_{\min} := -0.05$, $s_{\max} := 0.05$ und dem resultierenden Steuerbereich

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(Q) : s_{\min} \leq s(x, t) \leq s_{\max} \text{ in } Q\},$$

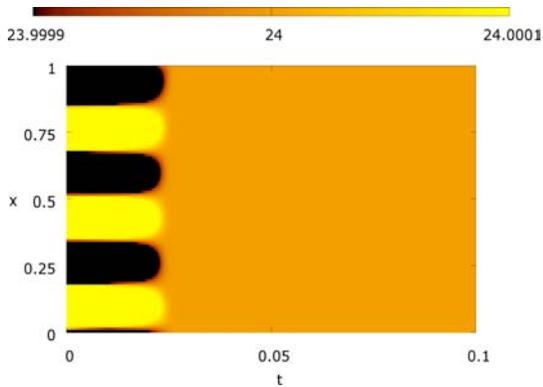
sowie $\Omega := (0, 1)$ und $T = 0.2$ ergibt sich der folgende optimale Steuerprozess:

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad J(y, w, s) &:= \frac{1}{2} \left(\|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \|y(\cdot, T) - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\ &\quad + \frac{\xi}{2} \left(\|w - c_w\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|w - c_w\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \|w(\cdot, T) - c_w\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\ \text{unter} \quad y_t - \Delta y - \gamma \left(a - y - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) &= s \quad \text{in } Q, \quad (4.48) \\ w_t - D \Delta w - \gamma \left(\delta(b - w) - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) &= 0 \quad \text{in } Q, \\ \partial_v y(0, \cdot) - \partial_v y(1, \cdot) + y(0, \cdot) - y(1, \cdot) &= 0 \quad \text{in } (0, T), \\ \partial_v w(0, \cdot) - \partial_v w(1, \cdot) + D^{-1}(w(0, \cdot) - w(1, \cdot)) &= 0 \quad \text{in } (0, T), \\ y(\cdot, 0) &= y_0 \quad \text{in } \Omega, \\ w(\cdot, 0) &= w_0 \quad \text{in } \Omega, \\ s &\in S_{ad} \quad \text{in } Q. \end{aligned}$$

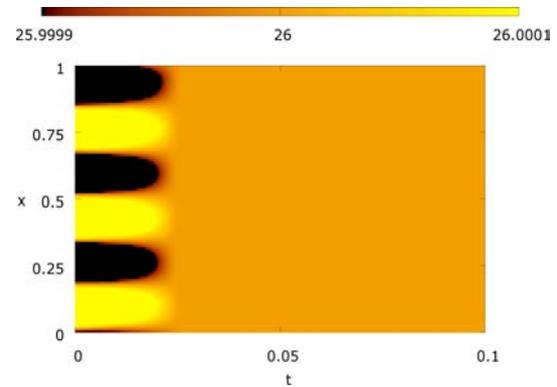
Für das Problem (4.48) werden wir im Folgenden mittels des Lagrange-Prinzips formale Optimalitätsbedingungen herleiten. Durch die periodischen Randbedingungen in (4.48) ist a priori nicht klar, wie die adjungierten Variablen der Randbedingungen mit den entsprechenden Adjungierten der Differentialgleichungen zusammenhängen. Bei den vorgegangenen Beispielen konnte man sofort den Zusammenhang mit der Adjungierten am Rand erkennen. Um die Identifizierung in diesem Beispiel zu erleichtern, bezeichnen wir die Adjungierten der Randbedingungen zunächst mit den zeitabhängigen Funktionen $\nu(t)$ und $\mu(t)$ und werden sie erst bei der Auswertung der Lagrange-Methode mit p und q in Verbindung bringen. Mit der üblichen Kopplung ergibt sich die folgende Lagrange-Funktion für das Problem (4.48):

$$\begin{aligned} L(y, w, s, p, q, \nu, \mu) &= J(y, w, s) - \iint_Q \left(y_t - \Delta y - \gamma \left(a - y - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) - s \right) p \\ &\quad - \iint_Q \left(w_t - D \Delta w - \gamma \left(\delta(b - w) - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) \right) q \\ &\quad - \int_0^T (\partial_v y(0, \cdot) - \partial_v y(1, \cdot) + y(0, \cdot) - y(1, \cdot)) \nu \\ &\quad - \int_0^T (D(\partial_v w(0, \cdot) - \partial_v w(1, \cdot)) + w(0, \cdot) - w(1, \cdot)) \mu. \end{aligned}$$

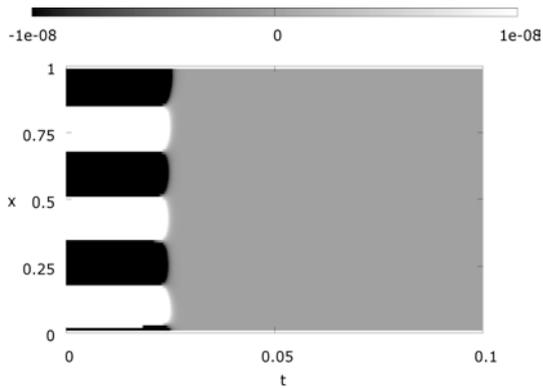
Abbildung 4.13.: Numerische Lösung von (4.48) mit $\xi = 0$



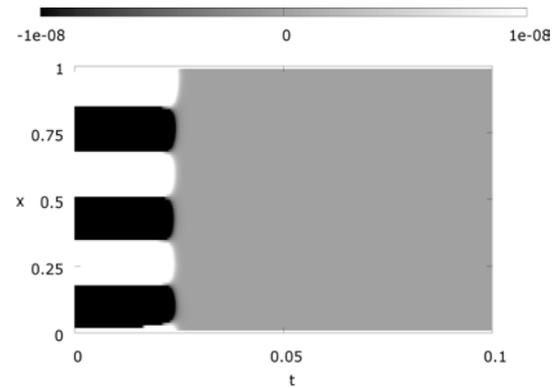
(a) 2D-Aufsicht des Aktivators $y^*(x, t)$



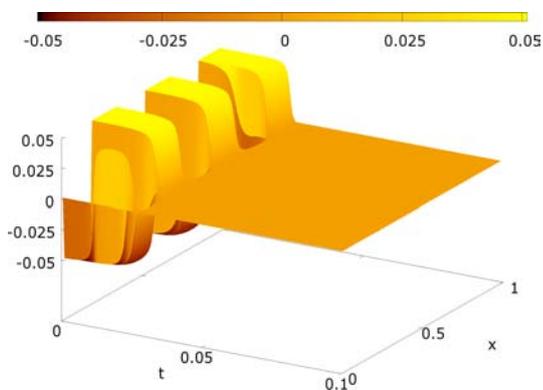
(b) 2D-Aufsicht des Inhibitors $w^*(x, t)$



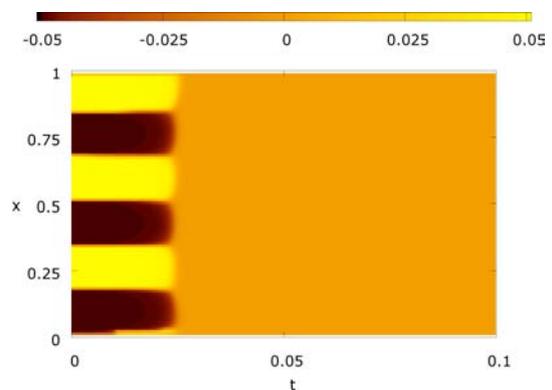
(c) Aktivator-Adjungierte $\tilde{p}(x, t)$



(d) Inhibitor-Adjungierte $\tilde{q}(x, t)$



(e) optimale Steuerung $s^*(x, t)$



(f) 2D-Aufsicht des Steuerung $s^*(x, t)$

Die Variationsableitungen der Lagrange-Funktion bezüglich der Zustandsvariablen ergeben die folgenden formalen notwendigen Optimalitätsbedingungen für (4.48):

$$\begin{aligned}
 0 = L_y(y^*, w^*, s^*, p, q, \nu, \mu)y &= J_y(y^*, w^*, s^*)y + \iint_Q p_t y \\
 &\quad - \int_{\Omega} p(\cdot, T)y(\cdot, T) + \int_{\Omega} p(\cdot, 0)y(\cdot, 0) \\
 &\quad + \iint_Q \Delta p y - \int_0^T y(0, \cdot)\nu + \int_0^T y(1, \cdot)\nu \\
 &\quad + \int_0^T \partial_v y(0, \cdot)p(0, \cdot) + \int_0^T \partial_v y(1, \cdot)p(1, \cdot) \\
 &\quad - \int_0^T \partial_v p(0, \cdot)y(0, \cdot) - \int_0^T \partial_v p(1, \cdot)y(1, \cdot) \\
 &\quad - \int_0^T \partial_v y(0, \cdot)\nu + \int_0^T \partial_v y(1, \cdot)\nu \\
 &\quad - \iint_Q \gamma \left(p + \left(\frac{\rho w^* (1 - Ky^{*2})}{(1 + y^* + Ky^{*2})^2} \right) (p + q) \right) y,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 0 = L_w(y^*, w^*, s^*, p, q, \nu, \mu)w &= J_w(y^*, w^*, s^*)w + \iint_Q q_t w \\
 &\quad - \int_{\Omega} q(\cdot, T)w(\cdot, T) + \int_{\Omega} w(\cdot, 0)q(\cdot, 0) \\
 &\quad + D \iint_Q \Delta q w - \int_0^T w(0, \cdot)\mu + \int_0^T w(1, \cdot)\mu \\
 &\quad + D \int_0^T \partial_v w(0, \cdot)q(0, \cdot) + D \int_0^T \partial_v w(1, \cdot)q(1, \cdot) \\
 &\quad - D \int_0^T \partial_v q(0, \cdot)w(0, \cdot) - D \int_0^T \partial_v q(1, \cdot)w(1, \cdot) \\
 &\quad - D \int_0^T \partial_v w(0, \cdot)\mu + D \int_0^T \partial_v w(1, \cdot)\mu \\
 &\quad - \iint_Q \gamma \left(\delta q + \left(\frac{\rho y^*}{1 + y^* + Ky^{*2}} \right) (p + q) \right) w.
 \end{aligned}$$

Da die roten Terme wegen der beliebigen Variation von y verschwinden müssen, ergibt sich die passende Identifizierung des Multiplikators ν in den grünen Termen, so dass sich für die Adjungierten ebenfalls periodische Randbedingungen dritter Art ergeben (4.49). Die richtige Wahl von Testfunktionen sichert wiederum ein Verschwinden der blauen Terme.

Daraus resultieren die folgenden adjungierten Gleichungen für (4.48):

$$\begin{aligned}
 -p_t - \Delta p + \gamma \left(p + \frac{\rho w^* (1 - K y^{*2}) (p + q)}{(1 + y^* + K y^{*2})^2} \right) &= y^* - c_y && \text{in } Q, \\
 -q_t - D \Delta q + \gamma \left(\delta q - \frac{\rho y^* (q + p)}{1 + y^* + K y^{*2}} \right) &= \xi (w^* - c_w) && \text{in } Q, \\
 \partial_v p(0, \cdot) + \partial_v p(1, \cdot) + p(0, \cdot) + p(1, \cdot) &= y^*(0, \cdot) + y^*(1, \cdot) - 2c_y && \text{in } (0, T), \\
 D(\partial_v q(0, \cdot) + \partial_v q(1, \cdot)) + q(0, \cdot) + q(1, \cdot) &= \xi (w^*(0, \cdot) + w^*(1, \cdot) - 2c_w) && \text{in } (0, T), \\
 p(\cdot, T) &= y^*(\cdot, T) - c_y && \text{in } \Omega, \\
 q(\cdot, T) &= \xi (w^*(\cdot, T) - c_w) && \text{in } \Omega.
 \end{aligned} \tag{4.49}$$

Als Variationsungleichung für eine kritische verteilte Steuerung $s^* \in S_{ad}$ ergibt sich die bereits bekannte Bedingung:

$$L_s(y^*, w^*, s^*, p, q, \nu, \mu)(s - s^*) = \iint_Q p(s - s^*) \geq 0 \quad \forall s \in S_{ad}. \tag{4.50}$$

Man sieht in (4.50), dass auch in diesem Beispiel nur das Vorzeichen der Aktivator-Adjungierten das Schaltverhalten einer kritischen Steuerung $s^* \in S_{ad}$ bestimmt. Durch die starke Kopplung von Aktivator und Inhibitor im Reaktionsterm der Zustandsgleichungen ergibt sich ebenfalls in den adjungierten Gleichungen eine komplizierte Kopplung. Diese erschwert auch die explizite Berechnung einer singulären Steuerung, so dass darauf an dieser Stelle verzichtet wird. Die Existenz einer singulären Teilfläche kann allerdings durch die Bestimmung der Flächen, in denen p verschwindet, verifiziert werden. Man sieht an dem System (4.49), dass man sich in der stationären Lösung $(y, w) \equiv (c_y, c_w)$ befindet, sobald p und q gleichzeitig auf einer Teilfläche verschwinden. Auf einer solchen Teilfläche muss zwangsläufig $s^* \equiv 0$ gelten. Es war an dieser Stelle allerdings nicht zu klären, warum die in Abbildung (4.13)(e) gezeigte numerisch berechnete optimale Steuerung in der Verbindung von der bang-bang zur singulären Teilfläche stetig ist.

Wie bereits erwähnt, ist eine verteilte Steuerung mathematisch interessant, doch aus praktischen Gesichtspunkten unrealistisch. Um von dem biologischen Modell zu einer rein chemischen Betrachtungsweise zu kommen, scheint es durchaus möglich, den Aktivator an ein oder zwei Punkten im Ortsgebiet beeinflussen zu können. Da im Modell kein ausgezeichneter Rand existiert, benutzen wir eine örtliche Beschränkungsfunktion $B : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, um die Steuerung in nur einem kleinen Teil des Ortgebietes wirken zu lassen. Mit

$$B(x) := \begin{cases} 1, & \text{falls } x \in [0.3 - \epsilon, 0.3 + \epsilon] \vee x \in [0.6 - \epsilon, 0.6 + \epsilon] \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

und $0 < \epsilon \ll 1$ kann man den optimalen Steuerprozess (4.48) abändern zu:

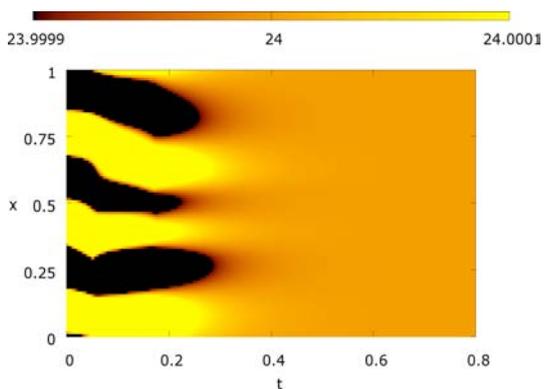
$$\begin{aligned}
 & \text{minimiere } J(y, w, s) := \frac{1}{2} \left(\|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \|y(\cdot, T) - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\
 & \text{unter} \quad y_t - \Delta y - \gamma \left(a - y - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) = B(x)s \quad \text{in } Q, \quad (4.51) \\
 & \quad w_t - D \Delta w - \gamma \left(\delta (b - w) - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) = 0 \quad \text{in } Q, \\
 & \quad \partial_v y(0, \cdot) - \partial_v y(1, \cdot) + y(0, \cdot) - y(1, \cdot) = 0 \quad \text{in } (0, T), \\
 & \quad \partial_v w(0, \cdot) - \partial_v w(1, \cdot) + D^{-1} (w(0, \cdot) - w(1, \cdot)) = 0 \quad \text{in } (0, T), \\
 & \quad y(\cdot, 0) = y_0 \quad \text{in } \Omega, \\
 & \quad w(\cdot, 0) = w_0 \quad \text{in } \Omega, \\
 & \quad s \in S_{ad} \quad \text{in } Q.
 \end{aligned}$$

Die Notwendigkeit der technischen Definition von B liegt daran, dass man die Steuerung nicht nur auf einer Menge vom Maß Null wirken lassen kann. Praktisch werden wir die Diskretisierung so vornehmen, dass die beiden Steuerungen $u_1(t) := s(0.3, t)$ und $u_2(t) := s(0.6, t)$ genau auf einem Diskretisierungspunkt liegen. Da man durch zwei einzelne Steuerungen keinen so großen Einfluss mehr auf das System hat, wie durch eine verteilte Steuerfunktion, wählen wir in (4.51) die etwas größeren Steuerschranken $s_{\min} := -0.5$, $s_{\max} := 0.5$, um in adäquater Zeit (z.B. $T = 0.8$) den gewünschten stationären Zustand erreichen zu können.

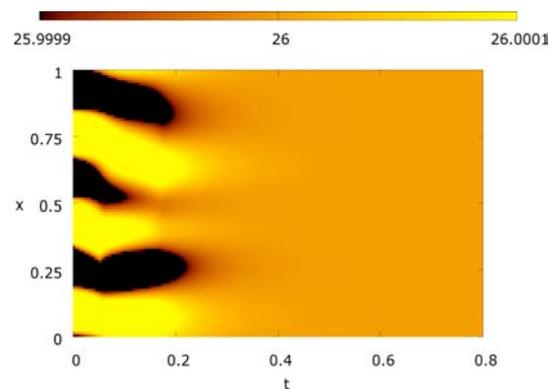
Wie man in den Abbildungen 4.14(a),(b) erkennen kann, ist es möglich, auch mit den Steuerungen aus Abbildung 4.14(c),(d), welche den aus (4.50) resultierenden Schaltbedingungen in den Ortspunkten $x = 0.3$ und $x = 0.6$ genügen, die stationäre Lösung $(y, w) \equiv (c_y, c_w)$ zu erreichen. Auch hier erhält man eine singuläre Steuerung genau dann, wenn die Adjungierten des Aktivators und des Inhibitors auf demselben Teilgebiet verschwinden. Wiederum ergeben sich die optimalen Steuerungen $u_1^*(t)$ sowie $u_2^*(t)$ unerklärlicherweise als stetige Funktionen.

