

Methoden der Parameterbestimmung in
gewöhnlichen Differentialgleichungen -
Ausgleichsprobleme als Aufgaben
der optimalen Steuerung

I n a u g u r a l d i s s e r t a t i o n

zur

Erlangung des akademischen Grades

doctor rerum naturalium (Dr. rer. nat.)

an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Ernst-Moritz-Arndt-Universität Greifswald

vorgelegt von

Kristine Al Zoukra

(geb. Schreiber)

geboren am 08.07.1981

in Schwedt/O.

Greifswald, den 29.10.2010

Dekan: Prof. Dr. Klaus Fesser

1. Gutachter: Prof. Dr. W. H. Schmidt

2. Gutachter: Prof Dr. C. Tammer

Tag der Promotion: 03.02.2011

Inhaltsverzeichnis

0.1	Bezeichnungen	iv
0.2	Mathematisch sprachliche Abkürzungen	iv
1	Einleitung	1
2	Die Aufgabenstellung	7
2.1	Problem (A). Ein akademisches Beispiel	9
2.2	Problem (B). Das Wachstum einer Hefe	10
2.3	Problem (C). Ein Problem aus der Optik	13
2.4	Problem (D). Das enzymkinetische Problem	14
3	Mathematische Grundlagen	17
3.1	Anforderungen an die Differentialgleichung	17
3.2	Parameterabhängige gewöhnliche Differentialgleichungen	18
3.2.1	Stetigkeit	18
3.2.2	Differenzierbarkeit	19
3.3	Differentielle a-priori Sensitivitätsanalyse	20
3.3.1	Analyse der Differentialgleichung	21
3.3.2	Die Zielfunktion	23
3.4	Steife Differentialgleichungen	24
3.4.1	Integratoren	28
4	Parameterbestimmung mit LGS und LOP	29
4.1	Aufgaben mit Euklidischer Norm	29
4.2	Tschebyschev- und Betragssummennorm mittels Optimierung	33
4.3	Zur Wahl des Parameterstartwertes	34
4.3.1	Suche in Gitterstrukturen	35
4.3.2	Ausdünnen	35
4.4	Ergebnisse	38
4.4.1	Ergebnisse Iterative Lineare Ausgleichsprobleme	38
4.4.2	Tschebyschev mit SLP	42
4.4.3	Bestimmung der Startparameter mittels Ausdünnen	42
5	Modellalgorithmus für richtungsdifferenzierbare Funktionen	47
5.1	Optimalitätsbedingungen erster Ordnung	48
5.2	Modellalgorithmus	52
5.3	Aufgaben mit Positivitätsbedingungen	53
5.4	Numerische Ergebnisse	56

6	Das Problem der optimalen Steuerung	61
6.1	Die Aufgabe der optimalen Steuerung	61
6.2	Stückweise konstante Steuerfunktionen	63
6.3	Optimale Steuerung mit einfachem Mayer-Funktional	63
6.4	Das verallgemeinerte Mayer-Funktional und konstante Steuerungen	65
7	Direkte Methoden zur Lösung von Optimalsteuerproblemen	69
7.1	Direkte Schießverfahren	69
7.1.1	Das Programmpaket OC-ODE	70
7.1.2	Ergebnisse mit OC-ODE	71
7.1.3	Das Programmpaket OCPID-DAE	75
7.1.4	Ergebnisse mit OCPID-DAE	75
7.2	Direkte Kollokation	76
7.2.1	Das Programmpaket DIRCOL	77
7.2.2	Ergebnisse mit DIRCOL	78
8	Parameterbestimmung mittels optimaler Steuerung	87
8.1	Verifikation von optimalen Steuerparametern	87
8.1.1	Numerische Ergebnisse	88
8.2	Parameterbestimmung mit notwendigen Bedingungen	89
8.2.1	Abstiegsverfahren für Integralwerte	90
8.2.2	Maximierung der Hamilton-Funktion	90
8.3	Stückweise konstante Steuerungen	91
8.3.1	Ergebnisse mit stückweise konstanten Parameterfunktionen	91
9	Zusammenfassung und Ausblick	95
	Tabellenverzeichnis	98
	Abbildungsverzeichnis	100
	Literaturverzeichnis	101
	Eidesstattliche Erklärung	107
	Tabellarischer Lebenslauf	109
	Danksagung	111
A	Ergebnistabellen und Abbildungen	113
A.1	Sensitivität	113
A.2	Lineare Ausgleichsprobleme	115
A.3	SLP für Tschebyschev- und Betragssummennorm	116
A.4	Direkte Kollokation	117
B	Besonderheiten der Implementierung in DIRCOL	119

C Programm-Dokumentation	123
C.1 Lineare Gleichungssysteme	123
C.2 Startparameterbestimmung	129
C.2.1 Algorithmus zur Ausdünnung	129
C.2.2 Lösung NLGS	130
C.3 Modellalgorithmus	132
D Transformierte Aufgabenstellungen	137
D.1 Problem (B)	137
D.2 Problem (C)	138

0.1 Bezeichnungen

n	Dimension des Zustandsraumes
\tilde{n}	Anzahl der Messungen zu Zuständen
\bar{n}	Anzahl der Anfangswerte zu Zuständen
M	Anzahl der Messwerte
K	Dimension des Parameterraumes
(t_1, \dots, t_M)	Vektor der Zeitpunkte
$m = (m_1, \dots, m_M)$	Vektor der Messwerte $m_i \in \mathbb{R}^{\tilde{n}}$ zu Zeitpunkten t_i
$P \in \mathbb{R}^K$	Parametervektor
$x(t_i) = (x_1(t_i), \dots, x_n(t_i))$	Vektor der Zustände des Systems zum Zeitpunkt t_i
$x(t)$	vektorielle Funktion der Zustandsvariablen
$f(P)$	Zielfunktion
$\mathfrak{h}(t, x), \hat{h}(t, x, P), h(x, P)$	rechte Seiten der Differentialgleichung
$J[x, u]$	Zielfunktional der optimalen Steuerung
u	K - dimensionale Steuerfunktion
$H(\psi, x, u)$	Hamilton-Funktion
$\bar{B}(x, r) \in \mathbb{R}^n$	abgeschlossene Kugel mit Radius r um den Mittelpunkt x
$I = [t_0, t_M]$	Intervall von t_0 bis t_M in \mathbb{R}
$SK(I, \mathbb{R}^K)$	Menge der stückweise konstanten Abbildungen vom Intervall I in den \mathbb{R}^K
$f : \mathbb{R}^K \longrightarrow \mathbb{R}$	
$x : [t_0, t_M] \longrightarrow \mathbb{R}^n$	
$\mathfrak{h} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$	
$\hat{h} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \longrightarrow \mathbb{R}^n$	
$h : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \longrightarrow \mathbb{R}^n$	
$u : [t_0, t_M] \longrightarrow \mathbb{R}^K$	
$J : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \longrightarrow \mathbb{R}$	
$H : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \longrightarrow \mathbb{R}$	

0.2 Mathematisch sprachliche Abkürzungen

ODE	gewöhnliche Differentialgleichung (aus dem Englischen ordinary differential equation)
AW/AWP	Anfangswert/Anfangswertproblem
u. d. N.	unter der Nebenbedingung
ZF	Zielfunktion/Zielfunktional
LGS	Lineares Gleichungssystem
LOP	Lineares Optimierungsproblem
NLOP	Nichtlineares Optimierungsproblem
SLP	Sequentielle lineare Optimierung (aus dem Englischen sequential linear programming)
It.	Iterationen
Gl.	Gleichung
AOS	Aufgabe der optimalen Steuerung
KKT	Karush-Kuhn-Tucker
o. B. d. A.	ohne Beschränkung der Allgemeinheit

Kapitel 1

Einleitung

Parameter sind zur Beschreibung veränderlicher Systeme sehr wichtig. In der Medizin spiegeln die Vitalparameter, wie beispielsweise Körpertemperatur, Atemfrequenz oder auch EKG¹-Werte, die Grundfunktionen eines Patienten wider und sind Grundlage wichtiger Entscheidungen beziehungsweise Diagnosen und daraus resultierenden Therapien.

In der Musik entscheiden die Parameter Frequenzen über die Klangfarbe eines Tonsatzes. Die Tondauern und Lautstärken tragen nicht unerheblich zum Empfinden von Musik bei.

In täglichen Untersuchungen des Wassers aus Aufbereitungsanlagen entscheiden mikrobiologische Parameterwerte, wie die Anzahl der Krankheitserreger Escherichia Coli oder Enterokokken auf 100 ml darüber, ob ein Wasser als Trinkwasser freigegeben wird oder nicht.

In der Mathematik spielen Parameter in Aufgabenstellungen eine Rolle, in denen es darum geht, ihren Wert aus einer Modellgleichung und einer Reihe von Messwerten zu bestimmen. Nicht alle Parameter sind von vornherein bekannt oder aus Voruntersuchungen gegeben, beziehungsweise mit wenig Aufwand durch Messgeräte zu erfassen. Einige Parameter erfordern eine aufwendigere Bestimmung aus vorgenommenen Untersuchungen und erhobenen Messdaten. Diese Aufgabe steht im Fokus dieser Arbeit und wird im Folgenden konkretisiert. Zunächst soll jedoch formal definiert werden, was unter einem Parameter zu verstehen ist.

Definition 1.1. *Wir definieren:*

- *Eine Konstante c ist ein in jedem Fall fester Wert, der sich nicht ändert, wohingegen*
- *ein Parameter P einen beliebigen, aber für einen betrachteten Fall festen Wert besitzt, der im nächsten Fall aber einen anderen Wert haben kann.*
- *Im Gegensatz dazu ist eine Variable $v(t)$ jederzeit variierbar, auch innerhalb eines betrachteten Falles.*

Die Arbeit befasst sich mit diesem in der Mathematik allgegenwärtig auftretenden Problem der Parameterbestimmung aus Messdaten. Gegeben ist eine

¹Elektrokardiogramm

Anzahl M von Messpunkten (t_i, m_i) mit $i = 1, \dots, M$ und ein mathematisches Modell, das den Zusammenhang zwischen der Zeit t und der gemessenen Größe $x(t)$ beschreibt. Unbekannt und daher aus den Messdaten zu bestimmen, sind die K Parameter P_j , $j = 1, \dots, K$, wobei in dieser Arbeit ausschließlich der Fall untersucht wird, dass die Anzahl K der zu bestimmenden Parameter kleiner ist als die Anzahl M der Messwerte. Des Weiteren wird hier die zusätzliche Schwierigkeit betrachtet, dass die Zustandsfunktion $x(t)$ nicht in analytischer Form gegeben ist. Sie liegt als eine die zu untersuchende Größe beschreibende gewöhnliche Differentialgleichung (ODE) $\dot{x}(t) = h(x(t), P)$ vor. Zum eigentlichen Problem der Parameterbestimmung aus Messdaten kommt also die adäquate Lösung der gegebenen ODE hinzu. An manchen Stellen wird in der Arbeit die Schreibweise $x(t, P)$ äquivalent zu $x(t)$ verwendet, wenn die Abhängigkeit der Zustandsfunktion vom Parameter betont werden soll und wenn es dem Verständnis dient. Nicht zuletzt soll die Determinierung des besten Parametervektors definiert werden. Der optimale Parametervektor sei der Vektor, der die Abweichungen der Lösungen der Zustandsdifferentialgleichungen zu den Messwerten bezüglich einer gegebenen Form minimiert, wobei dieser optimale Parametervektor nicht eindeutig sein muss.

Zusammenfassend stellt sich die Aufgabe wie folgt dar:

Aufgabe (0). *Gegeben seien*

- M Messwerte m_i zu Zeiten t_i , $i = 1, \dots, M$ mit $0 \leq t_0 < t_1 < \dots < t_M$,
- und eine Zustandsdifferentialgleichung mit $h : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^n$,

$$\dot{x}(t) = h(x(t), P), \quad (1.1)$$

die das Verhalten der zu untersuchenden Größe $x(t)$ beschreibt, eventuell mit gegebenem Anfangswert $x(t_0) = x_0$.

Die Aufgabe lautet: Bestimme einen Parametervektor $P^* = (P_1^*, \dots, P_K^*)$ aus dem Zulässigkeitsbereich D_P , der die Zielfunktion $f(P)$ mit

$$f(P) := \|(x(t_i, P) - m_i)_{i=1, \dots, M}\|_{\mathbb{R}^{n \times M}} \quad (1.2)$$

minimiert. Soweit nichts anderes angegeben ist, sei $D_P = \mathbb{R}^K$.

Die Arbeit gliedert sich wie folgt: In Kapitel 2 werden die Problemstellungen erläutert, die im Laufe der Arbeit immer wieder zu Anwendungszwecken und zum Vergleich der Lösungsmethoden herangezogen werden. Zunächst wird ein akademisches, also künstlich erzeugtes Problem betrachtet, dessen exakte Lösung bekannt ist und mit den erzeugten optimalen Lösungen verglichen werden kann, um deren Güte zu beurteilen.

Problem (A). *Eine in der Zustandsfunktion und im Parameter lineare Differentialgleichung mit gegebenem Anfangswert, vgl. Abschn. 2.1.*

Des Weiteren wird ein aus [EK05] übernommenes biologisches Problem, das Wachstumsverhalten der Hefe *Schizosaccharomyces kephir*, untersucht, genauer:

Problem (B). *Eine in der Zustandsfunktion und den Parametern nichtlineare Differentialgleichung ohne gegebenen Anfangswert, vgl. Abschn. 2.2*

Im Fokus steht außerdem ein Problem aus der physikalischen Optik [ReSc]:

Problem (C). *Ein in den Zuständen lineares und in den Parametern nichtlineares Differentialgleichungssystem mit Anfangswerten in Abhängigkeit von den Parametern, vgl. Abschn. 2.3.*

Abschließend komme ich auf das in [Schr06] untersuchte Problem der enzymkinetischen Gleichung zurück, die Bestimmung der Ratenkonstanten in der durch Alkoholdehydrogenase katalysierten Umwandlung von Alkohol:

Problem (D). *Ein in den Zuständen nichtlineares und in den drei Parametern lineares Differentialgleichungssystem mit gegebenen Anfangswerten, vgl. Abschn. 2.4.*

Bei dieser Problemstellung trat eine Eigenschaft der ODE als besondere Schwierigkeit hervor, die als Steifheit bezeichnet wird. Anforderungen an die Differentialgleichung, die die Lösbarkeit und Eindeutigkeit der Lösung gewährleisten, sowie einige Bemerkungen zu Lösungsmethoden und der Besonderheit der Steifheit von Differentialgleichungen werden in Kapitel 3 aufgegriffen.

An dieser Stelle kehren wir gedanklich zur Entstehung der Optimierungsaufgabe zurück. Die ursprüngliche Zielsetzung ist die Bestimmung der Parameter P , so dass

$$x(t_i, P) - m_i = 0, \quad \forall i = 1, \dots, M, \quad (1.3)$$

gilt. Die Aufgabe ist also die Lösung eines Gleichungssystems. Am Anfang dieses Kapitels wurde bereits auf die unterschiedliche Handhabung der Probleme bezüglich der Größenverhältnisse von K und M hingewiesen. Die Lösbarkeit des Gleichungssystems leitet sich aus der Anzahl M der gegebenen Messdaten und der Anzahl K der zu bestimmenden Parameter ab. Man unterscheidet hierbei die folgenden drei Problemklassen:

- (i) Die Anzahl M der Messwerte ist kleiner als die Anzahl K der zu bestimmenden Parameter. Das Problem ist *unterbestimmt*. Es läßt sich keine eindeutige Lösung für das Problem angeben.
- (ii) Die Anzahl M der Messwerte ist gleich der Anzahl K der zu bestimmenden Parameter. Das Problem ist unter bestimmten zusätzlichen Bedingungen *eindeutig lösbar*.
- (iii) Die Anzahl M der Messwerte ist größer als die Anzahl K der zu bestimmenden Parameter. Das Problem ist *überbestimmt* und hat im Allgemeinen keine Lösung.

Aus den eben beschriebenen Problemklassen resultieren unterschiedliche Herangehensweisen und Methoden zur Bestimmung der Parameter. Unterbestimmte Gleichungssysteme treten dann auf, wenn zu wenig Informationen zur Lösung der Aufgabe gegeben sind. Sofern sich die gegebenen Gleichungen nicht widersprechen, gibt es unendlich viele Lösungen. Es ist aber auch möglich, dass

gegebene Gleichungen redundant sind. Das heißt, die Gleichungen enthalten keine weiteren Informationen zur Bestimmung der Parameter, die nicht schon in den übrigen Gleichungen enthalten sind. Mathematisch handelt es sich um das Vorhandensein von Vielfachen einer Gleichung. Anstelle des im Allgemeinen nicht lösbaren überbestimmten Gleichungssystems wird dann eine neue Problemstellung formuliert:

$$\text{Minimiere } f(P) := \|(x(t_i, P) - m_i)_{i=1, \dots, M}\|.$$

In der Anwendung hat man es ursprünglich häufig mit einem überbestimmten Gleichungssystem zu tun. Diese Aufgabenstellung war schon Gegenstand zahlreicher Untersuchungen und auch diese Arbeit wird sich auf dieses überbestimmte Parameterbestimmungsproblem fokussieren. Überbestimmte Gleichungssysteme und deren Lösungsmethoden werden in Kapitel 4 kurz beschrieben. Nach der Betrachtung von Normalengleichungen für die Euklidische Norm im linearen Fall und Linearisierung bei nichtlinearen Problemen, wird die sequentielle lineare Optimierung zur Umsetzung der Problemstellung mit Betragssummen- und Tschebyschev-Norm vorgestellt. Im Anschluss daran folgt die Bestimmung eines Startparametertupels mittels der Lösung von Gleichungssystemen mit $M = K$. Weitere Methoden zur Gewinnung von Parameterstartwerten werden angegeben und auf unsere Probleme angewandt.

In Kapitel 5 wird ein Modellalgorithmus zur Minimierung richtungsdifferenzierbarer Zielfunktionen diskutiert. In diesem Modellalgorithmus wird zunächst die Zustandsdifferentialgleichung mit geeigneten Routinen für ein Startparametertupel gelöst, bevor anschließend überprüft wird, ob die notwendigen Optimalitätsbedingungen erfüllt werden. Iterativ wird dann nach einem verbesserten Parametertupel gesucht.

In Kapitel 6 wird eine neue Herangehensweise betrachtet, in der das Parameterbestimmungsproblem als Optimalsteuerproblem definiert wird. Die Parameter gehen als konstante und später als stückweise konstante Steuerungen auf dem Intervall $[t_0, t_M]$ in die Aufgabe der optimalen Steuerung ein. Dies wird erreicht, indem das Intervall zunächst nicht weiter unterteilt wird. In späteren Untersuchungen werden dann durch die Segmentierung des Intervalls, auf dem jeweils die Parameter als konstant angenommen werden, die stückweise konstanten Steuerungen implementiert. Das Zielfunktional ist in diesem Fall vom verallgemeinerten Mayer-Typ, das heißt, es hängt von mehreren Zustandswerten $x(t_i)$ zu Zeitpunkten t_i ab. Durch die Beschränkung auf stückweise konstante Steuerungen ist das Pontrjaginsche Maximum-Prinzip in der ursprünglichen Form nicht mehr anwendbar. Es wird ein entsprechendes notwendiges Optimalitätskriterium definiert.

In Kapitel 7 werden drei vorhandene Programmpakete zur direkten Lösung von Optimalsteuerproblemen vorgestellt und hinsichtlich des neuen Denkansatzes zur Parameterbestimmung untersucht. Bei den Programmpaketen handelt es sich um ein Direktes Mehrschießverfahren, OC-ODE und OCPID-DAE, sowie um die Direkte Kollokationsmethode, implementiert in DIRCOL. Direkte Methoden sind Verfahren, welche die Steuerung, und im Fall der Direkten Kollokation auch die Zustandsgleichung, diskretisieren und die Optimalsteueraufgabe

so durch ein nichtlineares Optimierungsproblem approximieren. Das hat den Vorteil, dass keine Überprüfung von Optimalitätsbedingungen für das Steuerproblem erforderlich ist.

Im Anschluss an diese Darstellung wird in Kapitel 8 die in Kapitel 6 vorgestellte notwendige Optimalitätsbedingung für stückweise konstante Funktionen genutzt, um die optimalen Parameter zu verifizieren. Die Lösung erfolgt mit Hilfe von Adjungierten. Es handelt sich folglich um einen indirekten Ansatz. Im letzten Abschnitt wird eine These diskutiert, wonach Parameter nun als stückweise konstante Funktionen zugelassen werden, mit einer Unterteilung des Zeitabschnitts $[t_0, t_M]$ in Teilintervalle. Dieses eröffnet eine Möglichkeit zur Diskussion der Korrektheit des Modells.

Im Anhang der Arbeit findet man Auszüge aus erstellten Programmen sowie ausgewählte numerische Ergebnisse.

Kapitel 2

Die Aufgabenstellung

Wir konkretisieren zunächst die in Kapitel 1 beschriebene Aufgabenstellung:

Aufgabe (0). *Gegeben seien*

- M Messwerte $m_i \in \mathbb{R}^{\tilde{n}}$, $0 \leq \tilde{n} \leq n$, zu Zeiten $t_i \geq 0$, $i = 1, \dots, M$, mit $t_i \neq t_j$ für $i \neq j$
- und eine Zustandsdifferentialgleichung

$$\dot{x}(t) = h(x(t), P), \quad (2.1)$$

mit rechter Seite $h : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^n$, die das Verhalten der zu untersuchenden Größe $x(t) \in \mathbb{R}^n$ in Abhängigkeit von einem Parametervektor $P = (P_1, \dots, P_K) \in D_P$ beschreibt.

- Eventuell ist ein Anfangswert $x(t_0) = x_0 \in \mathbb{R}^{\tilde{n}}$ gegeben, anderenfalls gehe er als zusätzlicher Parameter in die Problemstellung mit ein.

Bestimme einen Parametervektor $P^* = (P_1^*, \dots, P_K^*)$ aus dem Zulässigkeitsbereich D_P , der die Zielfunktion $f(P)$,

$$f(P) := \|(x(t_i, P) - m_i)_{i=1, \dots, M}\|_{\mathbb{R}^{\tilde{n}} \times M}. \quad (2.2)$$

minimiert. Dann ist $f : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$.

Um alle möglichen gegebenen Informationen auszunutzen, sollen hier noch einige Bemerkungen zur obigen Aufgabenstellung gemacht werden.

Bemerkung 2.1.

- Die obige Aufgabenstellung (0) umfasst Problemstellungen, in denen die rechte Seite der ODE von der Zeit t abhängt, $\hat{h}(t, x(t), P)$, also $\hat{h} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^n$, da diese durch die Einführung einer zusätzlichen Zustandsvariablen $\mathfrak{x}(t) = t$ mit $\dot{\mathfrak{x}}(t) = 1$ und $\mathfrak{x}(t_0) = t_0$ in eine autonome ODE überführt werden können.

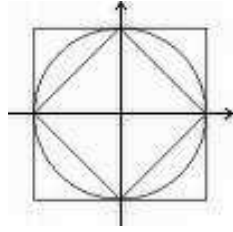


Abbildung 2.1: Darstellung der Euklidischen, der Betragssummen- und der Tschebyschev-Norm im Einheitskreis.

- Die Aussage $1 \leq \tilde{n} \leq n$ bei $m_i \in \mathbb{R}^{\tilde{n}}$ beschreibt den Umstand, dass nicht in jedem Fall Messungen zu allen Zustandskomponenten möglich sind und daher nicht für alle $x_l(t)$, $l = 1, \dots, n$, Messdaten vorliegen. Dies impliziert, dass in diesem Fall auch die Zielfunktion nur über die Komponenten der Zustandsfunktion definiert wird, zu denen Messdaten vorliegen:

$$f(P) = \|(x_l(t_i) - m_{li})_{l \in I, i=1, \dots, M}\|_{\mathbb{R}^{\tilde{n}} \times M}, \quad (2.3)$$

wobei $I = \{l \mid l \in \{1, \dots, n\}, \exists m_{li}\}$ die Indexmenge der Zustände bezeichnet, zu denen Messdaten vorhanden sind.

- Dieselbe Anmerkung betrifft die Bezeichnung $x(t_0) = x_0 \in \mathbb{R}^{\tilde{n}}$, welche den Fall beschreibt, dass nicht für alle n Differentialgleichungen ein Anfangswert gegeben ist. Sind $0 \leq \tilde{n} \leq n$ Anfangsbedingungen gegeben, werden die übrigen $n - \tilde{n}$ unbekanntes Anfangswerte als zusätzliche Parameter aufgenommen.
- In der obigen Aufgabenstellung wurde die Norm nicht weiter spezifiziert. Wir wollen im Folgenden nur drei verschiedene Typen von Normen betrachten, die Euklidische (l_2), die Betragssummen- (l_1) und die Tschebyschev-Norm (l_∞).

$$\begin{aligned} \|\cdot\|_2^2 &= \sum_{i=1}^M \|x(t_i) - m_i\|_{\mathbb{R}^{\tilde{n}}}^2 \\ \|\cdot\|_1 &= \sum_{i=1}^M \|x(t_i) - m_i\|_{\mathbb{R}^{\tilde{n}}} \\ \|\cdot\|_\infty &= \max_{i=1, \dots, M} \|x(t_i) - m_i\|_{\mathbb{R}^{\tilde{n}}} \end{aligned}$$

Dabei werden auch die inneren Normen jeweilig ersetzt.

Die l_∞ -Norm entsteht beispielsweise, wenn man Boxcar-Funktionen zur Modellierung der Wahrscheinlichkeitsdichte von Unsicherheiten benutzt. Die l_2 -Norm ist die quadratische Abweichung. Die robuste l_∞ -Norm bewertet Ausreißer stärker, vgl. Abb. 2.1. Selbstverständlich ist in den Zielfunktionen eine Wichtung der Fehler mittels Vorfaktoren möglich.

In den folgenden Abschnitten werden die einzelnen Probleme ausführlicher dargestellt und, falls bekannt, die Lösung der Probleme hergeleitet.

2.1 Problem (A). Ein akademisches Beispiel

Zur Motivation der Betrachtung eines akademischen, also künstlich erzeugten Problems sollen zunächst drei in der Numerik fundamentale Begriffe angegeben werden. Numerische Verfahren beinhalten für gewöhnlich folgende Schwierigkeit. Sie diskretisieren ein ursprünglich stetiges Problem, um dann mit in Rechnern möglichen Gleitkommazahlen das Problem zu lösen. Dies impliziert aber, dass im Regelfall nicht die exakte Lösung eines Problems reproduziert wird, sondern nur eine Näherung dessen, was die Lösung des stetigen Problems darstellt. Die oben beschriebene Diskretisierung erzeugt Fehler, deren Ausmaß mit der Konsistenz bewertet wird.

Definition 2.2. *Gegeben sei ein kontinuierliches Problem mit exakter Lösung $x(t)$. Die numerische Lösung für eine Schrittweite $h > 0$ sei $x_h(t)$. Dann heißt ein numerisches Verfahren konsistent, falls eine Funktion $\sigma(h)$ existiert, für die $\lim_{h \rightarrow 0} \sigma(h) = 0$ gilt, so dass*

$$\|x(t_h) - x_h(t_h)\| \leq \sigma(h) \quad \forall t_h = nh. \quad (2.4)$$

Das Verfahren hat die Konsistenzordnung φ , falls $\sigma(h) = \mathcal{O}(h^\varphi)$.

Hinzu kommen unvermeidliche Rundungsfehler durch die Verwendung von Gleitkommazahlen im Rechner. Sowohl Diskretisierungs- als auch Rundungsfehler können sich mit dem Algorithmus fortpflanzen und anwachsen, was selbstverständlich unerwünscht ist. Die Fortpflanzung von Fehlern jedweder Art wird mittels Stabilitätsanalyse bemessen.

Definition 2.3. *Sei $x(t)$ ein gegebenes mathematisches Problem in Abhängigkeit von den Eingabedaten t . \bar{x} sei eine Vorschrift zur Lösung des Problems und \tilde{t} eine gestörte Eingabe. Das Verfahren heißt stabil, falls es eine Konstante $\sigma \in \mathbb{R}$ gibt, so dass*

$$\|x(\tilde{t}) - \bar{x}(\tilde{t})\| \leq \kappa \sigma \epsilon \quad (2.5)$$

gilt mit der Maschinengenauigkeit ϵ und einer Konstanten κ . Folglich ist ein numerisches Verfahren stabil, wenn es unempfindlich gegenüber Störungen in den Eingabedaten ist.

Bei der Stabilität und der Konsistenz handelt es sich um Eigenschaften des Algorithmus. Nun wollen wir zu einer Eigenschaft des gestellten Problems kommen.

Definition 2.4. *Die Konstante κ in der vorigen Definition quantifiziert die Kondition, die Abhängigkeit der Lösung eines Problems von den Eingangsdaten, und ist definiert als*

$$\kappa = \limsup_{t \rightarrow \tilde{t}} \frac{\|x(t) - x(\tilde{t})\|}{\|t - \tilde{t}\|}, \quad (2.6)$$

wobei wie zuvor $x(t)$ das mathematische Problem in Abhängigkeit der Eingabedaten t , und \tilde{t} die gestörten Eingabedaten bezeichnen.

Diese drei beschriebenen Phänomene lassen sich anhand eines akademischen Beispiels nachvollziehen, dessen exakte Lösung bereits bekannt ist. Wir führen dazu folgende Problemstellung ein.

Problem (A). *Gegeben sei die Zustandsdifferentialgleichung*

$$\dot{x}(t) = P \cdot x(t), \quad (2.7)$$

mit gegebenem Anfangswert $x(0) = 1$ in einem Parameter P , sowie 5 Messwerte.

Diese Differentialgleichung läßt sich analytisch lösen. Die Lösung hat die Form

$$x(t) = C \cdot e^{Pt} \quad (2.8)$$

mit der Integrationskonstanten C , für welche sich aus der Anfangsbedingung der Wert $C = 1$ ergibt. Für ein beliebiges, aber festes P kann man somit an diesem akademischen Beispiel die Konsistenz des ODE-Lösers überprüfen.

Setzt man voraus, dass $P = 2$ der optimale Parameter ist, so kann man mithilfe der Lösung

$$x(t) = e^{2t} \quad (2.9)$$

“Messwerte” generieren.

t_i	0.25	0.5	1	2	3
m_i	\sqrt{e}	e	e^2	e^4	e^6

Tabelle 2.1: *Messwerte Problem (A).*

Nun besteht die Möglichkeit anstelle der Differentialgleichung zunächst mit der Lösung (2.9) einen Algorithmus zur Parameterbestimmung zu testen. Dabei kann man dokumentieren, ob und nach wievielen Iterationen ein Algorithmus den optimalen Parameter $P = 2$ findet und wie sich der Algorithmus bei verschiedenen guten Startwerten verhält.

Anschließend läßt man den selben Optimierungsalgorithmus mit einer Komponente zum Lösen von Differentialgleichungen für die Zielfunktion mit ODE laufen und vergleicht die Ergebnisse. Um das eigentliche Verhalten des Algorithmus bei Parameterbestimmungsproblemen zu beurteilen, können in einem weiteren Schritt die Daten verrauscht werden.

2.2 Problem (B). Das Wachstum der Hefe *Schizosaccharomyces kephir*

In diesem Abschnitt wollen wir aus Messdaten, die das Wachstumsverhalten einer Hefe beschreiben, Wachstumsparameter bestimmen. Bei der Hefe handelt es sich um die *Schizosaccharomyces kephir*, deren Wachstum bereits in [EK05] untersucht wurde.

Zunächst werden stetige Modelle eingeführt, wobei ihrer Formulierung mittels gewöhnlicher Differentialgleichungen, der Analyse und ihrer Interpretation

besondere Aufmerksamkeit gezollt wird. Durch verschiedene Annahmen kann das Modell vereinfacht werden. Im Folgenden bezeichne $N(t)$ die beobachtete Hefezelldichte zur Zeit t . Angenommen, wir könnten in einer Zeiteinheit beobachten, wie sich eine Hefezelle teilt, die Tochterzellen sich teilen und so weiter. Dann definieren wir die Reproduktionsrate der Hefe pro Zeiteinheit durch den Parameter $\mathcal{K} > 0$. Das Absterben von Zellen lassen wir außer Acht und erhalten

$$N(t + \Delta t) \approx N(t) + \mathcal{K} \cdot N(t) \cdot \Delta t,$$

das heißt,

$$\frac{N(t + \Delta t) - N(t)}{\Delta t} \approx \mathcal{K} \cdot N(t).$$

Im Limes gilt

$$\frac{dN}{dt} = \mathcal{K} \cdot N. \quad (2.10)$$

Durch Trennung der Variablen und Integration folgt

$$\int_0^t \frac{dN}{N} = \int_0^t \mathcal{K} ds, \text{ also } \ln N \Big|_0^t = \mathcal{K} \cdot t$$

$$\text{beziehungsweise } \ln N(t) - \ln N(0) = \mathcal{K} \cdot t, \quad \ln N(t) = \mathcal{K} \cdot t + a,$$

wobei $a = \ln N(0)$ ist. Dies erklärt die in der Biologie häufige Beobachtung, dass der Logarithmus-Plot von $N(t)$ für konstante Wachstumsraten \mathcal{K} linear in der Zeit ist.

Die Lösung der Differentialgleichung (2.10) ist

$$N(t) = N_0 \cdot e^{\mathcal{K} \cdot t}$$

und beschreibt das sogenannte Malthus-Gesetz, wobei $N_0 = N(0)$ die Größe der Anfangspopulation bezeichnet. Eine Reproduktionsrate $\mathcal{K} < 0$ kennzeichnet hingegen eine abnehmende Population.

Die Wachstumsrate kann auch direkt von den Ressourcen abhängen. Angenommen, es ist

$$\mathcal{K}(C) = \omega \cdot C, \quad \omega > 0,$$

mit der Nährstoffkonzentration C . α Einheiten Nährstoffe werden zur Produktion einer Einheit Populationszunahme konsumiert. Dann können Hefewachstum und Nährstoffverbrauch durch zwei Differentialgleichungen beschrieben werden:

$$\frac{dN}{dt} = \mathcal{K}(C) \cdot N = \omega \cdot C \cdot N \quad (2.11)$$

$$\frac{dC}{dt} = -\alpha \cdot \frac{dN}{dt} = -\alpha \cdot \omega \cdot C \cdot N \quad (2.12)$$

Dieses Differentialgleichungssystem kann leicht gelöst werden. Aus (2.12) ergibt sich nach Integration

$$C(t) = -\alpha \cdot N(t) + C_0 \quad (2.13)$$

mit $C_0 = C(0) + \alpha \cdot N(0)$. Substitution von (2.13) in (2.11) liefert

$$\frac{dN}{dt} = \omega \cdot (C_0 - \alpha \cdot N)N,$$

das logistische Wachstum. Nach Annahme ist $\mathcal{K}(N) = \omega \cdot (C_0 - \alpha \cdot N(t))$. Das Wachstumsgesetz ist mit dem eigentlichen Wachstumsparameter $r = \omega C_0$ und der tragenden Kapazität $B = \frac{C_0}{\alpha}$

$$\frac{dN}{dt} = r \left(1 - \frac{N}{B}\right) N. \quad (2.14)$$

ODE (2.14) wird später in das Parameterbestimmungsproblem eingehen. Sie hat mit der Anfangspopulation $N_0 = N(0)$ die Lösung

$$N(t) = \frac{N_0 \cdot B}{N_0 + (B - N_0) \cdot e^{-r \cdot t}}. \quad (2.15)$$

Wir betrachten jetzt:

Problem (B). *Gegeben sind*

- 10 Messwerte,

t_i	14,4	16	28,8	30,4	32	48	72	92,8	124,8	140,8
m_i	1,2	1,02	1,68	2,28	1,92	2,64	4,8	5,64	5,76	5,76

Tabelle 2.2: *Messwerte Problem (B). t_i Zeit in Stunden, N_i Menge der Hefezellen (ohne Maßeinheit).*

- und eine in der Zustandsfunktion nichtlineare Differentialgleichung

$$\dot{x} = r \left(1 - \frac{x}{B}\right) x, \quad (2.16)$$

ohne gegebenen Anfangswert $x(0) = x_0$ (der Anfangswert geht in diesem Problem als Parameter mit ein), mit einer Lösung in Abhängigkeit der drei Parameter $P = (B, x_0, r)$.

- Die Aufgabenstellung lautet:

$$\min_{P \in D_P} f(P) = \min_{P \in D_P} \|(x(t_i) - m_i)_{i=1, \dots, M}\|. \quad (2.17)$$

Es gibt hier zusätzliche Anforderungen an die Parameter. Der Definitionsbereich der Parameter ist eine Teilmenge von \mathbb{R}^3 , $D_P \subset \mathbb{R}^3$. Die Beschränkung des Definitionsbereiches für P resultiert aus der biologischen Interpretation der Parameter. Diese erfordert die Positivität aller Parameter, $P_j \geq 0$ für alle $j = 1, 2, 3$.

Die in [EK05] angegebene Lösung $N(t)$ ist

$$N(t) = \frac{5,8}{1 + e^{2.47550 - 0.06069 \cdot t}}. \quad (2.18)$$

Die angegebene Kurve approximiert die Messdaten hinreichend gut. Man entnimmt aus [EK05] und (2.18) für die gesuchten Größen N_0 , B und r , dass $r = 0.06069$ und $B = 5.8$ ist. Folglich ist $(B/N_0 - 1) = 11.8876$ und $N_0 = 0.450045$. Die in dieser Arbeit ermittelten Werte werden mit diesen Angaben verglichen.