Man sollte an dieser Stelle erwähnen, dass die Berechnung einer Lösung von (4.51) ein schwieriges numerisches Problem darstellt. Mit einer Crank-Nicolson-Diskretisierung vierter Ordnung und einem gewählten Gitter mit $N_x = 100 \times 1200 = N_t$ Diskretisierungspunkten benötigt man zur Lösung des resultierenden nichtlinearen Optimierungsproblems ca. 32 Stunden.

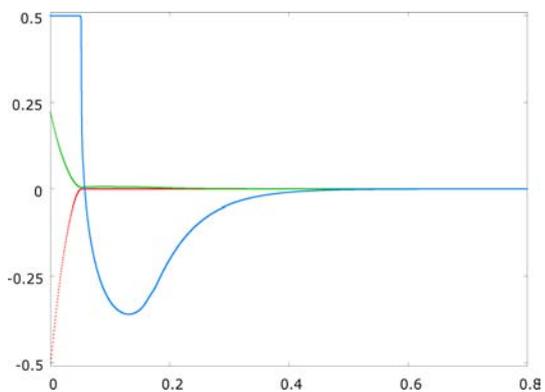
Abbildung 4.14.: Numerische Lösung von (4.51)



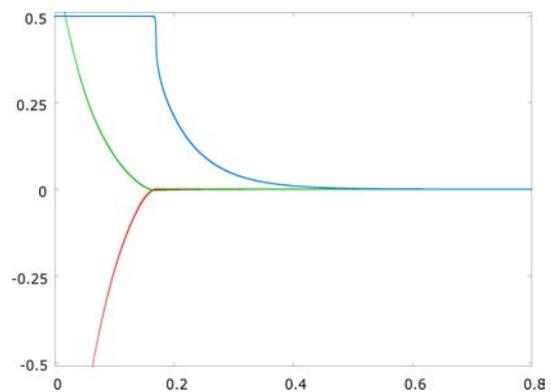
(a) 2D-Aufsicht des Aktivators $y^*(x, t)$



(b) 2D-Aufsicht des Inhibitors $w^*(x, t)$



(c) $u_1^*(t)$, $10^4 p(0.3, t)$ und $10^4 q(0.3, t)$



(d) $u_2^*(t)$, $5 \cdot 10^3 p(0.6, t)$ und $5 \cdot 10^3 q(0.6, t)$

5. Ansteuerung stationärer Lösungen von Evolutionsgleichungen

Die Praxisrelevanz finiter Differenzen-Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen ist in den verschiedensten naturwissenschaftlichen Disziplinen immer noch sehr groß. Selbst zur Lösung hochgradig nichtlinearer Systeme werden dazu äußerst simple Differenzen-Verfahren benutzt. Um die phänomenologischen nichtlinearen Effekte trotzdem numerisch darstellen zu können, werden extrem feine Diskretisierungen zur Gittergenerierung eingesetzt, die die RAM-Kapazität selbst moderner Computer übersteigen. Aus diesem Grund kann häufig die Dynamik zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen nur für sehr kleine Zeitschritte berechnet und auf der Festplatte zwischengespeichert werden. Ein typisches Beispiel für diese Problemklasse stellt die numerische Simulation nichtlinearer Evolutionsgleichungen dar. Diese treten häufig bei der Beschreibung instationärer physikalischer und chemischer Prozesse auf. Eine mathematische Formulierung geben wir in der folgenden

Definition 5.0.2 (Evolutionsgleichung k-ter Ordnung).

Gegeben seien ein Lipschitz-Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $1 \leq n \leq 3$, mit zugehörigem Raum-Zeit-Zylinder $Q := \Omega \times (0, T)$ sowie die Multiindexvektoren $\zeta^i \in \mathbb{N}_0^n$, $1 \leq i \leq r$ mit $k := \max_{1 \leq i \leq r} \{|\zeta^i|\}$. Die Indexvektoren seien so sortiert, dass gilt:

$$\begin{aligned} |\zeta^i| &< k & \forall 1 \leq i \leq r_0, \\ |\zeta^i| &= k & \forall r_0 + 1 \leq i \leq r. \end{aligned}$$

Jede partielle Differentialgleichung der Form

$$y_t = \sum_{r_0+1 \leq i \leq r} a_i D^{\zeta^i} y + f\left(D^{\zeta^1} y, \dots, D^{\zeta^{r_0}} y\right) \quad (5.1)$$

mit einem gegebenen Funktional $f : \mathbb{R}^{r_0} \rightarrow \mathbb{R}$, Funktionen $a_i : Q \rightarrow \mathbb{R}$ ($a_i \neq 0$) und einer Lösung $y : Q \rightarrow \mathbb{R}$ bezeichnen wir im Folgenden als **Evolutionsgleichung k-ter Ordnung**.

Bemerkung 5.0.3. In der Literatur findet man auch eine andere Definition der Evolutionsgleichungsordnung. Dort ist mit k die Ordnung der Zeitableitung gemeint. Da wir es in dieser Arbeit nur mit Evolutionsgleichungen erster Ordnung in der Zeit zu tun haben und somit eine Verwechslung ausgeschlossen ist, sprechen wir im Folgenden nur von **Evolutionsgleichungen k-ter Ordnung**.

Wenn man ein System mit einer nichtlinearen Evolutionsgleichung als Dynamik steuern möchte, ist es aus den oben genannten Gründen im Allgemeinen nicht möglich, die Optimierung auf dem kompletten Raum-Zeit-Zylinder durchzuführen. Da in jedem Optimierungsschritt eine Lösung der partiellen Differentialgleichung berechnet werden muss, ist es sinnvoller, ein geeignetes zeitlich lokales Optimierungsproblem auf kleinen Zeitschritten zu definieren. Der folgende Abschnitt beschreibt ein Konzept einer solchen lokalen Optimierungsstrategie.

5.1. Instantane Kontrolle zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen

Die Idee einer lokalen Optimierungsstrategie zur suboptimalen Steuerung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen ist schon älter. Vermutlich wurde sie zum ersten Mal in Choi et. al. [12] zur Lösung einer stochastischen Burgers-Gleichung vorgestellt. Die Methode einer instantanen Kontrolle (englisch: *instantaneous control*) ist in der Literatur auch unter dem Namen *model-predictive-control* sowie *receding-horizon-control* bekannt. Bisher wurde sie hauptsächlich zur Bestimmung einer closed-loop Steuerung von instationären Navier-Stokes- [31, 33, 32] bzw. Burgers-Gleichungen [34] benutzt.

5.1.1. Beschreibung der Funktionsweise einer instantanen Kontrolle

Das vorgegebene Zeitintervall $[0, T]$ unterteilen wir zunächst in M gleich große Teilintervalle der Länge $\tau = \frac{T}{M}$:

$$R_m :=]m\tau, (m+1)\tau[, \quad m = 0, \dots, M-1. \quad (5.2)$$

Mit $N_t(R_m)$ bezeichnen wir die Anzahl der Zeitdiskretisierungspunkte auf den Teilintervallen und wählen äquidistante Schrittweiten der Form:

$$h_t(R_m) := \frac{\tau}{N_t(R_m)}.$$

Für ein allgemeines Trackingproblem mit einer Dynamik der Form (5.1) definieren wir auf jedem Teilintervall R_m ein Subproblem, welches mit $(SP)_m$ bezeichnet wird. Zur Vereinfachung betrachten wir im Folgenden nur optimale Steuerprozesse mit einer verteilten Steuerung, deren Steuerbereich durch

$$S_{ad} := \{s \in \mathbb{L}^\infty(Q) : s_{\min} \leq s(x, t) \leq s_{\max} \text{ in } Q\}$$

mit konstanten Steuerschranken $s_{\min} < s_{\max}$ gegeben ist.

Definition 5.1.1 (Subprobleme $(SP)_m$). Gegeben sei das folgende Trackingproblem einer Evolutionsgleichung der Form (5.1) mit verteilter Steuerung:

$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && J(y, s) := \frac{1}{2} \left(\|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \beta \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \gamma \|y(\cdot, T) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\
 &\text{unter} && y_t = \sum_{r_0+1 \leq i \leq r} a_i D^{\zeta^i} y + f \left(D^{\zeta^1} y, \dots, D^{\zeta^i} y, \dots, D^{\zeta^{r_0}} y \right) + s \quad \text{in } Q, \quad (5.3) \\
 &&& y(\cdot, 0) = y_0 \quad \text{in } \Omega, \\
 &&& s \in S_{ad} \quad \text{in } Q,
 \end{aligned}$$

mit $\beta, \gamma \geq 0$ und passenden Randbedingungen auf dem Rand Σ . Für $0 \leq m \leq M-1$ und $Q_m := \Omega \times R_m$ bzw. $\Sigma_m := \Gamma \times R_m$ definieren wir die Subprobleme $(SP)_m$ von (5.3) als die optimalen Steuerprozesse:

$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && J_m(y, s) := \frac{1}{2} \left(\|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q_m)}^2 + \beta \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma_m)}^2 \right. \\
 &&& \left. + \gamma \|y(\cdot, (m+1)\tau) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\
 &\text{unter} && y_t = \sum_{r_0+1 \leq i \leq r} a_i D^{\zeta^i} y + f \left(D^{\zeta^1} y, \dots, D^{\zeta^i} y, \dots, D^{\zeta^{r_0}} y \right) + s_m \quad \text{in } Q_m, \\
 &&& (5.4) \\
 &&& y(\cdot, m\tau) = y_{m-1}^*(\cdot, m\tau) \quad \text{in } \Omega, \\
 &&& s_m \in S_{ad}^m \quad \text{in } Q_m,
 \end{aligned}$$

mit konsistenten Randbedingungen auf Σ_m . Dabei ist der Anfangswert für $(SP)_m$, durch den Endwert $y_{m-1}^*(\cdot, m\tau)$ des vorherigen Subproblems $(SP)_{m-1}$ festgelegt. Für $(SP)_0$ gilt die Anfangsbedingung

$$y_{-1}^*(\cdot, 0 \cdot \tau) := y(\cdot, 0) = y_0.$$

Die für $(SP)_m$ optimale Steuerung s_m^* nennt man auch **suboptimale Steuerung** von (5.3) im Zeitintervall R_m . Den zeitlich eingeschränkten Steuerbereich S_{ad}^m definieren wir durch:

$$S_{ad}^m := \{s \in \mathbb{L}^\infty(Q_m) : s_{\min} \leq s(x, t) \leq s_{\max} \quad \text{in } Q_m\}.$$

Bemerkung 5.1.2. Die Schrittweite τ in (5.2) muss nicht zwangsläufig äquidistant gewählt werden. Gerade bei der Ansteuerung stationärer Zustände, wo die Steuerung in vielen Fällen gegen einen konstanten Wert konvergiert, ist es sinnvoll, die Schrittweite bei kleiner werdenden Zielfunktionswerten adaptiv anzupassen.

Bemerkung 5.1.3. Eine gebräuchlichere (und numerisch schnellere) Variante der instantanen Kontrolle besteht darin, nicht die für das Subproblem $(SP)_m$ optimale Steuerung s_m^* zu berechnen, sondern lediglich einen Gradientenschritt in die Abstiegsrichtung $-\nabla J_m$ durchzuführen. Selbstverständlich erhält man den Geschwindigkeitsgewinn nur auf Kosten einer geringeren Genauigkeit.

Man kann in Definition 5.1.1 an Stelle von Ganzzeit-Trackingfunktionalen auch Zielfunktionen betrachten, die nur im Endzeitpunkt ausgewertet werden. Ein Kostenfunktional der Form

$$J(y, s) = \frac{1}{2} \|y(\cdot, T) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2$$

kann im Subprozess $(SP)_m$ beispielsweise durch

$$J_m(y, s) = \frac{1}{2} \|y(\cdot, (m+1)\tau) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \quad (5.5)$$

ersetzt werden. Es ist allerdings leicht zu erkennen, dass für ein solches Endzeit-Trackingfunktional die Approximation einer instantanen Kontrolle keine guten Ergebnisse liefern wird, da durch (5.5) die Struktur des ursprünglichen Optimierungsproblems nicht erhalten bleibt. Im Allgemeinen kann es nicht sinnvoll sein zu versuchen, die Wunschfunktion z , die man zum Zeitpunkt T erreichen will, bereits im Teilintervall R_m anzusteuern. Tröltzsch und Wachsmuth zeigen in [70, 75], dass eine lokale Optimierungsstrategie für das spezielle Problem (5.6) nicht zum gewünschten Erfolg führt.

Noch deutlicher wird die Problematik, wenn man zeitabhängige Zustandsbeschränkungen berücksichtigen möchte. Betrachten wir beispielsweise das Problem (5.6) mit $z \equiv 0 \equiv y_0$ und der reinen Zustandsbeschränkung:

$$y(x, t) \geq t - 1 \quad \forall (x, t) \in Q.$$

Für jeden Steuerbereich mit $0 \in S_{ad}$ würde eine lokale Optimierungsstrategie bis zum Zeitpunkt $t_1 = 1$ mit einer Steuerung $s \equiv 0$ in der stationären Lösung $y \equiv 0$ verharren und damit zu spät merken, dass sie es dann nicht mehr schafft, im ganzen Ortsgebiet Ω die Zustandsbeschränkung zu erfüllen. Die Problematik besteht darin, dass dieser Ansatz den ursprünglichen Steuerprozess nur zeitlich lokal berücksichtigt und damit der nötige „Blick in die Zukunft“ fehlt. Auch moving-(receding)-horizon-Techniken, die auf größeren Zeitintervallen arbeiten, können dieses Problem nicht vollständig lösen. Wir fassen die Erkenntnisse zusammen in der folgenden

Bemerkung 5.1.4. *Die lokale Betrachtungsweise der instantanen Kontrolle eignet sich nur bedingt zur suboptimalen Steuerung von Evolutionsgleichungen mit Endzeit-Trackingfunktionalen oder zeitabhängigen Zustandsbeschränkungen. Zeitinvariante Beschränkungen der Form*

$$y_{\min} \leq y(x, t) \leq y_{\max} \quad \forall (x, t) \in Q$$

mit konstanten Schranken $y_{\min} < y_{\max}$ ergeben in diesem Zusammenhang allerdings keine Schwierigkeiten.

Ein weitere Problematik besteht in der Interpretation der suboptimalen Steuerung. Wenn man diese mit der optimalen Steuerung s^* von (5.3) auf dem ganzen Zeitintervall $[0, T]$ vergleichen möchte, ist es im Vorhinein nicht klar, wie man die einzelnen Steuerungen s_m^* zusammensetzen sollte. Da bei der Lösung von nichtlinearen Evolutionsgleichungen

sehr kleine Zeitschritte benötigt werden, genügt es im Allgemeinen, wenn wir in jedem Zeitintervall R_m die Steuerung nur zeitlich konstant eingehen lassen. Diese Vorgehensweise hat im Vergleich zur ebenfalls möglichen Mittelung

$$s_m^*(x) := \frac{1}{N_t(R_m)} \sum_{j=1}^{N_t(R_m)} s_m^*(x, m\tau + h_t(R_m) \cdot j) \quad \forall x \in \Omega$$

den zusätzlichen Vorteil, dass sich die Anzahl der zu berechnenden Optimierungsvariablen deutlich reduzieren lässt.

Bemerkung 5.1.5. Wir werden bei allen folgenden Beispielen die Steuerfunktion eines Subproblems $(SP)_m$ zeitlich nur konstant in ein Teilgebiet Q_m eingehen lassen. Um dies im Subproblem zu kennzeichnen, benutzen wir die Bezeichnungen $s_m(x)$ bzw. $s_m^*(x)$ und schreiben den Steuerbereich um zu:

$$S_{ad}^\Omega := \{s \in \mathbb{L}^\infty(\Omega) : s_{\min} \leq s(x) \leq s_{\max} \text{ in } \Omega\}.$$

Da die Steuerschranken konstant gewählt wurden, ist der Steuerbereich S_{ad}^Ω für alle Subprobleme $(SP)_m$, $0 \leq m \leq M - 1$, gleich.

5.1.2. Ein einfaches Beispiel

Zur Illustration der Funktionsweise der instantanen Kontrolle betrachten wir ein Endzeit-Trackingproblem, dessen Dynamik durch die Wärmeleitungsgleichung, die einfachste Evolutionsgleichung zweiter Ordnung, bestimmt wird:

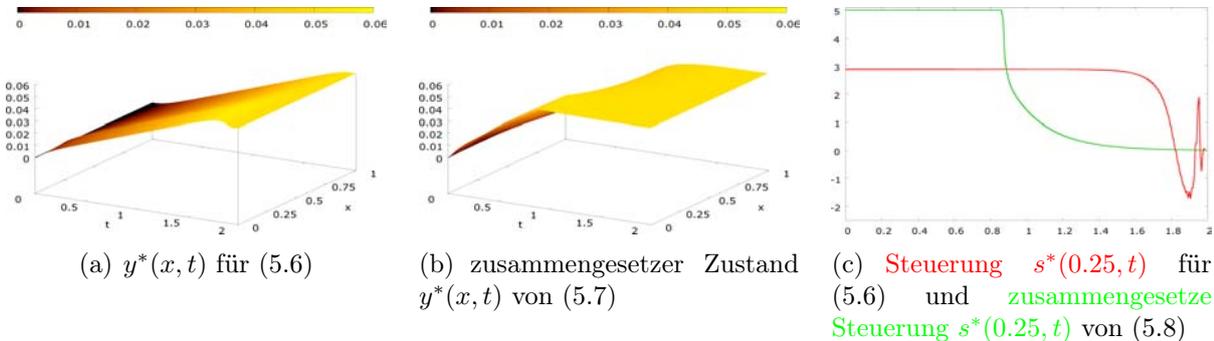
$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J(y, s) := \frac{1}{2} \|y(\cdot, T) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\ \text{unter} \quad & y_t = \Delta y + B(x)s && \text{in } Q, \\ & \partial_\nu y = 0 && \text{in } \Sigma, \\ & y(\cdot, 0) = y_0 && \text{in } \Omega, \\ & s \in S_{ad} && \text{in } Q. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Dieser optimale Steuerprozess stellt einen Spezialfall von (4.15) dar. Aus dem Anfangszustand $y_0 \equiv 0$ soll der stationäre Zustand $z \equiv 0.05$ zur Endzeit $T = 2$ auf dem 1D-Gebiet $\Omega = (0, 1)$ möglichst gut erreicht werden. Durch die Wahl großzügiger Steuerschranken $-s_{\min} = s_{\max} = 5$ ist das Problem (5.6) ähnlich „schlecht gestellt“ wie das Beispiel (4.24). Aus diesem Grund ist es zu erwarten, dass die Problemstellung zu mehrdeutigen singulären Steuerungen führen wird.

Die Funktion $B : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ dient hier wiederum zur Einschränkung des Wirkungsbereichs der Steuerung. In diesem Fall lassen wir die „verteilte“ Steuerung s praktisch nur auf einem Diskretisierungspunkt wirken und definieren für $0 < \epsilon \ll 1$:

$$B(x) := \begin{cases} 1, & \text{falls } x \in [0.25 - \epsilon, 0.25 + \epsilon], \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Abbildung 5.1.: Numerische Lösung für (5.6) (a) und (5.8) (b) und Vergleich der zugehörigen Steuerungen (c)



Als Subprobleme $(SP)_m$ ergeben sich die folgenden Steuerprozesse:

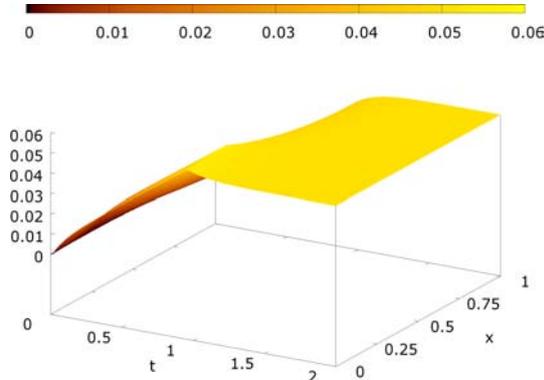
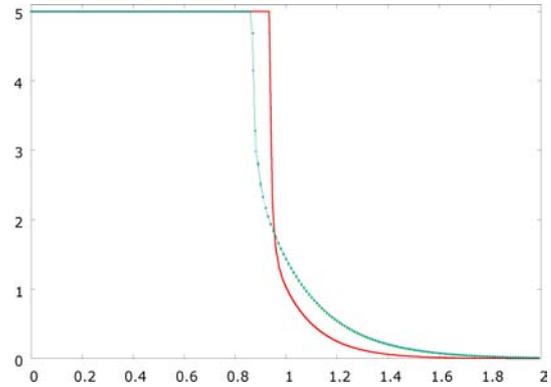
$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && J_m(y, s) := \frac{1}{2} \|y(\cdot, (m+1)\tau) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\
 &\text{unter} && y_t = \Delta y + B(x)s_m(x) && \text{in } Q_m, && (5.7) \\
 &&& \partial_\nu y = 0 && \text{in } \Sigma_m, \\
 &&& y(\cdot, m\tau) = y_{m-1}^*(\cdot, m\tau) && \text{in } \Omega, \\
 &&& s_m \in S_{ad}^\Omega && \text{in } \Omega.
 \end{aligned}$$

Da wir in diesem Beispiel die Steuerung in jedem Subproblem eigentlich nur auf einem Ortsdiskretisierungspunkt betrachten, können wir das Problem (5.7) noch einfacher schreiben:

$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && J_m(y, s) = \frac{1}{2} \|y(\cdot, (m+1)\tau) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\
 &\text{unter} && y_t = \Delta y + B(x)s_m(\text{const}) && \text{in } Q_m, && (5.8) \\
 &&& \partial_\nu y = 0 && \text{in } \Sigma_m, \\
 &&& y(\cdot, m\tau) = y_{m-1}^*(\cdot, m\tau) && \text{in } \Omega, \\
 &&& s_m(\text{const}) \in [s_{min}, s_{max}].
 \end{aligned}$$

Die Bezeichnungen $s_m(\text{const})$ bzw. $s_m^*(\text{const})$ sollen kennzeichnen, dass die gesuchte Steuerung im Subproblem nur eine Konstante ist. Vergleicht man nun die kritische Lösung aus (5.6) mit der zusammengesetzten Lösung von (5.8), so erkennt man keinerlei Zusammenhang (vgl. Abbildung 5.1). Hier liegt das Problem allerdings mehr an der Modellierung des Steuerprozesses (5.6) und weniger an der Optimierungsmethode aus (5.8). Wir haben nun schon in mehreren Beispielen gesehen, dass ein optimaler Steuerprozess mit einem reinen Endzeit-Trackingfunktional und einer linear eingehender Steuerfunktion zu numerischen und theoretischen Schwierigkeiten führt. Wird die Endzeit zu groß gewählt, hat die Steuerung durch ein fehlendes Vorhandensein des Zustandes in der adjungierten Differentialgleichung zu viel Freiheiten (vgl. Beispiel 4.5).

Abbildung 5.2.: Lösung für (5.9) (a) und ein Vergleich der Steuerung von (5.9), mit (5.7) und (5.10) (b)


 (a) $y^*(x, t)$ für (5.9)

 (b) Steuerung $s^*(x, t)$ für (5.9) und zusammengesetzte Steuerungen (5.7) und (5.10)

Intuitiv scheint es ersichtlich, dass sich eine lokale Optimierungsstrategie besser dazu eignet, Steuerprozesse mit Ganzzeit-Trackingfunktionalen zu approximieren. Ändert man das Zielfunktional in (5.6) und (5.8) so ab, dass man den Abstand zur zeitinvarianten Wunschfunktion auf dem ganzen Raum-Zeit-Zylinder Q minimiert, so ergibt sich der folgende Steuerprozess

$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && J(y, s) := \frac{1}{2} \left(\|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2 + \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma)}^2 + \|y(\cdot, T) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\
 &\text{unter} && y_t = \Delta y + B(x)s && \text{in } Q, && (5.9) \\
 &&& \partial_\nu y = 0 && \text{in } \Sigma, \\
 &&& y(\cdot, 0) = y_0 && \text{in } \Omega, \\
 &&& s \in S_{ad} && \text{in } Q,
 \end{aligned}$$

sowie die Subprobleme

$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && J_m(y, s) := \frac{1}{2} \left(\|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q_m)}^2 + \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma_m)}^2 \right. \\
 &&& \left. + \|y(\cdot, (m+1)\tau) - z\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\
 &\text{unter} && y_t = \Delta y + B(x)s_m(\text{const}) && \text{in } Q_m, && (5.10) \\
 &&& \partial_\nu y = 0 && \text{in } \Sigma_m, \\
 &&& y(\cdot, m\tau) = y_{m-1}^*(\cdot, m\tau) && \text{in } \Omega, \\
 &&& s_m(\text{const}) \in [s_{min}, s_{max}].
 \end{aligned}$$

Man sieht in Abbildung 5.2, dass diese Modellierung besser für das Ursprungsproblem geeignet ist. Dies folgt zum einen, weil die optimale Steuerung nun durch die adjungierte Gleichung festgelegt ist, und zum anderen, da man den gewünschten stationären Zustand schon zu einem wesentlich früheren Zeitpunkt erreicht.

Bemerkung 5.1.6. *Durch eine Lösung des Subproblems (5.10) erhält man eine obere Schranke für die minimale Endzeit T^* , die benötigt wird, um unter der gegebenen Dynamik den Anfangszustand in die Nähe eines Wunschzustandes zu steuern. Dies ist für schwierige Evolutionsgleichungen durchaus von praktischer Relevanz.*

5.2. Anwendungsbeispiele

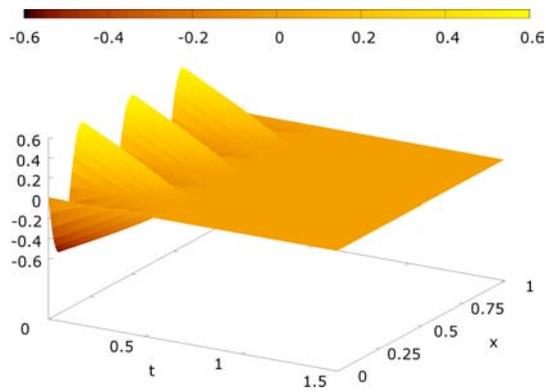
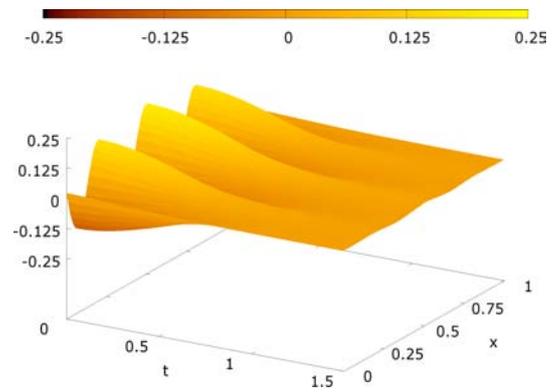
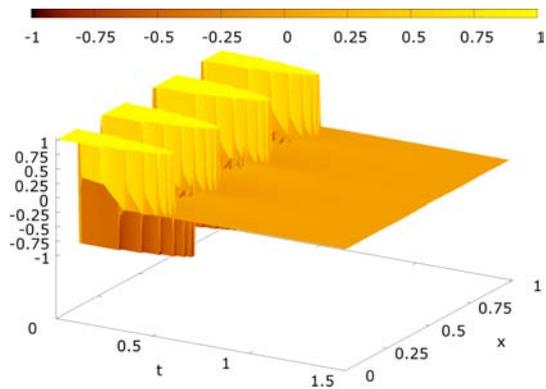
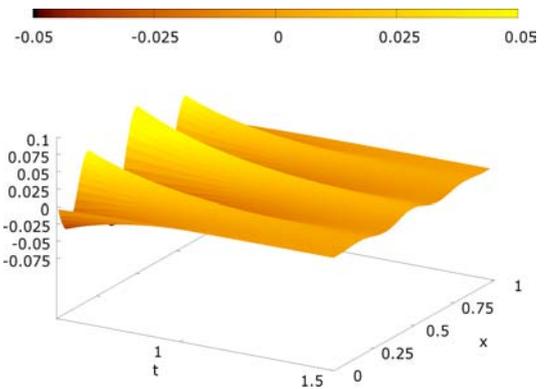
5.2.1. Solitonenmodell

Die Dynamik des Problems (4.39) besteht nach der Definition 5.0.2 aus zwei gekoppelten Evolutionsgleichungen zweiter Ordnung. Man kann die oben beschriebene Methodik der instantanen Kontrolle auch auf ein System von Evolutionsgleichungen anwenden, solange sichergestellt ist, dass man für jedes Subproblem eine Lösung berechnen kann. Wir haben bereits in Abschnitt 4.7.1 gesehen, dass für das Solitonenproblem eine Auswertung der formalen notwendigen Optimalitätsbedingungen möglich ist und mit den numerischen Ergebnissen übereinstimmt. Betrachten wir im Folgenden die Subprobleme von (4.39) mit $\xi = 0$:

$$\begin{aligned}
 &\text{minimiere} && J_m(y, s) := \frac{1}{2} \left(\|y\|_{\mathbb{L}^2(Q_m)}^2 + \|y\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma_m)}^2 + \|y(\cdot, (m+1)\tau)\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\
 &\text{unter} && \begin{aligned}
 &y_t = \sigma D \Delta y - y^3 + \delta y - w + s_m(x) && \text{in } Q_m, \\
 &w_t = D \Delta w + y - w && \text{in } Q_m, \\
 &\partial_\nu y = -(\sigma D)^{-1} y && \text{in } \Sigma_m, \\
 &\partial_\nu w = -D^{-1} w && \text{in } \Sigma_m, \\
 &y(\cdot, m\tau) = y_{m-1}^*(\cdot, m\tau) && \text{in } \Omega, \\
 &w(\cdot, m\tau) = w_{m-1}^*(\cdot, m\tau) && \text{in } \Omega, \\
 &s_m \in S_{ad}^\Omega && \text{in } \Omega.
 \end{aligned}
 \end{aligned} \tag{5.11}$$

Für die numerische Lösung von (4.39), welche in Abbildung 4.9 zu sehen ist, haben wir $N_x = 100$ Orts- und $N_t = 400$ Zeitdiskretisierungspunkte für ein Crank-Nicolson-Schema vierter Ordnung gewählt. Mit $M = 400$ Teilintervallen und einer äquidistanten Schrittweite von $\tau = 0.00375$ erhält man im letzten Teilintervall R_{M-1} eine Endzeit von $T = 1.5$, was der Endzeit in (4.39) entspricht. In jedem der Teilintervalle benutzen wir $N_t(R_m) = 20$ Diskretisierungspunkte, was wegen der geringen Größe von τ ausreicht, um die Evolutionsgleichung in $N_x(R_m) = 100$ Ortspunkten zu approximieren. Da wir die Steuerungen s_m in jedem Teilintervall R_m zeitlich konstant bestimmen, ergibt dies insgesamt eine Approximation der Steuerung auf Q in 100×400 Diskretisierungspunkten. Dies entspricht der Anzahl an Gitterpunkten im Originalproblem (4.39).

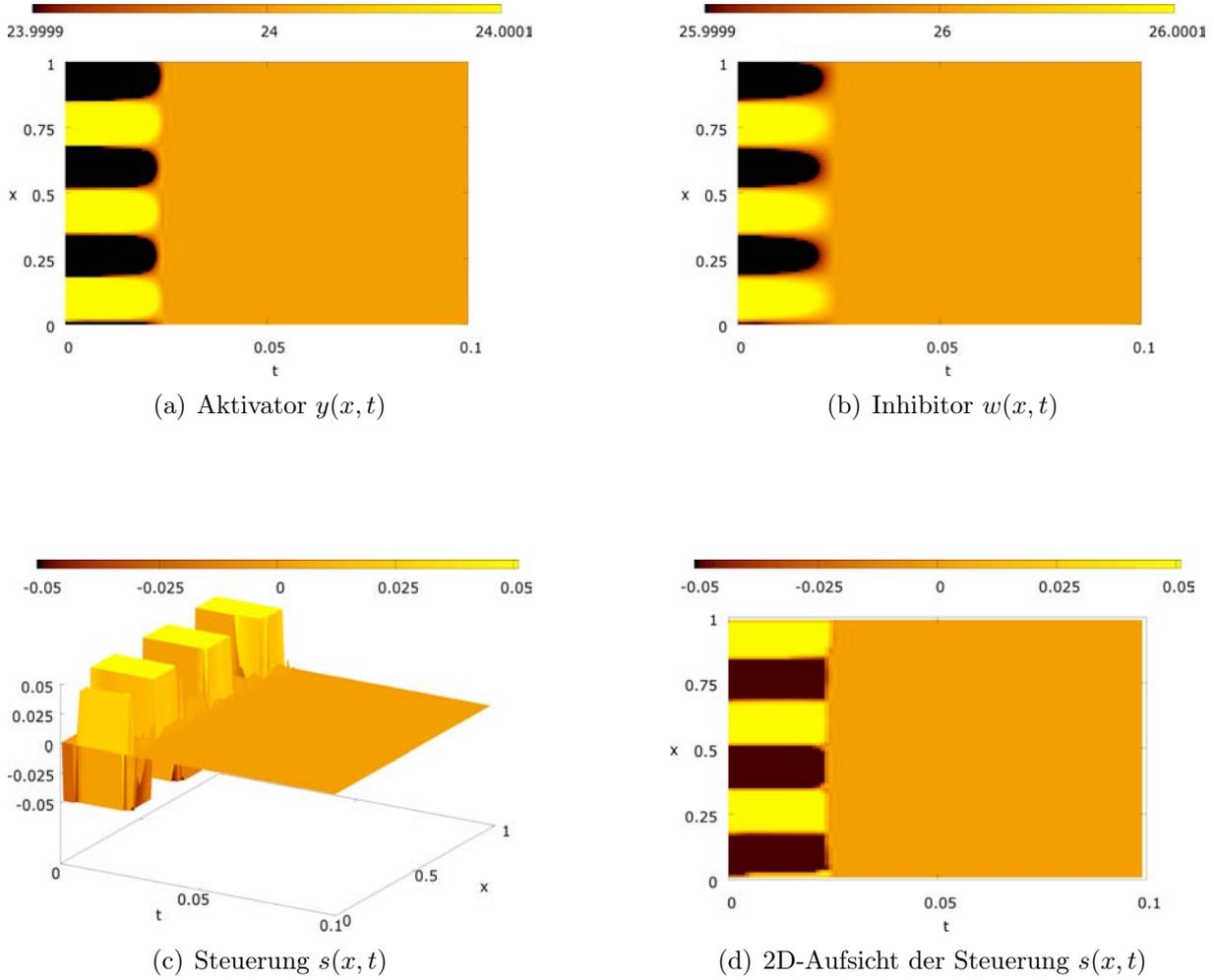
Man kann in Abbildung 5.3 erkennen, dass die zusammengesetzten suboptimalen Steuerungen nahezu mit der in Kapitel 4.7.1 berechneten optimalen Steuerung übereinstimmt. Selbst die singuläre Steuerung am Ende des Prozesses wird erstaunlich gut approximiert.