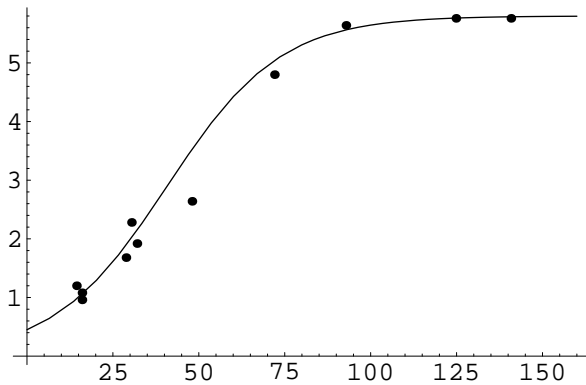


Abbildung 2.2: Graphische Darstellung der Messwerte für Problem (B) mit der in [EK05] angegebenen Lösungskurve (2.18).

2.3 Problem (C). Ein Problem aus der Optik

Gegeben sei ein Problem aus der nichtlinearen Optik, welches bereits von S. Rentzsch¹ und W. Schmidt² untersucht wurde. Dabei ist eine Funktion $x(t)$ gegeben, die ein physikalisches Verhalten beschreibt, sowie 17 Messpunkte. Aufgabe soll es sein, die Parameter A , B , C und D zu bestimmen.

Zeit t_i	Messwert m_i
0.0	-0.308e01
5.0	-0.298e01
10.0	-0.274e01
15.0	-0.221e01
20.0	-0.181e01
25.0	-0.122e01
30.0	-0.865e00
35.0	-0.586e00
40.0	-0.432e00
45.0	-0.295e00
55.0	-0.172e00
65.0	-0.911e-01
85.0	0.103e-01
105.0	0.934e-01
125.0	0.156e00
165.0	0.272e00
185.0	0.273e00

Aus den Messdaten der Tab. 2.3 wurden mit gegebenen Anfangswerten

$$A_0 = -7.08 \quad (2.19)$$

$$B_0 = 4.0 \quad (2.20)$$

$$C_0 = -0.0645 \quad (2.21)$$

$$D_0 = -0.096 \quad (2.22)$$

für die Funktion

$$x(t) = A \cdot e^{Ct} + B \cdot e^{Dt}$$

nach 4 Iterationen die Parameter

$$A = -7.23273952$$

$$B = 3.9388302$$

$$C = -0.064499989$$

$$D = -0.095999546$$

Tabelle 2.3: Messdaten von Frau Sabine Rentzsch zur physikalischen Optik.

bestimmt.

Aufgabe in dieser Arbeit soll es nun sein, diese Ergebnisse zu überprüfen, gegebenenfalls zu verbessern und eine Methode anzugeben, wie eine Startschätzung für die Parameter gewonnen werden kann. Zunächst muss dazu die

¹Universität Jena, Institut für Physikalische Optik (1938-2002)

²Universität Greifswald, Institut für Mathematik und Informatik

gegebene Funktion $x(t)$ in eine ODE überführt werden. Dies geschieht nach folgendem Ansatz: Die Funktion $x(t) = Ae^{Ct} + Be^{Dt}$ erinnert an die Lösung linearer ODEs zweiter Ordnung mit konstanten Koeffizienten

$$\ddot{x} + \alpha\dot{x} + \beta x = 0. \quad (2.23)$$

Diese hat die Lösung $x(t) = e^{\lambda t}$, wenn λ reelle Lösung der charakteristischen Gleichung

$$\lambda^2 + \alpha\lambda + \beta = 0 \quad (2.24)$$

ist. Und nach dem Superpositionsprinzip wäre demnach auch

$$x(t) = \eta_1 e^{\lambda_1 t} + \eta_2 e^{\lambda_2 t}$$

Lösung mit zwei verschiedenen reellen Wurzeln λ_1 und λ_2 des charakteristischen Polynoms. Da C und D verschiedene reelle Wurzeln der charakteristischen Gleichung (2.24) sein müssen, also

$$(\lambda - C)(\lambda - D) = \lambda^2 + \alpha\lambda + \beta,$$

ist $x(t) = \eta_1 e^{Ct} + \eta_2 e^{Dt}$ demnach Lösung der Differentialgleichung (2.23) mit $\alpha = -(C + D)$ und $\beta = CD$.

Die Konstanten η_1 und η_2 werden aus den Anfangswerten $x(t_0) = x_0$ und $\dot{x}(t_0) = \dot{x}_0$ bestimmt. Mit $t_0 = 0$ sind $x(0) = A + B$ und $\dot{x}(0) = AC + BD$ die Anfangswerte des Anfangswertproblems zweiter Ordnung,

$$\ddot{x} - (C + D)\dot{x} + CDx = 0.$$

Das zugehörige eindeutig lösbares Anfangswertproblem erster Ordnung erhält man dann mit dem Ansatz $x_1 = x$ und $x_2 = \dot{x} = \dot{x}_1$.

Somit haben wir unsere nichtlineare Funktion $x(t) = Ae^{Ct} + Be^{Dt}$ in ein Anfangswertproblem erster Ordnung der Form

$$\dot{x}_1 = x_2, \quad x_1(0) = A + B, \quad (2.25)$$

$$\dot{x}_2 = (C + D)x_2 - CDx_1, \quad x_2(0) = AC + BD, \quad (2.26)$$

umgewandelt.

2.4 Problem (D). Das enzymkinetische Problem

In [Schr06] wurde die folgende enzymkinetische Aufgabenstellung untersucht, die nun hier erneut aufgegriffen und verifiziert oder verbessert werden soll.

Enzyme sind Katalysatoren biologischer Systeme, die spezifisch ein Substrat binden, die Reaktionsenergie heruntersetzen und nach der Umsetzung des Substrats in ein Produkt wieder unverändert aus der Reaktion hervorgehen. Angenommen, bei der Produktbildung handelt es sich um einen irreversiblen Prozess, dann kann die Reaktion wie folgt dargestellt werden:



Ein Enzym e verbindet sich mit einem Substrat s , sie bilden einen Enzym-Substrat-Komplex c und können anschließend wieder in Enzym e und Substrat s oder Enzym e und Produkt p zerfallen.

Die Konzentrationen der einzelnen Stoffe zur Zeit t seien $e(t)$, $s(t)$, $c(t)$ und $p(t)$. Wir machen die plausible und konventionelle Annahme, dass die Rate zur Bildung von c proportional ist zur Konzentration von e und s . Wir nehmen ebenfalls an, dass der Zerfall von c -Molekülen in Enzym und Substrat oder Enzym und Produkt proportional zur Konzentration von c ist. Aus der Kombination unserer Annahmen und der Verwendung der Ratenkonstanten als Proportionalitätsfaktoren, die hier mit P_1 , P_2 und P_3 bezeichnet werden, erhält man somit das nichtlineare Differentialgleichungssystem

$$\frac{dc}{dt}(t) = P_1 e(t)s(t) - (P_2 + P_3)c(t) \quad (2.27)$$

$$\frac{de}{dt}(t) = -P_1 e(t)s(t) + (P_2 + P_3)c(t) \quad (2.28)$$

$$\frac{ds}{dt}(t) = -P_1 e(t)s(t) + P_3 c(t) \quad (2.29)$$

$$\frac{dp}{dt}(t) = P_2 c(t) \quad (2.30)$$

Um das zeitliche Verhalten der Konzentrationen zu beobachten, legen wir Anfangsbedingungen fest. Sinnvoll ist hier

$$e(0) = e_0, s(0) = s_0, c(0) = 0, p(0) = 0,$$

wobei davon ausgegangen wird, dass die Reaktion zu Beginn der Beobachtung startet und zuvor noch kein Komplex oder Produkt vorhanden ist. Wir haben somit ein klassisches Anfangswertproblem.

Das Enzym e geht als Katalysator unverändert aus der Reaktion hervor. Addieren der Gleichungen (2.27) und (2.28) liefert

$$\frac{dc}{dt} + \frac{de}{dt} = 0.$$

Daher ist $c(t) + e(t) = \text{const.} = e_0$ und folglich

$$e(t) = e_0 - c(t). \quad (2.31)$$

Ebenso gilt

$$\frac{dc}{dt} + \frac{ds}{dt} + \frac{dp}{dt} = 0,$$

und daher

$$c(t) = s_0 - s(t) - p(t). \quad (2.32)$$

Durch Einsetzen von (2.31) und (2.32) und sinnvolles Umformen können wir das System von vier nichtlinearen Differentialgleichungen und vier Anfangsbedingungen auf ein System von zwei nichtlinearen Differentialgleichungen mit zwei Anfangsbedingungen reduzieren:

$$\begin{aligned} \frac{ds}{dt}(t) &= -P_1(e_0 - s_0 + s(t) + p(t))s(t) + (P_2 + P_3)(s_0 - s(t) - p(t)) \\ \frac{dp}{dt}(t) &= P_2(s_0 - s(t) - p(t)) \end{aligned}$$

mit den Anfangsbedingungen

$$s(0) = s_0, p(0) = 0.$$

In einem Laborexperiment wurde diese Reaktion am Beispiel der Alkoholdehydrogenase untersucht, welche die Umwandlung von Alkohol und NAD^+ zu Acetaldehyd, $NADH$ und h^+ katalysiert. Es wurden über eine Periode von 2000 Sekunden Messwerte für die Produktkonzentration genommen, aus denen versucht wurde, die Reaktionskonstanten $P = (P_1, P_2, P_3)$ zu bestimmen.

Wir schreiben $x_1(t)$ und $x_2(t)$ für die Zustandsvariablen Substratkonzentration und Produktkonzentration und halten fest:

Problem (D). *Gegeben seien*

- 2000 Messwerte, jedoch lediglich für die zweite Zustandsvariable,
- ein in den Zuständen nichtlineares Differentialgleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -P_1(e_0 - X_{10} + x_1 + x_2)x_1 + (P_2 + P_3)(X_{10} + x_1 + x_2) \\ P_2(X_{10} - x_1 - x_2) \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

mit gegebenen Anfangswerten $x_1(0) = X_{10}$ sowie $x_2(0) = 0$ und einer gegebenen Konstante E_0 , in Abhängigkeit der drei Parameter $P = (P_1, P_2, P_3)$. Für die drei Parameter wird abermals die Positivität gefordert, da negative Ratenkonstanten keine sinnvolle Interpretation zulassen.

Die Aufgabe lautet:

$$\min_{(P_1, P_2, P_3)} f(P) = \min_{(P_1, P_2, P_3)} \|(x_2(t_i) - m_{2i})_{i=1, \dots, 2000}\| \quad (2.34)$$

Die Aufgabenstellung kann durch eine zusätzliche Nebenbedingung erweitert werden, wenn die Michaelis-Menten-Konstante $K_M = \frac{P_2 + P_3}{P_1}$ bekannt ist. Dieser Fall wird hier jedoch nicht betrachtet.

Das Problem verfügt über eine Besonderheit. Die ODE ist für gewisse Parameterkonstellationen steif. Dieses wird im folgenden Kapitel 3 kurz umrissen, nachdem grundlegende Voraussetzungen an die Zustandsdifferentialgleichungen erarbeitet wurden, welche die Lösbarkeit der Differentialgleichung gewährleisten.

Kapitel 3

Mathematische Grundlagen

Die später vorgestellten numerischen Methoden benutzen die partiellen Ableitungen der Zielfunktion $f(P)$, vgl. (1.2), nach den Parametern P_j , $j = 1, \dots, K$,

$$\left(\frac{\partial f}{\partial P_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial P_K} \right)^T. \quad (3.1)$$

Dies setzt die Differenzierbarkeit der Funktion bezüglich der Parameter voraus. Deshalb werden in diesem Kapitel Grundlagen der Stetigkeit und Differenzierbarkeit der Lösung $x(t, P)$ der ODE (1.1) bezüglich P kurz dargestellt. Ausführliche Untersuchungen findet man beispielsweise in [Heu95]. In der Darstellung lehnt sich das Kapitel jedoch weitestgehend an [De94].

3.1 Anforderungen an die Differentialgleichung

Wir betrachten zunächst ein gewöhnliches Anfangswertproblem

$$\dot{x}(t) = \mathfrak{h}(t, x) \quad , \quad x(t_0) = x_0, \quad (3.2)$$

mit stetiger Abb. $\mathfrak{h} : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ auf einem offenen Gebiet $U \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$. $\bar{B}(x, r) \in \mathbb{R}^n$ bezeichne die abgeschlossene Kugel mit Radius r um den Mittelpunkt x . Da U offen ist, gibt es einen Zylinder

$$Z_0 = [t_0 - T_0, t_0 + T_0] \times \bar{B}(x_0, r_0) \subset U.$$

Da Z_0 beschränkt ist, existiert ein

$$M = \sup_{(t,x) \in Z_0} \|\mathfrak{h}(t, x)\| < \infty.$$

Bekanntlich folgt allein schon aus der Stetigkeit und der Beschränktheit der Funktion $\mathfrak{h}(t, x)$ die Existenz mindestens einer Lösung der ODE (3.2). Eine gute Darstellung für ODEs erster Ordnung findet man in [Heu95]. Wir lassen hier jedoch den mehrdimensionalen Fall zu und argumentieren analog.

Sei $Z = [t_0 - \frac{T_0}{2}, t_0 + \frac{T_0}{2}] \times \bar{B}(x_0, r_0) \subset Z_0$, vergleiche Abb. 3.1.

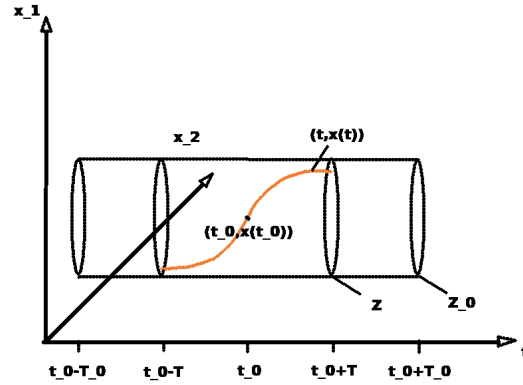


Abbildung 3.1: Zylinder Z_0 mit eingeschriebenem Sicherheitszylinder Z und $T = \frac{T_0}{2}$ für $x \in \mathbb{R}^2$.

Definition 3.1. Man nennt Z einen Sicherheitszylinder für (3.2), wenn jede Lösung $x : I \rightarrow \mathbb{R}^n$ des Anfangswertproblems mit $I \subset [t_0 - T, t_0 + T]$ in $\bar{B}(x_0, r_0)$ eingeschlossen bleibt.

Angenommen, die Lösung x entweicht im Intervall $[t_0, t_0 + T]$ aus Z . Es sei τ der erste Moment, für den dies auftritt, das heißt

$$\tau = \inf\{t \in [t_0, t_0 + T]; \|x(t) - x_0\| > r_0\}.$$

Dann gilt $\|x(t) - x_0\| \leq r_0$ für $t \in [t_0, \tau[$. Da $(t, x(t)) \in Z \subset Z_0$ für $t \in [t_0, \tau]$, folgt $\|\dot{x}(t)\| = \|\mathfrak{h}(t, x(t))\| \leq M$ und

$$r_0 = \|x(\tau) - x_0\| = \left\| \int_{t_0}^{\tau} \dot{x}(u) du \right\| \leq M(\tau - t_0),$$

also $\tau - t_0 \geq r_0/M$. Folglich kann für $T \leq r_0/M$ keine Lösung auf $[t_0 - T, t_0 + T]$ aus Z entweichen. Daher ist Z ein Sicherheitszylinder, wenn $T \leq \min(T_0, r_0/M)$ gewählt wurde.

Bemerkung 3.2. Wenn $Z \subset Z_0$ ein Sicherheitszylinder ist, dann erfüllt jede Lösung x von (3.2) mit $x : [t_0 - T, t_0 + T] \rightarrow \mathbb{R}^n$ die Bedingung $\|\dot{x}(t)\| \leq M$, das heißt, x besitzt eine Lipschitz-Konstante M .

Die Existenz einer Lipschitz-Konstanten ist gleichbedeutend mit der Existenz einer eindeutigen Lösung von (3.2). Der zugehörige Satz von Picard-Lindelöf für ODEs erster Ordnung mit Beweis ist ebenfalls in [Heu95] aufgeführt.

3.2 Parameterabhängige gewöhnliche Differentialgleichungen

Die eben getroffenen Aussagen zur Existenz mindestens einer und sogar genau einer Lösung werden im Anschluss auf parameterabhängige ODEs übertragen.

3.2.1 Stetigkeit

Betrachten wir nun eine gewöhnliche Differentialgleichung

$$\dot{x}(t) = \hat{h}(t, x, P) \quad (t, x, P) \in U, \quad U \text{ offen} \quad (3.3)$$

mit Anfangswert $x(t_0) = x_0$. Die Funktion $\hat{h} : U \subseteq \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^n$ sei stetig auf U . Bezeichne

$$\dot{x}(t) = \hat{h}(t, x, P) \quad (t, x) \in U_P, \quad (3.4)$$

die ODE für ein festes $P \in \mathbb{R}^K$, wobei $U_P \subset \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n$ die Punkte beinhaltet, für die $(t, x, P) \in U$ gilt. Die Beweise der folgenden Sätze können in Büchern der Analysis wie [Heu04], [De94] und [Wa02] nachgelesen werden. Sei $(t_0, x_0, P_0) \in U$ fest. Da U ein offenes Gebiet ist, besitzt der Punkt eine kompakte Umgebung

$$V_0 = [t_0 - T_0, t_0 + T_0] \times \bar{B}(x_0, r_0) \times \bar{B}(P_0, \alpha_0) \subset U.$$

Sei $M = \sup_{V_0} \|\hat{h}\|$. Dann ist für jedes feste $T \leq \min(T_0, r_0/M)$ und für jedes $P \in \bar{B}(P_0, \alpha_0)$

$$C = [t_0 - T, t_0 + T] \times \bar{B}(x_0, r_0) \subset U_P$$

für die Lösungen von (3.4) ein Sicherheitszylinder. Der Existenzsatz von Cauchy-Peano-Arzela bedingt dann

Satz 3.3. *Die Lösung $x(t, P)$ ist mit vorstehenden Bezeichnungen für jedes $(t, P) \in [t_0 + T, t_0 - T] \times \bar{B}(P_0, \alpha_0)$ definiert und besitzt als Wertebereich $\bar{B}(x_0, r_0)$.*

Es soll jetzt angenommen werden, dass \hat{h} einer lokalen Lipschitz-Bedingung bezüglich x genügt, das heißt, dass es eine neue Konstante $k \geq 0$ gibt, so dass

$$\|\hat{h}(t, x_1, P) - \hat{h}(t, x_2, P)\| \leq k\|x_1 - x_2\|$$

erfüllt ist

$$\forall (t, P) \in [t_0 - T, t_0 + T] \times \bar{B}(P_0, \alpha_0) \quad \text{und} \quad \forall x_1, x_2 \in \bar{B}(x_0, r_0).$$

Satz 3.4. *Wenn \hat{h} auf U stetig ist und bezüglich x einer lokalen Lipschitz-Bedingung genügt, dann ist die Lösung $x(t, P)$ auf $[t_0 - T, t_0 + T] \times \bar{B}(P_0, \alpha_0)$ stetig.*

Wenn $\hat{h}(t, x, P)$ einer lokalen Lipschitz-Bedingung bezüglich P genügt, so genügt $x(t, P)$ auch einer lokalen Lipschitz-Bedingung bezüglich (t, P) .

3.2.2 Differenzierbarkeit

Der Einfachheit halber nehmen wir $P \in \mathbb{R}$ an.

Satz 3.5. *Sei \hat{h} auf U stetig und habe dort stetige partielle Ableitungen \hat{h}'_{x_j} und \hat{h}'_P . Dann gehört $x(t, P)$ auf $[t_0 - T, t_0 + T] \times \bar{B}(P_0, \alpha_0)$ zur Klasse C^1 der einmal stetig differenzierbaren Funktionen und besitzt gemischte partielle Ableitungen, die stetig sind, und es gilt*

$$\frac{\partial}{\partial P} \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial P}.$$

Der Satz lässt sich leicht auf den Fall $P \in \mathbb{R}^K$ erweitern. Es genügt, alle Variablen P_i bis auf eine festzuhalten, um

$$\frac{\partial}{\partial P_i} \frac{\partial x}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial x}{\partial P_i}$$

nachzuweisen.

Satz 3.6. *Gehöre \hat{h} zur Klasse C^s und besitze partielle Ableitungen \hat{h}'_{x_j} und \hat{h}'_{p_i} aus C^s . Dann ist die Lösung $x(t, P)$ des zu (3.4) gehörenden Anfangswertproblems aus der Klasse C^{s+1} .*

Beweis. Vgl. [De94]. □

3.3 Differentielle a-priori Sensitivitätsanalyse

In der Parameterschätzung ist ein wesentlicher Faktor die Sensitivität der Zielfunktion bezüglich der Parameter. Diese beschreibt, wie sich die Werte der Zielfunktion bei kleinen Änderungen in den Parametern verhalten. Man erhält dadurch Auskunft, in welchen Größenordnungen die Parameter gestört werden müssen. Ist eine Funktion in einem Parameter sehr sensitiv, erfolgen große, ist sie weniger sensitiv, geringere Zu- bzw. Abnahmen der Funktionswerte. Insbesondere können Parameter, für die die Zielfunktion nicht sensitiv ist, nicht aus Messwerten bestimmt werden. Das numerische Verfahren wird in diesem Fall keine aussagekräftigen Lösungen für einen derartigen Parameter liefern.

Zur Ermittlung der Parametersensitivitäten werden üblicherweise differentielle Sensitivitätsuntersuchungen oder Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt. In dieser Arbeit wird ausschließlich die erste Methode verwendet, welche die Sensitivität der Zielfunktion mittels der Bestimmung der partiellen Ableitungen bzgl. der Parameter bestimmt. Die Zustandsfunktion geht jedoch in den Wert der Zielfunktion ein, d.h. ihre Sensitivität ist implizit in der Sensitivität der Zielfunktion enthalten. Aus diesem Grund werden ebenso die Sensitivitäten der Zustandsfunktionen mit untersucht. Ist die Zustandsfunktion unempfindlich gegenüber Störungen in den Parametern, so überträgt sich diese Eigenschaft auf die Zielfunktion. Der Ablauf der differentiellen Sensitivitätsuntersuchung stellt sich wie folgt dar:

Algorithmus 3.7. *Differentielle Sensitivitätsanalyse*

- (i) *Bestimme den Wert der Zielfunktion für normale Parameterwerte.*
- (ii) *Störe die zu untersuchenden Parameter um einen bestimmten Betrag Δ .*
- (iii) *Die Sensitivität S ergibt sich aus der Änderung der Zielfunktionwerte pro Auslenkung des Parameters und kann definiert werden als*

$$S_f(P, \Delta) := \frac{f(P) - f(P + \Delta)}{\Delta}.$$

- (iv) *Nach Berechnung der Sensitivitäten für alle Parameter, wird eine Vergleichbarkeit der Einflussgrößen durch Normierung der Sensitivitäten erreicht.*

In [Wi03] und [Wi06] wird ausführlich die Wahl des zu störenden Betrages diskutiert und eine Auslenkung um die Standardabweichung empfohlen. Da im hier betrachteten Fall keine Standardabweichungen gegeben sind bzw. auch nicht für zu bestimmende Parameter anzugeben sind, wurden nach Ermessen sinnvolle Werte als Auslenkungen gewählt. Diese sind bei den jeweiligen Problemen und entsprechenden Tabellen aufgeführt.

3.3.1 Analyse der Differentialgleichung

Wir benutzen im Folgenden die verkürzte Schreibweise

$$x(t, P_i + \Delta P_i) := x(t, P_1, \dots, P_{i-1}, P_i + \Delta P_i, P_{i+1}, \dots, P_K)$$

für in der i -ten Komponente ausgelenkte Parametervektoren. $x(P)$ beschreibe den Zustandswert für ungestörtes P . Die Änderung der Zustandsfunktion ist dann in erster Näherung

$$x(t, P_i + \Delta P_i) - x(t, P) \approx \frac{\partial x}{\partial P_i}(t, P) \Delta P_i.$$

Im Wesentlichen entsprechen die Sensitivitäten den Gradienten nach den Parametern, die im Folgenden zunächst auf die Zustandsfunktion und anschließend auf die Zielfunktion angewandt werden.

Wir betrachten zunächst **Problem (A)** mit der Lösung (2.9). Die partielle Ableitung von x nach P ist

$$\frac{\partial x}{\partial P}(t, P) = t e^{Pt}. \quad (3.5)$$

Für $t > 0$ ist (3.5) positiv. Abweichungen ΔP in P gehen mit dem Faktor (3.5) exponentiell ein. Die Evolutionsfunktion $x(t)$ der ODE (2.8) ist sensitiv im Parameter. Numerische Werte sind in Tab. A.1 im Anhang dargestellt. Die Änderung von x bei Störung ΔP ist

$$x(t, P + \Delta P) - x(t, P) = e^{(P+\Delta P)t} - e^{Pt} = e^{Pt}(e^{\Delta Pt} - 1). \quad (3.6)$$

Den Faktor t in (3.5) erhält man bei Division durch ΔP und Grenzwertübergang $\Delta P \rightarrow 0$ nach Anwendung der Regel von l'Hospital.

Auch für **Problem (B)** betrachten wir die analytische Lösung (2.15). Für nicht bekannte analytische Lösungen kann der Gradient numerisch mittels einseitiger oder zentraler Differenzenquotienten bestimmt werden, wie nachfolgend für Problem (D) gezeigt wird. Die partiellen Ableitungen in Problem (B) bezüglich B , N_0 und r sind

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial B} &= \frac{N_0(N_0 - e^{-rt})}{(N_0 + (B - N_0)e^{-rt})^2}, \\ \frac{\partial x}{\partial N_0} &= \frac{B^2 e^{-rt}}{(N_0 + (B - N_0)e^{-rt})^2}, \\ \frac{\partial x}{\partial r} &= \frac{(N_0 B^2 - N_0^2 B) t e^{-rt}}{(N_0 + (B - N_0)e^{-rt})^2}. \end{aligned}$$

Hier ist die Schlussfolgerung aus der Ableitung nicht ganz so einfach. Bei genauerer Betrachtung ergibt sich die nachstehende Abschätzung. Beurteilt werden soll, welcher Parameter bei gleicher Auslenkung die Funktion am meisten beeinflusst. Sei dazu $t > 0$, beliebig aber fest, sowie $\Delta > 0$ für alle Parameter gleich. Mit den a-priori Annahmen über die Größenordnungen der Parameter

$$B > N_0 \quad (3.7)$$

$$1 > N_0 > r \quad (3.8)$$

$$r > 0 \quad (3.9)$$

gilt:

- (i) Wegen (3.7) und $N_0 > 0$ ist

$$B^2 > N_0 B^2 - N_0^2 B > 0.$$

Für $t > 1$, wegen $e^{-rt} > 0$ für alle r , und wegen des gleichen Nenners ist somit gezeigt, dass $x(t)$ in r sensitiver ist als in N_0 .

- (ii) Wegen (3.9) gilt

$$|N_0 - e^{-rt}| < 1, \text{ also auch } N_0 |N_0 - e^{-rt}| < N_0,$$

woraus $N_0(N_0 - e^{-rt}) < B^2$ folgt. Die Funktion $x(t)$ ist sensitiver in N_0 als in B .

Diese Aussagen spiegeln auch die numerisch ermittelten Werte in Tab. 3.1 wider. Die Zustandsfunktion weist für obige Annahmen und $t > 1$ die größte Sensitivität in r auf. Kleine Änderungen in r verursachen größere Änderungen in $x(t)$. Am wenigsten wirken sich Auslenkungen in B aus. Hier sind größere ΔB notwendig, um $x(t)$ signifikant zu beeinflussen. Bei $t < 1$ ist der Einfluss von N_0 wie zu erwarten stärker. In B ist $x(t)$ für kleine t fast nicht sensitiv, vgl. Tab. 3.1.

Zeit	B	N_0	r	ZF-Wert	$\ x(t, P_i + \Delta P_i) - x(t, P_i)\ $	normierte Sensitivität	bzgl.
70	5	0.5	0.05	3.9315			
	5.1	0.5	0.05	3.9912	0.0597	0.5809	B
	5	0.6	0.05	4.0935	0.1620	1.8670	N_0
	5	0.5	0.15	4.9988	1.0673	58.8110	r
0.5	5	0.5	0.05	0.5114			
	5.1	0.5	0.05	0.5114	3.E-05	0.0099	B
	5	0.6	0.05	0.6133	0.1019	1.0201	N_0
	5	0.5	0.15	0.5348	0.0234	0.2295	r

Tabelle 3.1: Änderungen der Zustandsfunktion $x(t)$ in Problem (B) für die Zeiten $t = 70 \gg 1$ und $t = 0.5 < 1$ bei jeweils gleicher Auslenkung $\Delta P_i = 0.1$ sukzessive im Vergleich.

Einfacher ist die Betrachtung der Sensitivitäten in **Problem (C)**. Für das in A lineare x_1 ist die Abweichung bei Störung um ΔA

$$x_1(t, A + \Delta A) - x_1(t, A) = \Delta A e^{Ct} = \Delta A \cdot \frac{\partial x_1}{\partial A}(t, P),$$

ZF	ZF-Wert	$\ f(P_i + \Delta) - f(P)\ $	normierte Sensitivität
$f(P)$	0.9818		
$f(A + \Delta)$	0.9647	0.0171	1.7349
$f(B + \Delta)$	0.9942	0.0124	1.2190
$f(C + \Delta)$	3.0476	2.0658	1.4315E02
$f(D + \Delta)$	0.5684	0.4134	52.4178

Tabelle 3.2: Änderung von $f(P)$ für Problem (C) mit der Euklidischen Norm und $\Delta = 0.01$, sowie numerisch bestimmte Sensitivität.

analog für B . Bezüglich C verhält sich die Funktion wie im Problem (A)

$$x_1(t, C + \Delta C) - x_1(t, C) = Ae^{Ct}(e^{\Delta Ct} - 1),$$

analog für D . Die Faktoren für x_2 können durch ebensolchen Ansatz bestimmt werden. Numerische Ergebnisse sind in Tab. A.3 im Anhang dargestellt.

In **Problem (D)** ist die analytische Lösung nicht bekannt. Wir haben

$$h(x(t), P) = \begin{pmatrix} -P_1(e_0 - X_{10} + x_1(t) + x_2(t))x_1(t) + P_3(X_{10} - x_1(t) - x_2(t)) \\ P_2(X_{10} - x_1(t) - x_2(t)) \end{pmatrix}. \quad (3.10)$$

Die Sensitivitäten werden hier ausschließlich für die Zielfunktion numerisch bestimmt. Tab. A.4 im Anhang zeigt die Ergebnisse bei Störungen in den Parametern P_1 , P_2 und P_3 .

Die Zustandsfunktionen der Probleme (A)-(D) sind sensitiv in den Parametern. Die Konsequenzen für die Lösbarkeit der Aufgabenstellungen beschreibt der nächste Abschnitt.

3.3.2 Die Zielfunktion

Aus der Sensitivität der Zustandsfunktionen folgt die Sensitivität der Zielfunktionen, wenn die Zustände an den Zeitpunkten t_i ausgewertet werden, für die sie sensitiv in den Parametern reagieren. Die Untersuchung der Veränderung der Zielfunktionen bei Auslenkung in den Parametern erfolgte hier nur noch numerisch durch die Approximation

$$\frac{\partial f}{\partial P_i} = \frac{f(P_i + \Delta P_i) - f(P)}{\Delta P_i} \quad \text{mit } \Delta P_i = P_i \sqrt{\epsilon},$$

wobei ϵ die Maschinengenauigkeit ist. Exemplarisch seien hier in Tab. 3.2 nur die Ergebnisse für Problem (C) dargestellt. Die Tabellen mit den einzelnen Abweichungen für Problem (A), (B) und (D) findet der Leser im Anhang, vgl. Tab. A.1, A.2 und A.4. Dabei konnten keine Unterschiede in der Verwendung der drei Normen, Euklidische Norm, Tschebyschev- und Betragssummennorm festgestellt werden. Alle in der Arbeit betrachteten Problemstellungen sind sensitiv in ihren Parametern. Die Bestimmbarkeit der unbekannt Parameter ist damit theoretisch gewährleistet.

3.4 Steife Differentialgleichungen

Bei der Untersuchung von Problemen aus Naturwissenschaft und Technik treten in der Praxis häufig steife Differentialgleichungen auf. Diese ODEs beschreiben Probleme, die zumeist aus sehr unterschiedlichen Komponenten bestehen. Die Definition dieser Probleme ist schwierig und wird in vielen Lehrbüchern unterschiedlich dargestellt. Es heben sich jedoch einige Aussagen deutlich hervor.

Steife Differentialgleichungen werden durch das Verhalten ihrer Lösungen gekennzeichnet, die sich aus sehr unterschiedlichen Anteilen zusammensetzen. Gut ersichtlich ist das bei linearen Differentialgleichungssystemen

$$\dot{x}(t) = \mathfrak{A}x(t), \quad \mathfrak{A} \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

deren Lösung sich als Linearkombination aus Termen der Form $\eta \exp(\xi t)$ zusammensetzt, wobei ξ ein Eigenwert der Jacobi-Matrix ist. Sind die Eigenwerte negativ und im Betrag sehr unterschiedlich, so strebt ein Term sehr viel schneller gegen Null als der andere.

Des Weiteren teilt sich die Zeitachse bei den Lösungen der ODEs in einen schnell veränderlichen Zeitabschnitt, die transiente Phase, und einen sich sehr langsam ändernden längeren Abschnitt.

Zunächst will ich aber eine formale Definition für die Eigenschaft Steifheit bei linearen Differentialgleichungen aus [HRS97] geben.

Definition 3.8. *Gegeben sei ein lineares autonomes Differentialgleichungssystem*

$$\dot{x}(t) = \mathfrak{A} \cdot x(t).$$

Das Differentialgleichungssystem heißt steif, wenn die negativen Realteile der Eigenwerte der Matrix \mathfrak{A} betragsmäßig sehr unterschiedlich sind. Als Maß der Steifheit des Systems eignet sich somit der Quotient des betragsmäßig größten negativen Realteils der Eigenwerte ξ_i und des betragsmäßig kleinsten negativen Realteils der Eigenwerte ξ_j ,

$$\mu = \frac{|\xi_i|}{|\xi_j|}. \quad (3.11)$$

μ wird Steifigkeitsquotient genannt.

In unserer Aufgabenstellung befassen wir uns ausschließlich mit autonomen Differentialgleichungen, bei denen die Matrix \mathfrak{A} von den zu bestimmenden Parametern abhängt, $\mathfrak{A}(P) \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

In einer für uns nützlichen Variante definieren wir also:

Definition 3.9. *Das lineare parameterabhängige Differentialgleichungssystem $\dot{x}(t) = \mathfrak{A}(P)x(t)$ heißt steif für die Parameterkonstellation \bar{P} , wenn die negativen Eigenwerte der Matrix $\mathfrak{A}(\bar{P})$ sehr unterschiedlich sind.*

Beispiel 3.10. *Wir betrachten Problem (C) mit dem Parametertupel $(A, B, C, D) = (3, 3, -1, -100)$. Das Differentialgleichungssystem lautet*

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -100 & -101 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ -303 \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

t	0	0.01	0.1	1
$x_1(t)$	6	4.0737	2.7146	1.1036
$3 \cdot \exp(-t)$	3	2.9701	2.7145	1.1036
$3 \cdot \exp(-100t)$	3	1.1036	$1.3620e - 04$	$1.1160e - 43$

Tabelle 3.3: Erster und zweiter Summand der Komponente $x_1(t)$ der Zustandsfunktion aus Bsp. 3.10.

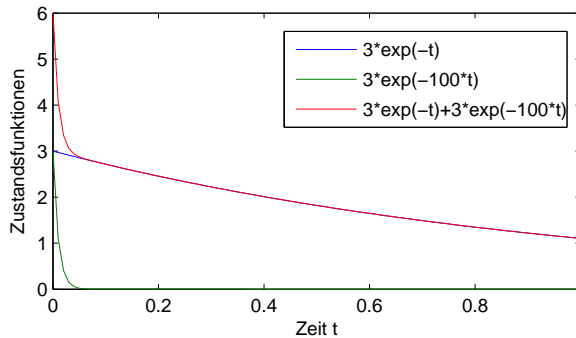


Abbildung 3.2: Zu sehen sind der oben beschriebene schnell veränderliche Abschnitt bis $t < 0.1$ und ein langsamer veränderlicher Abschnitt ab $t = 0.1$ für die Lösung (3.13) der steifen ODE (3.12).

Die Matrix \mathfrak{A} hat die beiden negativen Eigenwerte -1 und -100 . Der Steifigkeitsquotient der Matrix für diese Parameterkonstellation ist sehr groß, nämlich $\mu = 100$. Die Differentialgleichung ist für die Parameter $(A, B, C, D) = (3, 3, -1, -100)$ steif. In der Lösung der Differentialgleichung

$$x_1(t) = 3 \exp(-t) + 3 \exp(-100t) \quad (3.13)$$

$$x_2(t) = -3 \exp(-t) - 300 \exp(-100t) \quad (3.14)$$

findet sich das oben beschriebene Verhalten wieder, dass sich die Lösung aus sehr unterschiedlichen Teilen zusammensetzt, vgl. dazu Tab. 3.3. Die beiden Komponenten der Zustandsvariablen $x_1(t)$ ändern sich sehr unterschiedlich schnell. Während $3 \cdot \exp(-t)$ nur langsam abfällt, trägt $3 \cdot \exp(-100t)$ schon für $t = 0.1$ nichts mehr wesentlich zur Summe von $x_1(t)$ bei. In Abb. 3.2 sind die aktive und transiente Phase ersichtlich.

Dass das Differentialgleichungssystem jedoch nicht für alle Parametertupel steif ist, zeigt Abb. 3.3 für die Parameter $(3, 2, -1, -2)$ und das resultierende

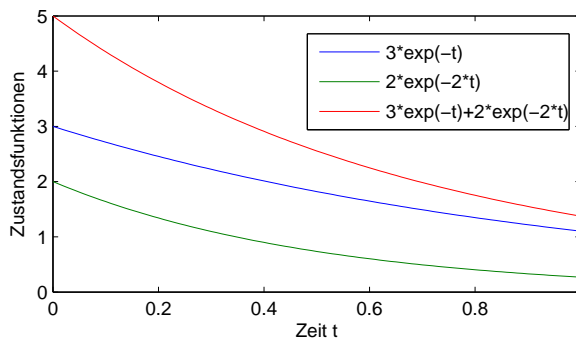


Abbildung 3.3: Bei der Lösung (3.16) der nicht-steifen ODE (3.15) ist kein schnell veränderlicher Abschnitt auszumachen.

Differentialgleichungssystem

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -2 & -3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -7 \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

mit der Lösung

$$x_1(t) = 3 \exp(-t) + 2 \exp(-2t), \quad (3.16)$$

$$x_2(t) = -3 \exp(-t) - 4 \exp(-2t). \quad (3.17)$$

In nichtlinearen ODE-Systemen versucht man, die Steifheit mit Hilfe einer Linearisierung zu erfassen und betrachtet die Approximation

$$\dot{x} = h(\bar{x} + \Delta x, P) \approx h(x, P) + \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) (x, P) \Delta x \quad (3.18)$$

mit $\left(\frac{\partial h}{\partial x} \right) \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Gl. (3.18) kann als neue in Δx lineare ODE mit Inhomogenität $h(x, P)$ aufgefasst werden. Somit ist Def. 3.9 anwendbar mit $\mathfrak{A}(P) = \left(\frac{\partial h_i}{\partial x_j} \right)$ und $i, j = 1, \dots, n$. Für in den Zuständen nichtlineare Systeme wie in Problem (D) definieren wir also analog:

Definition 3.11. Ein System wird an einer Stelle (\bar{x}, \bar{P}) steif genannt, wenn die Jacobi-Matrix $J = \frac{\partial h}{\partial x}(\bar{x}, \bar{P})$ Realteile ξ_1, \dots, ξ_k , $k \leq n$, negativer Eigenwerte besitzt, so dass

$$\max_{1 \leq i \leq k} |\xi_i| \gg \min_{1 \leq i \leq k} |\xi_i|. \quad (3.19)$$

Parameter	$P = (1000, 8000, 28000)$	$P = (5500, 1000, 23000)$
α	-3.6486E04	-2.6671E04
β	1.3312E09	7.1132E08
ξ_1	-0.0156E00	-0.0146E00
ξ_2	-7.2971E04	-5.3341E04

Tabelle 3.4: Eigenwerte von Problem (D) für zwei verschiedene Parameterkonstellationen P bei $t = 0$.

Nach Def. 3.11 ist Problem (D) für bestimmte Parameterkonstellationen P und gewisse Zeitpunkte t steif, wie aus Tab. 3.4 entnommen werden kann. Dort wurden die Eigenwerte der Jacobi-Matrix für die in [Schr06] ermittelten Parameterquadrupel und den Zeitpunkt $t = 0$ berechnet. Es ist

$$J(x, P) = \begin{pmatrix} -P_1(e_0 - X_{10} + 2x_1(t) + x_2(t)) - P_3 & -P_1x_1(t) - P_3 \\ -P_2 & -P_2 \end{pmatrix}. \quad (3.20)$$

Die Eigenwerte von (3.20) an der Stelle $t = 0$, d.h. $(x_1(0), x_2(0)) = (X_{10}, 0)$ sind

$$\xi_{1,2} = \frac{1}{2}(\alpha \pm \sqrt{\beta})$$

mit

$$\alpha = -P_1(X_{10} + e_0) - P_2 - P_3 \quad (3.21)$$

$$\beta = (P_1(X_{10} + e_0) + P_2 + P_3)^2 - 4P_1P_2e_0. \quad (3.22)$$

Aus den betragsmäßig sehr unterschiedlichen negativen Eigenwerten der Jacobi-Matrix von Problem (D) zum Zeitpunkt $t = 0$ kann auf Steifheit des Problems geschlossen werden.

Wie unzureichend die oberen Definitionen 3.8 und 3.9 sind, zeigt die Anwendung auf Problem (C). Die ODE des physikalisch-optischen Problems in Abschnitt 2.3 ist linear in den Zuständen. Allerdings ist die dem numerischen Verhalten nach zu urteilen steife ODE für die Parameterkonstellation

$$A = -7 \quad (3.23)$$

$$B = 4 \quad (3.24)$$

$$C = -0.2 \quad (3.25)$$

$$D = -0.7 \quad (3.26)$$

nach obiger Definition nicht steif. Die Zustandsfunktionen $x_1(t)$ und $x_2(t)$ zeigen den in Abb. 3.4 dargestellten Verlauf. Nach Konstruktion der ODE sind $C = -0.2$ und $D = -0.7$ die Eigenwerte der Matrix A . Ihr Quotient hat den Wert $\mu = 3.5$. Nach Def. 3.8 und 3.9 ist die ODE nicht steif, zeigt jedoch den geschilderten Charakter einer schnell veränderlichen, transienten Phase und daran anschließend einen langsam veränderlichen Abschnitt. Die in einigen

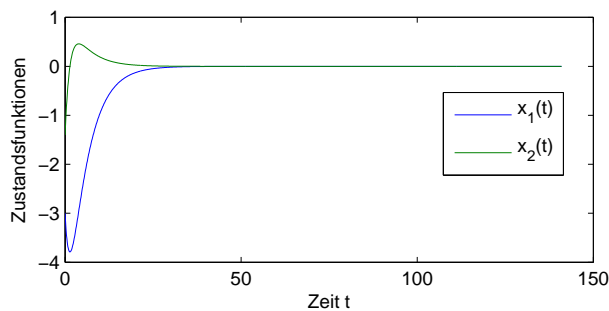


Abbildung 3.4: Bei der Lsg. des Problems (C) für die Parameter (3.23)-(3.26) ist ein schnell veränderlicher Abschnitt ersichtlich, welcher steife ODEs charakterisiert.

Lehrbüchern verwendete Def. 3.8 ist also genau genommen nicht ausreichend zur Charakterisierung steifer Differentialgleichungssysteme und Anfangswertprobleme. Es gibt Beispiele, deren Steifheit nicht auf einem betragsmäßig großen Eigenwert beruht, sondern auf einem extrem langen Integrationsintervall, vgl. [HW96], Seite 151. Dies trifft auch für unser Problem (C) zu, wie der vergrößerte Ausschnitt 3.5 von Abb. 3.4 zeigt.

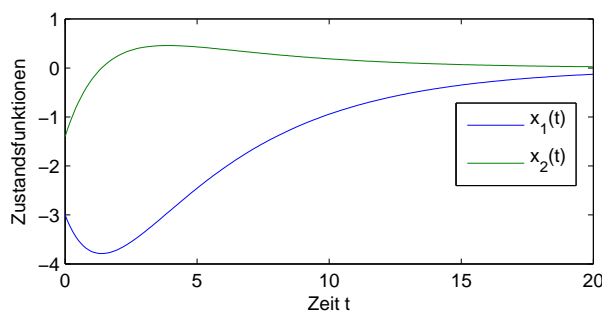


Abbildung 3.5: Bei der Lsg. des Problems (C) für die Parameter (3.23)-(3.26) ist ein schnell veränderlicher Abschnitt nicht ersichtlich, wenn die Integration der ODE lediglich über ein sehr kleines Intervall erfolgt.

Wir haben gesehen, dass für unterschiedliche Parameterkonstellationen ein

Problem mehr oder weniger steif sein kann. Ein Differentialgleichungssystem ist nicht per se steif. Es hängt bei unseren Anforderungen maßgeblich von der Parameterzusammenstellung ab. Die Parameterwahl ist im Vorfeld der Aufgabenstellung jedoch nicht immer ersichtlich. Es ist angebracht, numerische Differentialgleichungslöser für steife Differentialgleichungen zu verwenden. Diese sogenannten steifen Integratoren werden deshalb im nächsten Abschnitt eingehender betrachtet.

3.4.1 Integratoren

Die Eigenschaft der Steifheit von Differentialgleichungen wirkt sich auf das Verhalten der Zustandsgleichung bei der numerischen Lösung aus. Explizite Integrationsverfahren müssen hier in den schnell veränderlichen Phasen mit sehr kleinen Schrittweiten arbeiten, um die geforderte Genauigkeit zu erfüllen. Die aufwendigeren impliziten Verfahren können hier von Vorteil sein, wenn sie eine Schrittweitensteuerung umsetzen. In schnell veränderlichen Phasen werden kleine Schrittweiten, in sich nur langsam ändernden Phasen größere Schrittweiten zugelassen.

Steife Probleme sind also besser mit aufwendigeren impliziten Verfahren zu lösen, in denen die Schrittweite steuerbar ist. Die Schrittweite wird dann je nach Steifheit der Differentialgleichung in einer Umgebung klein oder etwas größer gewählt. Dazu ist eine Detektion der Steifheit erforderlich. Zwei Verfahren bieten sich dazu an. Zum einen kann das Produkt aus der Schrittweite und dem dominantesten Eigenwert und seine Nähe zum Stabilitätsbereich eines Verfahrens Aufschluss geben. Zum anderen ist eine direkte Schätzung der Eigenwerte der Jacobi-Matrix des Systems nützlich.

In den MATLAB-Programmen werden die steifen Integratoren `ode15s` und `ode23tb` verwendet. `ode15s` verwendet Formeln variabler Ordnung aus den numerischen Differentiationsformeln, wahlweise aus BDF, und erfüllt hohe Genauigkeitsanforderungen. In `ode23tb` ist hingegen ein implizites Runge-Kutta-Verfahren umgesetzt worden. Hat man geringere Genauigkeitsanforderungen ist es effizienter als `ode15s`. Bei hohen Genauigkeitsanforderungen ist es jedoch ungeeignet, vgl. [MAT].

Kapitel 4

Parameterbestimmung mittels Lösung von Gleichungssystemen und linearer Optimierungsaufgaben

Dieses Kapitel untersucht die Möglichkeit, die Aufgabenstellung mit Euklidischer, Betragssummen- und Tschebyschev-Norm mittels Lösung von Gleichungssystemen und Optimierungsaufgaben anzugehen. Dabei erfolgt im ersten Abschnitt die Anwendung von Normalgleichungen auf Probleme, die durch Linearisierung von in Parametern nichtlinearen Zustandsfunktionen entstehen. Im zweiten Abschnitt wird die Umsetzung der Tschebyschev- und Betragssummennorm als lineare Optimierungsaufgabe betrachtet. Abschließend wird die in der Arbeit verfolgte Strategie zur Bestimmung von Startparametern erklärt.

4.1 Aufgaben mit Euklidischer Norm

Eine in der Anwendung einfache Herangehensweise zur Parameterbestimmung in Problemen mit in den unbekannt Parametern linearen Funktionen ist die Berechnung mittels Normalgleichungen. Bei dieser Form der Ausgleichsrechnung wird aus der Forderung, dass die Funktionswerte $x(t_i)$ mit den Messwerten m_i zu den Zeitpunkten t_i übereinstimmen durch Multiplikation mit der transponierten Matrix ein lineares Gleichungssystem erzeugt. Diese auch als Methode der kleinsten Quadrate bekannte Methode soll im Folgenden auch auf die in Parametern nichtlinearen Funktionen angewandt werden. Dazu gehen wir wie folgt vor:

Wir linearisieren die Zustandsfunktion $x(t)$ durch Taylorapproximation er-

ster Ordnung

$$x(t; P) \approx \tilde{x}(t; P) := x(t; P^0) + \frac{\partial x}{\partial P_1}(t; P^0)(P_1 - P_1^0) + \dots + \frac{\partial x}{\partial P_K}(t; P^0)(P_K - P_K^0) \quad (4.1)$$

im Parameter P um einen festen Parameterstartpunkt P^0 . Man erhält die Optimierungsaufgabe: Minimiere

$$f^0(P) = \|(x(t_i; P^0) - m_i + \sum_{j=1}^K \frac{\partial x}{\partial P_j}(t_i; P^0)(P_j - P_j^0))_{i=1, \dots, M}\|_2^2. \quad (4.2)$$

Im Fall der Euklidischen Norm handelt es sich um die näherungsweise Ausgleichsaufgabe der Form

$$\min_P \|\mathcal{A} \Delta P - b\|_2^2,$$

mit

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial P_1}(t_1; P^0) & \dots & \frac{\partial x}{\partial P_K}(t_1; P^0) \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial x}{\partial P_1}(t_M; P^0) & \dots & \frac{\partial x}{\partial P_K}(t_M; P^0) \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} m_1 - x(t_1; P) \\ \vdots \\ m_M - x(t_M; P) \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

und

$$\Delta P = (P_1 - P_1^0, \dots, P_K - P_K^0)^T. \quad (4.4)$$

Sie kann bekanntermaßen mit Hilfe der Normalengleichungen

$$\mathcal{A}^T \mathcal{A} \Delta P = \mathcal{A}^T b \quad (4.5)$$

gelöst werden.

Satz 4.1. *Das lineare Ausgleichsproblem*

$$\min_P \|\mathcal{A} \Delta P - b\|_2$$

besitzt mindestens eine Lösung ΔP^* . Das Residuum $r := \mathcal{A} \Delta P^* - b$ ist eindeutig bestimmt und genügt der Gleichung $\mathcal{A}^T r = 0$. Jede Lösung ΔP^* ist auch Lösung der Normalengleichungen und umgekehrt.

Beweis. Den Beweis dieser bekannten Aussage findet man zum Beispiel in [St05]. \square

Aus der Lösung ΔP wird dann die nächste Näherung $P^1 = P^0 + \Delta P$ bestimmt, um die eine neue Taylorapproximation durchgeführt wird. Dabei ist die Matrix \mathcal{A} in jeder Iteration ι mit P^ι neu zu berechnen.

Der Algorithmus ist wie folgt:

Algorithmus 4.2. *Iteratives Lineares Ausgleichsproblem*

- (i) Ermittle gute Startnäherung P^0 .
- (ii) Solange Abbruchkriterium nicht erfüllt ist:

- (a) Löse die Normalgleichungen $\mathcal{A}^T \mathcal{A} \Delta P = \mathcal{A}^T b$.
 (b) Bestimme neue Näherung $P^{\nu+1} = P^\nu + \Delta P$.
 (c) Setze $P^\nu = P^{\nu+1}$. Gehe zu (ii).

Als Abbruchbedingung im Alg. 4.2 dienen die nachstehenden Bedingungen:

- $\|P^{\nu+1} - P^\nu\| \leq \varepsilon_P$. Die normierte Änderung in den Parametern muss einem Mindestwert entsprechen.
- $i \leq \text{MaxIt}$. Dabei handelt es sich um die Angabe einer maximalen Iterationszahl.
- $\|\mathcal{A} \Delta P - b\| < \varepsilon_F$. Ein hinreichend guter Parametervektor wurde gefunden.

Die Darstellung der Normalgleichungen wird etwas umfassender bei Berücksichtigung von $x(t_i; P) \in \mathbb{R}^n$ in Aufgabe (0). Für $n = 1$ ist \mathcal{A} bereits eine Matrix, vgl. (4.3). Für $n > 1$ ist \mathcal{A} ein Tensor der Dimension $n \times M \times K$, b eine Matrix $n \times M$. Sei für $n > 1$ die Funktion $\varphi(\xi_1, \dots, \xi_M)$ für $\xi_i \geq 0$ $i = 1, \dots, M$, reell mit

$$\varphi(\xi_1, \dots, \xi_M) > 0 \quad \text{für} \quad \xi_1 + \dots + \xi_M > 0, \quad (4.6)$$

$$\varphi(\xi_1, \dots, \xi_M) = 0 \quad \text{für} \quad \xi_1 = \dots = \xi_M = 0. \quad (4.7)$$

Für die Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ im \mathbb{R}^n gelte

$$\varphi(\xi_1, \dots, \xi_M) = \sum_{j=1}^M \xi_j^2, \quad \|\chi\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n \chi_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad \forall \chi \in \mathbb{R}^n. \quad (4.8)$$

Das gesuchte P^* ist Lösung der Optimierungsaufgabe: Minimiere über P

$$\varphi(\|x(t_1, P) - m_1\|_2, \dots, \|x(t_M, P) - m_M\|_2). \quad (4.9)$$

Die Methode der kleinsten Quadrate (4.8) kann im Falle einer bezüglich P affinen Funktion

$$x(t; P) = g_0(t) + G(t) \cdot P \quad (4.10)$$

praktisch gelöst werden, indem man die notwendige Bedingung eines Extremums benutzt, dass die erste Ableitung der Funktion φ in P verschwinden muss.

$$\varphi(\xi_1, \dots, \xi_M) = \sum_{i=1}^n (x_i(t_1, P) - m_{i1})^2 + \dots + \sum_{i=1}^n (x_i(t_M, P) - m_{iM})^2 \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial P_i} \stackrel{!}{=} 0 \quad \text{für} \quad i = 1, \dots, K \quad (4.12)$$

Falls $x(t, P)$ bezüglich P nicht affin ist, kann man ein Quasi-Newton-Verfahren anwenden. Sei P^0 irgendeine bekannte Näherung. Unter günstigen Umständen gilt (4.1) mit $\|P - P^0\| \ll 1$ und führt wie oben zur näherungsweise Ausgleichsaufgabe: Minimiere über P

$$\varphi(\|\tilde{x}(t_1, P) - m_1\|_2, \dots, \|\tilde{x}(t_M, P) - m_M\|_2)$$

mit zugehöriger Minimumstelle P^* . Wir führen die folgende verkürzte Schreibweise ein:

$$\tilde{x}(t_j; P) - m_j = x(t_j; P^0) - m_j + \frac{\partial x}{\partial P}(t_j; P) \Delta P =: X_j + G(t_j) \Delta P \quad (4.13)$$

$$= \begin{pmatrix} \vdots \\ X_{ij} \\ \vdots \end{pmatrix} + (G_{ik}(t_j)) \cdot \begin{pmatrix} \vdots \\ \Delta P_k \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (4.14)$$

Die Ermittlung von P^* beziehungsweise $\Delta P = P^* - P^0$ erfolgt im Fall von (4.8)

$$\min_{\Delta P} \phi(\Delta P) := \sum_{j=1}^M \|X_j + G(t_j) \cdot \Delta P\|_2^2$$

wie folgt: Sei h ein beliebiger Vektor (wie ΔP), ϵ eine reelle Zahl. Dann gilt für eine Minimumstelle von ϕ

$$\phi(\Delta P) \leq \phi(\Delta P + \epsilon \cdot h) \quad \forall \epsilon, \forall h$$

Daher ist für alle ϵ und alle h

$$\begin{aligned} \frac{d\phi(\Delta P + \epsilon \cdot h)}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} &= 2 \cdot \sum_j (G(t_j) \cdot h, X_j + G(t_j) \cdot \Delta P) \\ &= (h, \sum_j G^T(t_j) \cdot (X_j + G(t_j) \cdot \Delta P)) = 0 \\ &\Rightarrow \sum_j (G(t_j) \cdot h, X_j + G(t_j) \cdot \Delta P) = 0 \quad \forall h \\ &\Rightarrow \sum_j G^T(t_j) (X_j + G(t_j) \cdot \Delta P) = 0 \\ &\Rightarrow \left(\sum_j G^T(t_j) G(t_j) \right) \cdot \Delta P = \sum_j G^T(t_j) \cdot X_j. \end{aligned}$$

Satz 4.1 erlaubt eine Iteration wie in Algorithmus 4.2.

Der Algorithmus hat den Nachteil, dass er nur für im Sinne der Taylorapproximation gute Startnäherungen die Lösung P^* approximiert. Diese sind jedoch nicht immer gegeben. Ein erster Startparametervektor P_0 kann durch Lösung eines Gleichungssystems ermittelt werden, welches aus K Gleichungen mit eingesetzten Messstellen und deren Messwerten besteht

$$\begin{aligned} x(t_{i_1}, P) &= m_{i_1}, \\ &\vdots \\ x(t_{i_K}, P) &= m_{i_K}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

mit $i_j \in \{1, \dots, M\}$. Wir werden auf die Ermittlung von Startnäherungen in Abschn. 4.3 noch im Detail eingehen. Numerische Ergebnisse dieser Anwendung findet man in Abschn. 4.4

Der Algorithmus ist in dieser Form nicht für die Betragssummen- und Tschebyschev-Norm anwendbar. Ein Verfahren, welches auch diese beiden Normen zulässt, wird im nächsten Abschnitt beschrieben.

4.2 Tschebyschev- und Betragssummennorm mittels Optimierung

Seien $\varphi, \|\cdot\|$ jeweils für Tschebyschev- und Betragssummennorm

$$\varphi(\xi_1, \dots, \xi_M) = \max_{j=1, \dots, M} \xi_j, \quad \|\chi\| = \max_{i=1, \dots, n} |\chi_i|, \quad (4.16)$$

$$\varphi(\xi_1, \dots, \xi_M) = \sum_{j=1}^M \xi_j, \quad \|\chi\| = \sum_{i=1}^n |\chi_i|. \quad (4.17)$$

(4.16) und (4.17) führen unter gleichen Bedingungen wie in (4.12), den notwendigen Optimalitätsbedingungen erster Ordnung, zu linearen Optimierungsaufgaben.

Die Verwendung der Tschebyschev-Norm liefert die Optimierungsaufgabe

$$\min_{\Delta P} \phi(\Delta P) := \max_{j=1, \dots, M} \max_{i=1, \dots, n} \left| X_{ij} - \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k \right|. \quad (4.18)$$

Sei ΔP_0 eine obere Schranke für die $|X_{ij} - \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k|$, also auch für $\pm(X_{ij} - \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k)$. Diese obere Schranke zu minimieren, bedeutet (4.18) zu minimieren. Die Aufgabe lautet:

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & \bar{\phi}(\Delta P_0, \Delta P_1, \dots, \Delta P_K) &= \Delta P_0 & (4.19) \\ \text{u. d. N.} \quad & \Delta P_0 &+ \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k &\geq X_{ij} \\ & \Delta P_0 &- \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k &\geq -X_{ij} \\ & & \forall i = 1, \dots, n, \forall j = 1, \dots, M. & \end{aligned}$$

Wenn $(\Delta P_0, \Delta P_1, \dots, \Delta P_K)$ eine Lösung von (4.19) ist, ist $\Delta P = (\Delta P_1, \dots, \Delta P_K)$ die Minimumstelle von ϕ und P_0 der Minimalwert. Wie vorher ist dann $P^* = P^0 + \Delta P$ die Lösung der näherungsweise Ausgleichsaufgabe.

Für die l_1 -Norm ergibt sich folgendes: Die linearisierte Optimierungsaufgabe

$$\min_{\Delta P} \phi(\Delta P) := \sum_{j=1}^M \sum_{i=1}^n |X_{ij} - \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k| \quad (4.20)$$

führt bei Einführung von M zusätzlichen Variablen $\Delta P_{01}, \dots, \Delta P_{0M}$, welche obere Schranken für $|X_{ij} - \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k|$ bilden, ebenfalls zu einer neuen Optimierungsaufgabe mit zusätzlichen Parametern und zusätzlichen Ungleichungsnebenbedingungen. Gelte für alle $j = 1, \dots, M$,

$$\Delta P_{0j} \geq |X_{ij} - \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k|, \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (4.21)$$

was gleichbedeutend ist mit

$$\Delta P_{0j} + \sum_{k=1}^K G_{ik} \cdot \Delta P_k \geq X_{ij}, \quad (4.22)$$

$$\Delta P_{0j} - \sum_{k=1}^K G_{ik} \cdot \Delta P_k \geq -X_{ij}, \quad \forall i = 1, \dots, n, \quad (4.23)$$

so ist

$$n\Delta P_{0j} \geq \sum_{i=1}^n |X_{ij} - \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k|. \quad (4.24)$$

Die ursprüngliche Optimierungsaufgabe (4.20) kann also ersetzt werden durch:

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & \bar{\phi}(\Delta P_{01}, \dots, \Delta P_{0M}, \Delta P_1, \dots, \Delta P_K) = \sum_{j=1}^M n\Delta P_{0j} \quad (4.25) \\ \text{u. d. N.} \quad & \Delta P_{0j} + \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k \geq X_{ij} \\ & \Delta P_{0j} - \sum_{k=1}^K G_{ik}(t_j) \cdot \Delta P_k \geq -X_{ij} \\ & \forall i = 1, \dots, n, \forall j = 1, \dots, M, \end{aligned}$$

wobei der Faktor n in der Zielfunktion weggelassen werden kann.

Wenn $(\Delta P_{01}, \dots, \Delta P_{0M}, \Delta P_1, \dots, \Delta P_K)$ eine Lösung von (4.25) ist, ist $\Delta P = (\Delta P_1, \dots, \Delta P_K)$ die Minimumstelle von ϕ und $\sum_{j=1}^M P_{0j}$ der Minimalwert. Wie vorher ist dann $P^* = P^0 + \Delta P$ die Lösung der näherungsweise Ausgleichsaufgabe.

Der Aufwand zur Lösung der Optimierungsprobleme für die l_∞ - und die l_1 -Norm in einem Iterationsschritt kann anhand der zu lösenden Anfangswertprobleme abgeschätzt werden. Dabei sind in jedem Optimierungsschritt für $n = 1$ bei der Tschebyschev-Norm $(K+1)\frac{(K+2)}{2}$, und bei der Betragssummennorm $K+1$ Anfangswertprobleme zu lösen, um die partiellen Ableitungen $\frac{\partial x}{\partial P_k}$ für $k = 1, \dots, K$, bereitzustellen, vgl. [ScSc07]. Dieser Aufwand erhöht sich bei $n > 1$ um den Faktor n , da es sich in diesem Fall bei den Anfangswertproblemen um ODE-Systeme handelt.

4.3 Zur Wahl des Parameterstartwertes

Zur Lösung der Aufgabe (0) wurden in den vorhergehenden Kapiteln bereits zwei Algorithmen besprochen. Diese Methoden benötigen einen möglichst guten Parameterstartwert. Nur wenn der Startwert nahe genug an der Lösung ist, konvergieren die numerischen Verfahren. In [Schr06] wurde zur Ermittlung eines Startparameters auf einer Gitterstruktur nach geeigneten Parametervektoren gesucht. Eine andere Variante ist die Wahl einer Anzahl von Messwerten mittels Ausdünnen. Mit Hilfe der Messwerte wird ein Parameterstartwert durch Lösung des anschließend aufgestellten Gleichungssystems erzeugt.

4.3.1 Suche in Gitterstrukturen

Einem Muster folgend werden verschiedene Parametertupel gewählt und hinsichtlich des Wertes ihrer Zielfunktion untersucht. Dies kann entweder geordnet nach einer festen Struktur, zumeist in einem Gitter, oder durch Generierung von Zufallszahlen erreicht werden. Besonders im Fall von wenigen Parametern kann man sich so schnell einen Überblick über geeignete Startwerte verschaffen.

Die Suche nach einem Startparametertupel ist im Fall von Problemen mit nur zwei Parametern sehr übersichtlich, da es sich anschaulich um die Kontur der Zielfunktion im \mathbb{R}^3 handelt. Ausgehend von einer Anzahl von Parametertupeln mit niedrigem Funktionswert werden anschließend weitere numerische Optimierungsverfahren angewendet. Im Fall von mehr als zwei Parametern und je nach Feinheit des Gitters kann die Anzahl der Rechnungen aber explosionsartig ansteigen. Beispielsweise sind im enzymkinetischen Modell nur 3 Parameter, die Reaktionskonstanten P_1 , P_2 und P_3 , zu bestimmen. Läßt man aber pro Parameter 1000 Parameterpunkte zu, so hat man bereits für 10^9 Gitterpunkte beziehungsweise Parametertripel die Differentialgleichung zu lösen und die Abweichung zu den Messwerten zu bestimmen. Für Probleme mit großer Parameteranzahl sowie kleiner Gitterweiten empfiehlt sich daher die Verwendung von Parallelrechnern.

4.3.2 Ausdünnen

Wir betrachten zunächst den Fall, dass $x(t)$ als Funktion, und nicht in Form einer Differentialgleichung, vorliegt. Die Anzahl der zu approximierenden Parameter sei K , d. h. $P = (P_1, \dots, P_K)$. Es können dann K Messzeiten mit zugehörigen Messwerten in die gegebene Gleichung eingesetzt werden. Die Lösung $\tilde{P} = (\tilde{P}_1, \dots, \tilde{P}_K)$ des so entstandenen Gleichungssystems

$$\begin{aligned} x(t_{i_1}, P) &= m_{i_1} \\ &\vdots \\ x(t_{i_K}, P) &= m_{i_K} \quad i_j \in \{1, \dots, M\}, \forall j = 1, \dots, K \end{aligned}$$

soll dann als Startparametertupel dienen. Im Allgemeinen gilt jedoch $M \gg K$, es sind viel mehr Messpunkte als Parameter gegeben, und es ist zu überdenken, wie man die Messpunkte geschickt wählt, um die Lösbarkeit des Gleichungssystems zu gewährleisten, sowie eine gute Startnäherung der Parameter zu erhalten. Das nicht in jedem Fall eine brauchbare Anfangsnäherung erhalten wird, zeigt das folgende Beispiel:

Beispiel 4.3. *Wir betrachten das Problem (B) in Abhängigkeit von drei Parametern und wählen zur Berechnung einer Startnäherung die ersten drei Messwerte*

Zeit t_i	14.4	16	28.8
Messwert m_i	1.2	1.02	1.68

Dann erhalten wir als Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems mittels

der MATLAB-Routine *fsolve* das Parametertripel

$$\begin{aligned} B &= 1.049809251722504, \\ N_0 &= -0.000020309069588, \\ r &= 0.693719839706546. \end{aligned}$$

Diese Lösung ist als Startparametertripel jedoch gänzlich ungeeignet, da eine negative Ausgangskonzentration von Hefe weder zulässig noch biologisch sinnvoll ist.

Die Wahl der K Messwerte trägt also entscheidend zum Erhalt einer guten Anfangsnäherung der Parameter bei. Die im folgenden Abschnitt kurz beschriebenen Ausdünnungsalgorithmen werden ausführlich in [Is01] und [Is02] behandelt.

Univariates Ausdünnen

Gegeben sei ein Intervall $[a, b]$ und eine Folge $T = (t_1, \dots, t_M)$ von Punkten in $[a, b]$ mit

$$a = t_1 < t_2 < \dots < t_M = b,$$

für die für eine unbekannte Funktion $x : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ Messwerte m_1, \dots, m_M gegeben sind. Wir nehmen an, es gelte $x(t_i) = m_i$ für $i = 1, \dots, M$. Für jedes n , $K \leq n < M$ suchen wir eine Teilmenge $S = (s_1, \dots, s_n)$ von T so, dass

$$a = t_1 = s_1 < s_2 < \dots < s_n = t_M = b,$$

und so, dass der stückweise lineare Interpolant $L(x, S)$ zu den Daten $\{(s, x(s)) : s \in S\}$ dicht zu den Daten $\{(t, x(t)) : t \in T\}$ ist in dem Sinne, dass der Fehler

$$E(S; T; m) = \max_{t_i \in T} |L(x, S)(t_i) - m_i|$$

relativ klein ist zu Fehlern korrespondierend zu anderen Teilmengen von T mit Kardinalität n . Der Autor nimmt davon Abstand, die Punkte t_1 und t_M zu entfernen, um zu gewährleisten, dass $E(S; T; m)$ wohldefiniert ist.

Definition 4.4. Ein Punkt $s_i \in S$, $1 < i < n$ ist *entfernbar*, wenn

$$e(s_i) = \min_{j=2, \dots, n-1} e(s_j).$$

Die Ausdünnung wird folgendermaßen umgesetzt:

Algorithmus 4.5. *Ausdünnung*

- (i) Setze $T_M = T$
- (ii) Für $i = M, M - 1, \dots, K + 1$: Ermittle einen entfernbaren Punkt t in T_i und setze $T_{i-1} = T_i \setminus t$.

Wir erhalten als Ergebnis eine hierarchische Folge von Teilmengen von T , maximal im Fall $K = 2$ bis zu

$$a, b = T_2 \subset T_3 \subset \dots \subset T_M = T.$$

In [Is01] werden verschiedene erwartete-Fehler-Maße vorgestellt, die unterschiedlich die Dichte der Punkte und die Werte an den unterschiedlichen Punkten für ihr Maß gewichten. Wir beschränken uns hier lediglich auf die drei folgenden Ansätze.

(i) Nicht-adaptives Ausdünnen

$$e(s_i, S) = (s_i - s_{i-1})(s_{i+1} - s_i).$$

Die Wegnahme eines Punktes beruht nur auf der Dichte der Punkte in S und ist unabhängig von den Messwerten m .

(ii) Adaptives Ausdünnen 2

$$e(s_i, S) = |L(x, \{s_{i-1}, s_{i+1}\})(s_i) - m_i|.$$

Der erwartete Fehler hängt vom Funktionswert ab. $L(x, S)$ ist die stückweise lineare Interpolierende zu den Daten $\{(s, x(s)) : s \in S\}$.

(iii) Adaptives Ausdünnen 1

$$e(s_i, S) = \max_{t_j \in [s_{i-1}, s_{i+1}] \cap T} |L(x, \{s_{i-1}, s_{i+1}\})(t_j) - m_j|.$$

Der erwartete Fehler berücksichtigt zusätzlich zu s_i bereits entfernte Punkte $t \in T, t \notin S$.

Es sollen noch zwei theoretische Aspekte beleuchtet werden:

Bemerkung 4.6. Für jedes $i \in 2, \dots, n-1$, und $t \in [s_{i-1}, s_{i+1}] \cap T$ ist der Fehler bei der linearen Interpolation zwischen s_{i-1} und s_{i+1} gegeben durch

$$L(x, \{s_{i-1}, s_{i+1}\})(t) - m(t) = (t - s_{i-1})(s_{i+1} - t)x[s_{i-1}, t, s_{i+1}],$$

wobei $x[a, b, c]$ den gewöhnlichen zweiten Differenzenquotienten der Funktion x auf der Abszisse a, b, c bezeichnet.

Satz 4.7. Ist x ein quadratisches Polynom, dann sind die adaptiven Algorithmen AT1 und AT2 nicht-adaptiv. Ein Punkt $s_i \in S$ ist genau dann entfernbar, wenn

$$\max_{t \in [s_{i+1}, s_{i-1}] \cap T} (t - s_{i-1})(s_{i+1} - t) = \min_{1 < j < n} \max_{t \in [s_{j+1}, s_{j-1}] \cap T} (s - t_{j-1})(t_{j+1} - s)$$

in AT1 gilt, und

$$(s_i - s_{i-1})(s_{i+1} - s_i) = \min_{1 < j < n} (s_j - s_{j-1})(s_{j+1} - s_j)$$

in AT2 ist.

Beweis: Der gewöhnliche zweite Differenzenquotient $x[a, b, c]$ ist für alle a, b, c eine Konstante. Die zu erwartenden Fehler $e(s_i)$ können nach Skalierung auf

$$\max_{t \in [s_{i+1}, s_{i-1}] \cap T} (t - s_{i-1})(s_{i+1} - t) \quad \text{und} \\ (s_i - s_{i-1})(s_{i+1} - s_i)$$

reduziert werden.

□

4.4 Ausgewählte numerische Ergebnisse

4.4.1 Ergebnisse Iterative Lineare Ausgleichsprobleme

In diesem Abschnitt sind Ergebnisse dargestellt, welche durch iteratives Lösen linearer Ausgleichsprobleme erhalten wurden. Es sei an die Argumentation erinnert, dass Aufgaben mit Funktionen $x(t)$ linear in den Parametern für die Euklidische Norm unter anderem mit Normalgleichungen gelöst werden können. Der nichtlineare Fall wird hier in den Parametern linearisiert und kann dann ebenso mit Normalgleichungen gelöst werden. Iterativ wird dann der Parametervektor, um den die Zustandsfunktion linear approximiert wurde, verbessert.

Problem (A)

Wir betrachten zunächst Problem (A), welches im Programm Abschn. C.1 umgesetzt ist. Für dieses akademische Beispiel mit nur einem Parameter wurden mit diesem Algorithmus ganz passable Ergebnisse erhalten, vgl. Tab. A.5 im Anhang. Auch für verhältnismäßig weit vom optimalen Wert entfernte Parameterstartwerte wurde der optimale Parameter gefunden. Dabei ist die Anzahl der Iterationen für größer geschätzte Startwerte sehr viel geringer als für kleiner gewählte, welche noch nach einer vertretbaren Anzahl an Durchläufen gegen den optimalen Parameter konvergieren.

Problem (B)

Mit der ersten Näherung $(B^0, N_0^0, r^0) = (6.00595, 0.77812, 0.03593)$ erhält man

$$(B^1, N_0^1, r^1)^T = (5.64788, 0.512354, 0.0500326).$$

(Zum Erhalt einer ersten Näherung sei der Leser auf den folgenden Abschn. 4.4.3 verwiesen.) Die oben beschriebene Vorgehensweise wurde im Programm C.1 umgesetzt mit einem Schleifendurchlauf von 20. Tabelle 4.1 enthält die Ergebnisse für das Problem (B) mit der Euklidischen Norm. Abb. 4.1 zeigt die nach 20 Iterationen ermittelte Lösung im Vergleich zur in[EK05] angegebenen Lösung. Bei der Auswertung der Iterativen Ausgleichsprobleme im MATLAB-Programm ergaben sich Schwierigkeiten, welche hier kurz erläutert werden sollen.