Abbildung 5.3.: Die auf Q zusammengesetzten Lösungen von (5.11)(a) Aktivator $y(x, t)$ (b) Inhibitor $w(x, t)$ (c) Steuerung $s(x, t)$ (d) Steuerung $s(x, t)$ am Ende des Prozesses

5.2.2. Musterbildungsmodell

Auch in dem in Abschnitt 4.7.2 betrachteten Reaktions-Diffusions-Modell liegen als Dynamik zwei gekoppelte Evolutionsgleichungen zweiter Ordnung vor. Die Berechnung der numerischen Lösungen in Abbildung 4.13 und 4.14 hat sich auf Grund des nichtlinearen Reaktionsterms als kompliziert und langwierig herausgestellt. Während man das verteilte Problem (4.48) mit $N_x = 100 \times 600 = N_t$ Diskretisierungspunkten noch in wenigen Stunden lösen konnte, brauchte man für (4.51) schon $N_x = 100 \times 1200 = N_t$ Gitterpunkte und anderthalb Tage für die Berechnung der optimalen Lösung. Dabei war die Benutzung eines hochgradigen semi-impliziten Diskretisierungs-Verfahrens wie das Crank-Nicolson-Verfahren vierter Ordnung für die Approximation der Dynamik unabdingbar. Auch für (4.48) mit $\xi = 0$ definiert man die Subprobleme wie in Definition 5.1.1 vorgestellt:

Abbildung 5.4.: Die auf Q zusammengesetzte Lösung von (5.12)



$$\text{minimiere } J_m(y, s) := \frac{1}{2} \left(\|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(Q_m)}^2 + \|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Sigma_m)}^2 + \|y(\cdot, (m+1)\tau) - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right)$$

$$\text{unter } y_t = \Delta y + \gamma \left(a - y - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) + s_m(x) \quad \text{in } Q_m, \quad (5.12)$$

$$w_t = D \Delta w + \gamma \left(\delta (b - w) - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) \quad \text{in } Q_m,$$

$$\partial_\nu y(0, \cdot) = \partial_\nu y(1, \cdot) - y(0, \cdot) + y(1, \cdot) \quad \text{in } R_m,$$

$$\partial_\nu w(0, \cdot) = \partial_\nu w(1, \cdot) - D^{-1} (w(0, \cdot) - w(1, \cdot)) \quad \text{in } R_m,$$

$$y(\cdot, m\tau) = y_{m-1}^*(\cdot, m\tau) \quad \text{in } \Omega,$$

$$w(\cdot, m\tau) = w_{m-1}^*(\cdot, m\tau) \quad \text{in } \Omega,$$

$$s_m \in S_{ad}^\Omega \quad \text{in } \Omega.$$

In diesem Beispiel zeigt sich ebenfalls, dass sich die in Abbildung 5.4 dargestellte Steuerung, die durch die lokale Optimierungsmethode zur Ansteuerung des gewünschten stationären Zustandes bestimmt wurde, sehr nah an der in 4.13 berechneten Lösung liegt. Bei gleicher Ortsdiskretisierung erhält man mit einer Schrittweite von $\tau = 0.001$ und einer Anzahl von $M = 100$ Teilintervallen mit $N_t(R_m) = 20$ Diskretisierungspunkten eine zusammengesetzte Steuerung, die in ähnlicher Zeit den Zustand (c_y, c_w) erreicht.

Schwieriger wird die Bestimmung einer instantanen Steuerung, falls diese keinen so großen Einfluss im System besitzt. Beschränkt man beispielsweise wie im Problem (4.51) den Wirkungsbereich der Steuerung in der Aktivatorgleichung von (5.12) durch die Funktion $B : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$

$$B(x) := \begin{cases} 1, & \text{falls } x \in [0.3 - \epsilon, 0.3 + \epsilon] \text{ oder } x \in [0.6 - \epsilon, 0.6 + \epsilon], \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (5.13)$$

auf praktisch zwei Punkte

$$y_t = \Delta y + \gamma \left(a - y - \frac{\rho y w}{1 + y + K y^2} \right) + B(x) s_m(x) \quad \text{in } Q_m,$$

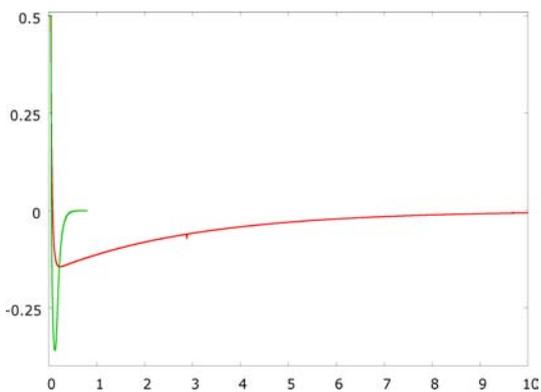
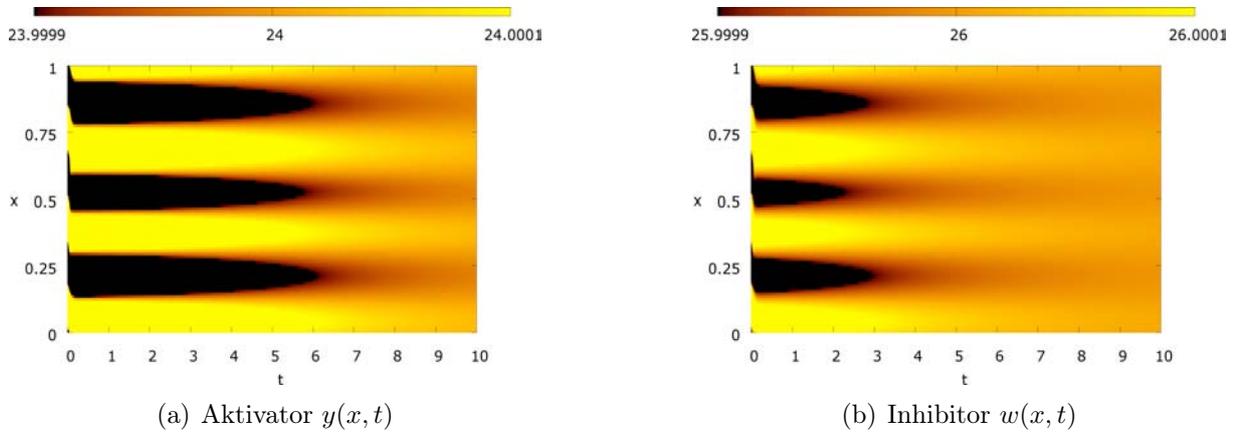
ist es zwar möglich, mit einer lokalen Strategie das System in die stationäre Lösung zu bringen, aber man benötigt im Vergleich zur optimalen Steuerung von (4.51) wesentlich mehr Zeit (vgl. Abbildung 5.5).

5.2.3. Wasserstrahlschneiden

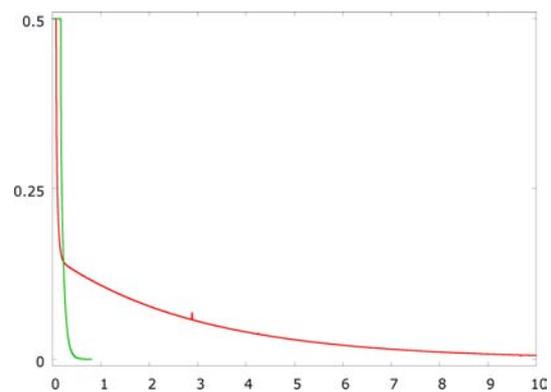
Auf dieses Modell sind wir durch die Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe R. Friedrich im Graduiertenkolleg „Nichtlineare kontinuierliche Systeme und deren Untersuchung mit numerischen, qualitativen und experimentellen Methoden“ gestoßen. Es handelt sich dabei um die Beschreibung einer ungewollten Riefenbildung (englisch: ripple formation) beim Durchtrennen eines Werkstücks mittels eines **Abrasiv-Wasserstrahlschneiders**. Wir werden im Folgenden den schematischen Aufbau eines Abrasiv-Wasserstrahlschneiders aus Abbildung 5.6 etwas näher beschreiben. Im Gegensatz zum Reinwasserschneiden, wo lediglich die Strahlenergie des Wasser genutzt wird, versetzt man hier das Wasser mit einem Schneidmittel (Abrasiv), um die Leistung zu erhöhen. Dazu wird in der **Mischkammer** $\langle 5 \rangle$ Wasser aus einer **Düse** $\langle 1 \rangle$ mit Granat, Korund oder Sand $\langle 4 \rangle$ aus dem **Abrasivkopf** $\langle 2 \rangle$ versetzt. Das resultierende Gemisch, bestehend aus ca. 90% Luft, 9% Wasser und 1% Abrasiv, wird mit einem Druck von etwa 4000-6000bar als **Wasserstrahl** $\langle 7 \rangle$ durch die **Abrasivfokussierdüse** $\langle 6 \rangle$ auf eine Geschwindigkeit von ungefähr Mach 3 beschleunigt und auf das Werkstück geschossen. Mit der neuesten Technologie im Hochdruckpumpensektor können heute Materialien wie z. B. Aluminium bis ca. 4mm mit einem 6000bar Reinwasserstrahl getrennt werden, während unter Verwendung von Abrasivmitteln Schnitttiefen bis zu 400mm möglich sind. Wie in Abbildung 5.7 zu sehen, entstehen beim Durchschneiden sehr dicker Materialien unerwünschte Riefen, die sich in regelmäßigen Abständen an dem Schnittprofil ausbilden.

Wie schon in früheren Beispielen von Musterbildungsprozessen, wird auch in diesem Modell die Dynamik durch eine nichtlineare Evolutionsgleichung beschrieben. Wir wollen diese auf einem eindimensionalen Raum-Zeit-Zylinder $Q := \Omega \times (0, T)$ betrachten, da man

Abbildung 5.5.: Die auf Q zusammengesetzte Lösung von (5.12) mit einer Einschränkung der Steuerfunktion durch (5.13)



(c) optimale Steuerung $u_1^*(t)$ von (4.51) und zusammengesetzte Steuerung $s(0.3, t)$



(d) optimale Steuerung $u_2^*(t)$ von (4.51) und zusammengesetzte Steuerung $s(0.6, t)$

das Phänomen der Riefenbildung damit ausreichend diskutieren kann. Der Zustand $y(x, t)$ soll dabei das seitliche Schneidprofil zur Zeit t beschreiben, welches entsteht, wenn der Wasserstrahl von oben in ein beliebig dickes und langes Werkstück schneidet. Die Funktion $y(x, t)$ nennt man auch die **Schnittfront** zur Zeit t . Durch diese 1D-Betrachtungsweise des Prozesses kann man nur die Wellenbildung am „Boden“ des Werkstücks beschreiben, die bei einem Durchschnitt des Materials in der Praxis nicht entstehen würden, jedoch zeigen Friedrich et al. in [21] sowie Radons in [60], dass diese Bodenwellen mit den seitlichen Riefen korrelieren.

In den oben genannten Arbeiten wurde für die Beschreibung dieser selbstorganisierten Strukturen ein phänomenologischer Ansatz gewählt. Bringt man die Evolution der Schnittfront beim Abrasiv-Wasserstrahlschneiden in Zusammenhang mit anderen Nichtgleichgewichtssystemen, wie etwa dem Ausbreitungsverhalten von Flammenfronten, oder der Frontausbildung bei chemischen Reaktionen, so erkennt man, dass die Dynamiken die-

Abbildung 5.6.: Aufbau eines Abrasiv-Wasserstrahlschneiders

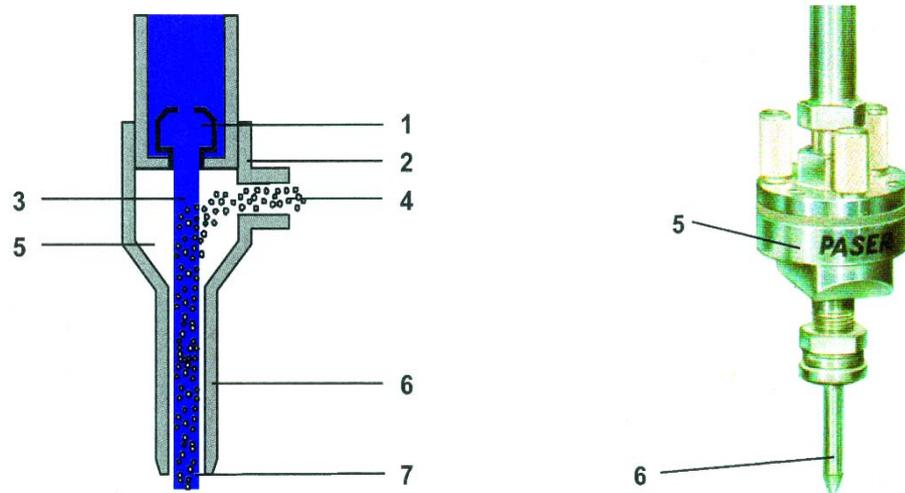
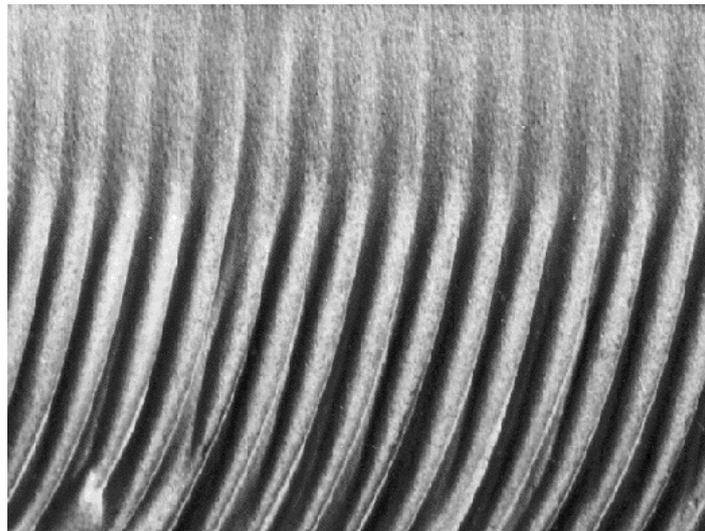


Abbildung 5.7.: Seitliches Schnittprofil beim Abrasiv-Wasserstrahlschneiden



ser Phänomene sich mit einer Variante der Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung¹ beschreiben lassen. Diese Gleichung findet man auch in anderen physikalischen Prozessen, wie zum Beispiel dem Ionenstrahl-Sputtern oder der Dünnschicht-Modellierung wieder.

Man benötigt zunächst einen Konvektionsterm, um zu beschreiben, dass das Werkstück und somit auch die Schnittfront, unter dem Wasserstrahl entlang bewegt wird. Die Evo-

¹Als die Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung bezeichnet man im Allgemeinen die Gleichung :

$$y_t = -\Delta y - \Delta^2 y - yy_x.$$

lutionsgleichung wird demnach die folgende Form besitzen:

$$y_t = -uy_x + g\left(D^{\zeta^1}y, \dots, D^{\zeta^i}y, \dots, D^{\zeta^r}y\right), \quad (5.14)$$

wobei u die konstante Vorschubgeschwindigkeit des Werkstücks darstellt. Das nichtlineare Funktional g in (5.14) wird die Erosionswirkung des Wasserstrahls modellieren. Es ist offensichtlich, dass der Wasserstrahl nicht auf dem ganzen Gebiet Ω , sondern nur örtlich begrenzt Material entfernen kann. Aus diesem Grund wird das Strahlprofil $V(x)$ häufig als eine Gauß-Funktion mit x_0 , dem Lotpunkt des Wasserstrahls, als Erwartungswert definiert. Wir werden für die Modellbildung eine nicht normierte Glockenkurve mit Varianz $\sigma = 1$ als Strahlprofil betrachten, die aus numerischen Gründen außerhalb des Strahls abgeschnitten wird:

$$V(x) := \begin{cases} e^{-0.5(x-x_0)^2}, & \text{falls } x \in [x_0 - 3, x_0 + 3], \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

Mit der obigen Überlegung lässt sich die Evolutionsgleichung umschreiben zu

$$y_t = -uy_x + V(x) \cdot \tilde{g}\left(D^{\zeta^1}y, \dots, D^{\zeta^i}y, \dots, D^{\zeta^r}y\right). \quad (5.15)$$

In die Bestimmung des Funktionals \tilde{g} , welches das Erosionsverhalten des Wasserstrahls modelliert, hat man in der Physik viel Arbeit investiert. In Friedrich/Radons [21, 60] wird die Annahme gemacht, dass der Einfluss von Abrasivmaterial (z. B. von einzelnen Sandkörnern) und kleineren Unebenheiten auf der Oberfläche eher gering ist. Sie wählen daher einen eher makroskopischen Ansatz für die Erosionsfunktion, indem sie alle anderen Terme der Taylor-Approximation aus phänomenologischen Gründen vernachlässigen:

$$\tilde{g} \approx \tilde{g}_0(y_x) + \kappa \Delta y + \vartheta \Delta^2 y.$$

Einen größeren Einfluss schreiben sie dabei dem Einfallswinkel des Wasserstrahls in Bezug zur Oberfläche zu. Für die zu betrachtenden Materialien hat sich dabei die Funktion

$$\tilde{g}_0(y_x) = \frac{1}{1 + y_x^2}$$

als sinnvoll erwiesen. Zusammen mit den vorherigen Überlegungen ergibt sich die Evolutionsgleichung

$$y_t = V(x) \cdot \left(\frac{1}{1 + y_x^2} + \kappa \Delta y + \vartheta \Delta^2 y \right) - uy_x \quad (5.16)$$

als eine mögliche Beschreibung der Dynamik des Erosionsprozess eines Abrasiv-Wasserstrahlschneiders. Die Gleichung (5.16) mit den Konstanten $\kappa, \vartheta < 0$ wird auch als verallgemeinerte Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung bezeichnet.