Startnaeherung P = (6.000000 , 0.500000 , 0.060000)

Durchlauf	Parameter B	Parameter N_0	Parameter r
0	6.00594997	0.778119981	0.0359300002
1	5.64785957	0.512335539	0.050033126
2	5.95461893	0.550666749	0.0491292514
3	5.95002508	0.548374474	0.0493489541
4	5.95135975	0.549008131	0.0493036918
5	5.95111227	0.548891187	0.0493122675
6	5.95115948	0.548913598	0.0493106358
7	5.95115042	0.548909426	0.049310945
8	5.95115232	0.548910201	0.0493108816
9	5.95115185	0.548910022	0.0493108965
10	5.95115185	0.548910081	0.0493108928
11	5.95115185	0.548910081	0.0493108891
12	5.95115185	0.548910081	0.0493108965
13	5.95115185	0.548910081	0.0493108928
14	5.95115185	0.548910081	0.0493108891
15	5.95115185	0.548910081	0.0493108965
16	5.95115185	0.548910081	0.0493108928
17	5.95115185	0.548910081	0.0493108891
18	5.95115185	0.548910081	0.0493108965
19	5.95115185	0.548910081	0.0493108928
20	5.95115185	0.548910081	0.0493108891

Tabelle 4.1: *Ergebnisse der Euklidischen Norm mittels Ausgleichsrechnung für Problem (B).*

```

P(1)=    P(2)=    P(3)=    n =    ZF =
5.9272   0.1291   0.0525   1    0.4142
5.2894  -0.2694   0.0907   2    0.3657

```

Warning: Failure at t=3.319900e+01. Unable to meet integration tolerances without reducing the step size below the smallest value allowed (1.136868e-13) at time t. Attempting to evaluate the solution outside the interval [0.000000e+00, 3.319900e+01] where it is defined.

```
Error in ==> xintP1DeltaP=deval(sol1,t);
```

Das Problem hat Definitionslücken. Der Nenner darf nicht Null werden. Bei der obigen Parameterkonstellation wird der Nenner jedoch für $t = 33.199$ gleich Null. Deshalb wird die Lösung der ODE dort abgebrochen. Beim anschließenden Zugriff auf spätere Zeitpunkte führt dies zu einer Fehlermeldung.

Problem (C)

In Tab. 4.2 sind die für das Problem (C) mit der von Rentzsch und Schmidt ermittelten Startnäherung $P^0 = (-7.08, 4.00, -0.0645, -0.0960)$ errechneten Ergebnisse des Prog. C.1 dargestellt. Dabei zeigt sich eine interessante Entwicklung. Bis zur 7. Iteration, in der für das Problem (C) mit den in [ReSc] gegebenen Startwerten der kleinste Zielfunktionswert ermittelt wird, springen die Werte für P_1 und P_2 zwischen negativen und positiven Beträgen. Dieser Übergang der Parameter P_1 und P_2 ist nur durch die Symmetrie der Parameter

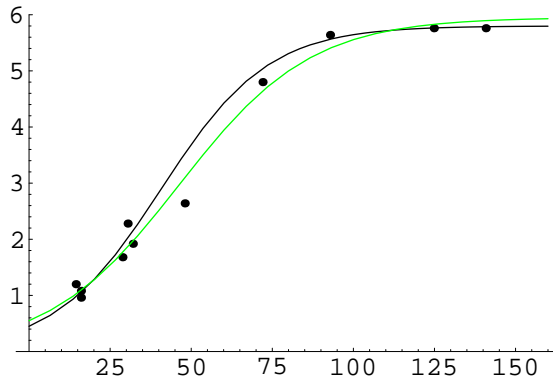


Abbildung 4.1: Lösung mit $(B, N_0, r) = (5.9512, 0.5489, 0.0493)$ (grün) im Vergleich zur in [EK05] angegebenen Kurve (schwarz).

It	P(1)	P(2)	P(3)	P(4)	ZF	Exit
1	-2.856191e+01	2.551499e+01	-1.113849e-01	-4.584536e-02	2.196552e-01	
2	5.792632e+00	-8.846753e+00	-1.124051e-01	-4.025908e-02	2.026977e-01	
3	2.700920e+00	-5.752172e+00	-1.291844e-01	-5.028377e-02	2.107533e-01	
4	6.138376e+00	-9.197352e+00	-7.903393e-02	-7.372587e-02	2.145173e-01	
5	-9.740888e+01	9.437667e+01	-2.517886e-01	-9.939556e-02	2.286963e-01	
6	3.879522e-01	-3.468109e+00	-2.550161e-01	-1.043856e-01	1.993884e-01	
7	-1.942845e+00	-1.137430e+00	7.844720e-02	7.971359e-02	1.987751e-01	
8	-1.108445e+01	1.111403e+01	8.664403e-02	7.863117e-02	2.733506e+06	a
9	-1.149912e+01	1.155424e+01	8.272188e-02	8.297470e-02	3.322550e+04	b
10	-1.216905e+01	1.216166e+01	8.271902e-02	8.271196e-02	5.060752e+07	c

a) Matrix close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 2.996659e-18.

b) Matrix close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 6.820261e-17.

c) Matrix close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 8.715284e-22.

Tabelle 4.2: Ergebnisse für Problem (C) mit der Euklidischen Norm mittels Ausgleichsrechnung für die Startwerte von Rentzsch und Schmidt $P^0 = (-7.08, 4.00, -0.0645, -0.0960)$.

in Problem (C) zu erklären. Betrachtet man die Paare A und C sowie B und D genauer, vgl. (2.25), (2.26), so erkennt man, dass die ODE in diesen Parametern vertauschbar ist. Paarweise lassen sich A durch B und C durch D ersetzen und man erhält die gleiche Problemstellung. Dieser Fakt ist ebenfalls ein Hinweis auf die nicht eindeutige Lösbarkeit des Parameterbestimmungsproblems. Ein weiteres Problem ist ab der 8. Iteration zu beobachten. Die in den Normalgleichungen entstehende Matrix \mathcal{A} wird singular, eine in der Numerik wohlbekannte Erscheinung. Häufig versucht man daher die Normalgleichungen zu umgehen und andere numerische Verfahren wie die Orthogonalisierung, vgl. [St05], zur Lösung des linearen Ausgleichsproblems zu verwenden.

Wir betrachten die Ergebnisse für leicht gestörte Startwerte aus [ReSc], welche mit $P^0 = (-7.0, 4.0, -0.06, -0.09)$ in Tab. 4.3 gegeben sind. Auch hier kann ein Wechsel der Parameter P_1 und P_2 von der ersten zur zweiten Iteration beobachtet werden. Ab Iteration 5 erhalten wir für die Matrix \mathcal{A} der Normalgleichungen einen schlechten Konditionswert, der zum Versagen des Algorithmus führt.

Noch kritischer wird die Anwendung des oben beschriebenen Algorithmus, wenn die Startwerte nicht in einer kleinen Umgebung des optimalen Parame-

It	P(1)	P(2)	P(3)	P(4)	ZF	Exit
1	-2.484825e+01	2.179319e+01	-1.032769e-01	-6.301703e-02	2.144713e-01	
2	2.391661e+01	-2.697596e+01	-1.177453e-01	-4.689421e-02	2.122395e-01	
3	5.331187e+00	-8.384153e+00	-1.160697e-01	-5.161553e-02	2.169195e-01	
4	7.304146e+00	-1.036098e+01	-9.780606e-02	-6.961505e-02	2.151893e-01	
5	1.618626e+02	-1.649204e+02	2.010641e-01	-2.742636e-01	2.067930e-01	
6	-1.413736e+01	-1.444920e+03	2.323141e-01	-1.627426e+01	2.861213e+36	a
7	-5.748637e-01	-1.444920e+03	2.313375e-01	-1.627426e+01	6.573239e+37	b
8	-5.748637e-01	6.030796e+02	2.293844e-01	-2.742636e-01	8.689913e+34	c
9	-1.340489e+00	3.339080e+03	2.281027e-01	-2.117636e-01	3.475760e+36	d
10	2.665951e+01	1.262191e+05	2.132101e-01	4.757364e-01	1.063249e+39	e

a) Matrix close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 2.633729e-26.

b) Matrix close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 3.508368e-29.

c) Matrix close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 2.366436e-28.

d) Matrix close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 1.731124e-27.

e) Matrix close to singular or badly scaled. Results may be inaccurate. RCOND = 2.185263e-30.

Tabelle 4.3: *Ergebnisse für Problem (C) mit der Euklidischen Norm mittels Ausgleichsrechnung für die gestörten Startwerte $P^0 = (-7.0, 4.0, -0.06, -0.09)$.*

ter liegen, vgl. Tab. 4.4. Der Start im Punkt $P^0 = (-10, 10, -0.1, -0.1)$ liefert einen sofortigen Abbruch. Auch hier ist der Konditionswert der Matrix

It	P(1)	P(2)	P(3)	P(4)	ZF
1	19079	-1.908150e+04	1.733650e+03	1.733588e+03	3.928226e+00

Tabelle 4.4: *Ergebnisse für Problem (C) mit der Euklidischen Norm mittels Ausgleichsrechnung für die Startwerte $P^0 = (-10.0, 10.0, -0.01, -0.1)$.*

\mathcal{A} schlecht.

Warning: Matrix is close to singular or badly scaled.

Results may be inaccurate. RCOND = 7.723946e-20.

Der Abbruch des Verfahrens hat hier allerdings einen anderen Auslöser. Wie die folgende Ausgabe zeigt, wird die ODE nicht über das volle Zeitintervall integriert. Bei $t = 0.3962$ kann auch mit ode15s eine Schrittweite unter dem Minimalwert von $8.881784e-16$ nicht umgesetzt werden, worauf die Lösung der ODE abgebrochen wird. Beim anschließenden Zugriff auf den Wert der Zustandsfunktion an dieser Stelle entsteht ein Fehler. Das lineare Optimierungsproblem kann nicht korrekt aufgestellt werden.

Warning: Failure at t=3.962060e-01. Unable to meet integration tolerances without reducing the step size below the smallest value allowed

(8.881784e-16) at time t.

Error using ==> Attempting to evaluate the solution outside the interval [0.000000e+00, 3.962060e-01] where it is defined.

Error in ==> xintP1DeltaP=deval(sol1,t);

Der Algorithmus konvergiert nur für 'gute' Startnäherungen.

Problem (D)

Im Fall des Problems (D) erhalten wir aus den Normalgleichungen ein lineares Gleichungssystem der Größe $M^2 = (2001)^2$, welches mit einfachen Matlab-Routinen nicht mehr praktisch lösbar ist. An dieser Stelle sind parallele numerische Verfahren zur Lösung hochdimensionaler LGS zu verwenden, vgl. [RR07].

4.4.2 Tschebyshev-Norm mit sequentieller linearer Optimierung

Präsentiert werden hier die Ergebnisse für die Tschebyshev-Norm bei Problem (B). Die Ergebnisse für die anderen Probleme findet der Leser in Abschn. A.3 im Anhang.

Problem (B)

Die für die Tschebyshev-Norm erhaltenen Ergebnisse zeigt Tab. 4.5.

Durchlauf	0	1	2	3	4	5	...	10
B	6.00595	6.2236	6.2607	6.2608	6.2608	6.2608	...	6.2608
N_0	0.77812	0.7047	0.7091	0.7091	0.7091	0.7091	...	0.7091
r	0.03593	0.0413	0.0410	0.0410	0.0410	0.0410	...	0.0410
quadr.Abw	1.6445	0.7542	0.7776	0.7775	0.7775	0.7775	...	0.7775

Tabelle 4.5: Ergebnisse der Tschebyshev-Norm mittels sequentieller linearer Optimierung für Problem (B)

Dass der Algorithmus nicht für alle Startschätzungen den optimalen Parameter liefert, zeigen Tab. 4.6 und die folgende Ausgabe. Bei Linearisierung in (5.0, 0.4, 0.05) versagt der Algorithmus nach zwei Iterationen, da auf einen Wert der Zustandsfunktion zugegriffen wird, der nicht ermittelt werden konnte.

It.	B	N_0	r	ZF-Wert	Abbr.
1	6.196564e+00	1.165768e-01	5.001110e-02	3.231622e-01	1
2	6.063418e+00	-2.782098e-01	9.450075e-02	3.524224e-01	1

Tabelle 4.6: Ergebnisse der Tschebyshev-Norm mittels sequentieller linearer Optimierung für Problem (B) bei schlechtem Startwert. 1 = Optimization terminated.

```
Warning: Failure at t=3.292048e+01. Unable to meet integration
tolerances without reducing the step size below the smallest value
allowed (1.136868e-13) at time t.
Error using ==> deval
Attempting to evaluate the solution outside the interval
[0.000000e+00, 3.292048e+01] where it is defined.
Error in ==> xintP1DeltaP=deval(sol1,t);
```

4.4.3 Bestimmung der Startparameter mittels Ausdünnen

Zuerst wird für das oben beschriebene Verfahren ein Startvektor P^0 von Parameterwerten benötigt, der aus einem Gleichungssystem aus Zeitpunkten t_i mit

zugehörigen Messwerten m_i ermittelt wird, wobei $i = 1, \dots, n$ mit n Anzahl der zu ermittelnden Parameter.

Auf die Darstellung der Ergebnisse für **Problem (A)** wird hier verzichtet, da nur ein Parameter zu bestimmen ist. Wird die Anzahl der Messwerte auf einen Messwert reduziert, so handelt es sich bei ungestörten Messwerten um den trivialen Fall, dass der optimale Parameter sofort aus der Gleichung $e^{Pt_i} = m_i$ bestimmt werden kann.

Problem (B)

Als Startvektor ist die Lösung eines Systems von drei Gleichungen $x(t_i) = m_i$ anzunehmen:

$$\frac{N_0 \cdot B}{N_0 + (B - N_0) \cdot e^{-r \cdot t_1}} = m_1, \quad (4.26)$$

$$\frac{N_0 \cdot B}{N_0 + (B - N_0) \cdot e^{-r \cdot t_2}} = m_2, \quad (4.27)$$

$$\frac{N_0 \cdot B}{N_0 + (B - N_0) \cdot e^{-r \cdot t_3}} = m_3. \quad (4.28)$$

Die Zeitpunkte t_1, t_2, t_3 können sehr verschieden gewählt werden. Für das hier beschriebene Beispiel wurden zunächst willkürlich $t_1 = 14.4, t_2 = 32$ und $t_3 = 140.8$ mit den zugehörigen Messwerten aus Tab. 2.2 verwendet. Man erhält 3 nichtlineare Gleichungen, die in MATLAB© mithilfe eines Newton-Gauss-Verfahrens und verschiedenen Starttripeln die Lösung $(B^0, N_0^0, r^0) \approx (6.00595, 0.77812, 0.03593)$ liefern. Diese kann u.a. in Algorithmus 4.2 als Anfangsparametervektor verwendet werden. Wie in Abschn. 4.3.2 jedoch bereits beschrieben, können bei ungeschickter Startparameterwahl unzulässige Startwerte erhalten werden. Eine Verbesserung erhält man durch Anwendung der dort beschriebenen Verfahren, wie die folgenden Ergebnisse zeigen.

Die Anwendung der Ausdünnungs-Algorithmen ergab folgende Auswahl, vgl. Tab. 4.7. Aus den verbleibenden Messpunkten wurde durch Lösung des

Zeit	14.4	16.0	28.8	30.4	32	48	72	92.8	124.8	140.8
Messwert	1.2	1.02	1.68	2.28	1.92	2.64	4.8	5.64	5.76	5.76
Algorithmus	Reihenfolge der Ausdünnung									
NAT		2	3	1	4	7	5		6	
AT2		2	4	5	3		7	6	1	
AT1		2	4	5	3	7		6	1	

Tabelle 4.7: Die Messpunkte und ihre Reihenfolge der Entnahme für Problem (B) mit den Algorithmen NAT, AT2 und AT1.

nichtlinearen Gleichungssystems

$$m_1 = \frac{B \cdot N_0}{q + (B - N_0) \cdot e^{-r \cdot 14.4}},$$

$$m_j = \frac{B \cdot N_0}{q + (B - N_0) \cdot e^{-r \cdot t_j}}, \quad 1 < j < 10,$$

$$m_{10} = \frac{B \cdot N_0}{q + (B - N_0) \cdot e^{-r \cdot 140.8}},$$

eine Anfangsnäherung für die Parameter berechnet. Das Ergebnis ist in Tabelle 4.8 dargestellt.

Algorithm	B	N_0	r	quad. Abweichung
NAT	5.765504315	0.5347236284	0.06558044169	3.294766125
AT2	6.084524369	0.7976208197	0.03386141205	2.051564354
AT1	5.796789525	0.6485024173	0.05060534950	0.974532337

Tabelle 4.8: Startparameterwerte B , N_0 und r für Problem (B), die durch Lösung eines nichtlinearen Gleichungssystems bestimmt wurden, welches aus den, mit den Algorithmen NAT, AT2 und AT1 bestimmten, verbleibenden Messpunkten entsteht, sowie quadratische Abweichung der Lösung zu den Messwerten.

Problem (C)

Die mit den Ausdünnungs-Algorithmen NAT, AT1 und AT2 erhaltenen Ergebnisse sind in Tab. 4.9 dargestellt. Die anschließende Bestimmung von Startpa-

Zeit	0	5	10	15	20	25	30	35	40	45	55	65	85	105	125	165	185
Alg.	Reihenfolge der Ausdünnung																
NAT		1	6	2	11	3	8	4	5		7	9	13	10		12	
AT2		10	13	9	11		5	12	2		4	8	3	6	1	6	
AT1		9		7	10	12	5		2	11	4	13	3	6	1	8	

Tabelle 4.9: Die Messpunkte und ihre Reihenfolge der Entnahme für Problem (C) mit den Algorithmen NAT, AT2 und AT1. Der Übersichtlichkeit wegen wurde auf die Darstellung der Messwerte verzichtet. Sie können aus Tab. 2.3 entnommen werden.

rametern aus den resultierenden Gleichungssystemen erfolgte mit der fsolve-Routine aus MATLAB. Die Ergebnisse sind in den Tab. 4.10, 4.11 und 4.12 dargestellt. Allerdings sollen die numerischen Ergebnisse hier ausführlicher diskutiert werden. Hinter der fsolve-Routine verbirgt sich ein Löser für nichtlineare Gleichungssysteme, bei dem es sich, je nach Einstellung um den Gauss-Newton- und den Levenberg-Marquardt-Algorithmus oder um Large-Scale-Methoden handelt. Als Abbruchkriterium dienen der fsolve-Routine die Anzahl maximaler Iterationen, MaxIter, und maximaler Funktionsauswertungen, MaxFunEvals, sowie die Norm des Funktionswerts des Gleichungssystems, TolFun. Standardmäßig ist MaxIter auf 15000 eingestellt, MaxFunEvals wird basierend auf der Problemgröße mit verschiedenen Faktoren berechnet, vgl. [MAT]. Die Abbruchkriterien stehen für

Abbruch	A^0	B^0	C^0	D^0	A	B	C	D
1	-7	4	-0.05	-0.05	-3.137	0.0574	-0.047	0.0084
2	-10	10	-0.1	-0.1	-730.9732	729.0239	-0.0759	-0.0761
2	10	10	0.1	0.1	-1.5401	-1.5401	-0.0527	-0.0527
2	-10	1-10	-0.1	0.1	-1.5402	-1.5402	-0.0527	-0.0527

Tabelle 4.10: *Problem (C)*. Dargestellt sind die Lösungen des aus NAT resultierenden Gleichungssystems erzielt mit *fsolve* für verschiedene Anfangspunkte.

Abbruch	A^0	B^0	C^0	D^0	A	B	C	D
2	-7	4	-0.05	-0.05	-306.3513	303.3455	-0.0667	-0.0671
2	-10	10	-0.1	-0.1	-757.1979	757.0655	-0.0934	-0.0940
2	10	10	0.1	0.1	-1.5448	-1.5448	-0.0420	-0.0420
2	-10	1-10	-0.1	0.1	-3.5296	-3.5296	-0.0669	-0.0669

Tabelle 4.11: *Problem (C)*. Dargestellt sind die Lösungen des aus AT2 resultierenden Gleichungssystems erzielt mit *fsolve* für verschiedene Anfangspunkte.

1: Optimierung erfolgreich. Funktion zu einer Lösung x konvergiert.

2: Optimierung abgebrochen. Maximale Anzahl von Funktionsauswertungen erreicht.

Bei Abbruch des Algorithmus mit 2 wurde die Anzahl der Iterationen sukzessive erhöht. Wurde trotzdem keine erfolgreiche Optimierung erlangt, sind die Ergebnisse des ersten Abbruch dargestellt. Die Auswertung der Startwertgewinnung läßt folgende Schlussfolgerung zu:

- Für den Erfolg der iterativen Ausgleichsrechnung sind sehr gute, das heißt nahe am optimalen Parameter liegende, Startparameter notwendig. Dies erfordert die Kenntnis der Größenordnungen und Größenverhältnisse der Parameter zueinander. Sind diese nicht bekannt, ist die Bestimmung optimaler Parameter schwierig.
- Die Ausdünnung und anschließende Lösung eines Gleichungssystems stellt ein Werkzeug zur Erzeugung dieser erforderlichen sehr guten Startparameter zur Verfügung. In den jeweils ersten beiden Zeilen der Tab. 4.10, 4.11 und 4.12 ist aus der Lösung der entsprechenden Gleichungssysteme eine gute Näherung zu erkennen, wobei sich die Güte in der Reihenfolge der Ausdünnungsalgorithmen NAT, AT1, AT1 verbessert.
- Allerdings zeigen die jeweils letzten zwei Zeilen der Tab. 4.10, 4.11 und 4.12 das bei der Nullstellenbestimmung und deren Algorithmen bekannte

Abbruch	A^0	B^0	C^0	D^0	A	B	C	D
2	-7	4	-0.05	-0.05	-437.8425	434.8395	-0.0621	-0.0625
2	-10	10	-0.1	-0.1	-331.9920	331.8751	-0.1103	-0.1128
2	10	10	0.1	0.1	-1.5699	-1.5699	-0.0344	-0.0344
2	-10	1-10	-0.1	0.1	-2.4321	-2.4321	-0.0611	-0.0611

Tabelle 4.12: *Problem (C)*. Dargestellt sind die Lösungen des aus AT1 resultierenden Gleichungssystems erzielt mit *fsolve* für verschiedene Anfangspunkte.

Problem. Die Existenz mehrerer Nullstellen kann nicht ausgeschlossen und eine Konvergenz zu einer Nullstelle nicht garantiert werden. Aus den Ergebnissen für Problem (C) läßt sich jedoch entnehmen, dass bei unbeschränkten Parametern zumindest durch die Vorgabe der Vorzeichen gute Startnäherungen erzeugt werden können.

Problem (D)

Da der Datensatz des enzymkinetischen Problems 1819 Messpunkte umfasst, wird davon Abstand genommen die Reihenfolge der Entnahme, welche in der *index*-Liste gespeichert wird, hier darzustellen. Wir beschränken uns auf die Ausgabe der *Messpkt*-Liste für $K = 3$ mit zugehöriger *Nummer*-Liste:

```
>> AT2thinning(3)
```

```
Nummer = 1          65          1819
ans = 1.0e+03 *
           0          0
    0.0715000000000000    0.000246951612903
    2.0009000000000000    0.000451483870968
```

Das resultierende nichtlineare Gleichungssystem wurden in MATLAB implementiert, vgl. Abschn. C.2.2 im Anhang.

```
>> NewtonEnzym
```

```
ans =          0    0.014241374279533    0.280222437368966
```

```
Warning: Matrix is singular to working precision.
```

```
> In NewtonEnzym at 53
```

```
Warning: Matrix is singular, close to singular or badly scaled.
```

```
Results may be inaccurate. RCOND = NaN.
```

```
> In ode15s at 674
```

```
In NewtonEnzym>x at 22
```

```
In NewtonEnzym at 55
```

Fazit: Offenbar weichen die für Parameter $P=[500;900;36000]$ berechneten Werte $x(t,P)$ noch stark von den Messwerten m ab:

```
x(t,P)=[0.0000000000000000    0.014241374279533    0.280222437368966]
m =     [0.0210000000000000    0.246951612903226    0.451483870967742]
```

Dennoch versagt das Newton-Verfahren schon im ersten Schritt. Bei der Lösung der steifen Differentialgleichung werden Werte sehr unterschiedlicher Größenordnung erhalten. Ebenso sind die Werte in der Jacobimatrix sehr klein. Die Inverse kann vermutlich nicht ohne Probleme berechnet werden.

Kapitel 5

Ein Modellalgorithmus für richtungsdifferenzierbare Funktionen mit Schrittweitensteuerung

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit dem Entwurf eines Modellalgorithmus, basierend auf einem Abstiegsverfahren. Die Besonderheit ist dabei die Berücksichtigung der Eigenschaften der Betragssummen- und Tschebyschev-Norm und der daraus resultierenden Einschränkungen hinsichtlich der Differenzierbarkeit. In der Darstellung lehnt sich das Kapitel an [We92]. Wir betrachten wieder die Aufgabe

$$\min_P f(P), \quad P \in \mathbb{R}^K, \quad (5.1)$$

mit $f(P) := g \circ F(P)$, wobei F eine glatte Abbildung¹ ist, $F : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^M$, und g konvex, $g(\cdot) = \|\cdot\|$, $g : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$, also

$$\min_P \|F(P)\|.$$

Es seien ein Anfangswertproblem $\dot{x}(t) = h(x(t), P)$ mit $x(t_0) = x_0$ und Messwerte (t_i, m_i) , $i = 1, \dots, M$, gegeben. Die Funktion $F(P)$ sei die vektorielle Funktion

$$F(P) = (x(t_1, P) - m_1, \dots, x(t_M, P) - m_M)^T,$$

wobei $x(t_i, P) \in \mathbb{R}$ die Lösung der Differentialgleichung

$$\dot{x}(t) = h(x(t), P) \quad \text{mit} \quad x(t_0) = x_0$$

zum Zeitpunkt t_i ist². Weitere Voraussetzungen sind:

- (i) Mit einem gegebenen $P^0 \in \mathbb{R}^K$ (Startpunkt des Iterationsverfahrens) ist die Niveaumenge $L_0 = \{P \in \mathbb{R}^K : f(P) \leq f(P^0)\}$ kompakt.

¹Mit glatt bezeichnet man hinreichend oft differenzierbare Funktionen.

²Natürlich sind auch Differentialgleichungssysteme mit $x(t_i) \in \mathbb{R}^n$ möglich. Dann muss aber die Norm entsprechend angepasst werden. Wir belassen es hier der Übersichtlichkeit halber beim eindimensionalen Fall.

- (ii) Die Abbildung $F : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^M$ ist auf einer offenen Obermenge von L_0 stetig differenzierbar.
- (iii) Die Funktionalmatrix $F'(\cdot)$ ist auf L_0 Lipschitz-stetig, das heißt es existiert eine Konstante $\gamma < 0$ mit

$$\|F'(P) - F'(\bar{P})\|_{\mathbb{R}^M \times \mathbb{R}^K} \leq \gamma \|P - \bar{P}\|_{\mathbb{R}^K} \quad \text{für alle } P, \bar{P} \in L_0.$$

Als Normen betrachten wir wieder

- die Betragssummennorm $\|y\|_1 = \sum_{i=1}^M |y_i|$
- die Euklidische Norm $\|y\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^M y_i^2}$
- und die Tschebyschev-Norm $\|y\|_\infty = \max_{i=1, \dots, M} |y_i|$.

5.1 Notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung

Für stetig differenzierbare Funktionen $f : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ definiert man stationäre Punkte P^* als Punkte, in denen die erste Ableitung verschwindet, das heißt:

$$f'(P^*) = \nabla f(P^*) = \left(\frac{\partial f}{\partial P_1}(P^*), \dots, \frac{\partial f}{\partial P_K}(P^*) \right)^T = 0,$$

wobei $0 = (0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^K$. Im Fall der Euklidischen Norm können wir demnach als notwendige Optimalitätsbedingungen erster Ordnung formulieren:

Satz 5.1. *Gegeben sei eine diskrete l_2 -Approximationsaufgabe der Form*

$$\text{Minimiere } f(P) := \|F(P)\|_2 = \sum_{i=1}^M (F_i(P))^2 = \sum_{i=1}^M (x(t_i, P) - m_i)^2, \quad P \in \mathbb{R}^K,$$

mit einem Anfangswertproblem $\dot{x} = h(t, x, P)$, $x(t_0) = x_0$ und Messpunkten (t_i, m_i) für $i = 1, \dots, M$. Die Lösung $x(t, P)$ sei in $P^* \in \mathbb{R}^K$ stetig differenzierbar. Dann gilt: Ist P^* eine lokale Lösung der l_2 -Approximationsaufgabe, so ist P^* auch stationärer Punkt der l_2 -Approximationsaufgabe, das heißt es gilt

$$f'(P^*) = 2 \cdot \sum_{i=1}^M [F_i(P^*)] \nabla F_i(P^*)^T = 0.$$

Da wir jedoch Funktionen $f(P)$ betrachten, bei denen die stetige Differenzierbarkeit nicht gelten muss, wollen wir uns zunächst auf die Richtungs-differenzierbarkeit von f beschränken. Wir definieren also:

Definition 5.2. • Die Abbildung $g : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ heißt in $y \in \mathbb{R}^M$ in Richtung $d \in \mathbb{R}^M$ richtungsdifferenzierbar, wenn

$$g'(y; d) := \lim_{t \rightarrow 0_+} \frac{g(y + td) - g(y)}{t}$$

existiert. $g'(y; d)$ wird dann die Richtungsableitung von g in y in Richtung d genannt. Ist g sogar in jede Richtung $d \in \mathbb{R}^M$ richtungsdifferenzierbar, so nennt man die Abbildung $g'(y; \cdot) : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ die Gateaux-Variation von g in y .

- Ist $f : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ in P^* in jede Richtung $d \in \mathbb{R}^K$ richtungsdifferenzierbar mit Gateaux-Variation $f'(P^*; \cdot)$, so heißt P^* ein stationärer Punkt von f oder eine stationäre Lösung von f , wenn $f'(P^*; d) \geq 0$ für alle $d \in \mathbb{R}^K$.

Die Richtungs-differenzierbarkeit wird im folgenden Satz für $g(\cdot) = \|\cdot\|_1$ gezeigt:

Satz 5.3. Sei $g : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ durch $g(y) := \|y\|_1 = \sum_{i=1}^M |y_i|$ definiert. Dann ist g in jedem $y \in \mathbb{R}^M$ richtungsdifferenzierbar, die Gateaux-Variation ist in jeder Richtung d durch

$$g'(y; d) = \sum_{j \in J(y)} |d_j| + \sum_{j \notin J(y)} \text{sign}(y_j) d_j \quad (5.2)$$

mit $J(y) := \{j \in \{1, \dots, M\} : y_j = 0\}$ gegeben.

Beweis. Wir nehmen o.B.d.A. $y \neq 0$ an (für $y = 0$ ist gerade $g'(0; d) = \sum_{i=1}^M |d_i|$). Sei eine Richtung $d \in \mathbb{R}^M$ vorgegeben. Es gilt $|y_j + td_j| - |y_j| = |td_j|$ für alle $j \in J(y)$. Daher ist

$$\begin{aligned} \frac{g(y + td) - g(y)}{t} &= \frac{\sum_{i=1}^M |y_i + td_i| - \sum_{i=1}^M |y_i|}{t} \\ &= \sum_{j \in J(y)} \frac{|td_j|}{t} + \sum_{j \notin J(y)} \frac{|y_j + td_j| - |y_j|}{t} \\ &= \sum_{j \in J(y)} |d_j| + \sum_{j \notin J(y)} \text{sign}(y_j) d_j, \end{aligned}$$

woraus nach Grenzübergang $t \rightarrow 0_+$ die Behauptung folgt. \square

Die Richtungs-differenzierbarkeit der Zielfunktion f folgt dann aus der Verkettung einer richtungsdifferenzierbaren mit einer stetig-differenzierbaren Funktion.

Satz 5.4. Mit der Abbildung $F : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^M$ sei $f : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$f(P) := g \circ F = \|F(P)\|_1 = \sum_{i=1}^M |F_i(P)|$$

definiert. Dann gilt: Ist F in $P^* \in \mathbb{R}^K$ stetig differenzierbar³, so ist f in P^* richtungsdifferenzierbar mit der Gateaux-Variation

$$f'(P^*; d) = \sum_{i \in I(P^*)} |\nabla F_i(P^*)^T d| + \sum_{i \notin I(P^*)} \text{sign}[F_i(P^*)] \nabla F_i(P^*)^T d \geq 0$$

für alle $d \in \mathbb{R}^K$, wobei $I(P^*) := \{i \in \{1, \dots, M\} : F_i(P^*) = 0\}$.

³ F ist in P^* stetig differenzierbar, wenn die rechte Seite der Differentialgleichung h Lipschitz in x ist und stetige partielle Ableitungen bzgl. x und P besitzt, vgl. Kap. 3.

Beweis. Mit $g : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$, definiert durch $g(y) = \|y\|_1$ ist $f = g \circ F$. Die Abbildung F ist nach Voraussetzung in P^* stetig differenzierbar, während g eine konvexe Funktion ist, deren Gateaux-Variation wir bereits kennen. Zu zeigen ist die Beziehung

$$f'(P^*; d) = g'(F(P^*); F'(P^*)d).$$

Sei $d \in \mathbb{R}^K$ und $\{t_k\} \subset \mathbb{R}_+$ eine Nullfolge. Definiert man

$$r_k := F(P^* + t_k d) - F(P^*) - t_k F'(P^*)d,$$

so gilt⁴, $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{r_k}{t_k} = 0$. Damit ist

$$\begin{aligned} \frac{f(P^* + t_k d) - f(P^*)}{t_k} &= \frac{g \circ F(P^* + t_k d) - g \circ F(P^*)}{t_k} \\ &= \frac{g(F(P^*) + t_k F'(P^*)d + r_k) - g(F(P^*))}{t_k} \\ &= \frac{g(F(P^*) + t_k F'(P^*)d) - g(F(P^*))}{t_k} \\ &\quad + \frac{g(F(P^*) + t_k F'(P^*)d + r_k) - g(F(P^*) + t_k F'(P^*)d)}{t_k}. \end{aligned}$$

Der erste Term der letzten zwei Zeilen konvergiert gegen $g'(F(P^*); F'(P^*)d)$, da g in $F(P^*)$ eine Gateaux-Variation besitzt. Der zweite Summand kann, da g eine Norm ist, mittels⁵ $\| \|x\| - \|y\| \| \leq \|x - y\|$ abgeschätzt werden als

$$\frac{\| \|F(P^*) + t_k F'(P^*)d + r_k\|_1 - \|F(P^*) + t_k F'(P^*)d\|_1 \|}{t_k} \leq \frac{\|r_k\|_1}{t_k}.$$

Es ist aber $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|r_k\|_1}{t_k} = 0$, und somit ist die Behauptung bewiesen. \square

Bemerkung 5.5. *Alle hier getroffenen Aussagen können auf die Tschebyschev-Norm übertragen werden. Da wir die Ergebnisse im Folgenden verwenden wollen, werden wir die Hauptaussagen zur diskreten Tschebyschev-Approximationsaufgabe und der zugehörigen Gateaux-Variation hier formulieren. Für Beweise und ausführlichere Darstellungen verweisen wir den Leser jedoch auf [We92].*

Analog zu Satz 5.3 gelten für die Tschebyschev-Norm die Sätze

Satz 5.6. *Sei $g : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ durch $g(y) := \|y\|_\infty = \max_{j=1, \dots, M} |y_j|$ definiert. Dann ist g in jedem $y \in \mathbb{R}^M$ richtungsdifferenzierbar, die Gateaux-Variation ist*

$$g'(y; d) = \begin{cases} \|d\|_\infty & \text{falls } y = 0, \\ \max_{j \in J(y)} \text{sign}(y_j) d_j & \text{falls } y \neq 0, \end{cases}$$

mit $J(y) := \{j \in \{1, \dots, M\} : |y_j| = \|y\|_\infty\}$.

⁴Man beachte: die Voraussetzung 'F stetig differenzierbar in P^* ' gewährleistet, dass $F'(P^*)d = F'(P^*; d)$ gilt.

⁵Da die Ungleichung Norm-unabhängig gültig ist, kann dieser Satz durch gleiche Argumentation auch für die Tschebyschev-Norm mit zugehöriger Richtungsableitung geschlossen werden.

Satz 5.7. Mit den Abbildungen $F : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^M$ und $g(\cdot) = \|\cdot\|_\infty : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ sei $f : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$f(P) := g \circ F(P) = \|F(P)\|_\infty = \max_{i=1,\dots,M} |F_i(P)|$$

definiert. Ist F in $P^* \in \mathbb{R}^K$ stetig differenzierbar, so ist f in P^* richtungsdifferenzierbar und hat die Gateaux-Variation

$$f'(P^*; d) = \begin{cases} \max_{i=1,\dots,M} |\nabla F_i(P^*)^T d| & \text{falls } F(P^*) = 0, \\ \max_{i \in I(P^*)} \text{sign}[F_i(P^*)] \nabla F_i(P^*)^T d & \text{falls } F(P^*) \neq 0, \end{cases}$$

wobei $I(P^*) := \{i \in \{1, \dots, M\} : |F_i(P^*)| = \|F(P^*)\|_\infty\}$.

Beweis. Die Beweise zu den Sätzen 5.6 und 5.7 findet man in [We92]. \square

Der folgende Satz liefert eine erste notwendige Bedingung für optimale Punkte P^* :

Satz 5.8. Sei $P^* \in \mathbb{R}^K$ eine lokale Lösung von (5.1). Ist f in P^* richtungsdifferenzierbar, so ist $f'(P^*; d) \geq 0$ für jedes $d \in \mathbb{R}^K$.

Beweis. Da P^* eine lokale Lösung ist, existiert eine Umgebung U von P^* mit $f(P^*) \leq f(P)$ für alle $P \in U$. Sei $d \in \mathbb{R}^K$ gegeben. Dann existiert ein $t_0 > 0$ so, dass $P^* + td \in U$ und daher $f(P^*) \leq f(P^* + td)$ für alle $t \in [0, t_0]$. Mit anderen Worten: Für jede Richtung d kann man ein t_0 so klein wählen, dass für alle Schrittweiten $0 \leq t \leq t_0$ der Funktionswert an der Stelle $P^* + td$ größer gleich dem lokalen Minimum ist, das heißt:

$$f'(P^*; d) = \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{f(P^* + td) - f(P^*)}{t} \geq 0.$$

\square

Wir fassen in den folgenden beiden Sätzen zusammen, was das im konkreten Fall der Betragssummen- und Tschebyschev-Norm für unsere diskreten Approximationsaufgaben bedeutet.

Satz 5.9. Gegeben sei eine diskrete l_1 -Approximationsaufgabe der Form

$$\text{Minimiere } f(P) := \|F(P)\|_1 = \sum_{i=1}^M |F_i(P)| = \sum_{i=1}^M |x(t_i, P) - m_i|, \quad P \in \mathbb{R}^K,$$

mit einem Anfangswertproblem $\dot{x} = h(t, x, P)$, $x(t_0) = x_0$ und Messpunkten (t_i, m_i) für $i = 1, \dots, M$. Die Lösung $x(t, P)$ sei in $P^* \in \mathbb{R}^K$ stetig differenzierbar. Dann gilt: Ist P^* eine lokale Lösung der l_1 -Approximationsaufgabe, so ist P^* auch stationäre Lösung der l_1 -Approximationsaufgabe, das heißt es gilt

$$f'(P^*; d) = \sum_{i \in I(P^*)} |\nabla F_i(P^*)^T d| + \sum_{i \notin I(P^*)} \text{sign}[F_i(P^*)] \nabla F_i(P^*)^T d \geq 0$$

für alle $d \in \mathbb{R}^K$, wobei $I(P^*) := \{i \in \{1, \dots, M\} : F_i(P^*) = 0\}$.

Beweis. Folgt sofort aus Satz 5.8 und Satz 5.4. \square

Satz 5.10. Gegeben sei eine diskrete l_∞ -Approximationsaufgabe der Form

$$\text{Minimiere } f(P) := \|F(P)\|_\infty = \max_{i=1,\dots,M} |F_i(P)| = \max_{i=1,\dots,M} |x(t_i, P) - m_i|,$$

$P \in \mathbb{R}^K$, mit einem Anfangswertproblem $\dot{x} = h(t, x, P)$, $x(t_0) = x_0$ und Messpunkten (t_i, m_i) für $i = 1, \dots, M$. Die Lösung $x(t, P)$ sei in $P^* \in \mathbb{R}^K$ stetig differenzierbar und es sei $F(P^*) \neq 0$. Dann gilt: Ist P^* eine lokale Lösung der l_∞ -Approximationsaufgabe, so ist P^* auch stationäre Lösung der l_∞ -Approximationsaufgabe, das heißt es gilt

$$f'(P^*; d) = \max_{i \in I(P^*)} \text{sign}[F_i(P^*)] \nabla F_i(P^*)^T d \geq 0 \quad \text{für alle } d \in \mathbb{R}^K,$$

wobei $I(P^*) := \{i \in \{1, \dots, M\} : |F_i(P^*)| = \|F(P^*)\|_\infty\}$.

Beweis. Folgt sofort aus Satz 5.8 und Satz 5.7. \square

5.2 Modellalgorithmus

Als Modellalgorithmus betrachten wir das gedämpfte Gauß-Newton-Verfahren für diskrete, nichtlineare Approximationsaufgaben:

$$\text{Minimiere } f(P) := \|F(P)\| = g \circ F(P), \quad P \in \mathbb{R}^K.$$

Hierbei ist $f : \mathbb{R}^P \rightarrow \mathbb{R}$ die Verknüpfung einer Norm $g : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ mit der vektorwertigen Funktion $F : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^M$. Bei der Untersuchung mit verschiedenen Normen wollen wir uns wieder auf die Tschebyschev-Norm $\|\cdot\|_\infty$, die Betragssummen-Norm $\|\cdot\|_1$ und die Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ beschränken. Von den Normen wissen wir, dass sie konvex sind. Über die Abbildung F wollen wir jedoch zunächst nichts derartiges voraussetzen. Wir nehmen an, dass $x(t)$ in geschlossener Form (als analytische Funktion) vorliegt. Wir werden die Details und notwendigen Erweiterungen bezüglich der numerischen Lösung der Differentialgleichung später nachholen.

Algorithmus 5.11. *Modellalgorithmus*

- (i) Bestimme einen Startwert $P^0 \in \mathbb{R}^K$.
- (ii) Überprüfe das Abbruchkriterium: Falls $f'(P^j; d) \geq 0$ für alle $d \in \mathbb{R}^K$, dann Stop.
- (iii) Bestimme eine Abstiegsrichtung $d_j \in \mathbb{R}^K$ mit $f'(P^j; d_j) < 0$ durch Lösung der linearisierten Approximationsaufgabe

$$\text{Minimiere } f_j(d) := \|F(P^j) + F'(P^j)d\|$$

- (iv) Bestimme eine Armijo-Schrittweite $t_j = \rho_j > 0$ mit $f(P^j + t_j d_j) < f(P^j)$.
- (v) Setze $P^{j+1} = P^j + t_j d_j$. Erhöhe $j := j + 1$. Gehe zu (ii).

Der Algorithmus wurde in MATLAB implementiert, vgl. Abschn.C.3 im Anhang. Die damit erzielten Ergebnisse sind stellvertretend für Problem (C) in Abschn. 5.4 dargestellt.

Bemerkung 5.12. *Das Abbruchkriterium $f'(P^j; d) \geq 0$ aus Alg. 5.11 kann in der Praxis nicht für alle $d \in \mathbb{R}^K$ überprüft werden. In der Umsetzung erfolgt hier nur die Untersuchung in den Richtungen der Koordinatenachsen.*

5.3 Aufgaben mit Positivitätsbedingungen

Wir betrachten nun das folgende Approximationsproblem mit Positivität als Nebenbedingung:

Aufgabe (PP). *Parameterbestimmung mit Positivitätsbedingung*

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & f(P) = g \circ F(P) \\ \text{mit} \quad & \dot{x}(t) = h(x(t), P), \quad x(t_0) = x^0 \\ \text{und} \quad & P \geq 0. \end{aligned}$$

Wie oben ist g eine der Normen $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_2$ oder $\|\cdot\|_\infty$, $g: \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$, und $F: \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^M$,

$$F(P) = (x(t_1, P) - m_1, \dots, x(t_M, P) - m_M)^T.$$

Bei dem oben beschriebenen Problem handelt es sich um eine Approximationsaufgabe mit Restriktionen. Ist $P \in \mathbb{R}$, d.h. $K = 1$, setzen wir $Q(P) = |P|$ und erhalten die

Aufgabe (UPP). *Unrestringierte Parameterbestimmung mit positiven Parametern*

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & f(P) = g \circ F(Q(P)) \\ \text{mit} \quad & \dot{x}(t) = h(x(t), Q(P)), \quad x(t_0) = x^0. \end{aligned}$$

Die Positivitätsnebenbedingung entfällt wegen des Betrages über P , es gilt immer $Q(P) = |P| \geq 0$. Somit haben wir ein restringiertes Approximationsproblem in ein unrestringiertes Approximationsproblem überführt. Möglich ist auch $Q(P) = P^2$ zu wählen. Auch hier überführt man ein restringiertes Problem in ein unrestringiertes, behält aber die Frechet-Differenzierbarkeit für $Q(\cdot)$. Gilt $P \in \mathbb{R}^K$, so ist die Betragsfunktion komponentenweise anzuwenden:

$$Q(P) = (|P_1|, \dots, |P_K|)^T.$$

Man erhält die Aufgabe (UPP) und optimiert über alle $P \in \mathbb{R}^K$. Sei P^* der optimale Parameter der unrestringierten Aufgabe. Der optimale positive Parameter der restringierten Aufgabe ist dann $\bar{P}^* = Q(P^*)$. Analog verfährt man mit

$$Q(P) = P^2 := (P_1^2, \dots, P_K^2)^T.$$

Im Folgenden wird gezeigt, dass sich der im Abschn. 5.2 beschriebene Modellalgorithmus auf dieses Problem übertragen lässt.

Satz 5.13. *Mit den Abbildungen $F : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^M$, $Q : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^K$ und einer beliebigen Norm $g : \mathbb{R}^M \rightarrow \mathbb{R}$ sei $f : \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ definiert durch*

$$f(P) = g \circ F \circ Q(P) = \|F(Q(P))\|.$$

Dann gilt: Ist Q in $P \in \mathbb{R}^K$ richtungsdifferenzierbar und F eine stetig differenzierbare Funktion, so ist f in P richtungsdifferenzierbar.

Beweis. Der Beweis wird in zwei Teilen geführt. Zuerst wird gezeigt, dass Satz 5.7 auch dann noch gilt, wenn dort F als richtungsdifferenzierbare Funktion angenommen wird. Im Teil zwei des Beweises wird dann motiviert, dass die Verknüpfung der richtungsdifferenzierbaren Funktion Q mit der stetig differenzierbaren Funktion F richtungsdifferenzierbar ist.

(i)

Satz 5.14. *Die durch $f(P) = g \circ F(P)$ definierte Funktion f ist richtungsdifferenzierbar, falls F eine richtungsdifferenzierbare Funktion und g eine beliebige Norm ist.*

Beweis. Die Norm g ist konvex und daher richtungsdifferenzierbar, ebenso wie nach Voraussetzung die Funktion F richtungsdifferenzierbar ist. Ebenfalls kennen wir bei Festlegung der Norm auf $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_2$ oder $\|\cdot\|_\infty$ die Gateaux-Variation $g'(P; \cdot)$ (vgl. Abschn. 5.1). Zu zeigen ist, dass die Gateaux-Variation von f in P durch

$$f'(P; d) = g'(F(P); F'(P)d)$$

beschrieben wird. Analog zu Satz 5.7 motiviert man: Sei $d \in \mathbb{R}^K$ und $\{s_n\} \subset \mathbb{R}_+$ eine Nullfolge. Definiert man

$$r_n := F(P + s_n d) - F(P) - s_n F'(P; d),$$

so ist $\lim_{n \rightarrow \infty} r_n/s_n = 0$, da F nach Voraussetzung in P richtungsdifferenzierbar ist. Man erhält:

$$\begin{aligned} \frac{f(P + s_n d) - f(P)}{s_n} &= \frac{g \circ F(P + s_n d) - g \circ F(P)}{s_n} \\ &= \frac{g(F(P) + s_n F'(P; d) + r_n) - g(F(P))}{s_n} \\ &= \frac{g(F(P) + s_n F'(P; d)) - g(F(P))}{s_n} \\ &\quad + \frac{g(F(P) + s_n F'(P; d) + r_n) - g(F(P) + s_n F'(P; d))}{s_n}. \end{aligned}$$

Da g in $F(P)$ eine Gateaux-Variation $g'(P; d)$ besitzt, konvergiert der erste Summand gegen $g'(F(P); F'(P; d))$. Für den Betrag des zweiten Summanden ergibt sich unter Beachtung der Normungleichung $\|a\| - \|b\| \leq \|a - b\|$

$$\begin{aligned} \frac{\|F(P) + s_n F'(P; d) + r_n\| - \|F(P) + s_n F'(P; d)\|}{s_n} &\leq \\ \frac{\|F(P) + s_n F'(P; d) + r_n - F(P) - s_n F'(P; d)\|}{s_n} &= \frac{\|r_n\|}{s_n}, \end{aligned}$$

und mit $\lim_{n \rightarrow \infty} r_n/s_n$ konvergiert dieser Term gegen Null. Folglich ist $f'(P; d) = g'(F(P); F'(P; d))$. \square

(ii) Im Teil zwei des Beweises ist zu zeigen:

Satz 5.15. *Die Verknüpfung $\bar{F}(P) = F \circ Q(P)$ einer richtungsdifferenzierbaren Funktion Q mit einer stetig differenzierbaren Funktion F ist richtungsdifferenzierbar und es gilt $\bar{F}'(P; d) = F'(Q(P)) \cdot Q'(P; d)$.*

Beweis.

$$\begin{aligned} F(Q(P) + k) &= F(Q(P)) + F'(Q(P))k + o(\|k\|), \\ k &:= Q(P + sd) - Q(P) = Q'(P; d)s + o(\|s\|), \\ F(Q(P + sd)) &= F(Q(P)) + F'(Q(P))Q'(P; d)s + F'(Q(P))o(s) + o(\|k\|), \\ &= F(Q(P)) + F'(Q(P))Q'(P; d)s + \\ &\quad + F'(Q(P))o(s) + o(\|Q'(P; d)s + o(s)\|), \\ &= F(Q(P)) + F'(Q(P))Q'(P; d)s + o(s), \end{aligned}$$

vgl. [Ze76]. \square

Unter Verwendung beider Teilbeweise ergibt sich abschließend, dass

$$f(P) = g \circ F \circ Q(P)$$

richtungsdifferenzierbar ist. Die Gateaux-Variation ist

$$f'(P; d) = g'(F(Q(P)); F'(Q(P))Q'(P; d)).$$

\square

Folgerung 5.16. *Damit können wir den oben angegebenen Modellalgorithmus auch auf Probleme mit Positivitätsbedingungen anwenden, indem wir die restringierte Approximationsaufgabe in eine unrestringierte Approximationsaufgabe umwandeln.*

Aufgabe (LPP). *Lineare Parameterbestimmung mit Positivitätsbedingung*
Die linearisierte Aufgabe heißt

$$\begin{aligned} \text{Minimiere } f_P(d) &= \|\bar{F}(P) + \bar{F}'(P; d)\| \\ &= \|F(Q(P)) + F'(Q(P))Q'(P; d)\| \\ \text{mit } \dot{x}(t) &= h(x(t), Q(P)). \end{aligned}$$

In (LPP) ist der Parameter P frei auf \mathbb{R}^K optimierbar. Die Lösung der Aufgabe ist dann jedoch $Q(P)$.

5.4 Numerische Ergebnisse

In diesem Abschnitt sollen mit dem Modellalgorithmus gewonnene numerische Ergebnisse für Problem (C) aus der optischen Physik, vgl. Abschn. 2.3, dargestellt und ausgewertet werden.

Das Startparameterquadrupel sei (2.19)-(2.22). Um einen Vergleich mit den Ergebnissen früherer Untersuchungen zulässig zu machen, wurden anfänglich nur 4 Iterationen mit den jeweiligen Normen gemacht. Die Ergebnisse sind nachfolgend als Ausgaben dargestellt:

- Für die Tschebyshev-Norm:

```

Optimization terminated.
Abbruchbed.: maximale Anzahl der Iterationen erreicht
Der zuletzt berechnete Parameter A ist: -7.2756120762...
Der zuletzt berechnete Parameter B ist: 4.1953471185...
Der zuletzt berechnete Parameter C ist: -0.0648328305...
Der zuletzt berechnete Parameter D ist: -0.0950622620...
Die Funktion f hat dort den Wert: 0.5569456739774559
Verwendete Norm: Tschebyshev-Norm
Elapsed time is 0.745039 seconds.

```

- für die Betragssummennorm:

```

Optimization terminated.
Abbruchbed.: maximale Anzahl der Iterationen erreicht
Der zuletzt berechnete Parameter A ist: -7.0852631551...
Der zuletzt berechnete Parameter B ist: 4.0052631551...
Der zuletzt berechnete Parameter C ist: -0.0663093307...
Der zuletzt berechnete Parameter D ist: -0.1427433477...
Die Funktion f hat dort den Wert: 1.5273130357142213
Verwendete Norm: Betragssummen-Norm
Elapsed time is 0.124580 seconds.

```

- und für die Euklidische Norm:

```

Abbruchbed.: maximale Anzahl der Iterationen erreicht
Der zuletzt berechnete Parameter A ist: -9.0601365183...
Der zuletzt berechnete Parameter B ist: 5.9814038334...
Der zuletzt berechnete Parameter C ist: -0.0679108743...
Der zuletzt berechnete Parameter D ist: -0.0912430407...
Die Funktion f hat dort den Wert: 1.0372120225603148
Verwendete Norm: Euklidische Norm
Elapsed time is 0.063460 seconds.

```

Im Vergleich dazu erhielten die Autoren die Werte

Norm	Maximum-	Betragssummen-	Euklidische
A	-17.0995	-7.0853	-61.2624
B	14.0162	4.0053	58.1853
C	-0.0715	-0.0663	-0.0774
D	-0.0818	-0.1427	-0.0804
Fkt.wert	0.5560	1.5273	1.0010
Zeit	4.7314 sec	15.4538 sec	0.9613 sec

Tabelle 5.1: Darstellung der Ergebnisse des Modellalgorithmus für das Problem der physikalischen Optik bei $MaxIt = 500$ mit unterschiedlichen Normen.

A = -7.2373952
 B = 3.9388302
 C = -0.064499989
 D = -0.095999546.

Im Anschluss daran wurden 500 Iterationen durchgeführt um die Entwicklung der Parameter zu beobachten, vgl. Tab. 5.4. Dabei fällt bei der Euklidischen Norm auf, dass die Parameter A und B verhältnismäßig stark ansteigen. Die Werte der Betragssummennorm verbessern sich gegenüber den Ergebnissen nach vier Iterationen nicht mehr wesentlich.

Abb. 5.2, 5.3 und 5.4 zeigen die unterschiedliche Wertung von Abweichungen bei den unterschiedlichen Normen. Zunächst ist deutlich erkennbar, dass unter der Anwendung der Betragssummennorm in Abb. 5.2 die Messwerte des ersten Abschnitts, $t \in [0, 40]$, am besten genähert werden. Keine der optimalen Parameterlösungen erreicht eine gute Approximation der letzten Messpunkte, $t \in [80, 140]$. Für die Betragssummennorm sind also die Beträge des vorderen Abschnitts entscheidend. Bei der Euklidischen Norm wird hingegen die quadratische Abweichung berechnet. Da Abweichungen vom Betrag kleiner 1 weniger ins Gewicht fallen, ist hier deutlich eine Verschiebung der optimalen Lösungsfunktion zu erkennen, vgl. Abb. 5.3. Die Messpunkte zwischen $t \in [30, 70]$ werden hier sehr gut genähert. Die gleiche Beobachtung trifft für die Tschebyschev-Norm zu, Abb. 5.4. Der limitierende Wert ist der maximale Betrag aller Abweichungen, welcher dem Zielfunktionswert entspricht und hier als $f(P^*) = 0.5560$ berechnet wurde. Es wäre hier zu erwarten gewesen, dass bei der Tschebyschev-Norm die optimalen Parameter die Werte der Betragssummennorm annehmen, da der maximale Betrag der Abweichungen hier kleiner als 0.5 ist. Ursache für diese Entwicklung der optimalen Parameter sind möglicherweise lokale Optima.

Grundsätzlich kann jedoch festgehalten werden, dass die optimalen Parameter für verschiedene Normen stark variieren, weshalb geschlussfolgert werden kann, dass der geschickten Wahl der verwendeten Norm ein hoher Stellenwert zukommt.

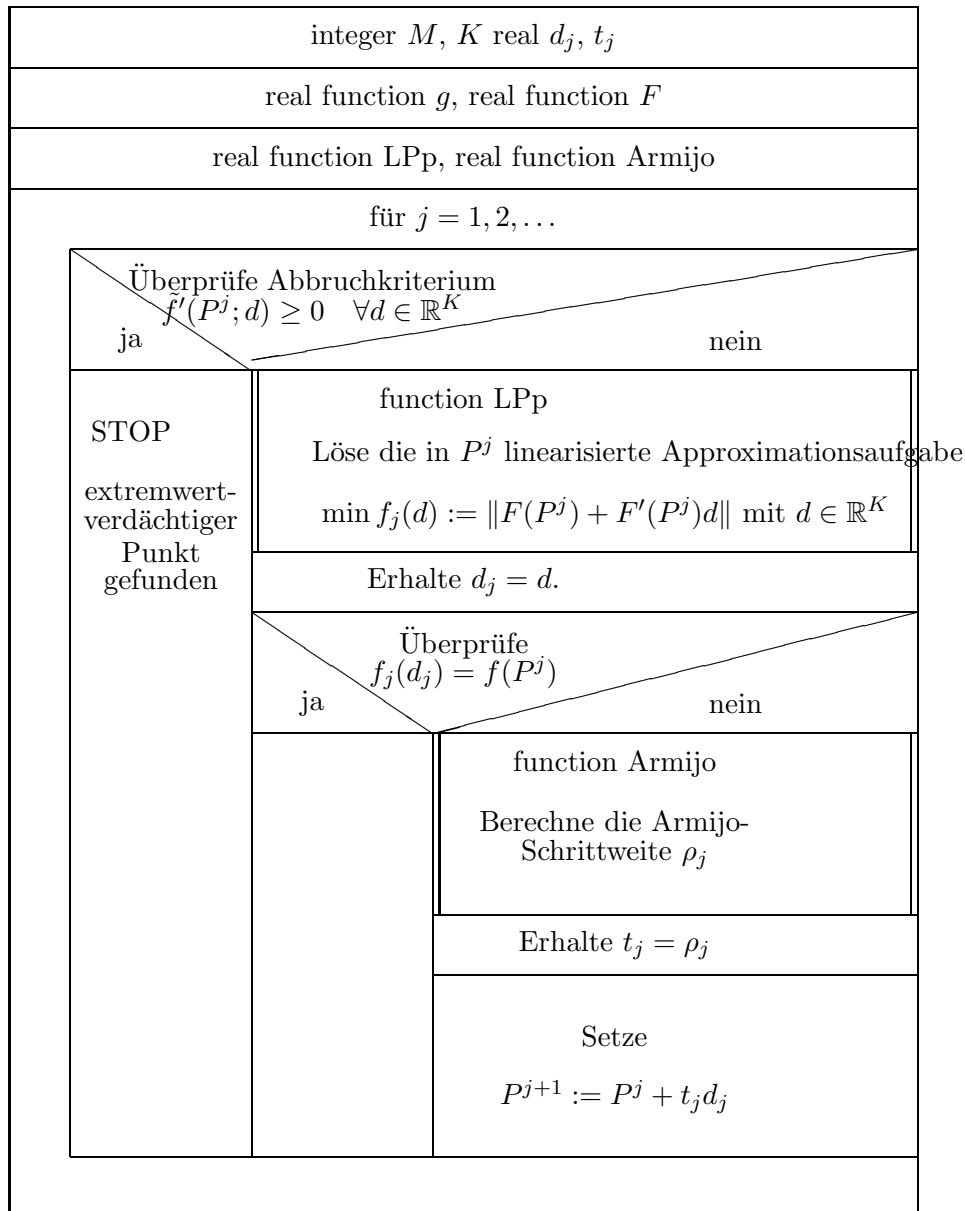


Abbildung 5.1: Ablaufschema des Modellalgorithmus.

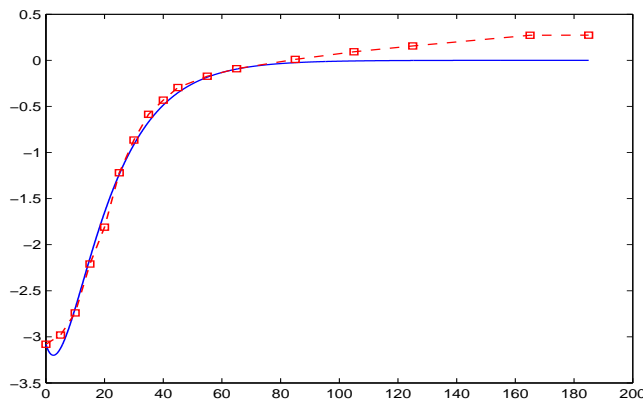


Abbildung 5.2: Graphische Darstellung der Ergebnisse für Problem (C) mit $\|\cdot\|_1$ unter Verwendung von Alg. 5.11 und den Startwerten (2.19)-(2.22).

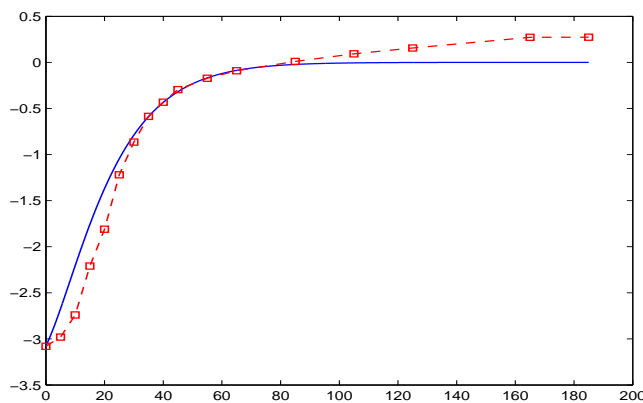


Abbildung 5.3: Graphische Darstellung der Ergebnisse für Problem (C) mit $\|\cdot\|_2$ unter Verwendung von Alg. 5.11 und der Startwerte (2.19)-(2.22).

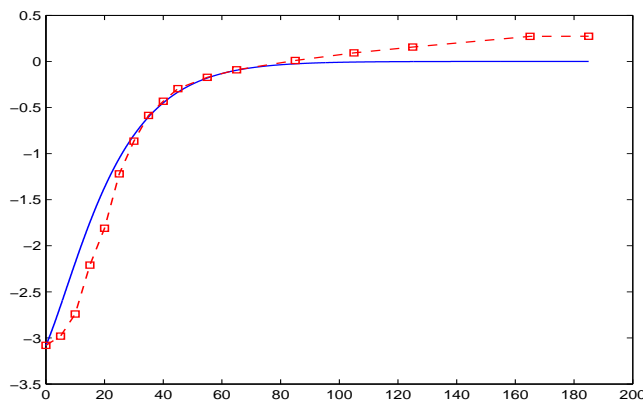


Abbildung 5.4: Graphische Darstellung der Ergebnisse für Problem (C) mit $\|\cdot\|_\infty$ unter Verwendung von Alg. 5.11 und der Startwerte (2.19)-(2.22).

Kapitel 6

Das Problem der optimalen Steuerung

In den folgenden Kapiteln wird das Parameterbestimmungsproblem als Aufgabe der optimalen Steuerung betrachtet. Die Darstellung verzichtet dabei auf Existenzsätze. Die Existenz optimaler Steuerungen wird vorausgesetzt.

6.1 Die Aufgabe der optimalen Steuerung

Sei $x(t)$ der Zustand eines Systems zur Zeit t im n -dimensionalen Zustandsraum $X \subseteq \mathbb{R}^n$, $x : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$. Das System werde durch die Differentialgleichung $\dot{x}(t) = h(x(t), u(t))$ beschrieben, wobei von $h : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}^n$ Stetigkeit und stetige Differenzierbarkeit bezüglich der x_1, \dots, x_n für alle $x(t) \in X$, $t \in [t_0, t_M]$, und alle zulässigen $u(t)$ gefordert wird¹. $u : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^K$ bezeichne hierbei die K -dimensionale stückweise stetige und eventuell beschränkte Steuerung und werde zulässig genannt, wenn gilt $u(t) \in U$ für alle $t \in [t_0, t_M]$, mit $U \subseteq \mathbb{R}^K$ der beschränkten Umgebung aus dem Raum der Steuerungen. Sei $g : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^K \rightarrow \mathbb{R}$ und g sowie g_x stetig. Das System soll nun so von einem gegebenen Anfangswert $x(t_0) = x^0$ zu einem x^M zur Zeit t_M gesteuert werden, dass das Kostenfunktional

$$J[x, u] = \int_{t_0}^{t_M} g(x(t), u(t)) dt$$

minimiert wird, unter der Voraussetzung dass zulässige Steuerungen u existieren, die das System von $x(t_0) = x^0$ in $x(t_M) = x^M$ überführen. Eine solche Steuerung $u^* = u^*(\cdot)$ mit zugehörigem optimalen Zustand $x^* = x^*(\cdot)$ wird *optimale Steuerung* genannt.

Zusammenfassend ist die Aufgabe der optimalen Steuerung (AOS) die folgende:

Aufgabe (AOS). *Aufgabe der optimalen Steuerung*

- Minimiere $J[x, u] = \int_{t_0}^{t_M} g(x(t), u(t)) dt$

¹Diese Forderung gewährleistet die eindeutige Lösung der Zustandsdifferentialgleichungen für einen gegebenen Anfangswert x^0 bei t_0 , vgl. Kap. 3.

- u. d. N. $\dot{x}(t) = h(x(t), u(t))$ mit $x(t_0) = x^0$
- und $u(t) \in U$ für alle $t \in [t_0, t_M]$.

Es kann nicht ohne weiteres angenommen werden, dass zulässige Steuerungen u existieren. In [Pi93] und [IT79] werden Beispiele für Aufgaben beschrieben, für die keine Lösung existiert. Sie geben auch Existenzsätze und ausführliche Darstellungen zu deren Beweisen an.

Um optimale Steuerungen von anderen zulässigen Steuerungen unterscheiden zu können, benötigt man ein entsprechendes Kriterium. Die notwendige Optimalitätsbedingung erster Ordnung findet Anwendung im Pontrjaginschen Maximum-Prinzip.

Wir definieren auf $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times U$ eine Funktion H durch

$$H(\psi(t), x(t), u(t)) = \psi_0 g(x(t), u(t)) + \psi(t) h(x(t), u(t)). \quad (6.1)$$

Das Pontrjaginsche Maximum-Prinzip lautet:

Satz 6.1. (Das Pontrjaginsche Maximum-Prinzip, PMP)

Sei $u^* = u^*(\cdot)$ eine zulässige Steuerung mit zugehörigem $x^* = x^*(\cdot)$, welches das System von $x(t_0) = x^0$ nach $x(t_M) = x^M$ überführt für eine nicht näher spezifizierte Zeit t_M . Sind u^* und x^* optimal, dann muss ein nicht triviales stückweise stetiges $\psi = \psi(\cdot)$ existieren mit

$$\dot{\psi}(t) = -\frac{\partial H}{\partial x}(t) \quad \text{und} \quad (6.2)$$

$$\dot{x}(t) = \frac{\partial H}{\partial \psi}(t), \quad (6.3)$$

so dass gilt:

- für fast jedes $t_0 \leq t \leq t_M$ nimmt H sein Maximum bezüglich u bei $u = u^*(t)$ an,

$$H(\psi(t), x(t), u^*(t)) = \max_{u \in U} H(\psi(t), x(t), u),$$

- $H(\psi^*(t), x^*(t), u^*(t)) = 0$ und $\psi^*(t) \leq 0$ bei $t = t_M$, wobei ψ^* die Lösung der ODE (6.2) und x^* die Lösung der ODE (6.3) ist.

Die Funktion $H : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \times U \rightarrow \mathbb{R}$ wird auch Hamilton-Funktion genannt.

Beweis. Den Beweis findet man u. a. in [IT79], [Pi93], [Bo71] und [Ga78]. \square

Um eine Lösung der (AOS) zu finden, muss also zunächst (6.1) bezüglich u maximiert werden. Der Kandidat u^* ist im Allgemeinen noch von x und ψ abhängig, die mittels der ODE (6.2) und (6.3) gelöst werden.

Das Pontrjaginsche Maximum-Prinzip stellt eine notwendige Optimalitätsbedingung dar. Jede Steuerung, die das PMP nicht erfüllt, kann keine optimale Steuerung sein. Andersherum muss eine Steuerung, die dem PMP entspricht, nicht notwendig optimal sein. Dazu sind weitere Untersuchungen erforderlich.

6.2 Stückweise konstante Steuerfunktionen

Für Aufgaben der Parameterbestimmung wird man stückweise konstante oder konstante Steuerfunktionen $u(\cdot) \in SK(I, U)$ für $I = [t_0, t_M]$ wählen. "Da als variierte Steuerungen zu einer optimalen Steuerung $u^*(\cdot) \in SK(I, U)$ auch Pontrjagin-Variationen gewählt werden können, gelten die hergeleiteten Maximumprinzipie auch für diese Aufgaben.", vgl. [Schm88].

Im Fall der Beschränkung der Anzahl von Umschaltpunkten gelten jedoch andere Bedingungen. Sei

$$u(t) = u^\mu \text{ für } t_{\mu-1} < t \leq t_\mu, \mu = 1, \dots, M,$$

eine stückweise konstante Steuerung. Es mögen die stetigen partiellen Ableitungen h_u auf $\mathbb{R}^n \times U^0$ und g_u auf $\mathbb{R} \times U^0$ existieren, wobei U^0 irgendeine offene Obermenge von U ist. Dann gilt

Satz 6.2. *Für die Optimalität von $u^*(\cdot)$, $x^*(\cdot)$ bezüglich des Optimalsteuerproblems (AOS) ist die Gültigkeit der folgenden Ungleichungen für alle $\mu = 1, \dots, M$ und $v \in K(u^\mu, U)$ notwendig:*

$$\int_{t_{\mu-1}}^{t_\mu} H_u^*(t)v \, dt \leq 0. \quad (6.4)$$

Ist U offen, so folgt

$$\int_{t_{\mu-1}}^{t_\mu} H_u^*(t) \, dt = 0.$$

Hierbei ist $H_u^*(t) = H_u(\psi^*(t), x^*(t), u^\mu)$ und ψ^* die Lösung von

$$\dot{\psi}(t) = -\psi_0 g_x(x^*(t), u^*(t)) - \psi(t) h_x(x^*(t), u^*(t)).$$

Beweis. In [Schm88], wobei anstelle der Integralgleichung die entsprechende ODE zu betrachten ist, die durch Ableitung nach der Zeit erhalten wird. \square

6.3 Optimale Steuerung mit einfachem Mayer-Funktional

Das einfache Mayer-Funktional ist eine Aufgabe, bei der das Funktional lediglich vom Endpunkt abhängt.

Aufgabe (OSM). *Aufgabe der optimalen Steuerung mit einfachem Mayer-Funktional*

- *Minimiere*

$$J[x, u] = f(x(t_M)). \quad (6.5)$$

- *u. d. N. $\dot{x}(t) = h(x(t), u(t))$ mit $x(t_0) = x^0$*
- *und $u(t) \in U$ für alle $t \in [t_0, t_M]$.*

Mit der Gestalt $J[x, u] = f(x(t_M))$ liegt es nicht in reiner Integralform vor. Damit das klassische Pontrjaginsche Maximum-Prinzip anwendbar ist, muss das Kostenfunktional in Integralform überführt werden. Dazu wird eine neue Variable \mathcal{X} eingeführt mit

$$\dot{\mathcal{X}}(t) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(x(t)) h_i(x(t), u(t)) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(x(t)) \dot{x}_i(t)$$

und der Endbedingung

$$\mathcal{X}(t_M) = J - f(x(t_0)). \quad (6.6)$$

Da der Anfangswert $x(t_0) = x^0$ gegeben ist, ist $f(x(t_0))$ eine bekannte Konstante. Damit ist die Minimierung von $\mathcal{X}(t_M)$ äquivalent zur ursprünglichen Aufgabe der Minimierung von (6.5). Wegen (6.5) und (6.6) gilt

$$\mathcal{X}(t_M) = f(x(t_M)) - f(x(t_0)) = \int_{t_0}^{t_M} \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(x(t)) h_i(x(t), u(t)) \right) dt.$$

Das PMP ist anwendbar. Die Hamilton-Funktion H besitzt die Gestalt

$$H(\psi(t), x(t), u(t)) = \psi_0 \left(\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial x_i}(x(t)) h_i(x(t), u(t)) \right) + \sum_{i=1}^n \psi_i(t) h_i(x(t), u(t)).$$

Wir setzen $\psi_0 = -1$. Die Differentialgleichung der Adjungierten lautet

$$\dot{\psi}_i(t) = -\frac{\partial H}{\partial x_i}(t). \quad (6.7)$$

Zur numerischen Lösung der ODE (6.7) werden jedoch Anfangs- oder Endbedingungen benötigt. Die Funktion H kann mit einigen Umformungen weiter vereinfacht werden. Dazu werden neue Adjungierte λ_i , $i = 1, \dots, n$,

$$\lambda_i(t) = \psi_i(t) - \frac{\partial f}{\partial x_i}(x(t)), \quad (6.8)$$

eingeführt, so dass H die neue Gestalt hat:

$$H(\lambda(t), x(t), u(t)) = \sum_{i=1}^n \lambda_i(t) h_i(x(t), u(t)) = \tilde{H}(\lambda(t), x(t), u(t)). \quad (6.9)$$

Wegen (6.7) und (6.8) ist

$$\begin{aligned} \dot{\lambda}_i(t) &= \dot{\psi}_i(t) - \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(x(t)) \frac{dx_j}{dt}(t) = \dot{\psi}_i(t) - \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_j \partial x_i}(x(t)) h_j(x(t), u(t)) \\ &= \sum_{j=1}^n \left(\psi_j(t) - \frac{\partial f}{\partial x_j}(x(t)) \right) \frac{\partial h_j}{\partial x_i}(x(t), u(t)) = \sum_{j=1}^n \lambda_j(t) \frac{\partial h_j}{\partial x_i}(x(t), u(t)), \end{aligned}$$

und mit (6.9) folgt

$$\dot{\lambda}_i(t) = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_i}(t).$$

Abschließend wird die Endbedingung für λ bei $t = t_M$ aus den Transversalitätsbedingungen bestimmt, für die wegen $x(t_M)$ frei $\psi(t_M) = 0$ gilt,

$$\lambda_i(t_M) = \psi_i(t_M) - \frac{\partial f}{\partial x_i} x(t_M) = -\frac{\partial f}{\partial x_i} x(t_M).$$

Die Aufgabe lautet dann: Maximiere $H(\lambda(t), x(t), u) = \sum_{j=1}^n \lambda_j(t) h_j(x(t), u)$ bezüglich $u \in U$,

$$H(\lambda^*(t), x^*(t), u^*(t)) = \max_{u \in U} H(\lambda^*(t), x^*(t), u) \text{ für fast alle } t.$$

Für die Optimalsteueraufgabe (OSM) mit einem Kostenfunktional vom einfachen Mayer-Typ (6.5) ist folgendes Randwertproblem zu lösen:

$$\begin{aligned} \dot{x}_j(t) &= \frac{\partial H}{\partial \lambda_j}(t) = h_j(x(t), u(t)), & x_j(t_0) &= x_j^0, & j &= 1, \dots, n \\ \dot{\lambda}_i(t) &= -\frac{\partial H}{\partial x_i}(t), & \lambda_i(t_M) &= -\frac{\partial f}{\partial x_i} x(t_M), & i &= 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Beispiel 6.3. Wir untersuchen das Problem (A) mit der Euklidischen Norm, vereinfachen die Aufgabe aber, indem wir nur einen gegebenen Messwert o. B. d. A. $(t_1, m_1) = (1, e^2)$ betrachten. Minimiere $f(x(t_1)) = (x(t_1) - m_1)^2$ mit $\dot{x} = Px$ und $x(0) = 1$. Aus dem PMP leiten wir dann die folgende Randwertaufgabe ab:

$$\begin{aligned} \text{Minimiere} \quad & H(\lambda, x, u) = \lambda h(x, u) = \lambda Px & \text{bzgl. } u \\ \text{u. d. N.} \quad & \dot{x} = Px, & x(0) = 1, \\ \text{und} \quad & \dot{\lambda} = -P\lambda, & \lambda(t_1) = -\frac{\partial f}{\partial x} x(t_1). \end{aligned}$$

Die Maximierung der Funktion H bezüglich des Parameters P , der hier als Steuerung fungiert, kann nicht sofort über $\frac{\partial H}{\partial P} = 0$ erfolgen. Zunächst sind $x(t)$ und $\lambda(t)$ zu bestimmen. Nach Lösen der ODE für die Zustände und mit der Endbedingung $\lambda(t_1) = -2(x(t_1) - m_1)$ ergibt sich für die Adjungierte $\lambda(t) = -2(e^{2Pt_1} - m_1 e^{Pt_1})e^{-Pt}$. Die notwendige Bedingung eines Maximums der Hamilton-Funktion liefert nun das gesuchte Ergebnis $P = 2$.