Die Anfangsbedingung wird durch das Modell bereits fest vorgegeben. Da das Werkstück noch intakt sein soll bevor der Wasserstrahl auftrifft, gilt

$$y(x, 0) = 0 \quad \forall x \in \Omega, \quad (5.17)$$

d. h. die unberührte Oberfläche des Materials liegt auf der Nulllinie. Für die „Gut-Gestelltheit“ der Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung mit Anfangs- und Randbedingungen sei auf Cousin/Larkin [13], Tadmor [64] sowie Mori/Kuramoto [54] verwiesen.

In den oben genannten Arbeiten von Radons/Friedrich werden die Simulationen auf sehr großen Ortsgebieten mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen

$$y(x, t) = 0, \quad \forall (x, t) \in \Sigma \quad (5.18)$$

gerechnet. Auf einem solch großen Raum-Zeit-Zylinder ist die Berechnung einer Lösung von (5.16) nur mit einem hohen numerischen Aufwand zu leisten und daher eine Optimierung kaum möglich. Da die Erosion nur in einer kleinen Umgebung um den Lotpunkt des Wasserstrahls stattfindet, genügt es, den Schneidprozess in einem Teilgebiet zu betrachten. Material, das nicht unter der Gauß-Glocke liegt, wird unbearbeitet weiter transportiert. Aus diesem Grund betrachten wir im Folgenden ein eingeschränktes Ortsgebiet $\Omega := (15, 28)$ um den Lotpunkt $x_0 = 24$ mit der einzigen Randbedingung:

$$y(28, t) = 0 \quad \forall t \in (0, T). \quad (5.19)$$

Die Randbedingung (5.19) bedeutet, dass kontinuierlich intaktes Material vom rechten Rand ($x = 28$) nachgeliefert wird. Durch bewusstes Aussparen einer Bedingung am linken Rand ($x = 15$) wird sichergestellt, dass das Material störungsfrei nach links heraus befördert wird. Diese fehlende Randbedingung muss zwingend im numerischen Diskretisierungsschema berücksichtigt werden. Da am linken Rand von Außen keine Information in das System gelangt und auch der Wasserstrahl in diesem Gebiet keinen Einfluß auf das Werkstück besitzt, kann man auf Randbedingungen höherer Ordnung verzichten und muss an beiden Rändern nur die Transportgleichung

$$y_t = -uy_x \quad (5.20)$$

berücksichtigen. Wir werden an dieser Stelle zur numerischen Approximation von (5.20) ein spezielles Upwind-Verfahren benutzen, um sicherzustellen, dass die Ortsableitung y_x durch bereits bekannten Diskretisierungspunkte berechnet werden kann (vgl. (5.27)). In Abbildung 5.8 wird anhand des Punktes auf der Oberfläche des Werkstücks demonstriert, wie das Material von rechts nach links unter dem Gauß-förmigen Wasserstrahl (blau) hindurch geschoben wird.

Zusammenfassend wollen wir den folgenden Evolutionsprozess des Abrasiv-Wasserstrahl-schneidens auf dem Grundgebiet $\Omega = (15, 28)$ betrachten:

$$\begin{aligned} y_t &= V(x) \cdot \left(\frac{1}{1 + y_x^2} + \kappa \Delta y + \vartheta \Delta^2 y \right) - uy_x && \text{in } Q, && (5.21) \\ y(\cdot, 0) &= 0 && \text{in } \Omega, \\ y(28, \cdot) &= 0 && \text{in } (0, T). \end{aligned}$$

mit den Konstanten $\kappa = -1$ und $\vartheta = -5.066$ sowie dem Gauß-förmigen Strahlprofil (??) mit Lotpunkt $x_0 = 24$. Die Größe u stellt dabei die konstante Vorschubgeschwindigkeit des Werkstücks dar.

Abbildung 5.8.: seitliche Schnittprofile $y(x, 0)$ und $y(x, 10)$

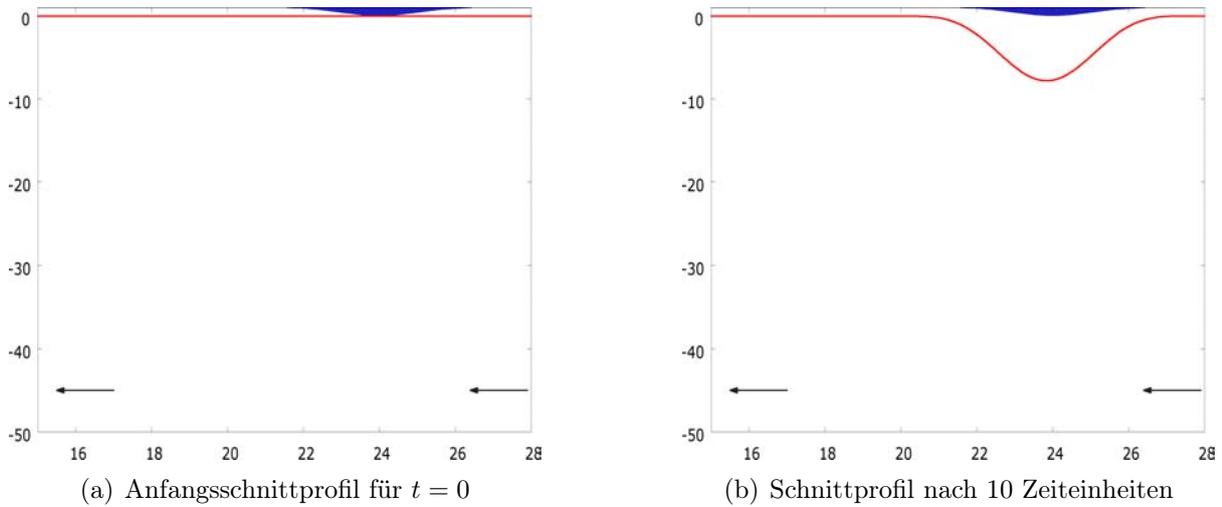
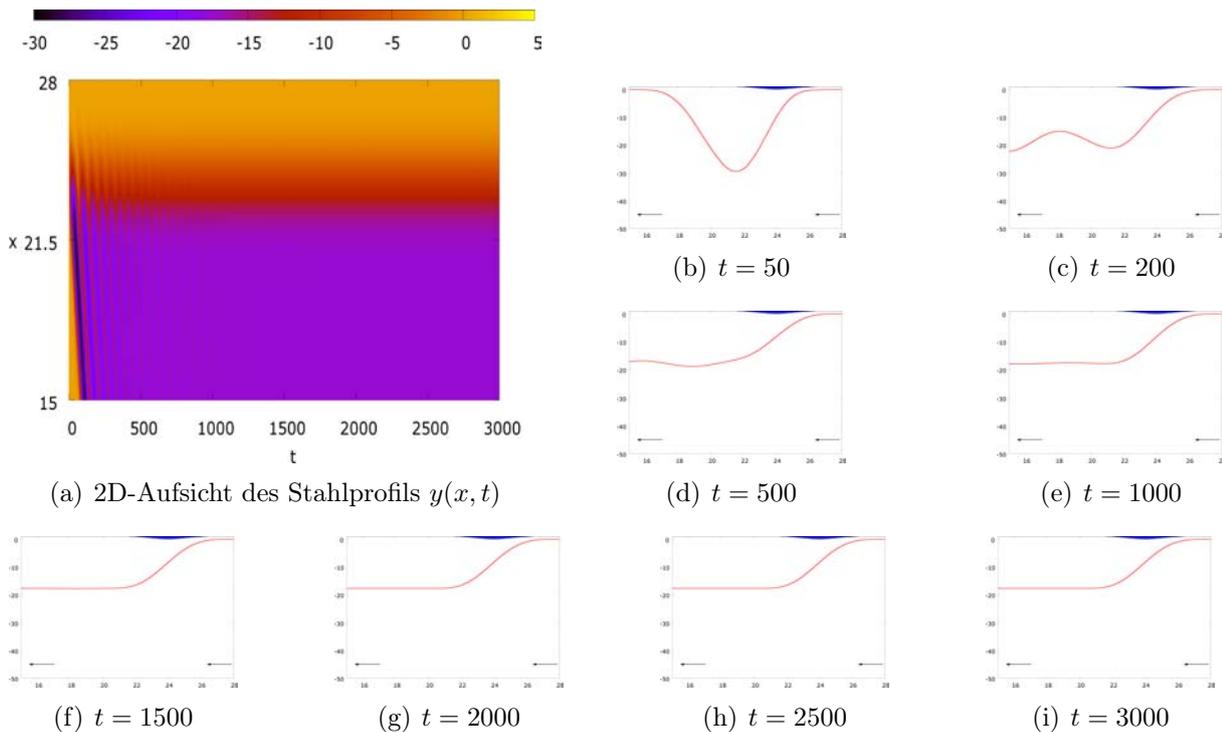
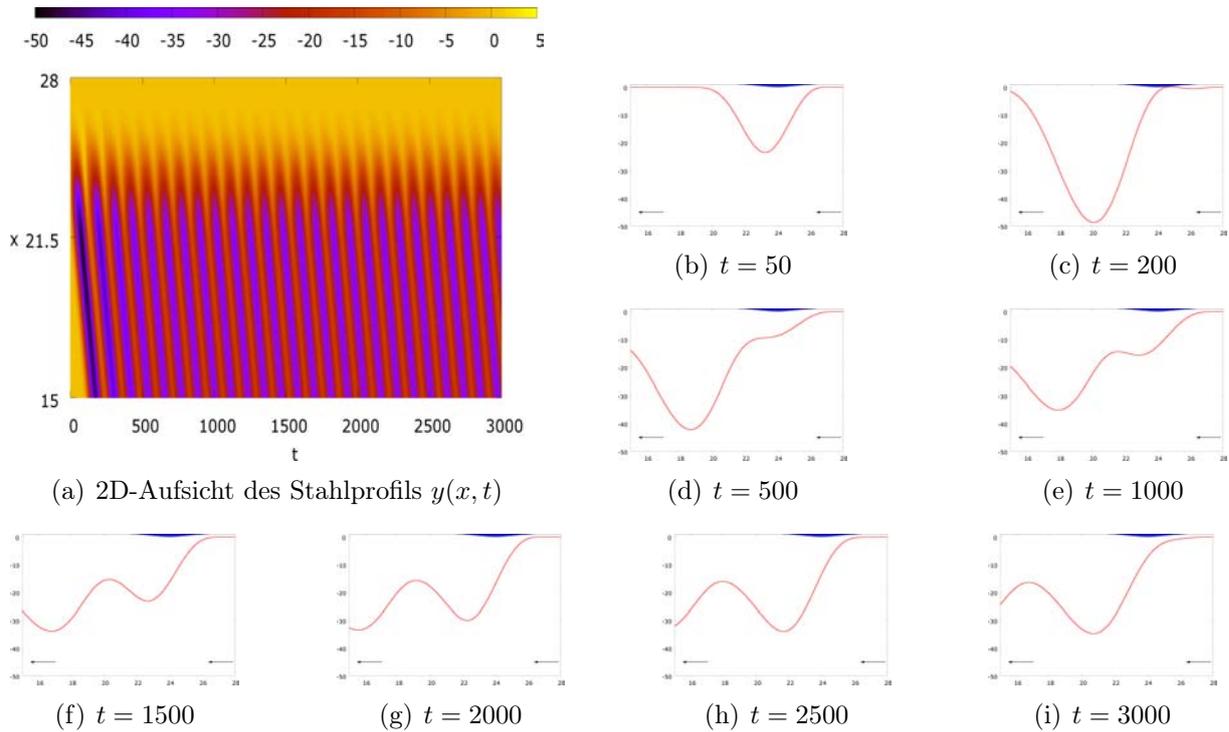


Abbildung 5.9.: glatte Schnittfront bei einer Vorschubgeschwindigkeit von $u \equiv -0.101$



In der Praxis liegt die Zielsetzung darin, stationäre Fronten zu erreichen, die ein möglichst glattes Schnittprofil mit einer konstanten Einschnitttiefe aufweisen. Tatsächlich erhält man solche glatte Fronten in experimentellen Versuchen und numerischen Simulationen, falls die Vorschubgeschwindigkeit groß genug ist (vgl. Abbildung 5.9). Aus diesem Grund ist für solche stationäre Schnittprofile die Annahme

$$|y_x| \gg |\Delta y| \quad \text{und} \quad |y_x| \gg |\Delta^2 y|$$

Abbildung 5.10.: Riefenbildung bei einer Vorschubgeschwindigkeit von $u \equiv -0.065$ 

realistisch. Somit sollten solch glatte stationäre Fronten in erster Näherung die folgende Gleichung erfüllen

$$uy_x = \frac{V(x)}{1 + y_x^2}.$$

Der Ortsgradient genügt daher einer Gleichung dritten Grades:

$$y_x + y_x^3 = \frac{V(x)}{u}. \quad (5.22)$$

Man kann an der obigen Gleichung erkennen, dass sich der Gradient der Schnittfront und damit auch die Schnitttiefe antiproportional zur Vorschubgeschwindigkeit verhält, d. h. je schneller man das Werkstück bewegt, desto geringer wird die Schnitttiefe ausfallen. Man beobachtet allerdings, dass ab einer kritischen Vorschubgeschwindigkeit u_c sich selbstorganisierte Strukturen ausbilden und man kann keine glatten stationären Fronten mehr erwarten. Für die gewählten Materialkonstanten $\kappa = -1$ und $\vartheta = -5.066$ im Erosionsprozess (5.21) liegt dieser Wert ungefähr bei $u_c = -0.07$. Diese Riefenbildung ist in Abbildung 5.10 zu sehen. Eine intuitive Fragestellung ist nun, ob es möglich ist, glatte stationäre Fronten mit einer höheren Schnitttiefe zu erreichen. In Friedrich/Radons [21, 60] wird gezeigt, dass dies mittels einer periodischen Modulation der Vorschubgeschwindigkeit oder der Strahlintensität bedingt möglich ist. Wir wollen über die Formulierung eines optimalen Steuerprozesses einen anderen Ansatz verfolgen, der es möglich macht, durch eine gezielte Steuerung der Vorschubgeschwindigkeit glatte Fronten mit höherer Schnitttiefe zu erreichen.

Durch die technische Möglichkeit, die Vorschubgeschwindigkeit rechnergesteuert anzupassen, ist es sinnvoll, sie als dynamische Größe aufzufassen. Dies gibt uns die Möglichkeit, die Vorschubgeschwindigkeit als zeitabhängige Steuerfunktion $u(t)$ im Erosionsprozess (5.21) zu benutzen. Die größte Schwierigkeit bei der Modellierung eines optimalen Steuerprozesses liegt in der Definition einer passenden Zielfunktion bzw. Wunschfunktion. A priori ist unklar, ob überhaupt stationäre Lösungen von (5.21) mit höheren Schnitttiefen existieren. Aus diesem Grund ist es nicht möglich, ein Tracking-Funktional der Form

$$J(y, s) = 0.5 \|y - z\|_{\mathbb{L}^2(Q)}^2$$

auf dem ganzen Raum-Zeit-Zylinder zu definieren. Man beschränkt sich auf die Definition eines Ganzzeit-Tracking-Funktional auf einem kleinen Ortsgebiet, um die unbekannte stationäre Lösung zu erreichen. Wenn man die stationäre Front für eine konstante Vorschubgeschwindigkeit aus Abbildung 5.9 betrachtet, scheint eine Zielfunktion der Art

$$J(y, s) := 0.5 \|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\tilde{Q})}^2 + 0.5 \|y(\cdot, T) - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \quad (5.23)$$

mit $\tilde{Q} = (15, 20) \times (0, T)$ und einer konstanten Wunschfunktion $z(x) \equiv c_y$ in der Nähe der geforderten Schnitttiefe am sinnvollsten. Es stellte sich allerdings bei den numerischen Simulationen heraus, dass ein Raum-Zeit-Zylinder, der nicht in der Nähe des Wirkungsbereiches des Wasserstrahls liegt, keine gute Wahl für eine lokale Optimierungsstrategie ist. Für die folgenden Berechnungen haben wir ein Zielfunktional der Form (5.23) mit

$$\tilde{Q} := \tilde{\Omega} \times (0, T) := (20.85, 22.8) \times (0, T) \quad (5.24)$$

benutzt. Mit diesem Ansatz ist es nicht möglich, die Schnitttiefe exakt auf den Wert c_y einzustellen, da die stationäre Front durch den Einfluss des Wasserstrahls in $\tilde{\Omega}$ noch keinen konstanten Wert erreichen kann. Da die Schnitttiefe aber auf natürliche Weise von der Wahl der Wunschfunktion c_y abhängen wird, ist damit eine flexible Ansteuerung verschiedener Schnitttiefen durchaus realisierbar.