Um die Aufgabe der Parameterbestimmung als Aufgabe der optimalen Steuerung zu formulieren, reicht das bisher betrachtete einfache Mayer-Funktional nicht aus. Es läßt lediglich die Abhängigkeit vom Endpunkt, hier $x(t_M)$, zu. Im Fall der Parameteridentifizierung sollen jedoch Zielfunktionale in Abhängigkeit mehrerer $x(t_i)$, $i = 1, \dots, M$, $M > 1$, betrachtet werden.

6.4 Das verallgemeinerte Mayer-Funktional und stückweise konstante Steuerungen

Das verallgemeinerte Mayer-Funktional ist $J[x, u] = f(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_M))$ und soll im späteren Verlauf durch die bereits bekannte Zielfunktion der quadratischen Abweichung $\sum_{i=1}^M (x(t_i) - m_i)^2$ ersetzt werden. Als zulässige Steuerungen seien jetzt stückweise konstante Funktionen u zugelassen. Wir halten fest:

Aufgabe (VMKS). Aufgabe der optimalen Steuerung mit verallgemeinertem Mayer-Funktional und stückweise konstanten Steuerungen

- Minimiere

$$J[x, u] = f(x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_M)) \quad (6.10)$$

- u. d. N. $\dot{x} = h(x, u)$ mit $x(t_0) = x^0$
- und $u \in SK(I, U)$ stückweise konstant.

Aus [Schm88] und [Schm86] wurde für (6.4) folgende Zuarbeit geleistet: "Die Ungleichung lässt sich sofort auch für Prozesse mit einem Punktfunktional des Typs $f(x(t_1), \dots, x(t_M))$ zeigen, sie hat formal die gleiche Gestalt, [...]"². Gegeben sei ein Problem der Form (VMKS) und Messstellen $t_0 \leq t_1 < \dots < t_M$. Die Hamilton-Funktion sei wie folgt definiert:

$$H(\psi(t), x(t), u(t)) = \psi(t) \cdot h(x(t), u(t)),$$

wobei die Adjungierte $\psi(\cdot)$ durch eine ODE mit Sprüngen bei t_1, \dots, t_M gegeben ist.

Sei $u(\cdot)$ stückweise konstant, das heißt $\dot{u}(t) = 0$ auf ganz $I = [t_0, t_M]$. Dann kann man zeigen, falls die stückweise konstante Funktion $u^*(\cdot)$ optimal ist, $u^*(t) = u^*$, so existiert eine Lösung $\psi^*(\cdot)$ der adjungierten Gleichung, wobei

$$\dot{\psi}(t) = -\psi(t) \cdot h_x(x(t), u(t))$$

und

$$\psi(t_\mu + 0) = \psi(t_\mu) + f_{x_\mu}(x^*(t_1), \dots, x^*(t_M)), \quad \mu = 1, \dots, M,$$

so dass

$$\int_{t_0}^{t_M} H_u(\psi^*(t), x^*(t), u^*) dt = 0,$$

das heißt

$$\int_{t_0}^{t_M} \psi^*(t) \cdot h_u(x^*(t), u^*) dt = 0.$$

Beispiel 6.4. Wir betrachten das Problem (A) mit der Euklidischen Norm, nehmen dieses Mal aber zwei Messwerte als gegeben, o. B. d. A. $(t_1, m_1) = (1, e^2)$ und $(t_2, m_2) = (2, e^4)$. Minimiere $f(x(t_1), x(t_2)) = (x(t_1) - m_1)^2 + (x(t_2) - m_2)^2$ mit $\dot{x} = Px$ und $x(0) = 1$. Wir leiten folgende Randwertaufgabe ab:

$$\begin{array}{lll} \text{Minimiere} & H(\lambda, x, u) = \lambda h(x, u) = \lambda Px & \text{bzgl. } u \\ \text{u. d. N.} & \dot{x} = Px, & x(0) = 1, \\ \text{und} & \dot{\lambda} = -P\lambda, & \lambda(t_2 + 0) = \lambda(t_2) + \frac{\partial f}{\partial x} x(t_2), \\ \text{sowie} & & \lambda(t_1 + 0) = \lambda(t_1) + \frac{\partial f}{\partial x} x(t_1). \end{array}$$

²Für die bessere Lesbarkeit wurde das Punktfunktional an die in der Arbeit verwendeten Bezeichnungen angepasst.

Auch hier ist die Maximierung der Funktion H bezüglich des Parameters P mit $\frac{\partial H}{\partial P} = \lambda x = 0$ erfolglos. Wir bestimmen $x(t)$ und $\lambda(t)$, wobei zu beachten ist, dass die Stellen t_1 und t_2 Sprungstellen für λ darstellen. Nach Lösen der ODE für die Zustände $x(t) = e^{Pt}$ mit gegebenem Anfangswert und Lösen der ODE der Adjungierten $\lambda(t) = Ce^{-Pt}$ ist die Integrationskonstante C für die Teilintervalle $I_1 =]t_0, t_1]$ und $I_2 =]t_1, t_2]$ aus den Sprungbedingungen $\lambda(t_i + 0) = \lambda(t_i) + 2(x(t_i) - m_i)$, $i = 1, 2$, zu bestimmen. Es ergibt sich für die Adjungierte

$$\begin{aligned}\lambda(t) &= -2(e^{2Pt_2} - m_2 e^{Pt_2})e^{-Pt}, & t_1 < t \leq t_2, \\ \lambda(t) &= (-2(e^{2Pt_2} - m_2 e^{Pt_2}) - 2(e^{2Pt_1} - m_2 e^{Pt_1}))e^{-Pt}, & t_0 < t \leq t_1.\end{aligned}$$

Die notwendige Bedingung eines Maximums der Hamilton-Funktion muss in diesem Fall auf beiden Teilintervallen I_1 und I_2 ausgewertet werden und liefert für I_2 den gesuchten Parameter $P = 2$. Für I_1 wird die Optimalitätsbedingung

$$(e^{2Pt_2} - m_2 e^{Pt_2}) + (e^{2Pt_1} - m_1 e^{Pt_1}) = 0.$$

Sie ist mit obigen Messwerten und $P = 2$ erfüllt.

Für Probleme mit mehreren Messwerten erfolgt die analytische Lösung analog.

Nachfolgend werden klassische Methoden zur Lösung von (AOS) erläutert.

Kapitel 7

Direkte Methoden zur Lösung von Optimalsteuerproblemen

Zur numerischen Lösung von Optimalsteuerproblemen liegen umfangreiche Arbeiten vor. Dabei wird zwischen *direkten* und *indirekten* Verfahren unterschieden. Direkte Verfahren bezeichnen Verfahren, die die Zustands- und Steuervariable endlich dimensional approximieren und dadurch anstelle des Optimalsteuerproblems ein nichtlineares Optimierungsproblem erzeugen. Indirekte Verfahren benutzen hingegen notwendige Optimalitätsbedingungen und erfordern vom Anwender Kenntnisse und Vorarbeit über das Maximumprinzip und die adjungierten Variablen. In dieser Arbeit werden ausschließlich die direkten Verfahren betrachtet, welche in die *direkten Schießverfahren*, Abschn.7.1, und die *direkten Kollokationsmethoden*, Abschn. 7.2, unterteilt werden. Direkte Schießverfahren diskretisieren die Steuerung und erstellen mit der darauffolgenden numerischen Integration der ODE ein nichtlineares Optimierungsproblem. Direkte Kollokationsmethoden diskretisieren sowohl Steuerung als auch Zustandsvariable. Die ODE wird mit der Kollokationsmethode erfüllt. Auch hier entsteht eine nichtlineare Optimierungsaufgabe, die ebenfalls mit dem SQP-Verfahren behandelt wird. Zur Darstellung der Verfahrensweise der direkten Methoden betrachten wir die Aufgabe der optimalen Steuerung mit einfachem Mayer-Funktional (OSM):

- Minimiere $J[x, u] = \bar{f}(x(t_M))$,
- u. d. N. $\dot{x}(t) = h(x(t), u(t))$ mit $x(t_0) = x^0$
- und $u(t) \in U \subseteq \mathbb{R}^K$ für alle $t \in [t_0, t_M]$.

7.1 Direkte Schießverfahren

Die Idee des direkten Schießens basiert auf einer Diskretisierung der Steuerung u auf einem Gitter

$$\Gamma_N = \{\tau_1, \dots, \tau_N\}$$

mit Steuerungsgitterpunkten $t_0 = \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_N = t_M$, beispielsweise durch eine stückweise konstante Funktion

$$u_N(t) = \bar{u}_i, \quad t \in [\tau_i, \tau_{i+1}), \quad i = 1, \dots, N-1.$$

Bei der anschließenden Lösung der ODE mittels eines numerischen Integrationsverfahrens entsteht ein nichtlineares Optimierungsproblem, welches mit dem SQP-Verfahren gelöst wird.

7.1.1 Das Programmpaket OC-ODE

Im Programmpaket OC-ODE ist ein direktes Schießverfahren umgesetzt. Die Software ermöglicht dem Benutzer eine breite Wahl an verschiedensten Einstellungen. Für die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit wurde ein äquidistantes Gitter $\Gamma_N = \{\tau_1 + i\theta \mid i = 0, 1, \dots, N-1\}$, $N \geq 2$, $N \in \mathbb{N}$, mit Schrittweite $\theta = \frac{\tau_N - \tau_1}{N-1}$ gewählt, auf dem die Steuerung u durch die Funktion

$$u_N(t) = u_N(t; c_1, \dots, c_{n+k-2}) := \sum_{i=1}^{N+k-2} c_i B_{ik}(t) \quad (7.1)$$

approximiert wird. Die Vektoren $c_i \in \mathbb{R}^K$, $i = 1, \dots, N+k-2$, werden die Boor-Punkte genannt und die Funktionen $B_{ik}(\cdot)$ sind B-Splines der Ordnung k , vgl. [Ge09]. Für $k = 1$ sind die $B_{i1}(\cdot)$ stückweise konstant, $i = 1, \dots, N-1$,

$$B_{i1}(t) = \begin{cases} 1, & \text{falls } \tau_i \leq t < \tau_{i+1}, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}.$$

Die Steuerung u wird dann durch die de Boor-Punkte gegeben,

$$u_N(\tau_i) = c_i, \quad i = 1, \dots, N-1.$$

Die Integration der ODE erfolgt auf einem Zustandsgitter $G = \{\bar{\tau}_1, \dots, \bar{\tau}_n\}$, $n \geq 1$, mit Mehrzielknoten $t_0 = \bar{\tau}_1 < \dots < \bar{\tau}_n = t_M$ mittels eines s -stufigen Runge-Kutta-Verfahrens mit Koeffizienten a_{ij} , b_j ,

$$x_{i+1} = x_i + \theta \sum_{j=1}^s b_j k_j, \quad i = 0, \dots, n-1, \quad (7.2)$$

$$k_j = h(x_i + \theta \sum_{l=1}^s a_{jl} k_l, u_N). \quad (7.3)$$

In jedem Zustandsgitter-Teilintervall $[\bar{\tau}_i, \bar{\tau}_{i+1}]$, $i = 1, \dots, n-1$, wird die ODE $\dot{x} = h(x, u)$ für einen unbekanntem Anfangswert $x(\bar{\tau}_i)$ und die durch u_N ersetzte Steuerung u gelöst. Das für $k = 1$ resultierende NLOP ist

$$\begin{array}{ll} \text{Minimiere} & \bar{f}(x_n) \\ \text{bezüglich} & (x_0, \dots, x_{n-1}, u_1, \dots, u_{N-1})^T \in \mathbb{R}^{n+(N-1)K} \\ \text{u. d. N.} & \text{Gl. (7.2) und (7.3),} \end{array}$$

und wird mit der SQP-Methode gelöst, vgl. [GMSW86].

- 0 = erfolgreich, KKT¹-Punkt mit geforderter Genauigkeit gefunden.
- 1 = erfolgreich, Suchrichtung Null, KKT-Punkt gefunden, evtl. nicht geforderte Genauigkeit.
- 2 = erfolgreich, Suchrichtung hinreichend klein, KKT-Punkt gefunden, evtl. nicht geforderte Genauigkeit.
- 5 = keine Verbesserung in Suchrichtung, evtl. schlechte Startschätzung.
- 6 = nicht erfolgreich, Problem evtl. unzulässig.

Für eine Lösung mit $IER > 0$ sind demnach die Werte für die Verletzung der Nebenbedingungen und der KKT-Optimalitätsbedingungen entscheidend. Sie sollten in einem Optimum nahe bei Null sein.

Die Ergebnisse werden hier für Problem (B) dargestellt. Aber auch Problem (C) und (D) wurden mit dieser Software untersucht. Die Komplikationen, die sich dabei ergaben, werden im Anschluss kurz diskutiert.

Problem (B)

Für das Problem (B) haben wir nach oben beschriebener Transformation 10 ODEs in Abhängigkeit von B und r mit unbekanntem Anfangswert N^0 . Die Aufgabe, vgl. hierzu Anhang D, wird also mit 2 Parametern und 9 Randwertbedingungen $x_i(t_M) = N^0$ implementiert, wobei jeweils Beschränkungen für die Parameter und den AW angegeben werden. Das direkte Schießverfahren wurde mit verschiedenen Integratoren auf das Problem (B) angewendet, darunter explizite und implizite RK-Verfahren verschiedener Ordnungen sowie explizites und implizites Euler-Verfahren. Bei passender Wahl der Toleranzen sind alle Integratoren erfolgreich. Stellvertretend werden hier die Ergebnisse mit Runge-Kutta 45 aufgezeigt.

Euklidische Norm Die mit OC-ODE erhaltenen Ergebnisse für die Euklidische Norm sind in Tab. 7.1 dargestellt. Nach der Auswertung der Einträge können folgende Aussagen getroffen werden:

- Bei Startparametern in der Umgebung der optimalen Parameter konvergiert das Verfahren auch für schwache Beschränkungen $P \in [\overline{P}, \underline{P}]$ gegen die Parameter.
- Anfangswerte sind ungleich Null zu wählen. Werden mehrere Startparameter Null gesetzt, bricht der Algorithmus ohne Erfolg ab.
- Eine schlechte Startparameterwahl behindert die Konvergenz zu einem Minimum. Dabei ist eine allgemein gültige Aussage, welcher Parameter wie stark vom Optimum abweichen darf, um eine Konvergenz zu erzielen, schwierig. Es läßt sich jedoch entnehmen, dass die einzelnen Parameter entsprechend ihrer Sensitivitäten verhältnismäßig gleich weit vom optimalen Parameter entfernt sein dürfen.

¹KKT: Karush-Kuhn-Tucker.

Im Allgemeinen wird das Verhalten des Algorithmus jedoch stark von der Art des Problems abhängen. Außerdem kann nicht ausgeschlossen werden, dass viele nah beieinander liegende lokale Minima existieren.

P_0	$P_i \in [\underline{P}, \overline{P}]$	ZF	P_{opt}	IER/NB	KKT
$B^0 = 5.80$ $N^0 = 0.45$ $r^0 = 0.06$	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	0.5320	$B^* = 5.9576$ $N^{0*} = 0.5609$ $r^* = 0.0488$	1 / 0	$2E - 07$
<u>$B^0 = 10.0$</u> $N^0 = 0.45$ <u>$r^0 = 0.00$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	/ (o.E.)	$B^* /$ $N^{0*} /$ $r^* /$	/	/
<u>$B^0 = 0.00$</u> $N^0 = 0.45$ <u>$r^0 = 0.01$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	/ (o.E.)	$B^* /$ $N^{0*} /$ $r^* /$	/	/
<u>$B^0 = 7.0$</u> $N^0 = 0.45$ $r^0 = 0.01/0.1$	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	/ (o.E.)	$B^* /$ $N^{0*} /$ $r^* /$	/	/
<u>$B^0 = 7.0$</u> $N^0 = 0.45$ <u>$r^0 = 0.06$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	6.7293	$B^* /$ $N^{0*} /$ $r^* /$	6 / 0	$0.5E03$
<u>$B^0 = 6.0$</u> $N^0 = 0.45$ $r^0 = 0.01/0.07$	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	0.5320	$B^* = 5.9576$ $N^{0*} = 0.5609$ $r^* = 0.0488$	1/0	$1E - 07$
<u>$B^0 = 1.0$</u> <u>$N^0 = 0.6/0.9$</u> <u>$r^0 = 0.07$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	16.44	$B^* = 3.8634$ $N^{0*} = 0.0734$ $r^* = 0.1728$	2/1E-06	$1E - 02$

Tabelle 7.1: Ergebnisse mit OC-ODE für Problem (B) mit der Euklidischen Norm: 2 Parameter B und r ; N^0 geht als freier Anfangswert ein, unter Benutzung des Integrators RK45. Die Veränderungen in jedem Durchlauf sind unterstrichen. o.E. = ohne Erfolg.

Betragssummennorm Bei der Auswertung der Ergebnisse für die Betragssummennorm ist deutlich eine Tendenz der Lösung zu erkennen. Es zeigt sich, dass der Algorithmus des direkten Schießens bei gleichen Startparametern wie im Falle der Euklidischen Norm erfolgreich ist, vgl. Tab 7.2. Ebenso kann ein Versagen des Verfahrens bei schlechten Startparametern beobachtet werden. Bei der Untersuchung der Anfälligkeit des Algorithmus auf ungeschickte Startparameter-Wahl kann ein Versagen bei Startwerten in Null beobachtet werden. Im Vergleich der ermittelten optimalen Parameter für die Euklidische Norm und die Betragssummennorm sind deutliche Größenunterschiede auszumachen.

Tschebyschev-Norm Im großen und ganzen können die Ergebnisse für die Euklidische und die Betragssummennorm auch für die Tschebyschev-Norm nachgewiesen werden, vgl. Tab 7.3. Bei Startparametern in der Umgebung der optimalen Lösung und mit adäquaten Beschränkungen konvergiert der Algorithmus gegen ein Minimum. Es kann jedoch eine größere Empfindlichkeit des Algorith-

P_0	$P_i \in [\underline{P}, \underline{P}]$	ZF	P_{opt}	IER / NB	KKT
$B^0 = 5.80$ $N^0 = 0.50$ $r^0 = 0.06$	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 0.1]$	1.6088	$B^* = 5.8226$ $N^{0*} = 0.4363$ $r^* = 0.0564$	1 / 0	7E01
<u>$B^0 = 1.00$</u> <u>$N^0 = 0.10$</u> <u>$r^0 = 0.07$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	1.6089	$B^* = 5.8225$ $N^{0*} = 0.4365$ $r^* = 0.0564$	2 / 0	2E01
<u>$B^0 = 10.0$</u> $N^0 = 0.10$ <u>$r^0 = 0.10$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	/ (o.E.)	$B^* /$ $N^{0*} /$ $r^* /$	/	/
<u>$B^0 = 0.00$</u> <u>$N^0 = 0.45$</u> <u>$r^0 = 0.01$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	/ (o.E.)	$B^* /$ $N^{0*} /$ $r^* /$	/	/

Tabelle 7.2: Ergebnisse mit OC-ODE für Problem (B) mit der Betragssummennorm: 2 Parameter B und r ; N^0 geht als freier Anfangswert ein unter Benutzung des Integrators RK45. Die Veränderungen in jedem Durchlauf sind unterstrichen. o.E. = ohne Erfolg.

mus für die Zielfunktion mit Tschebyschev-Norm gegenüber schlechten Startparametern beobachtet werden. Der Algorithmus ist hier ausschließlich für gute Startschätzungen erfolgreich.

P_0	$P_i \in [\underline{P}, \underline{P}]$	ZF	P_{opt}	IER / NB	KKT
$B^0 = 5.80$ $N^0 = 0.50$ $r^0 = 0.06$	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 0.1]$	0.3527	$B^* = 6.2608$ $N^{0*} = 0.7091$ $r^* = 0.0410$	1 / 0	1E - 04
<u>$B^0 = 1.00$</u> <u>$N^0 = 0.10$</u> <u>$r^0 = 0.07$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	/ (o.E.)	$B^* /$ $N^{0*} /$ $r^* /$	/	/
<u>$B^0 = 10.0$</u> $N^0 = 0.10$ <u>$r^0 = 0.10$</u>	$B \in [0.0, 10]$ $N^0 \in [0.0, 10]$ $r \in [0.01, 1.0]$	/ (o.E.)	$B^* /$ $N^{0*} /$ $r^* /$	/	/

Tabelle 7.3: Ergebnisse mit OC-ODE für Problem (B) mit der Tschebyschev-Norm: 2 Parameter B und r ; N^0 geht als freier Anfangswert ein unter Benutzung des Integrators RK45. Die Veränderungen in jedem Durchlauf sind unterstrichen. o.E. = ohne Erfolg.

Ein Vergleich der optimalen Parameter zeigt, dass die Wahl der Norm bei der optimalen Parameterwahl entscheidend ist. In Tab. 7.4 sind die mit OC-ODE ermittelten optimalen Parameter für Problem (B) mit der Euklidischen-, der Betragssummen- und der Tschebyschev-Norm dargestellt. Die Werte der einzelnen Komponenten des optimalen Parameters unterscheiden sich beträchtlich.

Norm	B	N_0	r
l_2	= 5.9576	= 0.5609	= 0.0488
l_1	= 5.8226	= 0.4363	= 0.0564
l_∞	= 6.2608	= 0.7091	= 0.0410

Tabelle 7.4: Mit OC-ODE ermittelte optimale Parameter für die l_2 -, l_1 - und l_∞ -Norm

Der Wahl einer passenden Norm eines bestimmten Anwendungsproblems kommt daher ein wesentlicher Beitrag zu.

Bemerkung 7.1. *Bei der Umsetzung von Problem (C) ist ebenso wie bei Problem (B) das verallgemeinerte Mayer-Funktional in ein einfaches Mayer-Funktional umzuwandeln. Allerdings ist hier zu beachten, dass die ODE die Dimension zwei besitzt. Damit erhöht sich die Anzahl der ODE für die umgewandelte Zielfunktion nicht nur auf die Anzahl der Messpunkte, sondern diese wird auch noch verdoppelt. Das resultierende ODE-System besitzt 32 Differentialgleichungen, vgl. Anhang D.2. Für höherdimensionale Systeme und eine große Anzahl an Messwerten scheint diese Art der Umwandlung des Zielfunktionalis ungeeignet, da sich die Anzahl der Differentialgleichungen sehr erhöht.*

In der im Anschluss verwendeten Software OCPID-DAE wird dieses Problem umgangen.

7.1.3 Das Programmpaket OCPID-DAE

Bei dem Programmpaket OCPID-DAE handelt es sich um eine Weiterentwicklung des OC-ODE-Pakets. Als wichtigste Neuerung ist jedoch die neue Zielfunktion zu nennen, [Ge10]. Sie hat nun die Gestalt

$$\varphi(x(t_0), x(t_M), t_M, P) + \sum_{i=1}^M \mathfrak{H}(t_i, x(t_i), u(t_i), P)$$

mit $t_i \in [t_0, t_M]$. Die Wahl von $\varphi = 0$ für alle $t \in [t_0, t_M]$ und \mathfrak{H} als

$$\mathfrak{H}(t_i, x(t_i), u(t_i), P) = |x(t_i) - m_i| \quad \text{oder} \quad (7.9)$$

$$\mathfrak{H}(t_i, x(t_i), u(t_i), P) = |x(t_i) - m_i|^2 \quad (7.10)$$

für Betragssummen- und Euklidische Norm respektive entspricht damit dem von uns zu untersuchenden Zielfunktional. Die Umsetzung der Tschebyshev-Norm wie oben ist aufgrund der Summation über $\mathfrak{H}(t_i, x(t_i), u(t_i))$ nicht möglich. Stattdessen erfolgt die Umformung des Problems durch Einführung eines zusätzlichen Parameters, der den Wert des Maximums repräsentiert, vgl. Abschn. 4.2. Dadurch kommen zusätzliche Ungleichungsnebenbedingungen hinzu.

7.1.4 Ergebnisse mit OCPID-DAE

Die Ergebnisse der Parameteroptimierung mit OCPID-DAE sind in Tab. 7.5 dargestellt. Die Ergebnisse für die Euklidische und die Betragssummennorm

Norm	$P^0 =$	$(B$	N_0	$r)$	ZF	B^*	N_0^*	r^*	IER / NB	KKT
l_1		5.8	0.5	0.06	1.6088	5.8226	0.4363	0.0564	1 / 0	8E01
l_2		5.8	0.5	0.06	0.5320	5.9576	0.5609	0.0488	1 / 0	2E-70
l_∞		5.8	0.5	0.06	/ (o.E.)	/	/	/	/	/

Tabelle 7.5: Mit OCPID-DAE erzielte Ergebnisse für Problem (B).

stimmen mit den Ergebnissen des Softwarepaketes OC-ODE überein. Keine Ergebnisse konnten hingegen für die Tschebyschev-Norm erzielt werden. Die oben beschriebene Umformung führt zu einem nicht zulässigen Problem. Der Grund dafür ist, dass die Ungleichungsnebenbedingungen bei der Transformation der Beträge nur an den Messzeitpunkten erfüllt sein müssen. OCPID-DAE läßt jedoch lediglich Aufgaben zu, bei denen die Ungleichungsnebenbedingung auf einem ganzen Intervall erfüllt sein muss. Die Anwendung der OC-ODE Software scheint daher für Zielfunktionen mit Tschebyschev-Norm geeigneter.

7.2 Direkte Kollokation

Die Direkte Kollokation ist eine direkte Methode zur Lösung von Optimalsteuerproblemen. Mittels Diskretisierung der Zustandsvariablen und Steuerfunktionen durch stückweise Polynome wird das unendlich dimensionale Optimalsteuerproblem in ein endlich dimensionales nichtlineares Optimierungsproblem mit Nebenbedingungen umgewandelt, [vS95]. Wir betrachten, der besseren Übersicht wegen, die Diskretisierung der Zustandsvariablen als stetige stückweise lineare und der Steuerfunktionen als stückweise konstante Funktionen in der (AOS), vgl. Abschn. 6.1, im eindimensionalen Fall $n = 1$, $K = 1$. Für das Intervall $I = [t_0, t_M]$ und eine Diskretisierung analog zur Form der Messpunkte sei

$$u_d(t) = \begin{cases} u_d\left(t_i + \frac{t_{i+1}-t_i}{2}\right), & t_i \leq t < t_{i+1}, \quad i = 1, \dots, M-1, \\ u_d\left(t_M + \frac{t_M-t_{M-1}}{2}\right), & t_M, \end{cases} \quad (7.11)$$

und

$$x_d(t) = \begin{cases} x_d(t_i) + \frac{t-t_i}{t_{i+1}-t_i}(x_d(t_{i+1}) - x_d(t_i)), & t_i \leq t < t_{i+1}, \\ & i = 1, \dots, M-1, \\ x_d(t_M) + \frac{t-t_{M-1}}{t_M-t_{M-1}}(x_d(t_M) - x_d(t_{M-1})), & t_M. \end{cases} \quad (7.12)$$

Es wird die verkürzte Schreibweise verwendet: $x_i = x_d(t_i)$ und $u_i = u_d\left(t_i + \frac{t_{i+1}-t_i}{2}\right)$. Die Funktionen u_d und x_d werden nun so bestimmt, dass sie $J[x, u]$ minimieren und die ODE $\dot{x} = h(x, u)$ wenigstens an den $M-1$ Stützpunkten $\frac{t_{i+1}-t_i}{2}$, den Zwischenstellen der Teilintervalle $[t_i, t_{i+1}]$, erfüllen,

$$x_d\left(\frac{t_{i+1}-t_i}{2}\right) = \frac{x_{i+1} - x_i}{2}, \quad (7.13)$$

$$\dot{x}_d\left(\frac{t_{i+1}-t_i}{2}\right) = \frac{x_{i+1} - x_i}{t_{i+1} - t_i}. \quad (7.14)$$

Die resultierende endlich dimensionale nichtlineare Optimierungsaufgabe lautet

$$\begin{aligned} & \min_{x_1, u_1, \dots, x_M, u_M} J(x_d(t), u_d(t)) \\ & \text{u. d. N.} \quad \dot{x}_d(t) = h(x_d(t), u_d(t)), \quad \text{für alle } t = \frac{t_{i+1}-t_i}{2}, \quad i = 1, \dots, M-1. \end{aligned}$$

7.2.1 Das Programmpaket DIRCOL

Die direkte Kollokation ist ebenfalls in dem Programm-Paket DIRCOL zur Lösung von Optimalsteuerproblemen bei ODE und Randwertproblemen umgesetzt, vgl. [vS97]. Dabei wird das nichtlineare Optimierungsproblem mit NPSOL, einer auf dem SQP-Verfahren basierenden Methode gelöst, siehe [GMSW86]. Zur späteren Einschätzung der von DIRCOL ausgegebenen Ergebnisse ist die kurze Beschreibung von zwei Funktionen interessant:

- Defekte $d(t)$: Es handelt sich hierbei um absolute Fehler-Funktionen der Approximation der n_x Differentialgleichungen, die durch die Approximationen von x_{app} , u_{app} und p_{app} als stückweise lineare Funktionen an sogenannten Checkpunkten t^* beschrieben werden:

$$d(t^*) = \max\{|f_j^i(x_{app}(t), u_{app}(t), p_{app}, t) - \dot{x}_{j,app}(t)| \text{ bei } t = t^*, j = 1 \dots, n_x\}.$$

- Lokaler Optimalitätsfehler: Dieser Schätzer wird aus den Fehlern der ODE und der Nebenbedingungen, die bezüglich ihres Einflusses auf die Zielfunktion gewichtet werden, berechnet. Sei Φ der wahre Wert des Minimums und $\tilde{\Phi}$ der für das diskretisierte Problem berechnete Wert. Dann ist $\omega = \Phi - \tilde{\Phi}$ der absolute Fehler der Zielfunktion, für den aus der Summe der lokalen Fehler-Schätzer in jedem diskretisierten Intervall ein Schätzer $\tilde{\omega}$ erhalten werden kann.

Besonderheiten der Implementierung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Probleme (B) und (C) mit DIRCOL untersucht. Die Umsetzung in der Programmsoftware bei der Betragssummennorm und der Tschebyshev-Norm erforderte eine Anpassung im Zielfunktional, für welches in DIRCOL eine Eingabe des Mayer-Typs erwartet wird, vgl. [vS97]. Es sind Zielfunktionale von Multiphasen-Problemen der Form

$$F(E) = F1(E(1)) + F2(E(2)) + \dots + FM(E(M))$$

erlaubt. Das heißt, das Zielfunktional ist eine Summe von Funktionen $F_i, i = 1, \dots, M$, die entweder nur von Zustands-, Steuer- und Parameterwerten an Anfangs- oder Endpunkten, $i = 1$ beziehungsweise $i = M$, oder von den links- und rechtsseitigen Grenzwerten an Schaltpunkten, $i = 2, \dots, M - 1$, abhängen.

Im Fall der Euklidischen Norm, vgl. Tab. B.1 im Anhang, ist das Zielfunktional demnach die Summe über die Quadrate

$$Fi(E(i)) = (x(E(i)) - mi)^2$$

an den einzelnen Schaltpunkten, die den Messzeiten t_i entsprechen. Die links- und rechtsseitigen Grenzwerte in den Schaltpunkten sollen übereinstimmen, um die Stetigkeit der Lösung $x(t)$ zu gewährleisten. Dieses erzwingt man durch die Einführung zusätzlicher nichtlinearer Schaltpunktbedingungen

$$RB(E(i)) = XL(E(i)) - XR(E(i)) = 0.$$

Für die Betragssummennorm werden zusätzliche Parameter $P_{\xi_i} = |x(E(i)) - mi|$ für die Beträge eingeführt, vgl. Tab B.3 im Anhang. Diese werden dann als Ungleichungen in das Problem eingebunden, mit jeweils zwei Ungleichungen für eine Betragsgleichung

$$-P_{\xi_i} \leq x(E(i)) - mi, \quad (7.15)$$

$$P_{\xi_i} \geq x(E(i)) - mi. \quad (7.16)$$

Als Problem tritt hier auf, dass in DIRCOL die Ungleichungsnebenbedingungen für alle t aus der entsprechenden Phase gelten müssen, wohingegen die Ungleichungen (7.15) und (7.16) nur für den Zeitpunkt t_i gelten. Außerdem ist die Umsetzung der Betragssummennorm nur auf Kosten der Einführung von M zusätzlichen Parametern möglich, was bei großer Anzahl von Messpunkten abträglich sein kann. Die Zielfunktion lautet dann entsprechend

$$\min \sum_i Fi(E(i)) = \sum_i \xi_i.$$

Für die Umsetzung der Tschebyschev-Norm sind etwas umfassendere Änderungen notwendig, vgl. Tab. B.2 im Anhang. Da die Zielfunktion als Summe über die Zielfunktionale der einzelnen Phasen bestimmt wird, ist die Umsetzung der Tschebyschev-Norm als Multiphasen-Problem schwierig. Denkbar wäre zwar eine Implementierung als Summe mittels Fallunterscheidung, bei der alle Summanden, bis auf den betragsmäßig maximalen Phasen-Funktionalwert, verschwinden. Eine andere Vorgehensweise ergibt sich aus dem vorigen Abschnitt, der Transformation auf ein einheitliches Zeitintervall. Das Zielfunktional F für die Tschebyschev-Norm lässt sich dann für nur einen Phasenpunkt $E(1) = t_M$ angeben als

$$F = MAX(ABS(x1(E(1))-m1), ABS(x2(E(1))-m2), \dots, ABS(xM(E(1))-mM)).$$

7.2.2 Ergebnisse mit DIRCOL

Das Programmpaket DIRCOL wurde mit unterschiedlichem Erfolg an den oben vorgestellten Parameterbestimmungsproblemen getestet.

Problem (B)

Die Parameterschätzung ist nur für sehr gute Startwerte erfolgreich. Tab. 7.6 zeigt die Ergebnisse für verschiedene Parameter-Starttupel bei der Euklidischen Norm. Nur für die bereits sehr gute Startnäherung $(B, N_0, r) = (6, 0.5, 0.1)$ wird ein guter Zielfunktionswert, das heißt, eine kleine Abweichung von den Messwerten, erreicht.

In den Abb. 7.1- 7.3 sind die Zielfunktion $N(t)$, die Defekte $d(t)$ und die lokalen Optimalitätsfehler aufgezeichnet. Aus den Grafiken für $d(t)$ kann man entnehmen, dass die Lösung (10.52, 0.71, 86.83) in Abb. 7.2 entfällt, da Defekte größer als $1 \cdot 10^{-2}$ nicht hinnehmbar sind, vgl. [vS97].

Im Gegensatz dazu wird für das Parametertripel $(-301370.07, 1.67, 0.01)$ in Abb. 7.1 im ersten Zeitabschnitt eine gute Approximation der Messwerte

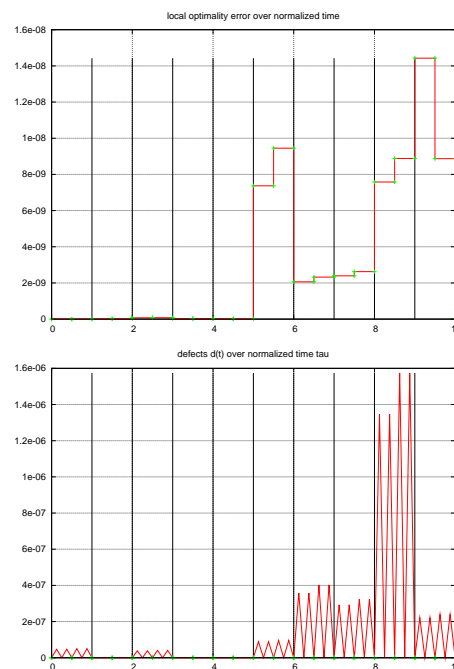
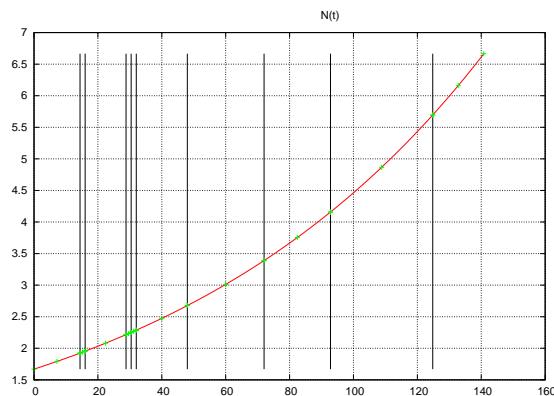
Start-Parameter			IFAIL	Lösungs-Parameter			Funktionswert
B	N_0	r		B	N_0	r	
1	1	1	0	-301370.07	1.6700498	0.0098293987	6.8323
6	1	1	4	10.524193	0.71080174	86.826294	6.655731
6	0.5	0.1	0	5.9576693	0.56086698	0.048826360	0.5319413

IFAIL 0: - Optimal solution found.

IFAIL 4: - Too many major iterations.

Tabelle 7.6: Problem (B): Ergebnisse für die Euklidische Norm mit verschiedenen Starttripeln.

Abbildung 7.1: Ergebnisse mit DIRCOL für Problem (B) und die Euklidische Norm: $N(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für das Parametertripl $(-3.01E05, 1.67E0, 9.83E-03)$, (gerundete Werte).

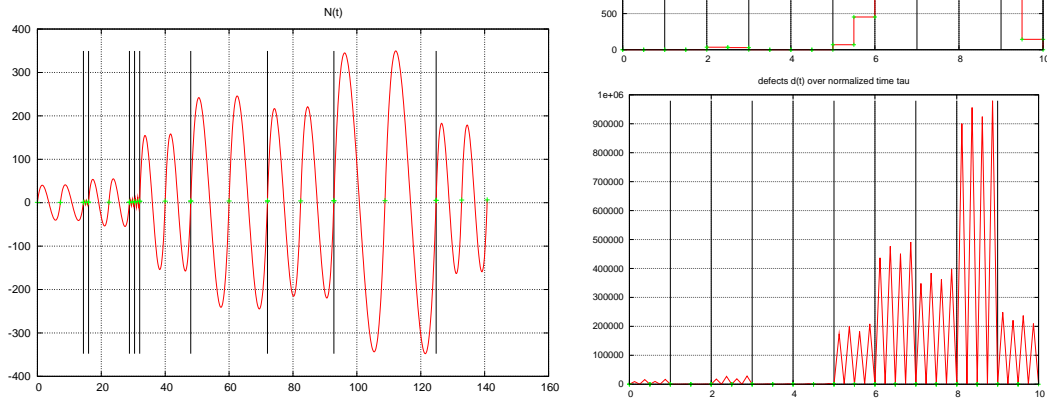


erzielt. Der beste Zielfunktionswert wird dennoch mit der Lösung $(5.96, 5.61E-01, 4.88E-02)$ in Abb. 7.3 erreicht.

Das mit DIRCOL ermittelte Lösungstripel ist mit den in den vorigen Kapiteln ermittelten Parametern in Tab. 7.7 gegenübergestellt. Dabei wird deutlich, dass die Software-Pakete OC-ODE, OCPID-DAE und DIRCOL für die Zielfunktion mit Euklidischer Norm gleiche optimale Parameter ermitteln. Eine Auswahl des geeignetesten Verfahrens sollte in diesem Fall anhand des Aufwands der Implementierung getroffen werden. Hierbei ist demnach das Paket OCPID-DAE vorzuziehen.

Die Ergebnisse der Betragssummennorm sind in Tab. 7.8 aufgeführt.

Abbildung 7.2: Ergebnisse mit DIRCOL für Problem (B) und die Euklidische Norm: $N(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für das Parametertripel $(1.05E01, 7.11E-01, 8.68E01)$, (gerundete Werte).



Methode/ Herkunft	B	N0	r
[EK05]	5.800	0.450	0.06069
Ausgleichsrechnung	5.951	0.549	0.04931
OC-ODE	5.958	0.561	0.04883
OCPID-DAE	5.958	0.561	0.04883
DIRCOL	5.958	0.561	0.04883

Tabelle 7.7: Vergleich der mit den verschiedenen Methoden erzielten Parameter für Problem (B) mit der Euklidischen Norm (gerundete Werte).

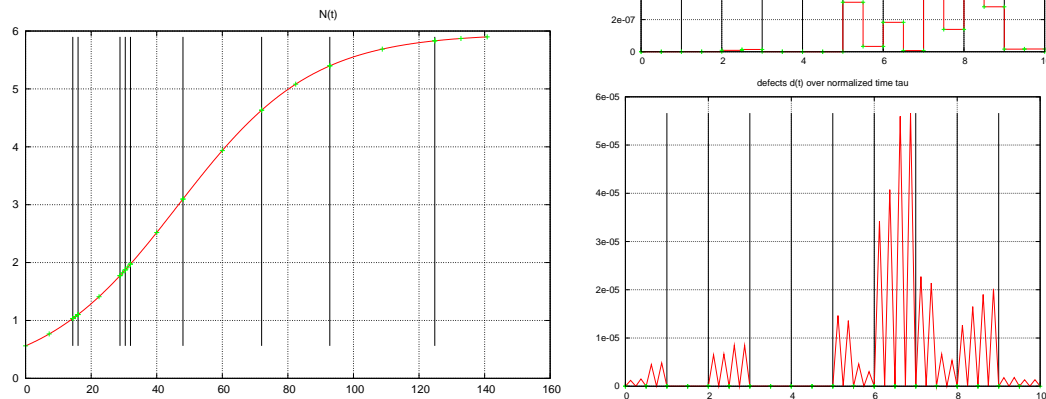
Start-Parameter			IFAIL	Lösungs-Parameter			Funktionswert
B	N_0	r		B	N_0	r	
6	0.5	0.1	6	-2341.8095	1.5784507	0.10363598E-01	6.380931
6	0.6	0.05	6	5.8268041	0.46077346	0.55511619E-01	1.609919
5.958	0.561	0.049	6	5.8291301	0.45270508	0.55230779E-01	1.610952

IFAIL 6: - Current point cannot be improved upon.

Tabelle 7.8: Problem (B): Ergebnisse für die Betragssummennorm mit verschiedenen Starttripeln.

Bei Wahl von $P^0 = (6, 0.5, 0.1)$ ist die Optimierung des Parameters erfolglos. Es ist die für die Euklidische Norm beobachtete Empfindlichkeit der Ergebnisse gegenüber Startparameterschätzungen zu beobachten, wobei hier die Existenz vieler lokaler Minima nicht ausgeschlossen werden kann. Im Fall der Tschebyschev-Norm konnte selbst für den sehr guten Startschätzer $(6, 0.6, 0.05)$ keine Lösung erzielt werden.

Abbildung 7.3: Ergebnisse mit DIRCOL für Problem (B) und die Euklidische Norm: $N(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für das Parametertripel $(5.96, 5.61E - 01, 4.88E - 02)$, (gerundete Werte).



Ähnliche Ergebnisse wurden bei der Bearbeitung des Problems (C) mit der Tschebyschev-Norm beobachtet. Die Resultate werden im folgenden Abschnitt präsentiert.

Problem (C)

Die Anwendung des Programms DIRCOL auf Problem (C) mit der Euklidischen Norm ist in Tab. 7.9 aufgeführt. Dabei wird deutlich, dass für Problem (C) mit

Start-Parameter				Lösungs-Parameter				Funktionswert
A	B	C	D	A	B	C	D	
0	0	0	0	-25.63014	22.18432	-0.02135	-0.01918	0.58487
-7.08	4.0	-0.0645	-0.096	-477.29050	474.25153	-0.09105	-0.09183	0.22753

Bei allen Durchläufen Erfolg, d.h. mit IFAIL 0: - Optimal solution found.

Tabelle 7.9: Problem (C): Ergebnisse für die Euklidische Norm mit verschiedenen Startwerten, Lösungsparameter und Funktionswerte gerundet auf fünf Stellen nach dem Komma.

der Euklidischen Norm eine Sensitivität gegenüber schlechten Startparametern nicht gegeben ist. Selbst für einen Start im Nullvektor werden die Parameter gut ermittelt. Der Zielfunktionswert unterscheidet sich vom Zielfunktionswert, welcher aus der sehr guten Startschätzung $(-7.08, 4.0, -0.0645, -0.096)$ ermittelt wurde, erst in der Nachkommastelle.

Abb. 7.4 zeigt die Lösung der Zustandsfunktion für die mit DIRCOL für die Euklidische Norm ermittelten Parameter $(-25.6, 22.2, -0.021, -0.019)$. Die

Zustandsfunktion für den Parametervektor $(-477, 474, -0.0911, -0.0918)$ ist in Abb. 7.5 dargestellt.

Abbildung 7.4: *Problem (C) mit Euklidischer Norm: $x(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für den Parametervektor (gerundete Werte) $(-25.6, 22.2, -0.021, -0.019)$.*

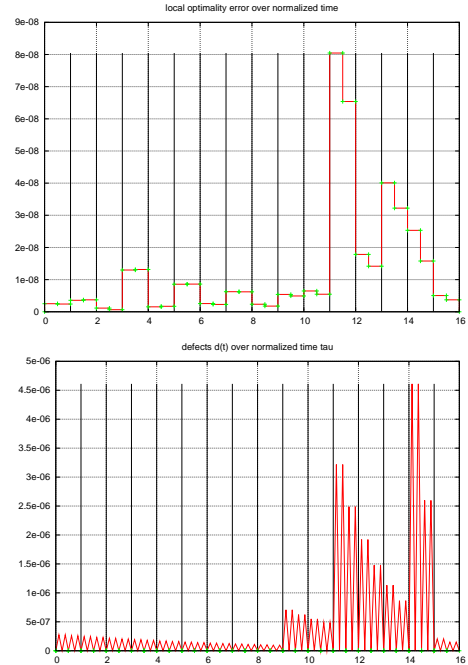
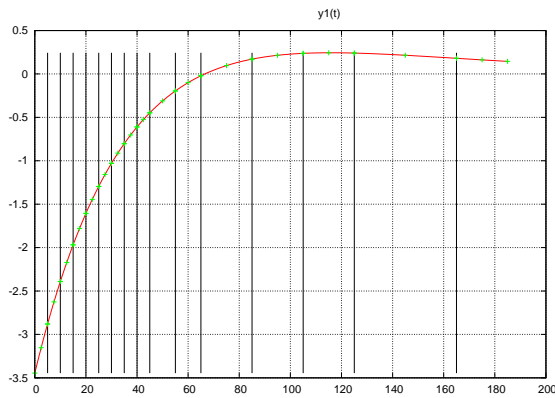
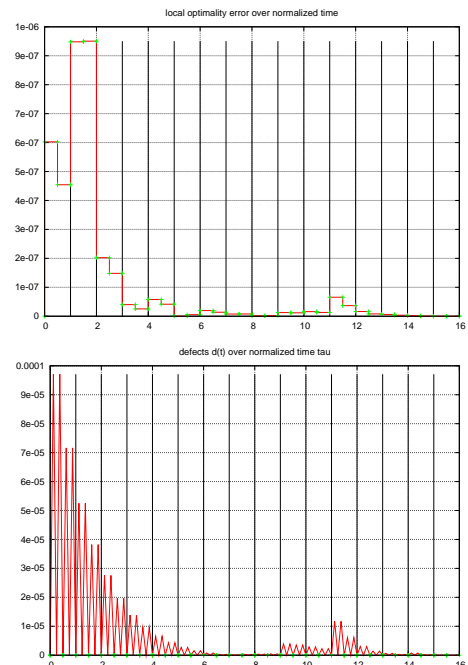
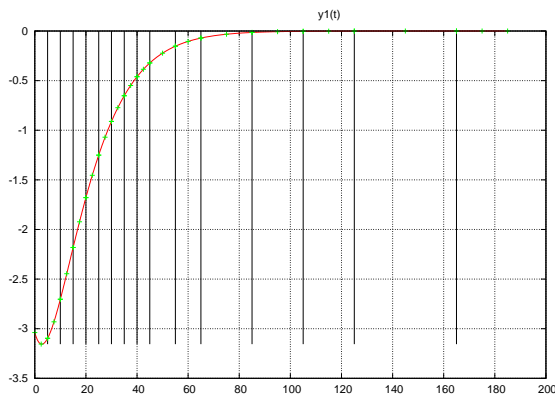


Abbildung 7.5: *Problem (C) mit Euklidischer Norm: $x(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für den Parametervektor (gerundete Werte) $(-477, 474, -0.0911, -0.0918)$.*



Des Weiteren war zu beobachten, dass in weiterführenden Berechnungen zum Teil schon bei der Angabe von wenigen Messwerten gute Näherungen für die Parameter geliefert wurden. Dies variierte jedoch stark je nach Wahl der

Messpunktmenge. Hilfreich waren hier die Ausdünnungsalgorithmen aus Abschn. 4.3.2, vgl. [Is02].

Weniger erfolgreich bei schlechter Anfangsnäherung für die Parameter war die DIRCOL-Methode bei der Betragssummennorm, wie Tab. 7.10 zeigt. Beim Start des Algorithmus im Nullvektor wurden keine zufriedenstellenden Parameter bestimmt. Die Größenordnungen von Parameter A und B zueinander entsprechen nicht den erwarteten Werten. Daraus resultierend ist der Zielfunktionswert größer als bei guten bis sehr guten Startnäherungen. Mit der

Start-Parameter				Lösungs-Parameter				Funktionswert
A	B	C	D	A	B	C	D	
0	0	0	0	-3.32	-0.32101	-0.05258	-0.05258	4.37532
-7.08	4.0	-0.0645	-0.096	-11.88537	8.92187	-0.08484	-0.12345	2.62380
-25	25	-0.1	-0.1	-25.63878	22.22773	-0.02702	-0.02465	3.53732
-25.630	22.184	-0.021	-0.019	-25.60098	22.18993	-0.02702	-0.02465	3.53732
-477.291	474.252	-0.091	-0.092	-477.26078	474.31243	-0.10011	-0.10091	2.62555

Bei allen Startquadrupeln endeten die Durchläufe mit IFAIL 0: - Optimal solution found.

Tabelle 7.10: *Problem (C): Ergebnisse für die Betragssummennorm mit verschiedenen Startwerten, Lösungsparameter und Funktionswerte gerundet auf fünf Stellen nach dem Komma.*

Näherung aus [ReSc] wird der beste Zielfunktionswert erzielt. Die Ergebnisse sind in Abb. 7.6 dargestellt. Die Zustandsfunktionen für die Parametervektoren $(-11.88, 8.92, -0.08, -0.12)$ und $(-25, 22, -0.03, -0.02)$ findet der Leser in Abb. A.1 und A.2 im Anhang der Arbeit.

Abbildung 7.6: *Problem (C) mit Betragssummen-Norm: $x(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für den Parametervektor (gerundete Werte) $(-3.32, -0.32, -0.05, -0.05)$.*

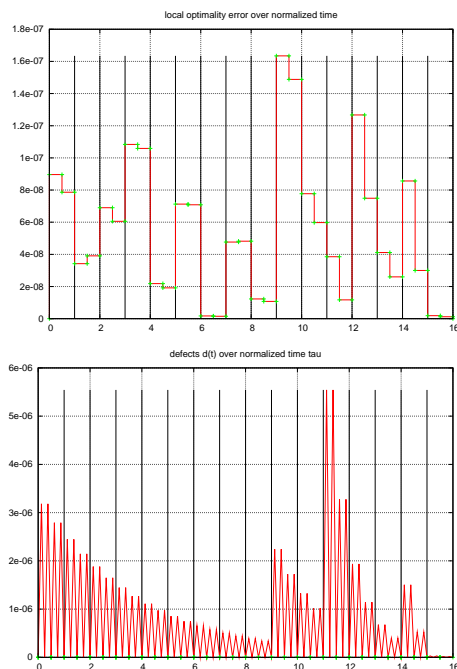
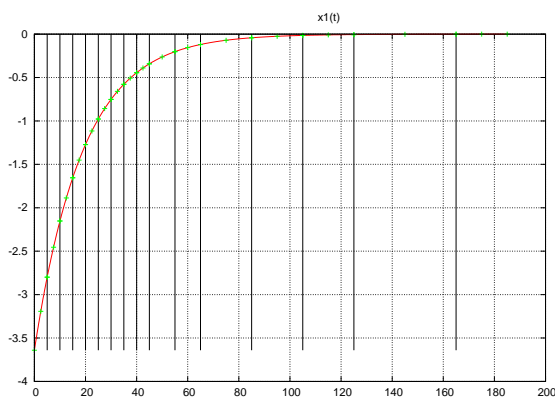
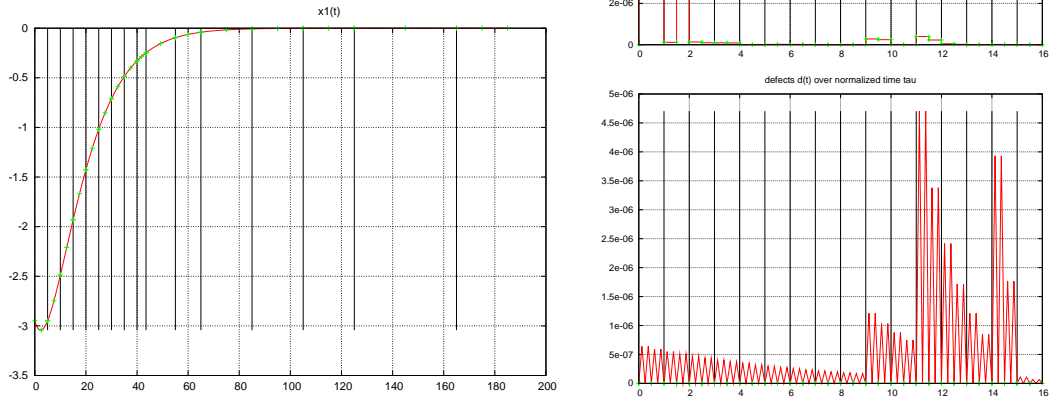


Abbildung 7.7: Problem (C) mit Betragssummennorm: $x(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für den Parametervektor (gerundete Werte) $(-477, 474, -0.1, -0.1)$.



Die Anwendung der Tschebyschev-Norm ergab auch hier wie bei Problem (B) keine Lösung. Selbst für gute Startnäherungen konnten keine optimalen Parameter ermittelt werden. Eine mögliche Fehlerquelle ist die Transformation der Tschebyschev-Norm auf eine in DIRCOL implementierbare Form mit den in Abschn. B beschriebenen Unzulänglichkeiten, dass die resultierenden Ungleichungen auf der ganzen Phase erfüllt sein müssen.

Abschließend läßt sich auch mit DIRCOL keine optimale Lösung für Problem (D) finden. Hierbei ist der Grund allerdings den vermutlich schlechten Startschätzungen zuzuschreiben. Wie in Problem (B) und (C) bereits gezeigt, ist schon für die l_1 -Norm eine Verschlechterung der Ergebnisse für ungenügende Startparameter zu beobachten. Da für Problem (D) die optimalen Parameter nicht bekannt sind, konnten ausschließlich die mit einer Gittersuchmethode erzielten Parameter $P = (1000, 8000, 28000)$ und $P = (5500, 1000, 23000)$ vorgegeben werden, welche augenscheinlich nicht den Genauigkeitsanforderungen für Startparameter entsprechen.

In diesem Kapitel wurde die Parameterbestimmung mittels direkter Verfahren der Optimalsteuerung bewerkstelligt. Dabei können aus der Implementierung und den Ergebnissen nachstehende Schlussfolgerungen gezogen werden:

- Die mit den verschiedenen Verfahren bestimmten Parameter unterscheiden sich maßgeblich je nach Wahl der Norm in der Zielfunktion.
- OC-ODE erwartet als Eingabe eine Zielfunktion vom einfachen Mayer-Typ. Dies erfordert eine Intervalltransformation für alle übrigen Messwerte, wodurch die Größe des ODE-Systems stark ansteigt. Für Aufgaben mit einer großen Anzahl an Messwerten ist diese Form der Umsetzung nicht praktikabel. Als Vorteil ist dennoch hervorzuheben, dass nach

Umwandlung auf ein einfaches Mayer-Funktional die Implementierung der Tschebyschev-Norm ohne Probleme möglich ist.

- In OCPID-DAE ist die Umsetzung der Tschebyschev-Norm dagegen nicht gelungen. Das verallgemeinerte Mayer-Funktional ist als Summe im Programm verankert. Die durch die Einführung eines zusätzlichen Parameters entstehenden Ungleichungen sollen nur an einzelnen Punkten erfüllt sein. Positiv wirkt sich die Form der Zielfunktion jedoch bei der Euklidischen und der Betragssummennorm aus, welche ohne Intervalltransformation programmiert werden können.
- DIRCOL weist ähnliche Eigenschaften wie OC-ODE auf. Als Zielfunktion wird ein einfaches Mayerfunktional erwartet, was die gleichen Schwierigkeiten wie bei OC-ODE impliziert. Für die Euklidische und die Betragssummennorm werden aber ebenfalls gute Ergebnisse erzielt.
- Zusammenfassend kann man festhalten, dass die direkten Methoden der Optimalsteuerung auf Parameterbestimmungsprobleme angewandt werden können. Allerdings ist die Vorgabe guter Startnäherungen notwendig. Gegenüber den iterativen Verfahren kann hier aber eine Verbesserung beobachtet werden. Ist die Optimierung erfolgreich, so stimmen die mit den einzelnen Verfahren erhaltenen optimalen Parameter überein. Einzig Problem (D) konnte, auch mit einer reduzierten Messwertanzahl, für keine Norm gelöst werden, wobei die Ursache im Mangel an guten Startparametern vermutet wird.

Kapitel 8

Parameterbestimmung mittels optimaler Steuerung

Wir betrachten die Parameterbestimmungsaufgabe mit Euklidischer Norm für gegebene Messpunkte (t_i, m_i) , $i = 1, \dots, M$. Der Parameter $P \in \mathbb{R}^K$ wird durch die stückweise konstante Parameterfunktion $u(\cdot) = u$ ersetzt, wobei $u(t) \in U$, $U \subseteq \mathbb{R}^K$, für alle $t \in [t_0, t_M]$ gilt. Die Aufgabe lautet :

- $\min_u f(x(t_1), \dots, x(t_M)) = \|(x(t_i) - m_i)_{i=1, \dots, M}\|_2^2$
- u. d. N. $\dot{x}(t) = h(x(t), u(t))$ mit $x(t_0) = x^0$,
- und $u(t) \in U$ für alle $t \in [t_0, t_M]$.

In diesem Kapitel soll nun die Bestimmung stückweise konstanter Steuerfunktionen untersucht werden. Zunächst werden hierzu die notwendigen Optimalitätsbedingungen der optimalen Steuerung einbezogen.

8.1 Verifikation von optimalen Steuerparametern

Wir kehren zurück zu den Resultaten aus Abschn. 6.4 und erinnern uns an die notwendige Bedingung einer optimalen stückweise konstanten Steuerung u für ein verallgemeinertes Mayer-Funktional f und die Hamilton-Funktion $H(\psi(t), x(t), u(t)) = \psi(t) \cdot h(x(t), u(t))$: Ist die stückweise konstante Funktion u^* optimal, so existiert eine Lösung der adjungierten Gleichung $\dot{\psi}$, wobei

$$\dot{\psi} = -\psi \cdot h_x(x, u) \quad (8.1)$$

und

$$\psi(t_k + 0) = \psi(t_k) + f_{x_k}(x^*(t_1), \dots, x^*(t_M)),$$

so dass

$$\int_{t_0}^{t_M} \psi(t) \cdot h_u(x^*(t), u^*) dt = 0. \quad (8.2)$$

Die Zustände werden durch die ODE $\dot{x} = h(x, u)$ mit AW $x(t_0) = x^0$ beschrieben, die im Verlauf numerisch gelöst wird.

Es ist mit dem folgenden Algorithmus möglich, eine vermeintlich optimale Steuerung u^* , die den Parameter repräsentiert, auf ihre Richtigkeit zu überprüfen¹.

Algorithmus 8.1. *Notwendige Bedingung der optimalen Steuerung*

Gegeben eine Steuerung u^* .

- (i) Löse für gegebenes u^* die Zustandsdifferentialgleichung $\dot{x} = h(x, u)$ mit Anfangswert $x(t_0) = x^0$.
- (ii) Löse mit x^* und u^* die ODE der Adjungierten ψ unter Berücksichtigung der Sprünge bei t_i , $i = 1, \dots, M$.
- (iii) Berechne das Integral $s = \int_{t_0}^{t_M} \psi^*(t) \cdot h_u(x^*(t), u^*) dt$.
- (iv) Die untersuchte Steuerung u^* ist optimal, wenn $\|s\| < \eta$ für ein gegebenes $\eta \geq 0$.

Die Komplexität des Algorithmus ist abhängig von der Art der gewählten Verfahren zur Lösung der zwei ODEs sowie der numerischen Integration.

Der Algorithmus 8.1 ist auch auf die Problemstellungen mit l_1 - und l_∞ -Zielfunktionalen anwendbar. Dazu sind die im Abschn. 4.2 beschriebenen Umformungen notwendig. Eine ausführliche Darstellung findet der Leser in [AS10].

8.1.1 Numerische Ergebnisse

Als Beispiel für die Anwendung des beschriebenen Verfahrens werden im nächsten Abschnitt die Ergebnisse für Problem (C) präsentiert. Die Vorgehensweise lässt sich analog auf die anderen Problemstellungen übertragen.

Problem (C)

In Problem (C) ist das Funktional $F : \mathbb{R}^{17} \times \mathbb{R}^{17} \rightarrow \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned} F(x(t_1), \dots, x(t_{17})) &:= F((x_1(t_1), x_2(t_1)), \dots, (x_1(t_{17}), x_2(t_{17}))) \\ &= f(x_1(t_1), \dots, x_1(t_{17})) = \sum_{i=1}^{17} (x_1(t_i) - m_{1i})^2 \end{aligned}$$

zu minimieren. Die Unterscheidung von F und f dient der Unterstreichung, dass Messwerte lediglich für die Komponente x_1 gegeben sind. Wir haben die ODE

$$\dot{x} = \begin{pmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_1(x, P) \\ h_2(x, P) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ (C + D)x_2 - CDx_1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2.$$

Die Funktion $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ wird bestimmt durch

$$\begin{pmatrix} \dot{\psi}_1 \\ \dot{\psi}_2 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ h_{2x_1} & h_{2x_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix},$$

¹Es wird hierbei davon ausgegangen, dass die im Algorithmus benötigten partiellen Ableitungen der rechten Seite der ZustandsODE h_x und h_u 'per Hand' bestimmt werden. Anderenfalls ist eine numerische Approximation der Ableitungen mittels einseitiger Differenzenquotienten möglich

mit Sprüngen

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t_i + 0) \\ \psi_2(t_i + 0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_1(t_i) \\ \psi_2(t_i) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_{x_{1i}}(x(t_1), \dots, x(t_{17})) \\ f_{x_{2i}}(x(t_1), \dots, x(t_{17})) \end{pmatrix}.$$

Als vermeintlich optimaler Parameter wurde der in [ReSc] berechnete Parameter P_2^* dem dort präsentierten Anfangsparameter P_1^* gegenübergestellt:

Parameter	A	B	C	D
P_1^*	-7.08	4	-0.0645	-0.096
P_2^*	-7.2373952	3.9388302	-0.06449989	-0.09599954

Tabelle 8.1: Der in [ReSc] präsentierte optimalen Parameter, sowie die Anfangsschätzung.

Die mit dem Alg. 8.1 erzeugten Ergebnisse stellen sich wie folgt dar und sind in Tab. 8.2 aufgelistet:

$$\begin{aligned} \text{I} \quad & \int_0^T \psi(t) \cdot h_u(x, u) dt = (0, 0, 0.1074, 0.0493), \\ \text{II} \quad & \int_0^T \psi(t) \cdot h_u(x, u) dt = (0, 0, 0.0836, 0.0379). \end{aligned}$$

Das jeweilige Integral besteht aus vier Komponenten, resultierend aus $P \in \mathbb{R}^4$. Allerdings sind aus den Integralwertkomponenten keine Rückschlüsse auf die Güte der einzelnen Parameter zulässig. Dass die Beträge für A und B verschwinden, impliziert nicht, dass A und B optimal bestimmt sind. Aus den Ergebnissen kann aber geschlossen werden, dass der Parameter P_2^* die Messdaten besser approximiert, in Übereinstimmung mit früheren Ergebnissen. Bisher

Parameter	Integral	A	B	C	D	Norm
P_1^*	I	0	0	0.1074	0.0493	0.1182
P_2^*	II	0	0	0.0836	0.0379	0.0918

Tabelle 8.2: Die Integralwerte und daraus resultierenden Normen für die Parameter aus [ReSc] und Kap. 4 im Vergleich.

wurde die notwendige Bedingung zur Verifikation einer Steuerung u benutzt. Ist eine Steuerung optimal, so muss das Optimalitätskriterium erfüllt sein. Im nächsten Abschnitt wird untersucht, ob wie im Fall des PMP mit stückweise stetigen Steuerungen mit Hilfe der notwendigen Optimalitätsbedingung auch Kandidaten ausfindig gemacht werden können.

8.2 Parameterbestimmung mittels notwendiger Optimalitätsbedingungen

Soll ein optimaler Parameter mit Hilfe der notwendigen Optimalitätsbedingungen der Optimalsteuerungstheorie bestimmt werden, drängen sich zwei Ansätze

auf. Zum einen kann man für einen Parameterstartwert die in Abschn. 8.1 eingeführten Integralwerte und ein darauf angewandtes Abstiegsverfahren nutzen, um extremwertverdächtige Parameter zu bestimmen. Eine andere Möglichkeit ist, eine Maximierung der Hamilton-Funktion vorzunehmen und daraus scheinbar optimale Parameter zu bestimmen. In beiden Fällen erhält man aus der notwendigen Optimalitätsbedingung lediglich vermeintlich optimale Parameter, deren Optimalität noch zu überprüfen ist. Die Erfüllung von Gl. (8.2) ist nicht hinreichend.

8.2.1 Abstiegsverfahren für Integralwerte

Ein Abstiegsverfahren für Integralwerte erfordert die Bestimmung einer Abstiegsrichtung, welche numerisch mit einem Differenzenquotienten bestimmt werden kann. Für den Vorwärtsdifferenzenquotienten wäre in diesem Fall der im Alg. 8.1 berechnete Wert s , welcher für ein u^0 bestimmt wurde, in einem weiteren Schritt für ein ausgelenktes $u^0 + \delta u$ zu bestimmen. Da es sich bei u^0 um eine stückweise konstante Funktion handelt, muss die Bestimmung einer Abstiegsrichtung auf jedem konstanten Teilstück von u^0 erfolgen. Dieses Verfahren scheint aufgrund des rechnerischen Aufwands jedoch nicht praktikabel und wurde in der Arbeit deshalb nicht weiter verfolgt.

8.2.2 Maximierung der Hamilton-Funktion

Eine weitere Möglichkeit ist die Maximierung der Hamilton-Funktion,

$$\max_{u \in U} H(\psi(t), x(t), u) = \max_{u \in U} \psi(t)h(x(t), u). \quad (8.3)$$

Dass auch dieser Ansatz nicht in jedem Fall praktikabel ist, zeigt die folgende Anwendung auf Problem (B).

Die zu betrachtende Zustandsdifferentialgleichung ist

$$N'(t) = r(t) \left(1 - \frac{1}{B(t)} \cdot N(t) \right) \cdot N(t) = (u_1(t) - u_2(t) \cdot N(t)) \cdot N(t),$$

wobei $u_1 = r$ und $u_2 = \frac{r}{B}$ im folgenden die zu bestimmenden Steuerungen sind. Außerdem sei $u_3 = N_0$. Wir definieren dann wie oben beschrieben eine Funktion

$$H(\psi(t), N(t), u(t)) = \psi(t) \cdot h(N(t), u(t)) = \psi(t) \cdot (u_1(t) - u_2(t) \cdot N(t)) \cdot N(t).$$

Die Ableitung nach den Steuerungen ergibt

$$\frac{\partial H}{\partial u_1}(t) = \psi(t)N(t) = 0, \quad (8.4)$$

$$\frac{\partial H}{\partial u_2}(t) = -\psi(t)N^2(t) = 0, \quad (8.5)$$

wobei die Ableitung nach u_3 keine weiteren Informationen liefert. Mit den ODEs für x und ψ erhält man ein Randwertproblem, wobei sowohl die Steuerung u als auch der AW der Zustandsfunktion unbekannt sind.

Es sind unter anderem die nachfolgenden Punkte zu berücksichtigen:

- Ist die Hamilton-Funktion linear in den zu bestimmenden Steuerungen, so verschwinden die Steuerungen bei Ableitung von H nach u . Die Ableitungen sind nur noch Funktionen von x und ψ .
- Als Konsequenz des Umstands, dass der Anfangswert der Zustandsdifferentialgleichung mit zu bestimmen ist, ist zu nennen, dass in jedem Fall eine Startschätzung für den Anfangswert notwendig ist.
- Des Weiteren erfordert auch die Zustandsfunktion, welche in Form einer ODE gegeben ist, und deren geschlossene Lösung unter Umständen nicht bekannt ist, eine numerische Lösung.

Es ist für die Maximierung der Hamilton-Funktion für die allgemeine Problemstellung also eine iterative Methode erforderlich.

8.3 Stückweise konstante Steuerungen

Abschließend soll eine Behauptung untersucht werden, die aus [Schr06] entstand. Lassen sich nach Untersuchung lokaler Minima optimale Parameter ablesen, die trotz allem eine verhältnismäßig große Abweichung, also einen großen Zielfunktionswert, produzieren, so kann man zum einen argumentieren, dass dies durch Messfehler entstanden ist, die eine große Varianz haben.

Zum anderen muss man überlegen, dass Parameter daraus hervorgehen, dass man für einen bestimmten Fall deren Konstanz annimmt. Die Abweichung kann hier auch aus einer fehlerhaften Annahme entstehen. Als Beispiel sei die Erdanziehungskraft genannt, die oft als Konstante betrachtet wird, aber über eine Ortsabhängigkeit verfügt. Der Modellfehler, der daraus resultiert, ist schwer zu detektieren, da die Zustandsdifferentialgleichung als gegeben angenommen wird.

Für diese beiden grundsätzlichen Fragestellungen soll hier eine Möglichkeit der Verifikation aus den oben erhaltenen Methoden dargestellt werden.

Wir betrachten das übliche Parameterbestimmungsproblem, unterstellen jetzt aber, dass die Modellierung mit konstanten Parametern nicht der Realität entspricht. Diese Vermutung wird überprüft, indem wir anstelle eines konstanten Parameters eine stückweise konstante Funktion zulassen. Diese neue Aufgabenstellung kann ohne große Mühe in die im Kap. 7 präsentierten Software-Pakete OC-ODE und OCPID-DAE implementiert werden. Unterliegen die stückweise konstanten Steuerungen starken Schwankungen, d.h. ändern sie sich um Größenordnungen, so erhärtet sich der Verdacht von Messfehlern beziehungsweise der Existenz einer stückweise konstanten Parameterfunktion.

8.3.1 Ergebnisse mit stückweise konstanten Parameterfunktionen

Die Idee wird an Problem (B) mit der Euklidischen Norm verdeutlicht. Tab. 8.3 zeigt die mit OC-ODE erzeugten Lösungen. In den Abb. 8.1, 8.2 und 8.3 sind die stückweise konstanten Steuerungen B und r graphisch dargestellt. Es wurden auf den äquidistanten Teilintervallen optimale konstante Steuerungen ermittelt. Dabei wurde die Anzahl der Teilintervalle und der Steuerraum U variiert. Die

Ergebnisse der dritten Zeile in Tab. 8.3 müssen jedoch wegen des KKT-Wertes verworfen werden.

Intervalle	$[\overline{P}, \underline{P}]$	ZF	IER	KKT	NB	Ergebnis
9	$B \in [5, 8]$ $r \in [-0.1, 0.1]$	0.3829	1	5e-07	0	Tab. 8.4 Abb. 8.1
4	$B \in [5, 8]$ $r \in [-0.1, 0.1]$	0.3356	1	3e-07	0	Tab. 8.5 Abb. 8.2
4	$B \in [1, 10]$ $r \in [-1, 1]$	1.7131	1	2e05	0	/
2	$B \in [5, 8]$ $r \in [-0.1, 0.1]$	0.4161	1	6e-07	0	Tab. 8.6 Abb. 8.3

Tabelle 8.3: Stückweise konstante Steuerungen für Problem (B) erzeugt mit OC-ODE. Die Schaltpunkte werden äquidistant gesetzt. Es wird $N_0 \geq 0$ gefordert. Integrator ist RK45.

Intervall	B	r	N_0
1	0.8000000000000000E+01	-0.8243848906976939E-01	0.6670982976115415E+00
2	0.5000000000000000E+01	0.9026997544571698E-01	
3	0.8000000000000000E+01	0.9533616023964944E-01	
4	0.8000000000000000E+01	0.1000000000000000E+00	
5	0.8000000000000000E+01	0.6626473930105048E-01	
6	0.8000000000000000E+01	0.7200190611617577E-01	
7	0.6972211059935759E+01	0.1000000000000000E+00	
8	0.5000000000000000E+01	0.2083340162812964E-01	
9	0.6591551103754479E+01	-0.1000000000000000E+00	

Tabelle 8.4: Stückweise konstante Steuerungen für Problem (B) mit Euklidischer Norm, erzielt mit OC-ODE. 9 Intervalle.

Intervall	B	r	N_0
1	0.7537772454504608E+01	0.1000000000000000E+00	0.7091370103833360E+00
2	0.5303645464701927E+01	0.8411636987261720E-01	
3	0.5000000000000000E+01	-0.1000000000000000E+00	
4	0.6327681920361448E+01	0.6593943574927140E-01	

Tabelle 8.5: Stückweise konstante Steuerungen für Problem (B) mit Euklidischer Norm, erzielt mit OC-ODE. 4 Intervalle.

Intervall	B	r	N_0
1	0.8000000000000000E+01	0.4966790062812391E-01	0.6259939805071032E+00
2	0.6421413565486539E+01	0.3644505163971976E-01	

Tabelle 8.6: Stückweise konstante Steuerungen für Problem (B) mit Euklidischer Norm, erzielt mit OC-ODE. 2 Intervalle.