Aus praxisrelevanten Gründen benötigen wir noch Steuerbeschränkungen in unserem Modell. Wir lassen an dieser Stelle keine positiven Werte für die Vorschubgeschwindigkeit zu und begrenzen die maximale Geschwindigkeit, mit der das Werkstück vorgeschoben werden kann, durch den negativen Wert $u_{\min} = -0.5$. Obwohl modelltechnisch ein „Rückwärts fahren“ des Werkstücks zur Beseitigung aufkommender Riefen durchaus sinnvoll sein kann, werden wir sehen, dass der Steuerbereich

$$U_{ad} := \{u \in \mathbb{L}^\infty(0, T) : u_{\min} \leq u(t) \leq 0 \text{ in } (0, T)\}$$

ausreicht, um glatte Schnittfronten zu erreichen. Dieses Vorgehen sichert eine einfache numerische Behandlung der verallgemeinerten Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung mittels Finite-Differenzen-Verfahren zu. Wir fassen das Modell in dem folgenden optimalen Steuerprozess zusammen:

$$\begin{aligned}
 \text{minimiere} \quad & J(y, s) := 0.5 \|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\tilde{Q})}^2 + 0.5 \|y(\cdot, T) - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \\
 \text{unter} \quad & y_t = V(x) \cdot \left(\frac{1}{1 + y_x^2} + \kappa \Delta y + \vartheta \Delta^2 y \right) - u(t) y_x \quad \text{in } Q, \quad (5.25) \\
 & y(\cdot, 0) = 0 \quad \text{in } \Omega, \\
 & y(28, \cdot) = 0 \quad \text{in } (0, T), \\
 & u \in U_{ad} \quad \text{in } (0, T),
 \end{aligned}$$

mit $\Omega := (15, 28)$, $\tilde{Q} := (20.85, 22.8) \times (0, T)$, den Konstanten $\kappa = -1$ und $\vartheta = -5.066$ sowie dem Gauß-förmigen Strahlprofil (??) mit Lotpunkt $x_0 = 24$. Das Problem (5.25) ist trotz des eingeschränkten Ortsgebietes auf dem kompletten Raum-Zeit-Zylinder Q mit den bekannten Verfahren nur sehr schwer zu lösen.

Die Transportgleichung als einfachste hyperbolische Gleichung erster Ordnung, muss im Vergleich zu parabolischen Gleichungen numerisch gesondert behandelt werden. Sie taucht sehr häufig in Evolutionsgleichungen auf, in denen Konvektion eine Rolle spielt. Für sich genommen ist die Transportgleichung eine Evolutionsgleichung erster Ordnung. Durch das Auftreten von Zeit- und Ortsableitungen können zur Beschreibung der verschiedenen Differenzen-Verfahren dieselben Indexmengen und Shift-Operatoren wie in Kapitel 4 benutzt werden (vgl. Tabelle 4.1). Die gängigsten Finiten-Differenzen-Verfahren zur Lösung der linearen Transportgleichung sind im Anhang A zusammengefasst.

Bei einigen Transportproblemen existiert eine ausgezeichnete **Vorzugsrichtung**, die im Prozess dominiert. Beim Modell des Wasserstrahlschneidens wird diese durch die Vorschubgeschwindigkeit u vorgegeben. Diese stellt sicher, dass das Werkstück zu jedem Zeitpunkt t zum linken Rand geschoben wird ($u(t) < 0$) bzw. stehen bleibt ($u(t) = 0$). Die Vorzugsrichtung hat, wie bereits bei der Modellierung beschrieben, einen direkten Einfluss auf die Diskretisierung der Evolutionsgleichung sowie der zugehörigen Randbedingungen.

Da wir es in (5.25) mit einer Evolutionsgleichung vierter Ordnung zu tun haben, werden wir im Inneren des Gitters den Term Δ^2 mit einem zentralen Differenzenoperator approximieren, der fünf Ortspunkte benutzt. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, die Randbedingung (5.19) auch auf dem rechten Nebenrand zu fordern:

$$y_{i,j} = 0 \quad \forall (i, j) \in \text{DRR}(\Sigma) \cup \text{DNRR}(Q). \quad (5.26)$$

Wie bereits erwähnt, kann man die Wirkung des Wasserstrahls in größerer Entfernung zum Lotpunkt vernachlässigen. In diesen Punkten wirkt nur noch die Transportgleichung auf das Werkstück, so dass unter Berücksichtigung der Vorzugsrichtung die Upwind-Diskretisierung

$$(\delta^+ + u_j \delta_+) y_{i,j} = 0 \quad \forall (i, j) \in \text{DLR}(\Sigma) \cup \text{DNLR}(Q) \quad (5.27)$$

die Evolutionsgleichung am linken Rand ausreichend beschreibt. Zur Diskretisierung des Terms Δ^2 in der Evolutionsgleichung benutzen wir einen zentralen Differenzenoperator, welcher die Ortspunkte gemäß des Pascal'schen-Dreiecks gewichtet:

$$\delta_\Delta := \frac{1}{h_x^4} (K^2 - 4K + 6I - 4K^{-1} + K^{-2}). \quad (5.28)$$

Im Gegensatz zum Transportterm spielt beim Winkeleinfluss die Vorzugsrichtung keine Rolle, so dass man diesen besser durch einen zentralen Ortsdifferenzenoperator approximiert:

$$\frac{1}{1 + \delta_0^2}. \quad (5.29)$$

Zusammen mit dem bereits bekannten Differenzenoperator δ_\times für den Laplace-Term ergibt sich die folgende Crank-Nicolson-Diskretisierung für die verallgemeinerte Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung (5.16):

$$\left(\delta^+ - \mu^+ \left(V_i \left(\frac{1}{1 + \delta_0^2} + \kappa \delta_\times + \vartheta \delta_\Delta \right) + u_j \delta_+ \right) \right) y_{i,j} = 0 \quad \forall (i, j) \in \text{DIN0}(Q). \quad (5.30)$$

Zur Komplettierung des Gleichungssystems wählt man als diskrete Anfangsbedingung von (5.25):

$$y_{i,j} = 0 \quad \forall (i, j) \in \text{DAB}(0). \quad (5.31)$$

Mit diesem Finite-Differenzen-Verfahren wurden die Simulationsergebnisse (Abbildung 5.9 und 5.10) der ungesteuerten Gleichung (5.21) mit konstanter Vorschubgeschwindigkeit auf $2.25 \cdot 10^6$ Gitterpunkten berechnet.

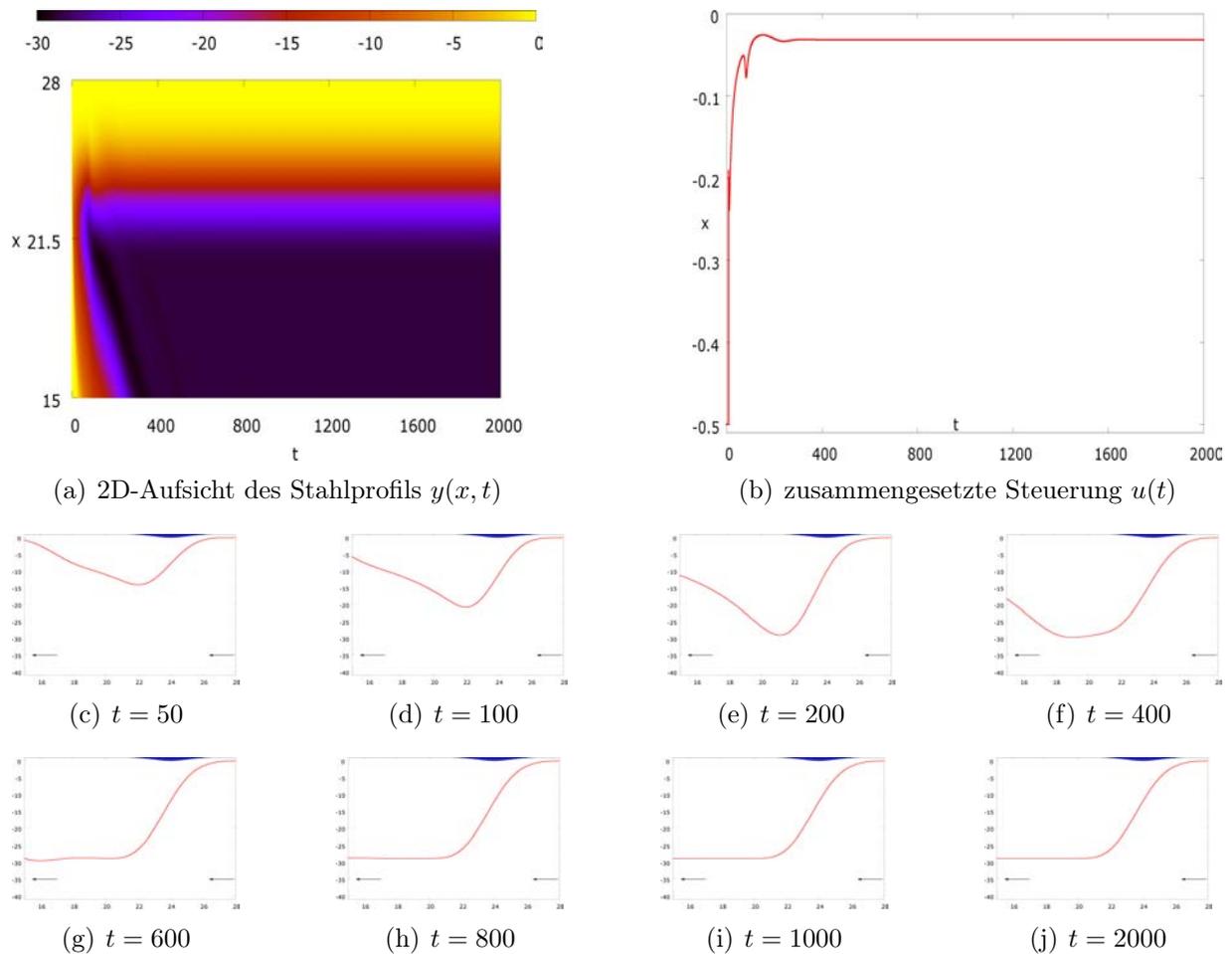
Die numerische Simulation der verallgemeinerten Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung mit einem Finite-Differenzen-Verfahren ist auf einem Ortsgitter, welches fein genug ist die Abtragungseffekte zu erfassen, nicht einfach. Da man auf langen Zeitskalen rechnen muss, um glatte Schnittfronten zu erreichen, aber kleine Zeitschritte benötigt, um die numerische Genauigkeit zu gewährleisten, werden die Rechenzeiten sehr lang. Möchte man zudem noch mittels eines optimalen Steuerprozesses eine dynamische Vorschubgeschwindigkeit bestimmen, die zu größeren Einschnitttiefen führt, ist dies ohne lokale Optimierungsstrategien nicht möglich.

Um die Subprobleme definieren zu können, wählen wir eine äquidistante Schrittweite $\tau = 1$, was die folgenden M Teilintervalle ergibt:

$$R_m =]m, (m + 1)[, \quad m = 0, \dots, M - 1.$$

Die Anzahl der Intervalle kann je nach Länge des zu betrachtenden Zeitraums variieren, doch wird sie immer in der Größenordnung von einigen Tausenden liegen. Die Subprobleme $(SP)_m$ von (5.25) ergeben sich nach Definition 5.1.1 damit zu:

$$\begin{aligned} \text{minimiere} \quad & J_m(y, s) := \frac{1}{2} \left(\|y - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\bar{Q}_m)}^2 + \|y(\cdot, (m + 1)\tau) - c_y\|_{\mathbb{L}^2(\Omega)}^2 \right) \\ \text{unter} \quad & y_t = V(x) \cdot \left(\frac{1}{1 + y_x^2} + \kappa \Delta y + \vartheta \Delta^2 y \right) - u_m(\text{const}) y_x \quad \text{in } Q_m, \quad (5.32) \\ & y(28, \cdot) = 0 \quad \text{in } R_m, \\ & y(\cdot, m\tau) = y_{m-1}^*(\cdot, m\tau) \quad \text{in } \Omega, \\ & u_m(\text{const}) \in [-0.5, 0]. \end{aligned}$$

Abbildung 5.11.: Zusammengesetzte Lösung von (5.32) mit $c_y = 25$ 

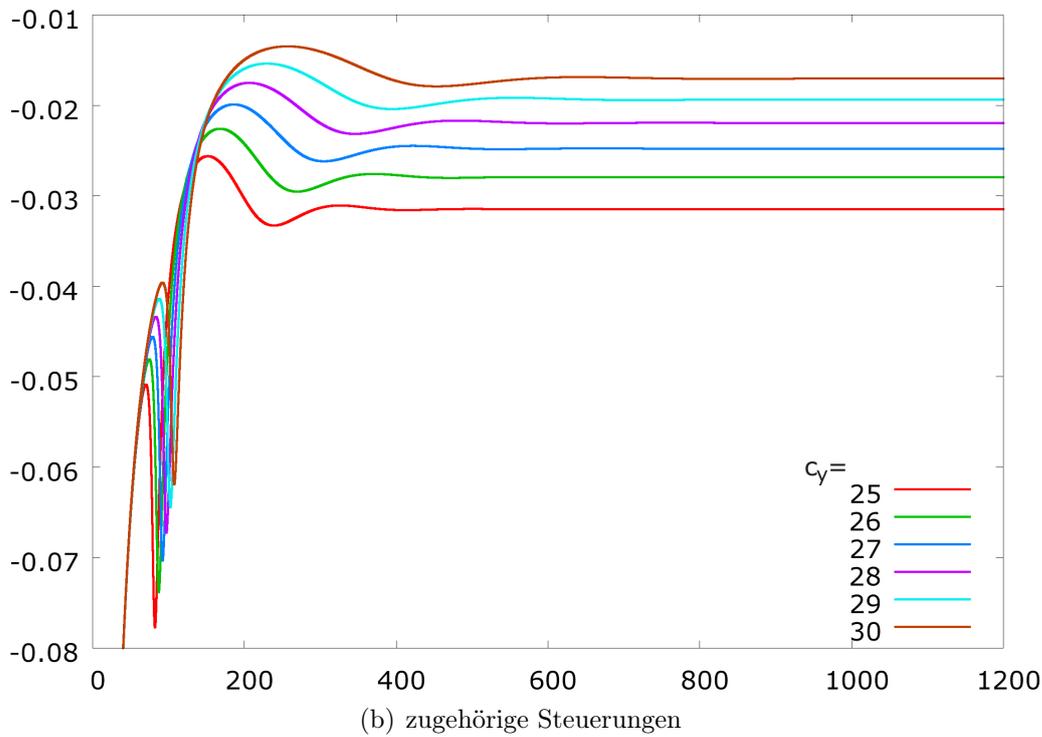
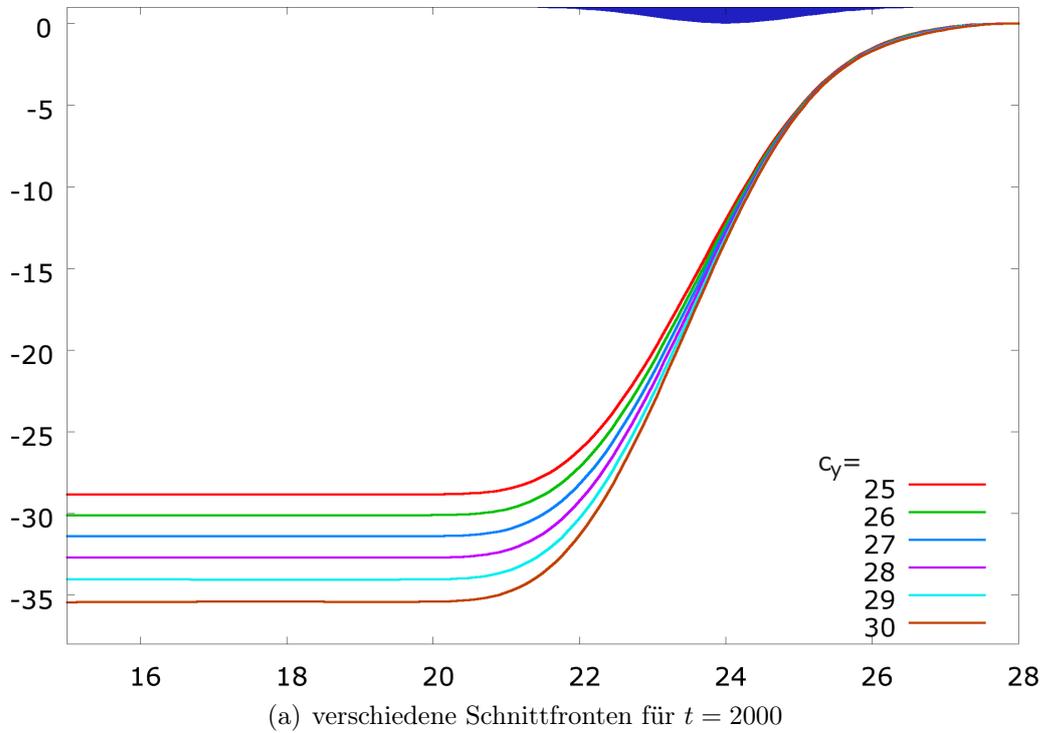
Für eine Wahl von

$$N_x(R_m) = 150, \quad N_t(R_m) = 10 \quad \forall m = 0, \dots, M - 1$$

Diskretisierungspunkten konnten wir mit dem in (5.30) vorgestellten finiten Differenzen-Verfahren innerhalb einer Minute für jedes Subproblem $(SP)_m$ eine optimale konstante Vorschubgeschwindigkeit $u_m^*(\text{const}) \in U_{ad}$ finden. Nach einer gewissen Anzahl an Iterationen stellt man fest, dass die Vorschubgeschwindigkeit gegen einen konstanten Wert u_{c_y} konvergiert, der von der gewünschten Einschnitttiefe c_y abhängt. Ein solches Verhalten war gemäß der Relation (5.22) zu erwarten.

Man sieht in Abbildung 5.12, dass man durch den vorgestellten Ansatz in der Lage ist, für jede realistisch vorgegebene Schnitttiefe eine instantane Kontrolle zu bestimmen, die eine stationäre Front mit dieser Schnitttiefe ansteuert. Ein positiver Nebeneffekt der berechneten instantanen Kontrolle besteht darin, dass sich die gewünschte stationäre Front wesentlich früher einstellt. Während sich die stationäre Front im ungesteuerten Fall in Abbildung 5.9 erst bei ca. $t = 2000$ einstellt, wird sie durch die Steuerung schon bei $t = 700$ erreicht (vgl. Abbildung 5.11). Dies würde im Produktionsprozess eine drastische Reduzierung des Verschnitts bedeuten.

Abbildung 5.12.: Für verschiedene Schnitttiefen berechnete stationäre Fronten mit zugehörigen zusammengesetzten Steuerungen



Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden verschiedene Klassen von optimalen Steuerprozessen unter partiellen Differentialgleichungs-Restriktionen mit linear eingehender Steuerfunktion untersucht. Ein besonderes Augenmerk haben wir dabei auf Steuerungen gelegt, die singuläre Teilstücke besitzen. Wir konnten durch Auswertung der Schaltfunktion für eine große Klasse von semilinearen elliptischen und parabolischen Steuerproblemen eine explizite Darstellung solcher singulärer Steuerungen herleiten, wie man es im Falle optimaler Steuerprozesse unter gewöhnlichen Differentialgleichungs-Restriktionen kennt.

Für die numerische Behandlung dieser Probleme haben wir den optimalen Steuerprozess durch eine geeignete Diskretisierung in ein nichtlineares Optimierungsproblem verwandelt und mit dem Innere-Punkte-Solver IPOPT gelöst. Die Identifizierung der Lagrange-Multiplikatoren des Optimierungsproblems im optimalen Steuerprozess stellte dabei einen wichtigen Punkt bei der Überprüfung der numerischen Ergebnisse mit den kontinuierlichen notwendigen Optimalitätsbedingungen dar. Für alle von uns betrachteten regularisierten Probleme war es mittels direkter Optimierungsmethoden möglich, im Rahmen der numerischen Genauigkeit eine Übereinstimmung der numerisch berechneten optimalen Steuerung mit der aus der Optimalitätsbedingung stammenden Projektionsbedingung aufzuzeigen. Auch bei einer linear eingehenden Steuerfunktion konnten wir in allen akademischen sowie praxisrelevanten Beispielen überprüfen, dass die numerischen Ergebnisse mit den von uns hergeleiteten Schaltbedingungen im bang-singulären Fall übereinstimmen.

Im letzten Teil der Arbeit stand die Ansteuerung stationärer Zustände von nichtlinearen Evolutionsgleichungen im Vordergrund. Wir haben aufgezeigt, warum Optimierungsstrategien zur Berechnung suboptimaler Steuerungen, wie beispielsweise instantane Kontrollalgorithmen, ein nützliches sowie leicht zu implementierendes Werkzeug für diese Art von Problemstellungen ist. Ein aus praktischen Gründen wichtiger Vorteil dieser Verfahren liegt darin, dass man bereits entwickelte Optimierungsalgorithmen weiter benutzen kann. Zudem sind durch die Entkopplung von Zeit- und Ortsdiskretisierung wesentlich höhere Ortsauflösungen möglich, was bei nichtlinearen Prozessen von entscheidender Bedeutung sein kann.

Durch die Trennung der Abhängigkeit von Zeit- zu Ortsdiskretisierung war es uns möglich, die nichtlinearen Effekte der Strukturbildung im Modell des Abrasiv-Wasserstrahlschneidens zu simulieren und durch die Steuerung der Vorschubgeschwindigkeit zu unterdrücken. Durch die Wahl eines geeigneten Trackingfunktional konnten wir zusätzlich die Schnitttiefe der simulierten stationären Fronten deutlich erhöhen. Auch in der Praxis erhoffen wir uns, durch eine dynamische Anpassung der Vorschubgeschwindigkeit bessere Schnittergebnisse erzielen zu können. Die Berechnung einer optimalen Steuerung des Trackingproblems mit direkten Methoden war auf dem kompletten Raum-Zeit-Zylinder mit der uns zur Verfügung stehenden Rechenleistung nicht realisierbar.

Wir haben uns in dieser Arbeit zu einem großen Teil auf elliptische und parabolische Differentialgleichungen als Nebenbedingungen für einen optimalen Steuerprozess beschränkt. Ähnliche explizite Vorschriften für singuläre und bang-singuläre Steuerungen werden sich auch für andere Klassen von Differentialgleichungen herleiten lassen, sobald notwendige Optimalitätsbedingungen zur Verfügung stehen. Es bleibt in jedem Fall die Frage nach hinreichenden Optimalitätsbedingungen offen, so dass die Optimalität einer kritischen bang-singulären Steuerung im Unklaren bleibt.

Numerisch hat sich die direkte Methode mit Zuhilfenahme des Solvers IPOPT als gutes Werkzeug zur Lösung von optimalen Steuerprozessen unter partiellen Differentialgleichungs-Restriktionen gezeigt. Diese Robustheit wird sich auch für andere nichtlineare gewöhnliche und partielle Differentialgleichungs-Nebenbedingungen einstellen, wenn man geeignete Diskretisierungsschemata benutzt. Dabei können sowohl gemischte Steuer- und Zustandsbeschränkungen, als auch zeitoptimale oder Parameter-Identifikationsprobleme behandelt werden. Hat man die Struktur der optimalen Steuerung bestimmt, kann man zudem durch die Einführung von Multiprozessen eine Schaltungsoptimierung von ortsinvarianten bang-bang bzw. bang-singulär Steuerungen durchführen, um noch genauere Lösungen zu erhalten.

Es ist zu erwarten, dass die instantane Kontroll-Methode für viele nichtlineare Evolutionsgleichungen gute Ergebnisse liefern wird, wenn die Zielvorgabe in der Ansteuerung von stationären Zuständen liegt. Damit die suboptimale Steuerung berechnet werden kann, ist darauf zu achten, dass das Trackingfunktional passend definiert wird. Besonders hoffnungsvoll erscheint uns die Ansteuerung von stationären Zuständen bei Dünnschicht-Gleichungen, da ihre Dynamik ebenfalls durch eine nichtlineare Evolutionsgleichung vierter Ordnung gegeben ist, die der verallgemeinerten Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung sehr ähnelt.

A. Tabellen und Abkürzungen

Tabelle A.1 Indexmengen für diskrete elliptische 2D-Probleme

$$\begin{aligned}
 D(\Omega) &:= \{1, \dots, N-1\} \times \{1, \dots, N-1\} \\
 DLR(\Gamma) &:= \{0\} \times \{0, \dots, N\} \\
 DRR(\Gamma) &:= \{N\} \times \{0, \dots, N\} \\
 DUR(\Gamma) &:= \{1, \dots, N-1\} \times \{0\} \\
 DOR(\Gamma) &:= \{1, \dots, N-1\} \times \{N\} \\
 DNLR(\Omega) &:= \{1\} \times \{1, \dots, N-1\} \\
 DNRR(\Omega) &:= \{N-1\} \times \{1, \dots, N-1\} \\
 DNUR(\Omega) &:= \{2, \dots, N-2\} \times \{1\} \\
 DNOR(\Omega) &:= \{2, \dots, N-2\} \times \{N-1\} \\
 D(\Gamma) &:= DLR(\Gamma) \cup DRR(\Gamma) \cup DOR(\Gamma) \cup DUR(\Gamma) \\
 DN(\Omega) &:= DNLR(\Omega) \cup DNRR(\Omega) \cup DNOR(\Omega) \cup DNUR(\Omega) \\
 DIN(\Omega) &:= D(\Omega) \setminus \{DNLR(\Omega) \cup DNRR(\Omega) \cup DNOR(\Omega) \cup DNUR(\Omega)\} \\
 DNLUE(\Omega) &:= \{(1, 1)\} \\
 DNLOE(\Omega) &:= \{(1, N-1)\} \\
 DNRUE(\Omega) &:= \{(N-1, 1)\} \\
 DNROE(\Omega) &:= \{(N-1, N-1)\} \\
 DNLE(\Omega) &:= DNLUE(\Omega) \cup DNLOE(\Omega) \\
 DNRE(\Omega) &:= DNRUE(\Omega) \cup DNROE(\Omega) \\
 DNLKE(\Omega) &:= DNLR(\Omega) \setminus DNLE(\Omega) \\
 DNRKE(\Omega) &:= DNRR(\Omega) \setminus DNRE(\Omega)
 \end{aligned}$$

Tabelle A.2 Indexmengen für diskrete parabolische 1D-Probleme

$$\begin{aligned}
 D(Q) &:= \{1, \dots, N_x - 1\} \times \{1, \dots, N_t - 1\} \\
 D0(Q) &:= \{1, \dots, N_x - 1\} \times \{0, \dots, N_t - 1\} \\
 DAB(0) &:= \{0, \dots, N_x\} \times \{0\} \\
 DEB(T) &:= \{0, \dots, N_x\} \times \{N_t\} \\
 DLR(\Sigma) &:= \{0\} \times \{1, \dots, N_t - 1\} \\
 DRR(\Sigma) &:= \{N_x\} \times \{1, \dots, N_t - 1\} \\
 DNLR0(Q) &:= \{1\} \times \{0, \dots, N_t - 1\} \\
 DNRR0(Q) &:= \{N_x - 1\} \times \{0, \dots, N_t - 1\} \\
 D(\Sigma) &:= DLR(\Sigma) \cup DRR(\Sigma) \\
 DN0(Q) &:= DNLR0(Q) \cup DNRR0(Q) \\
 DIN0(Q) &:= D0(Q) \setminus DN0(Q) \\
 D(\bar{Q}) &:= D(Q) \cup D(\Sigma) \cup DAB(0) \cup DEB(T)
 \end{aligned}$$

Tabelle A.3 Finite Differenzen-Verfahren für die Transportgleichung $y_t - y_x = 0$

$$\begin{aligned}
 (\delta^+ - \delta_0) y_{i,j} &= 0 && \text{(Euler)} \\
 (\delta^- - \delta_0) y_{i,j} &= 0 && \text{(Rückwärts-Euler)} \\
 (\delta^+ - \mu^+ \delta_0) y_{i,j} &= 0 && \text{(Crank-Nicolson)} \\
 (\delta^0 - \delta_0) y_{i,j} &= 0 && \text{(Leap-Frog)} \\
 (\mu_+ \delta^+ - \mu^+ \delta_+) y_{i,j} &= 0 && \text{(BOX)} \\
 \left(\delta^0 - \left(\frac{4}{3} \delta_0(h) - \frac{1}{3} \delta_0(2h) \right) \right) y_{i,j} &= 0 && \text{(Leap-Frog4)} \\
 \left(\frac{1}{h_t} (Z - \mu_0) - \delta_0 \right) y_{i,j} &= 0 && \text{(Lax-Friedrich)} \\
 (\delta^+ - \delta_+) y_{i,j} &= 0 && \text{(Upwind)} \\
 \left(\delta^+ - \delta_0 - \frac{1}{2} h_t \delta_x \right) y_{i,j} &= 0 && \text{(Lax-Wendroff)}
 \end{aligned}$$

B. Beispiel einer AMPL-Datei

An dieser Stelle möchte ich die AMPL-Eingabedatei `Borzi.mod` vorstellen, die dazu genutzt wurde das Problem (3.49) zu lösen. Sie ist an den wichtigen Stellen kommentiert, so dass die Syntax leicht verständlich sein sollte.

```
#Borzi.mod
#####

# Anzahl der Diskretisierungspunkte
param Nx1 := 600;
param Nx2 := 600;

# Definition des Grundgebietes
param xl1 := 0;
param xr1 := 1;
param xl2 := 0;
param xr2 := 1;

# Definition der Schrittweiten (äquidistant)
param hx1 := (xr1-xl1)/Nx1;
param hx2 := (xr2-xl2)/Nx2;

# Definitionen der Indexmengen
set ORT1 := {0..Nx1};
set ORT2 := {0..Nx2};
set GANZ := ORT1 cross ORT2;
set INORT1 := {1..Nx1-1};
set INORT2 := {1..Nx2-1};
set INNEN := INORT1 cross INORT2;

# Festlegung des Regularisierungsparameters
param nu := 0;

# Definition von PI
param pi := 3.1415926535897932;

# Festlegung der Steuerschranken
param uus := -30;
param uos := 30;

# Definition der Wunschfunktion
param z {(i,j) in GANZ} := sin(2*pi*i*hx1)*sin(pi*j*hx2);

# Angabe der Optimierungsvariablen
var y1 {GANZ}; var u1 {GANZ};
```

```

# Approximation der Zielfunktion über die einfache Trapezsumme
minimize ZF : 0.5*hx1*hx2*sum{(i,j) in GANZ}((y1[i,j]-z[i,j])^2 + nu*u1[i,j]^2);

# Diskretisierung der PDGL mittels des Fünfpunkte-Sterns
subject to dgl1 {(i,j) in INNEN} : (y1[i+1,j] + y1[i,j+1] + y1[i-1,j] + y1[i,j-1] - 4*y1[i,j])
    /(hx1*hx2) = -u1[i,j];

# Dirichlet-Randbedingung
subject to rb1 {(i,j) in GANZ : i == 0 or i == Nx1 or j == 0 or j == Nx2}: y1[i,j] = 0;

# Steuerbeschränkung
subject to sb {(i,j) in GANZ}: uos <= u1[i,j] <= uos;

# AMPL Optionen
option abs_boundtol 1;
option solver '/share/numeric/sparc-sun-solaris2/bin/ipopt';
option ipopt_options "imaxiter = 500 iprint=10 dtol=1e-12";

# Befehl zum Lösen
solve;

# Ausgabe ähnlich zu C-Programmen
for {i in ORT1} {
    for {j in ORT2} {
        printf "%1.12g %1.12g %1.12g\n", xl1+hx1*i, xl2+hx2*j, y1[i,j] > 'y1.dat';
        printf "%1.12g %1.12g %1.12g\n", xl1+hx1*i, xl2+hx2*j, u1[i,j] > 'u1.dat';
        printf "%1.12g %1.12g %1.12g\n", xl1+hx1*i, xl2+hx2*j,
            abs(u1[i,j] - 5*pi*pi*sin(2*pi*(xl1+hx1*i))*sin(pi*(xl2+hx2*j)))
                > 'usingverg.dat';
        printf "%1.12g %1.12g %1.12g\n", xl1+hx1*i, xl2+hx2*j, u1[i,j]
            > 'u1einzel.dat';
        printf "%1.12g %1.12g %1.12g\n", xl1+hx1*i, xl2+hx2*j, z[i,j] > 'z.dat';
        printf "%1.12g %1.12g %1.12g\n", xl1+hx1*i, xl2+hx2*j, abs(y1[i,j]-z[i,j])
            > 'yvergleich.dat';
        if i > 0 and i < Nx1 and j > 0 and j < Nx2 then {
            printf "%1.12g %1.12g %1.12g\n", xl1+hx1*i, xl2+hx2*j,
                dgl1[i,j] > 'p1.dat';
        }
    }
}
printf "\n" > 'y1.dat'; printf "\n" > 'z.dat'; printf "\n" > 'u1.dat';
printf "\n" > 'usingverg.dat'; printf "\n" > 'yvergleich.dat';
printf "\n\n" > 'u1einzel.dat';
if i > 0 and i < Nx1 then {
    printf "\n" > 'p1.dat';
}
}

```

Abbildungsverzeichnis

3.1. Vergleiche des berechneten Zustands mit dem Wunschzustand (a) sowie der berechneten Steuerung mit der Projektionsbedingung (b) für (3.49) mit $\lambda = 10^{-5}$	37
3.2. Numerische Lösung von (3.49) mit $\lambda = 10^{-5}$	39
3.3. Vergleiche des berechneten Zustands mit dem Wunschzustand (a) sowie der berechneten Steuerung mit der Projektionsbedingung (b) für (3.49) mit $\lambda = 0$	40
3.4. Numerische Lösung von (3.49) mit $\lambda = 0$	41
3.5. Numerische Lösung von (3.51)	42
3.6. Vergleiche von Zustand (a) und Steuerung (b) von (3.54) mit $\lambda = 10^{-6}$	44
3.7. Numerische Lösung von (3.54) mit $\lambda = 10^{-6}$	45
3.8. Numerische Lösung von (3.54) mit $\lambda = 0$	46
3.9. Vergleiche von Zustand (a) und Steuerung (b) von (3.58) mit $\lambda = 10^{-6}$	48
3.10. Numerische Lösung von (3.58) mit $\lambda = 10^{-6}$	49
3.11. Numerische Lösung von (3.58) mit $\lambda = 0$	50
3.12. Vergleiche der numerisch berechneten Zuständen von (3.61) zu ihren exakten Werten (3.64) und (3.63)	51
3.13. Numerische Lösung von (3.61)	52
3.14. Steuerung und Vorzeichen des adjungierten Zustandes für (3.65) mit verschiedenen Steuerschranken $-s_{\min} = s_{\max} = c$	54
3.15. Numerische Lösung von (3.65) mit $-s_{\min} = s_{\max} = 5000$	55
3.16. Numerische Lösung von (3.86) mit $\lambda = 10^{-5}$	60
3.17. Numerische Lösung von (3.86) mit $\lambda = 0$	61
4.1. Numerische Lösung von (4.21) mit $\lambda = 10^{-6}$ und $c = 0.1$	76
4.2. Numerische Lösung von (4.21) mit $\lambda = 0$ und $c = 0.1$	77
4.3. Numerische Lösung von (4.24) mit $\lambda = 10^{-6}$ und $c = 0.1$	79
4.4. Numerische Lösung von (4.24) mit $\lambda = 0$ und $c = 0.1$	80
4.5. Lösung von (4.21) mit Zielfunktional (4.26) und $\lambda = 0$	81
4.6. Ausbildung von selbstorganisierten Strukturen in Form von drei Solitonen im Gasentladungssystem (4.35) nach einer kleinen Störung des Aktivators mit den Daten aus (4.36)	85
4.7. Ausbildung von selbstorganisierten Strukturen in Form von drei Solitonen im Gasentladungssystem (4.37) unter einem Rauschen von $z = 0.1\%$ mit den Daten aus (4.36)	86
4.8. Zerstörung zweier Solitonen durch Kollision für $\tau = 10$	87
4.9. Numerische Lösung von (4.39) mit $\xi = 0$	89
4.10. Numerische Lösung von (4.39) mit $\xi = 1$	90

4.11. Vergleiche von Zustand (a) und Steuerung (b) für (4.39)	92
4.12. Verschiedene Lösungen der Aktivatorgleichung aus (4.45) für $D = 7$ unter dem Parametersatz (4.46)	94
4.13. Numerische Lösung von (4.48) mit $\xi = 0$	96
4.14. Numerische Lösung von (4.51)	100
5.1. Numerische Lösung für (5.6) (a) und (5.8) (b) und Vergleich der zugehörigen Steuerungen (c)	106
5.2. Lösung für (5.9) (a) und ein Vergleich der Steuerung von (5.9), mit (5.7) und (5.10) (b)	107
5.3. Die auf Q zusammengesetzten Lösungen von (5.11)	109
5.4. Die auf Q zusammengesetzte Lösung von (5.12)	110
5.5. Die auf Q zusammengesetzte Lösung von (5.12) mit einer Einschränkung der Steuerfunktion durch (5.13)	112
5.6. Aufbau eines Abrasiv-Wasserstrahlschneiders	113
5.7. Seitliches Schnittprofil beim Abrasiv-Wasserstrahlschneiden	113
5.8. seitliche Schnittprofile $y(x, 0)$ und $y(x, 10)$	116
5.9. glatte Schnittfront bei einer Vorschubgeschwindigkeit von $u \equiv -0.101$	116
5.10. Riefenbildung bei einer Vorschubgeschwindigkeit von $u \equiv -0.065$	117
5.11. Zusammengesetzte Lösung von (5.32) mit $c_y = 25$	121
5.12. Für verschiedene Schnitttiefen berechnete stationäre Fronten mit zugehörigen zusammengesetzten Steuerungen	122

Literaturverzeichnis

- [1] A. A. Agrachev, G. Stefani, and P. Zezza, *Strong optimality for a bang-bang trajectory*, SIAM J. Control Optim. **41** (2002), no. 4, 991–1014.
- [2] H. Y. Benson, D. F. Shanno, and R. J. Vanderbei, *Interior-point methods for non-convex nonlinear programming: jamming and numerical testing*, Math. Program. **99** (2004), no. 1, Ser. A, 35–48.
- [3] M. Bergounioux and F. Tröltzsch, *Optimality conditions and generalized bang-bang principle for a state-constrained semilinear parabolic problem*, Numer. Funct. Anal. Optim. **17** (1996), no. 5-6, 517–536.
- [4] ———, *Optimal control of semilinear parabolic equations with state-constraints of bottleneck type*, ESAIM Control Optim. Calc. Var. **4** (1999), 595–608 (electronic).
- [5] L. T. Biegler and A. Wächter, *SQP SAND strategies that link to existing modeling systems*, Large-scale PDE-constrained optimization (Santa Fe, NM, 2001), Lect. Notes Comput. Sci. Eng. **30** (2003), 199–217.
- [6] M. Bode, A. W. Liehr, C. P. Schenk, and H.-G. Purwins, *Interaction of dissipative solitons: particle-like behaviour of localized structures in a three-component reaction-diffusion system*, Phys. D **161** (2002), no. 1-2, 45–66.
- [7] J. F. Bonnans and A. Shapiro, *Perturbation Analysis of Optimization Problems*, Springer-Verlag, New York (2001).
- [8] A. Borzi and K. Kunisch, *A multigrid scheme for elliptic constrained optimal control problems*, Comput. Optim. Appl. **31** (2005), no. 3, 309–333.
- [9] U. Brandt-Pollmann, D. Lebiedz, M. Diehl, S. Sager, and J. Schlöder, *Real-time nonlinear feedback control of pattern formation in (bio)chemical reaction-diffusion processes: a model study*, Chaos **15** (2005), no. 3, 033901, 1–13.
- [10] E. F. Camacho and C. Bordons, *Model predictive control*, Springer-Verlag (1999).
- [11] E. Casas, F. Tröltzsch, and A. Unger, *Second order sufficient optimality conditions for some state-constrained control problems of semilinear elliptic equations*, SIAM J. Control Optim. **38** (2000), no. 5, 1369–1391 (electronic).
- [12] H. Choi, R. Temam, P. Moin, and J. Kim, *Feedback control for unsteady flow and its application to the stochastic Burgers equation*, J. Fluid Mech. **253** (1993), 509–543.

- [13] A. T. Cousin and N. A. Larkin, *Initial boundary value problem for the Kuramoto-Sivashinsky equation*, VI Workshop on Partial Differential Equations, Part I (Rio de Janeiro, 1999), *Mat. Contemp.* **18** (2000), 97–109.
- [14] D. den Hertog, *Interior point approach to linear, quadratic and convex programming*, Kluwer (1994).
- [15] A. V. Dmitruk, *Second order optimality conditions for singular extremals*, Computational optimal control (München, 1992), Birkhäuser, Internat. Ser. Numer. Math. **115** (1994), 71–81.
- [16] ———, *Quadratic order conditions of a local minimum for singular extremals in a general optimal control problem*, Differential geometry and control (Boulder, CO, 1997), Amer. Math. Soc., Proc. Sympos. Pure Math. **64** (1999), 163–198.
- [17] E. Emmerich, *Gewöhnliche und Operator-Differentialgleichungen*, Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden (2004).
- [18] K. Eppler and F. Tröltzsch, *On switching points of optimal controls for coercive parabolic boundary control problems*, *Optimization* **17** (1986), no. 1, 93–101.
- [19] A. V. Fiacco and G. P. McCormick, *Nonlinear Programming*, John Wiley, New York (1968).
- [20] R. Fourer, D. M. Gay, and B. W. Kernighan, *The AMPL Book*, Duxbury Press (2002).
- [21] R. Friedrich, G. Radons, T. Ditzinger, and A. Henning, *Ripple Formation through Interface Instability from Moving Growth and Erosion Sources*, *Physical Review Letters* **85** (2000), no. 23, 4884–4887.
- [22] K. Glashoff and E. Sachs, *On theoretical and numerical aspects of the bang-bang-principle*, *Numer. Math.* **29** (1977/78), no. 1, 93–113.
- [23] K. Glashoff and N. Weck, *Boundary control of parabolic differential equations in arbitrary dimensions: supremum-norm problems*, *SIAM J. Control Optimization* **14** (1976), no. 4, 662–681.
- [24] R. Gollmer, *Optimierungsverfahren und ihre Umsetzung in Software I - Lineare Modelle*, Skript, <http://www.uni-duisburg.de/FB11/disma/gollmer/>.
- [25] R. Griesse, *Parametric sensitivity analysis in optimal control of a reaction-diffusion system. I. Solution differentiability*, *Numer. Funct. Anal. Optim.* **25** (2004), no. 1-2, 93–117.
- [26] ———, *Parametric sensitivity analysis in optimal control of a reaction-diffusion system. II. Practical methods and examples*, *Optim. Methods Softw.* **19** (2004), no. 2, 217–242.
- [27] C. Großmann and H. G. Roos, *Numerik partieller Differentialgleichungen*, Teubner-Studienbücher: Mathematik, Stuttgart (1992).

-
- [28] W. A. Gruver and E. Sachs, *Algorithmic methods in optimal control*, Pitman (Advanced Publishing Program), Research Notes in Mathematics **47** (1981).
- [29] E. Hille and R. S. Phillips, *Functional Analysis and Semigroups*, American Mathematical Society, AMS Colloquium Publications **XXXI** (1957).
- [30] M. Hintermüller and M. Ulbrich, *A mesh-independence result for semismooth Newton methods*, Mathematical Programming **101** (2004), no. 1, Ser. B, 151–184.
- [31] M. Hinze, *Optimal and instantaneous control of the instationary Navier-Stokes equations*, Habilitationsschrift, Fachbereich Mathematik, Technische Universität Berlin (1999).
- [32] M. Hinze and K. Kunisch, *Second order methods for boundary control of the instationary Navier-Stokes system*, ZAMM Z. Angew. Math. Mech. **84** (2004), no. 3, 171–187.
- [33] M. Hinze and T. Slawig, *Adjoint gradients compared to gradients from algorithmic differentiation in instantaneous control of the Navier-Stokes equations*, Optim. Methods Softw. **18** (2003), no. 3, 299–315.
- [34] M. Hinze and S. Volkwein, *Analysis of instantaneous control for the Burgers equation*, Nonlinear Anal. **50** (2002), no. 1, Ser. A: Theory Methods, 1–26.
- [35] K. Ito and K. Kunisch, *Augmented Lagrangian-SQP methods for nonlinear optimal control problems of tracking type*, SIAM J. Control and Optimization **34** (1996), no. 3, 874–891.
- [36] ———, *Receding horizon optimal control for infinite dimensional systems*, ESAIM Control Optim. Calc. Var. **8** (2002), 741–760.
- [37] B. Jansen, *Interior point techniques in optimization*, Kluwer (1997).
- [38] A. Karafiat, *The problem of the number of switches in parabolic equations with control*, Ann. Polon. Math. **34** (1977), no. 3, 289–316.
- [39] A. S. Kauffman, R. Shymko, and K. Trabert, *Control of sequential compartment in Drosophila*, Science **199** (1978), 259–270.
- [40] G. Knowles, *Über das bang-bang-Prinzip bei Kontrollproblemen aus der Wärmeleitung*, Arch. Math., Basel **29** (1977), no. 3, 300–307.
- [41] C. Laird and A. Wächter, *Introduction to IPOPT: A tutorial for downloading, installing and using IPOPT*,
<http://projects.coin-or.org/Ipopt/browser/trunk/Docs/documentation.pdf>.
- [42] D. Lebedz and U. Brandt-Pollmann, *Manipulation of self aggregation patterns and waves in a reaction-diffusion-system by optimal boundary control strategies*, Phys. Rev. Lett. **91** (2003), no. 20, 208301, 1–4.

- [43] J. L. Lions, *Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations*, Springer-Verlag Berlin (1971).
- [44] D. G. Luenberger, *Introduction to Linear and Nonlinear Programming*, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, Massachusetts (1973).
- [45] U. Mackenroth, *On parabolic distributed optimal control problems with restrictions on the gradient*, Appl. Math. Optim. **10** (1983), no. 1, 69–95.
- [46] P. K. Maini, *Some mathematical models for biological pattern formation*, On Growth and Form. Spatio-Temporal Pattern Formation in Biology, John Wiley, New York (1999), 111–128.
- [47] P. K. Maini and Murray J. D., *A nonlinear analysis of a mechanical model for biological pattern formation*, SIAM J. Appl. Math. **48** (1988), 1064–1072.
- [48] H. Maurer, *Optimierung*, Skript, Universität Münster (1998).
- [49] H. Maurer and H. D. Mittelman, *Optimization techniques for solving elliptic control problems with control and state constraints. I. Boundary control*, Comput. Optim. Appl. **16** (2000), no. 1, 29–55.
- [50] ———, *Optimization techniques for solving elliptic control problems with control and state constraints. II. Distributed control*, Comput. Optim. Appl. **18** (2001), no. 2, 141–160.
- [51] A. A. Milyutin, *Calculus of variations and optimal control*, Calculus of variations and optimal control (Haifa, 1998), Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, Res. Notes Math. **411** (2000), 159–172.
- [52] H. D. Mittelman and H. Maurer, *Solving elliptic control problems with interior point and SQP methods: control and state constraints*, J. Comput. Appl. Math. **120** (2000), no. 1-2, 175–195, SQP-based direct discretization methods for practical optimal control problems. MR MR1781714
- [53] H. D. Mittelman and F. Tröltzsch, *Sufficient optimality in a parabolic control problem*, Trends in industrial and applied mathematics (Amritsar, 2001), Appl. Optim., vol. 72, Kluwer Acad. Publ., 2002, pp. 305–316.
- [54] H. Mori and Y. Kuramoto, *Dissipative Structures and Chaos*, Springer (1998).
- [55] J. D. Murray, *Mathematical Biology - Part I - An Introduction, 3rd Edition*, Springer (2003).
- [56] ———, *Mathematical Biology - Part II - Spatial Models and Biomedical Applications, 3rd Edition*, Springer (2003).
- [57] J. Nečas, *Les méthodes directes en théorie des équations elliptiques*, Academia, Prague (1967).

-
- [58] N.P. Osmolovskii and H. Maurer, *Equivalence of second order optimality conditions for bang-bang control problems, part 1*, Control and Cybernetics **34** (2005), no. 3, 927–950.
- [59] H.-G. Purwins, H. U. Bödeker, and A. W. Liehr, *Dissipative solitons in reaction-diffusion systems*, Dissipative solitons, Springer Berlin, Lecture Notes in Phys. **661** (2005), 267–308.
- [60] G. Radons, *Nonlinear dynamics of production systems*, Wiley-VCH (2004).
- [61] J. P. Raymond and F. Tröltzsch, *Second order sufficient optimality conditions for nonlinear parabolic control problems with state constraints*, Discrete Contin. Dynam. Systems **6** (2000), no. 2, 431–450.
- [62] E. J. P. G. Schmidt, *The “bang-bang” principle for the time-optimal problem in boundary control of the heat equation*, SIAM J. Control Optim. **18** (1980), no. 2, 101–107.
- [63] J. C. Strikwerda, *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*, Chapman and Hall (1989).
- [64] E. Tadmor, *The well-posedness of the Kuramoto-Sivashinsky equation*, SIAM J. Math. Anal. **17** (1986), no. 4, 884–893.
- [65] A. L. Tits, A. Wächter, S. Bakhtiari, T. J. Urban, and C. T. Lawrence, *A primal-dual interior-point method for nonlinear programming with strong global and local convergence properties*, SIAM J. Optim. **14** (2003), no. 1, 173–199.
- [66] L. N. Trefethen, *Finite difference and spectral methods for ordinary and partial differential equations*, unpublished text, freely available at <http://web.comlab.ox.ac.uk/oucl/work/nick.trefethen/pdetext.html>.
- [67] F. Tröltzsch, *The generalized bang-bang-principle and the numerical solution of a parabolic boundary-control problem with constraints on the control and the state*, Z. Angew. Math. Mech. **64** (1984), no. 12, 551–556.
- [68] ———, *Optimality conditions for parabolic control problems and applications*, BSB B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, Teubner-Texte zur Mathematik [Teubner Texts in Mathematics] **62** (1984).
- [69] ———, *Optimale Steuerung partieller Differentialgleichungen*, Vieweg Verlag (2005).
- [70] F. Tröltzsch and D. Wachsmuth, *On convergence of a receding horizon method for parabolic boundary control*, Optim. Methods Softw. **19** (2004), no. 2, 201–216.
- [71] A. M. Turing, *The chemical basis for morphogenesis*, Phil. Trans. R. Soc. Lond. B. **237** (1952), 37–72.
- [72] R. J. Vanderbei, *LOQO: an interior point code for quadratic programming*, Optim. Methods Softw. **11/12** (1999), no. 1-4, 451–484.

- [73] ———, *LOQO user's manual—version 3.10*, Optim. Methods Softw. **11/12** (1999), no. 1-4, 485–514.
- [74] G. Vossen, *Numerische Lösungsmethoden, hinreichende Optimalitätsbedingungen und Sensitivitätsanalyse für optimale bang-bang und singuläre Steuerungen*, Dissertation, Münster (2005).
- [75] D. Wachsmuth, *On instantaneous control for a nonlinear parabolic boundary control problem*, Numer. Funct. Anal. Optim. **25** (2004), no. 1-2, 151–181.
- [76] J. Werner, *Optimization theory and applications*, Friedr. Vieweg & Sohn, Advanced Lectures in Mathematics, Braunschweig (1984).
- [77] J. Wloka, *Partielle Differentialgleichungen*, Teubner-Verlag Leipzig (1982).
- [78] S. J. Wright, *Primal-dual interior-point methods*, SIAM (1997).
- [79] J. Zowe and S. Kurcyusz, *Regularity and stability for the mathematical programming problem in Banach spaces*, Appl. Math. Optim. **5** (1979), no. 1, 49–62.

Karsten Theißen

Lebenslauf

Einsteinstr. 62
48149 Münster

☎ +49 251 83-33794

✉ karsten.theissen@googlemail.com

Persönliche Informationen

geboren am 13. September 1975 in Paderborn
Familienstand ledig
Vater Bernhard Theißen, geboren am 01. April 1949 in Ahlen
Mutter Ilse Theißen, geb. Kohl, geboren am 19. Dezember 1952 in Ahlen
Bruder Sven Theißen, geboren am 03. März 1978 in Paderborn

Schulbildung

1982–1986 Paul-Gerhardt Grundschule Ahlen
1986–1995 Städtisches Gymnasium Ahlen mit Abschluss Abitur am 09. Juni 1995

Militärdienst

Oktober 1995 Beginn des Grundwehrdienstes in Rheine

Studium

Oktober 1996 Beginn des Studiums im Fach Mathematik mit Nebenfach Informatik an der WWU Münster mit Abschluss Diplom am 13. März 2002

Dissertation

April 2002 Beginn der Dissertation im Fach Mathematik am Institut für Numerische und Angewandte Mathematik der WWU Münster bei Prof. Dr. H. Maurer

Tätigkeiten

Oktober 1998 Studentische Hilfskraft im Fach Mathematik an der WWU Münster
– März 2002
April 1998 Gewählter Vertreter der Fachschaft Mathematik und Informatik an der
– März 2002 WWU Münster
April 2002 Stipendiat des physikalischen Graduiertenkollegs "Nichtlineare kontinuierliche Systeme und deren Untersuchung mit numerischen, qualitativen und experimentellen Methoden" der DFG
– März 2005
April 2002 Wissenschaftliche Hilfskraft im Fach Mathematik an der WWU Münster
– März 2005
April 2005 Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der WWU Münster mit Teilnahme am DFG-Projekt "Theorie, Numerik und Sensitivitätsanalyse für optimale Steuerprozesse mit linear eingehender Steuerung"