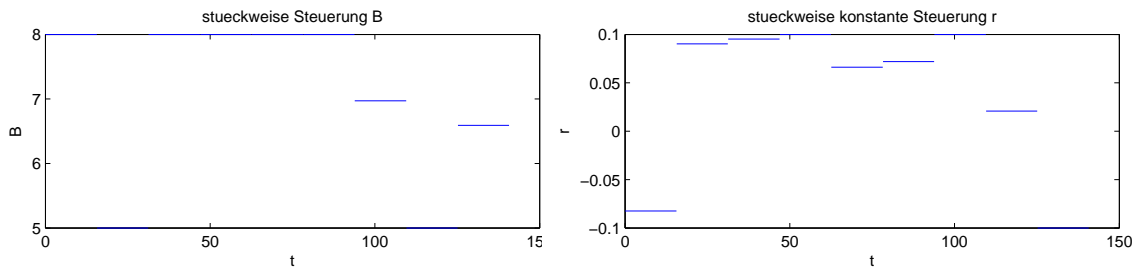


Abbildung 8.1: Stückweise konstante Steuerungen B und r für Problem (B) mit Euklidischer Norm, erzielt mit OC-ODE. 9 Intervalle.

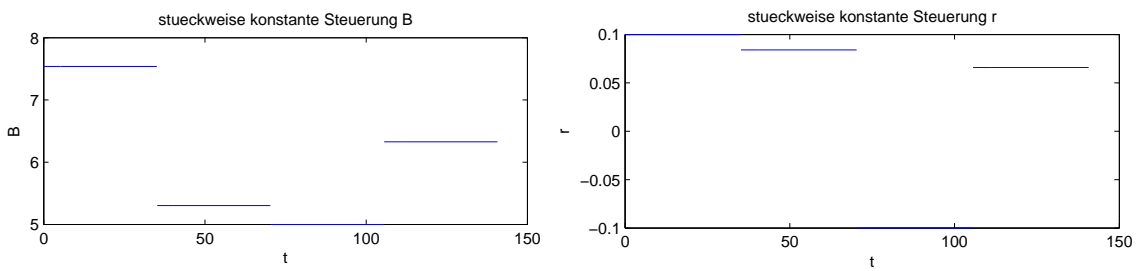


Abbildung 8.2: Stückweise konstante Steuerungen B und r für Problem (B) mit Euklidischer Norm, erzielt mit OC-ODE. 4 Intervalle.

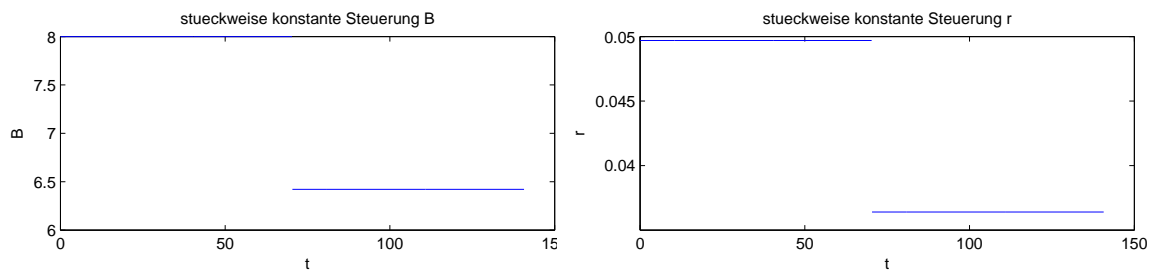


Abbildung 8.3: Stückweise konstante Steuerungen B und r für Problem (B) mit Euklidischer Norm, erzielt mit OC-ODE. 2 Intervalle.

Der Vergleich der zulässigen Lösungen für die Intervallzahlen 9, 4 und 2 ergibt:

- Der Zielfunktionswert vermindert sich in allen drei Versuchen im Vergleich zu den in Kap. 4, 5 und 7 ermittelten Zielfunktionswerten. Dieses resultiert aus der Möglichkeit, anstelle von nur zwei Parametern B und r auf dem Gesamtintervall jetzt je zwei Parameter auf kleineren Teilintervallen wählen zu dürfen. Diese werden dann spezifisch an dort gegebene Messwerte angepasst, was eine Verminderung des Zielfunktionswertes auf dem Gesamtintervall beinhaltet.
- Bei der Verminderung von 9 auf 4 Teilintervalle wird bei letzteren der bessere Zielfunktionswert erreicht. Das ist deshalb möglich, weil die Länge der Teilintervalle äquidistant gewählt wurde. Die Schaltpunkte der stückweise konstanten Steuerfunktionen liegen folglich an unterschiedlichen Zeitpunkten. Günstige Schaltpunkte bedingen in diesem Fall bessere Zielfunktionswerte.
- In den Abb. 8.1 und 8.2 ist eine starke Veränderung der Parameter festzustellen. Allerdings sind die Zeitpunkte, an denen sich die Parameter stark unterscheiden, sehr verschieden. Während sich in Abb. 8.2 der Parameter r in der ungefähren Zeitspanne $t \in [70, 105]$ sehr stark ändert, ist eine Änderung von r in Abb. 8.1 hier nicht beträchtlich. Des Weiteren ist in Abb. 2.2 dort auch kein außerordentlich großer Messfehler, d.h. Ausreißer, auffindbar.
- Allerdings geht die Variation von B in Abb. 8.1 bei $t \approx 30$ mit einer starken Änderung von B in Abb. 8.2 einher. Untersucht man dieses Indiz mittels Betrachtung von Abb. 2.2, so erkennt man die dort aufgetretenen Messungenauigkeiten.
- In Abb. 8.3 fällt auf, dass die Parameterpaare auf den zwei Intervallen weniger stark variieren. Es kann hier weder auf einen Modellfehler noch auf große Messungenauigkeiten geschlossen werden.
- Die Anzahl der Teilintervalle spielt bei der Beurteilung der Parameter folglich eine wesentliche Rolle. Wird sie zu groß gewählt, werden lediglich die Messfehler sichtbar, vgl. Abb. 8.1 und 2.2. Wird die Anzahl niedrig gewählt, so erhält man eine Abschätzung der optimalen Parameter für das Gesamtintervall durch beispielsweise Bilden des Durchschnitts.

Abschließend kann man feststellen, dass sich die Betrachtung von stückweise konstanten Funktionen anstelle der Parameter als sinnvoll erweist. Weitere Untersuchungen, insbesondere zur Anzahl der Teilintervalle, sind jedoch erforderlich.

Kapitel 9

Zusammenfassung und Ausblick

Gegenstand der Arbeit war die Parameterbestimmung aus Messdaten für eine gegebene Modellgleichung in Form einer gewöhnlichen Differentialgleichung. Durch eine ausführliche Untersuchung der Zustands- und Zielfunktionen auf Sensitivität bezüglich der Parameter, konnte eine Lösbarkeit der Aufgaben gewährleistet werden. Dazu wurden zunächst die üblichen Methoden der Ausgleichsrechnung und die Anwendung der Sequentiellen Linearen Optimierung auf die Problemstellung unter Beachtung der verwendeten Normen, Euklidische, Tschebyschev- und Betragssummennorm, betrachtet. Darüber hinaus wurde ein Modellalgorithmus eines Abstiegsverfahrens unter Verwendung von Richtungsableitungen entwickelt. Im zweiten Teil der Arbeit wurde das Parameterbestimmungsproblem als Problem der optimalen Steuerung untersucht. Ziel der Arbeit war es, herauszufinden, ob und wie sich Methoden der Optimalsteuerung auf Aufgaben der Parameterbestimmung anwenden lassen. Für die Anwendung der notwendigen Optimalitätsbedingungen und der daraus resultierenden Prinzipie wurden theoretische Grundlagen gelegt. Anschließend wurden die einzelnen Problemstellungen mit den direkten Methoden untersucht, und zwar einem direkten Schießverfahren, umgesetzt in OC-ODE und OCPID-DAE, und einer direkten Kollokationsmethode, implementiert in DIRCOL. Im letzten Kapitel wurde dann die Aufgabenstellung noch einmal abgeändert. Anstelle eines Parameters wurden mittels der direkten Methoden der Optimalsteuerung stückweise konstante Steuerfunktionen gesucht, wobei die Anzahl der Teilintervalle variiert wurde. Ziel war es, zum einen zu untersuchen ob Messfehler erkannt werden, zum anderen sollte die Möglichkeit einer Modellverifikation überprüft werden.

Aus den im Rahmen der vorliegenden Arbeit erzielten Ergebnissen können folgende Aussagen getroffen oder bekräftigt werden:

- Eine Untersuchung der Sensitivitäten der Zustands- und Zielfunktionen bezüglich Änderungen in den Parametern ist für nicht analytisch lösbare ODE nur in Abhängigkeit von bestimmten Zeit- und Parameterpunkten machbar. Allerdings ist die numerische Bestimmung von partiellen Ableitungen mittels einseitigen Differenzenquotienten nicht aufwendig.

Eine derartige Voruntersuchung wird daher empfohlen, um etwaige schlechte Startparameter oder sogar nicht bestimmbare Parameter auszuschließen.

- Es konnte für Fallbeispiele gezeigt werden, dass die gegebenen ODEs je nach Parameterkonstellation steif sein können. Da die Größe der Parameter erst zu bestimmen ist, kann nicht ausgeschlossen werden, dass die ODE während der Parameterbestimmung numerisch ein steifes Verhalten zeigt. Es wird daher empfohlen, entsprechend geeignete Löser zu verwenden.
- Für die Euklidische, die Betragssummen- und die Tschebyschev-Norm und die daraus resultierenden Zielfunktionen wurden optimale Parameter bestimmt. Es konnten durchaus erhebliche Unterschiede in den Werten dokumentiert werden. Daraus wird deutlich, welcher Stellenwert einer für eine Aufgabenstellung geeigneten Normwahl zukommt.
- Die herkömmlichen numerischen Verfahren der Ausgleichsrechnung und der Sequentiellen Linearen Optimierung sind erfolgreich bei guter Startparameterwahl. Bei Start in einiger Distanz, deren Größe abzuschätzen hier leider nicht gelungen ist, von den optimalen Parametern, ist nur das Erreichen eines lokalen Optimums wahrscheinlich. Dieses in der numerischen Optimierung bekannte Problem kann auch in dieser Aufgabenstellung nicht umgangen werden.
- Zur Wahl der Parameterstartwerte wird das in der Arbeit benutzte Vorgehen empfohlen, welches zunächst ein Ausdünnen der Messwerte auf die Anzahl der Parameter mittels eines Ausdünnungsalgorithmus aus [Is02] empfiehlt. Es ist jedoch zu diskutieren, ob das Beibehalten des ersten und letzten Messwertes für unserer Zwecke angemessen ist. Es sollte möglich sein, diese nicht von der Ausdünnung auszuschließen und trotzdem eine Wohldefinition des linearen Interpolants zu erbringen. Das ist sinnvoll, da wir nicht von Funktions- sondern Messwerten ausgehen, die mit Fehlern belastet sein können. Ein stark fehlerhafter Startwert würde die Startparameterwahl unter Umständen negativ beeinflussen.
- Nach der Ausdünnung wird das aus den verbleibenden Messwerten resultierende nichtlineare Optimierungsproblem numerisch gelöst. Die so ermittelten Parameter dienen als Startwerte in den iterativen Verfahren der Optimierung und den direkten Verfahren der Optimalsteuerung.
- Die direkten Methoden der Optimalsteuerung können auch in der Parameterbestimmung angewandt werden, wobei mit den in der Arbeit erzielten Ergebnissen die in Kap. 7 getroffenen Aussagen gelten. Diese sind im Wesentlichen:
 - Die Verwendung von OC-ODE und DIRCOL erfordert eine Umformung der Zielfunktion in ein einfaches Mayer-Funktional. Durch die Intervalltransformation wird jedoch die Anzahl der ODEs mit der Anzahl der Messpunkte erhöht. Für Probleme mit einer hohen Messpunktanzahl sind diese Verfahren daher nicht zu empfehlen.

- In OCPID-DAE ist eine Intervalltransformation nicht notwendig, da als Zielfunktion ein verallgemeinertes Mayer-Funktional zugelassen ist. Allerdings ist die Umsetzung der Tschebyschev-Norm hier schwierig. Für dieses Zielfunktional konnte mit diesem Verfahren keine Lösung erzielt werden.
- Aus den theoretischen Anwendungen auf das Parameterbestimmungsproblem können notwendige Optimalitätsbedingungen abgeleitet werden, die eine Methode zur Verifikation optimaler Parameter ermöglichen. Diese wurde auf kleine Beispiele angewandt und hat sich bei diesen als geeignet erwiesen.
- Die abschließend untersuchten stückweise konstanten Parameterfunktionen liefern einen neuen Ansatz zur Detektion von eventuellen Mess- und Modellfehlern. Je nach Anzahl der zugelassenen Teilintervalle geben die stückweise konstanten Parameterfunktionen einen Hinweis auf Ausreißer in den Messpunkten oder unterstützen die Vermutung, dass die Modellannahme eines auf dem ganzen Intervall konstanten Parameters nicht korrekt ist.

Insbesondere die letzten beiden Punkte erfordern weitere Untersuchungen. Dort ist zum einen die Anwendung des Alg. 8.1 auf größere Parameterbestimmungsprobleme offen. Außerdem kann für die stückweise konstanten Parameterfunktionen der Nutzen für die Bestimmung eines auf dem ganzen Intervall konstanten Parameters untersucht werden. Man denke hier beispielsweise an die Berechnung des optimalen Parameters aus dem arithmetischen Mittel der Werte der stückweise konstanten Parameterfunktion. Denkbar wäre hier auch eine Wichtung je nach Auftreten von Messfehlern.

Offen bleibt des Weiteren die Frage nach dem optimalen Parameter für Problem (D). Mit allen in der Arbeit untersuchten Methoden konnte für diese Aufgabenstellung keine zufriedenstellende Lösung gefunden werden. Es ist auch zu untersuchen, wie sich zusätzliche Nebenbedingungen an die Parameter auf die Lösung auswirken. Man denke beispielsweise an die Michaelis-Menten-Konstante, welche für Problem (D) eine zusätzliche Bedingung liefern könnte. An dieser Stelle wird ausdrücklich auf die Arbeit [HvS96] und den darin vorgestellten Algorithmus PAREST verwiesen, sowie die Arbeiten [BKK07], [BKS07] und [DBK06].

Tabellenverzeichnis

2.1	Messwerte Problem (A)	10
2.2	Messwerte Problem (B)	12
2.3	Messwerte Problem (C)	13
3.1	Sensitivität Problem (B)	22
3.2	Sensitivität Problem (C)	23
3.3	Bsp. steife ODE	25
3.4	Eigenwerte Problem (D)	26
4.1	Ausgleichsrechnung, Problem (B) mit l_2	39
4.2	Ausgleichsrechnung, Problem (C) mit l_2 , Erg. 1	40
4.3	Ausgleichsrechnung, Problem (C) mit l_2 , Erg. 2	41
4.4	Ausgleichsrechnung, Problem (C) mit l_2 , Erg. 3	41
4.5	SLP, Problem (B) mit l_∞ , Erg. 1	42
4.6	SLP, Problem (B) mit l_∞ , Erg. 2	42
4.7	Ausdünnung, Problem (B)	43
4.8	Startparameter für Problem (B)	44
4.9	Ausdünnung, Problem (C)	44
4.10	NAT, Startparameter für Problem (C)	45
4.11	AT2, Startparameter für Problem (C)	45
4.12	AT1, Startparameter für Problem (C)	45
5.1	Ergebnisse für Problem (C)	57
7.1	OC-ODE für Problem (B) mit l_2	73
7.2	OC-ODE für Problem (B) mit l_1	74
7.3	OC-ODE für Problem (B) mit l_∞	74
7.4	OC-ODE, Optimale Parameter nach Normen	74
7.5	OCPID-DAE, Problem (B)	75
7.6	DIRCOL Problem (B) mit l_2 -Norm	79
7.7	Vergleich optimaler Parameter, Problem (B), l_2	80
7.8	DIRCOL Problem (B) mit l_1 -Norm	80
7.9	DIRCOL Problem (C) mit l_2 -Norm	81
7.10	DIRCOL Problem (C) mit l_1 -Norm	83
8.1	Optimale Parameter, Problem (C)	89
8.2	Integralwerte von Parametern, Problem (C)	89

8.3	SK-Steuerung, Problem (B), OC-ODE	92
8.4	SK-Steuerung, Problem (B), OC-ODE, 9 Intervalle	92
8.5	SK-Steuerung, Problem (B), OC-ODE, 4 Intervalle	92
8.6	SK-Steuerung, Problem (B), OC-ODE, 2 Intervalle	92
A.1	Sensitivität, Zustand und Zielfunktion, Problem (A)	113
A.2	Sensitivität, Zielfunktion, Problem (B)	113
A.3	Sensitivität, Zustand, Problem (C)	114
A.4	Sensitivität, Zustand, Problem (D)	114
A.5	Ausgleichsrechnung, Problem (A), l_2	115
A.6	SLP, Problem (A), l_∞	116
A.7	SLP, Problem (C), l_∞	116
B.1	Umsetzung l_2 -Norm in DIRCOL	120
B.2	Umsetzung l_∞ -Norm in DIRCOL	121
B.3	Umsetzung l_1 -Norm in DIRCOL	122

Abbildungsverzeichnis

2.1	l_1 -, l_2 - und l_∞ -Norm	8
2.2	Messwerte Problem (B), graphische Darstellung	13
3.1	Sicherheitszylinder	18
3.2	Bsp. steife ODE	25
3.3	Bsp. nicht-steife ODE	25
3.4	Steifes Problem (C)	27
3.5	Steifes Problem (C), kleines Intervall	27
4.1	Ausgleichsalgorithmus, Problem (B) mit l_2	40
5.1	Modellalgorithmus	58
5.2	Modellalgorithmus, Problem (C) mit l_1	59
5.3	Modellalgorithmus, Problem (C) mit l_2	59
5.4	Modellalgorithmus, Problem (C) mit l_∞	59
7.1	DIRCOL, Problem (B) mit l_2	79
7.2	DIRCOL, Problem (B) mit l_2	80
7.3	DIRCOL, Problem (B) mit l_2	81
7.4	DIRCOL, Problem (C) mit l_2	82
7.5	DIRCOL, Problem (C) mit l_2	82
7.6	DIRCOL, Problem (C) mit l_1	83
7.7	DIRCOL, Problem (C) mit l_1	84
8.1	SK-Steuerung, Problem (B), OC-ODE, 9 Intervalle	93
8.2	SK-Steuerung, Problem (B), OC-ODE, 4 Intervalle	93
8.3	SK-Steuerung, Problem (B), OC-ODE, 2 Intervalle	93
A.1	DIRCOL, Problem (C) mit l_1	117
A.2	DIRCOL, Problem (C) mit l_1	118

Literaturverzeichnis

- [Al02] W. Alt, *Nichtlineare Optimierung: Eine Einführung in Theorie, Verfahren und Anwendungen*, Vieweg Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 2002
- [AS10] K. Al Zoukra, W. H. Schmidt, *New Aspects in Parameter Identification*, Journal of Applied Mathematics, APLIMAT, 2010, 3(2), 179-184
- [Bi76] L. Bittner, *Necessary Optimality Conditions for a Model of Optimal Control Processes*, Banach Center Publications, Vol. 1: Mathematical Control Theory, PWN - Polish Scientific Publishers, Warszawa, 1976
- [BKK07] H. G. Bock, E. A. Kostina, O. I. Kostyukova, *Conjugate Gradient Methods for Computing Covariance Matrices for Constrained Parameter Estimation Problems*, SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, 29, Issue 2, 626-642, 2007
- [BKS07] H. G. Bock, E. A. Kostina, J. P. Schlöder, *Numerical Methods for Parameter Estimation in Nonlinear Differential Algebraic Equations*, GAMM Mitteilungen, 30, Issue 2, 376-408, 2007
- [Bo76] W. Boltjanski, *Optimale Steuerung diskreter Systeme*, Akadem. verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig, 1976
- [Bo71] W. Boltjanski, *Mathematische Methoden der Optimalen Steuerung*, Akadem. Verlagsgesellschaft Geest & Portig K.-G., Leipzig, 1971
- [CW71] L. Collatz, W. Wetterling *Optimierungsaufgaben, zweite Auflage*, Springer-Verlag Berlin, 1971
- [De94] J.- P. Demailly, *Gewöhnliche Differentialgleichungen - Theoretische und numerische Aspekte*, Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Braunschweig/Wiesbaden, 1994
- [DB02] P. Deuffhard, F. Bornemann *Scientific Computing with Ordinary Differential Equations*, Springer-Verlag, New York, 2002
- [DBK06] M. Diehl, H. G. Bock, E. A. Kostina, *An Approximation Technique for Robust Nonlinear Optimization*, Mathematical Programming, 107, Issue 1-2, 213-230, 2006

- [EK05] L. Edelstein-Keshet, *Mathematical models in biology*, Siam, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2005
- [EMR96] G. Engeln-Müller, F. Reutter, *Numerik-Algorithmen: Entscheidungshilfe zur Auswahl und Nutzung*, VDI Verlag, Düsseldorf, 1996
- [Ga78] R. Gamkrelidze, *Principles of Optimal Control Theory*, Plenum Press, New York, 1978
- [GK02] C. Geiger, C. Kanzow, *Theorie und Numerik restringierter Optimierungsaufgaben*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002
- [Ge09] M. Gerds, *User's Guide OC-ODE Optimal Control of Ordinary-Differential Equations*, Vers. 1.4, 2009
- [Ge10] M. Gerds, *User's Guide OCPID-DAE1 Optimal Control and Parameter Identification with Differential-Algebraic Equations of Index 1*, Vers. 1, 2010
- [GMSW86] P.E. Gill, W. Murray, M.A. Saunders, M.H. Wright *User's Guide for NPSOL (Version 4.0)*, Report SOL 86-2. Department of Operations Research, Stanford Universität, Kalifornien, 1986
- [Gr00] A. Griewank, *Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation*, SIAM frontiers in applied mathematics, 2000
- [HW96] E. Hairer, G. Wanner, *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1996
- [HvS96] A. Heim, O. v. Stryk, *Documentation of PAREST - A Multiple Shooting Code For Optimization Problems in Differential-Algebraic Equations*, Techn. Univ. München, Fak. f. Math, Report TUM M9616 (96), 1996
- [He04] M. Hermann, *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen: Anfangs- und Randwertprobleme*, Oldenbourg Wissenschaftsverlag, München, 2004
- [Heu04] H. Heuser, *Lehrbuch der Analysis*, Bnd. 2, Teubner-Verlag, Stuttgart, 2004
- [Heu95] H. Heuser, *Gewöhnliche Differentialgleichungen: Einführung in Lehre und Gebrauch*, Teubner-Verlag, Stuttgart, 1995
- [IT79] A. D. Ioffe, V. M. Tichomirov, *Theorie der Extremalaufgaben*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1979
- [Is01] A. Iske, *Thinning Algorithms in Scattered Data Modeling*, Technical Report, TU München, 2000
- [Is02] A. Iske, *Univariate Adaptive Thinning*, Mathematical Methods for Curves and Surfaces, Vanderbilt University Press, Oslo, 2000

- [Ja96] J. Jahn, *Introduction to the Theory of Nonlinear Optimization*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996
- [JS04] F. Jarre, J. Stoer, *Optimierung*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2004
- [Le86] G. Leitmann, *The Calculus of Variations and Optimal Control*, Plenum Press, New York, 1986
- [Lo01] A. Locatelli, *Optimal Control: An Introduction*, Birkhäuser Verlag, Basel, 2001
- [Lu69] R. Ludwig, *Methoden der Fehler- und Ausgleichsrechnung*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1969
- [MAT] *MATLAB[®] 7, User Guides*, The MathWorks, 2009
- [Mu02] J. D. Murray, *Mathematical Biology I: An Introduction*, Springer Science+Business Media, New York, 2002
- [MW06] C.-D. Munz, T. Westermann, *Numerische Behandlung gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen*, Springer-Verlag, Berlin, 2006
- [NW06] J. Nocedal, S. J. Wright, *Numerical Optimization*, Springer Series in Operations Research, New York, 2006
- [Pi93] E. Pinch, *Optimal Control and the Calculus of Variations*, Oxford University Press, New York, 1993
- [HJR08] H.-J. Reinhardt, *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*, de Gruyter-Verlag, Berlin, 2008
- [ReSc] S. Rentzsch, W. H. Schmidt, persönliche Mitteilungen
- [RR07] T. Rauber, G. Rünger, *Parallele Programmierung*, Springer Verlag, Berlin, 2007
- [Schi07] W. Schirotzek, *Nonsmooth Analysis*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2007
- [Schm88] W. H. Schmidt, *Optimalitätsbedingungen für verschiedene Aufgaben von Integralprozessen in Banachräumen und das Verfahren von Chernousko*, Habilitation Thesis, Greifswald, 1988
- [Schm86] W. H. Schmidt, *Necessary Optimality Conditions for Special Integral Processes and an Abstract Model of Optimal Control Processes*, Materialy VII Konferencji Szkoleniowej Z Teorii Zagadnień Ekstremalnych, S.94 ff., Lodz, 1986
- [Schm78] W. Schmidt, U. Schmidt, *Methoden der Ausgleichsrechnung zur Bestimmung der Aktivierungsenergie - Ein Applikationsproblem*, Ernst-Moritz-Arndt-Universität, Preprint, 1978

- [Schr06] K. Schreiber, *Untersuchungen zu Enzymkinetischen Modellen - Theorie und Mathematische Lösungsverfahren*, Diplomarbeit, Greifswald, 2006
- [ScSc07] K. Schreiber, W. H. Schmidt, *Differential Equations in Biology - Parameter Identification*, APLIMAT, 2007, 2:299-308
- [HRS97] H. R. Schwarz, *Numerische Mathematik*, Teubner-Verlag, Stuttgart, 1997
- [Sp94] H. Späth, *Numerik: Eine Einführung für Mathematiker und Informatiker*, Vieweg Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 1994
- [St05] J. Stoer, *Numerische Mathematik 1*, Springer Verlag, Berlin, 2005
- [vS95] O. v. Stryk, *Numerische Lösung optimaler Steuerungsprobleme: Diskretisierung, Parameteroptimierung und Berechnung der adjungierten Variablen*, Fortschrittberichte, VDI Verlag, München 1995
- [vS97] O. v. Stryk, *User's Guide for DIRCOL, A Direct Collocation Method For The Numerical Solution Of Optimal Control Problems*, Version 1.2 of August 1997
- [Ta05] A. Tarantola, *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*, saim, Paris, 2005
- [Vi00] R. Vinter, *Optimal Control*, Birkhäuser Verlag, Boston, 2000
- [Wa02] W. Walter, *Analysis 2*, Springer-Verlag, Berlin, 2002
- [We92] J. Werner, *Numerische Mathematik, Bnd. 2, Eigenwertaufgaben, lineare Optimierungsaufgaben, unrestringierte Optimierungsaufgaben: mit 122 Aufgaben*, Vieweg-Studium, Braunschweig, Wiesbaden, 1992
- [Wh96] P. Whittle, *Optimal Control: Basics and Beyond*, Wiley-Interscience Series in Systems and Optimization, John Wiley Verlag, Chichester, 1996
- [Wi06] F. Wiese, *Langzeitüberwachung großer solarintegrierter Wärmeversorgungsanlagen*, Dissertation, Kassel, 2006
- [Wi03] A. Wille, *Vermessung des Passiv-Solarhauses Cölbe und Untersuchungen zur Parametersensitivität*, Dissertation, Marburg, 2003
- [Ze76] E. Zeidler, *Vorlesungen über nichtlineare Funktionalanalysis 1 - Fixpunktsätze*, Teubner-texte zur Mathematik, Leipzig, 1976

Eidesstattliche Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass diese Arbeit bisher von mir weder an der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Ernst-Moritz-Arndt-Universität noch einer anderen wissenschaftlichen Einrichtung zum Zwecke der Promotion eingereicht wurde. Ferner erkläre ich, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die darin angegebenen Hilfsmittel benutzt habe.

Greifswald, den 29.10.2010

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name, Vorname Al Zoukra, Kristine (geb. Schreiber)
Geburtsdatum 08.07.1981
Geburtsort Schwedt/ Oder

Berufliche Erfahrungen

03/2010 - heute wissenschaftliche Mitarbeiterin
Institut für Mathematik
Freie Universität
Berlin
05/2006 - 02/2010 wissenschaftliche Mitarbeiterin
Institut für Mathematik und Informatik
Ernst-Moritz-Arndt-Universität
Greifswald

Studium

05/2006 Abschluss: Diplom-Biomathematikerin
04/2004 - 04/2006 Hauptstudium Biomathematik
Ernst-Moritz-Arndt-Universität
09/2003 - 03/2004 Auslandsstudium Mathematik
Blekinge Tekniska Högskola
Karlskrona, Schweden
10/2001 - 08/2003 Grundstudium Biomathematik
Ernst-Moritz-Arndt-Universität

Schule

08/1998 - 06/2001 Abitur
Einstein-Gymnasium
Angermünde

Danksagung

An diese Stelle seien ein paar Worte des Dankes gestellt. Zunächst danke ich Prof. Dr. W. H. Schmidt für die Möglichkeit der Promotion, die Geduld und den Willen, mich auch über den wohlverdienten Ruhestand hinaus zu betreuen.

Weiterhin danke ich Prof. Dr. O. v. Stryk und Prof. Dr. M. Gerdts für die zur Verfügungstellung der Programmpakete DIRCOL und OC-ODE, sowie OCPID-DAE, und Prof. Dr. M. Gerdts für die Hilfestellungen im Umgang mit der Software und für die Hinweise zur Vermeidung gemeiner Fehler. Außerdem danke ich meinen ehemaligen und neuen Kollegen für die Unterstützung, ganz besonders Anja Mauritz und Ute von Wangenheim für die konstruktive Kritik und das Korrekturlesen.

Ein ganz außerordentlicher Dank geht an meine Familie, die immer an mich geglaubt hat und nicht zuletzt an meinen Mann, Khaled Al Zoukra, für seinen unerschütterlichen Optimismus und die Zuversicht.

Anhang A

Ergebnistabellen und Abbildungen

A.1 Sensitivität

In diesem Abschnitt sind die in der Arbeit nicht aufgeführten numerischen Ergebnisse für die Abschätzung der Sensitivitäten in den Tabellen dargestellt.

	$t = 0.25$	$t = 0.5$	$t = 1$	$t = 2$	$t = 3$
$x(t, P) = e^{Pt}$	$e^{0.5}$ 1.6487	e^1 2.7182	e^2 7.3891	e^4 54.5982	e^6 403.4288
$x(t, P + \Delta P)$	$e^{0.525}$ 1.6905	$e^{1.05}$ 2.8577	$e^{2.1}$ 8.1662	$e^{4.2}$ 66.6863	$e^{6.3}$ 544.5719
$\ x(t, P + \Delta P) - x(t, P)\ $	0.0417	0.1394	0.7771	12.0882	141.1431
$\ S_x(P, \Delta P)\ $	0.417	1.394	7.771	120.882	1411.431
$\ f(P + \Delta P) - f(P)\ = 20068.327$ $\ S_f(P, \Delta P)\ = 200683.27$					

Tabelle A.1: Änderung von $x(t)$ in Problem (A) bzgl. P im Optimum $P = 2$ mit $\Delta P = 0.1$ für die Messzeitpunkte t_i und daraus resultierend die Änderung der ZF.

ZF	ZF-Wert	$\ f(P_i + \Delta) - f(P)\ $	$\ S_f(P, \Delta)\ $
$f(P)$	3.5248		
$f(B + \Delta)$	2.9537	0.5711	6.0294
$f(N_0 + \Delta)$	2.9853	0.5395	7.5352
$f(r + \Delta)$	32.0739	28.5491	2.3699E02

Tabelle A.2: Änderung von $f(P)$ für Problem (B) mit der Euklidischen Norm und $\Delta = 0.1$, sowie numerisch bestimmte Sensitivität der ZF.

Die Sensitivitäten der Zustandsfunktion für Problem (B) findet der Leser in Abschn. 3.3.1.

		$\ S_{x_i}(A, \Delta)\ $	$\ S_{x_i}(B, \Delta)\ $	$\ S_{x_i}(C, \Delta)\ $	$\ S_{x_i}(D, \Delta)\ $
$t = 0,$	$i = 1$	1	1	0	0
	$i = 2$	0.0645	0.096	7.08	4
$t = 45,$	$i = 1$	0.0549	0.0133	17.4866	2.3940
	$i = 2$	0.0035	0.0013	0.3635	0.1766

Tabelle A.3: Analytisch bestimmte Sensitivitäten der Zustände für Problem (C) zu den Zeitpunkten $t = 0$ und $t = 45$ und mit den Parametern (2.19)-(2.22). Die Auslenkung Δ berechnet sich nach $\Delta = P\sqrt{\epsilon}$.

Die Sensitivitäten der Zielfunktion für Problem (C) werden im Abschn. 3.3.2 berechnet.

Parameter	$P_1 = 1000$	$P_2 = 8000$	$P_3 = 28000$
Zeitpunkte	$t = 0$	$t = 100$	$t = 500$
$S_{x_1}(P_1, \Delta)$	0	-0.5536E-03	0.7977E-03
$S_{x_2}(P_1, \Delta)$	0	0.5536E-03	-0.7977E-03
$S_{x_1}(P_2, \Delta)$	0	-0.1682E-04	-0.0372E-04
$S_{x_2}(P_2, \Delta)$	0	0.1682E-04	0.0372E-04
$S_{x_1}(P_3, \Delta)$	0	-0.1687E-03	-0.2002E-03
$S_{x_2}(P_3, \Delta)$	0	0.1687E-03	0.2002E-03
Parameter	$P_1 = 5500$	$P_2 = 1000$	$P_3 = 23000$
Zeitpunkte	$t = 0$	$t = 100$	$t = 500$
$S_{x_1}(P_1, \Delta)$	0	-0.1158E-02	0.4912E-02
$S_{x_2}(P_1, \Delta)$	0	0.1158E-02	-0.4912E-02
$S_{x_1}(P_2, \Delta)$	0	-0.1693E-03	-0.0362E-03
$S_{x_2}(P_2, \Delta)$	0	0.1693E-03	0.0362E-03
$S_{x_1}(P_3, \Delta)$	0	-0.0414E-03	0.2118E-03
$S_{x_2}(P_3, \Delta)$	0	0.0414E-03	-0.2118E-03

Tabelle A.4: Numerisch bestimmte Sensitivitäten der Zustände in Problem (D) für die Parametertripel (1000, 8000, 28000) sowie (5500, 1000, 23000) zu den drei Zeitpunkten $t = 0$, $t = 100$ und $t = 500$.

Die Sensitivitäten der Zustände für Problem (D) sind nicht normiert dargestellt. Man kann aus den Werten eine Antisymmetrie der Sensitivitäten vermuten. Die normierten Werte würden dann übereinstimmen. Allerdings ist diese Vermutung falsch. Die ähnlicher Werte kommen durch die Wahl der Anfangsbedingungen zustande. Da E_0 vier Größenordnungen kleiner ist als der Anfangswert x_{10} , erwecken die hier berechneten Werte den Eindruck, dass das Produkt x_2 genau in dem Maße zunimmt, wie das Substrat x_1 abnimmt. Man muss jedoch beachten, dass ein für dieses Beispiel sehr kleiner Anteil von Substrat x_1 als mit Enzym gebundener Komplex vorliegt. Es gilt daher nicht $x_2(t) = x_{10} - x_1(t)$. Der gebundene Anteil von x_1 ist jedoch so gering, dass er bei der numerischen Bestimmung der Sensitivitäten nicht ins Gewicht fällt.

A.2 Lineare Ausgleichsprobleme

Startnaeherung	Iterationen	Opt. Parameter	Wert ZF
0.000000	1	NaN	NaN
0.100000	100	4.092406e+01	5.206512e+70
0.200000	100	2.531375e+01	3.961185e+43
0.300000	100	1.247041e+01	1.931971e+21
0.400000	100	2.257323e+00	3.488105e+02
0.500000	78	2.001592e+00	3.896381e-03
0.600000	59	2.001386e+00	2.956047e-03
0.700000	44	2.005661e+00	5.167270e-02
0.800000	33	2.003620e+00	2.056447e-02
0.900000	25	2.000710e+00	7.954480e-04
1.000000	19	2.000165e+00	5.602182e-05
1.100000	14	2.001042e+00	1.678948e-03
1.200000	11	2.000113e+00	3.087526e-05
1.300000	8	2.001659e+00	4.230441e-03
1.400000	6	2.003710e+00	2.161589e-02
1.500000	5	2.001067e+00	1.759534e-03
1.600000	4	2.001126e+00	1.959309e-03
1.700000	3	2.002655e+00	1.092697e-02
1.800000	2	2.007549e+00	9.406487e-02
1.900000	2	2.000392e+00	2.578002e-04
2.000000	1	1.999988e+00	8.646614e-07
2.100000	2	2.000261e+00	1.230947e-04
2.200000	2	2.003485e+00	1.901627e-02
2.300000	3	2.000282e+00	1.420879e-04
2.400000	3	2.001814e+00	5.061492e-03
2.500000	3	2.006699e+00	7.330374e-02
2.600000	4	2.000452e+00	3.359427e-04
2.700000	4	2.002026e+00	6.323118e-03
2.800000	4	2.006459e+00	6.795768e-02
2.900000	5	2.000372e+00	2.341689e-04
3.000000	5	2.001617e+00	4.020689e-03
3.100000	5	2.005172e+00	4.285568e-02
3.200000	6	2.000244e+00	1.099244e-04
3.300000	6	2.001131e+00	1.975333e-03
3.400000	6	2.003815e+00	2.289762e-02
3.500000	7	2.000142e+00	4.412060e-05
3.600000	7	2.000735e+00	8.509565e-04
3.700000	7	2.002679e+00	1.112862e-02
3.800000	7	2.007609e+00	9.564577e-02
3.900000	8	2.000453e+00	3.384958e-04
4.000000	8	2.001814e+00	5.063359e-03

Tabelle A.5: *Ergebnisse mit der Euklidischen Norm mittels Ausgleichsrechnung für Problem (A).*

A.3 SLP für Tschebyschev- und Betragssummennorm

Problem (A) Die Ergebnisse für die Tschebyschev-Norm, gelöst mit sequentieller linearer Optimierung, sind in Tab. A.6 dargestellt. Dabei konnte auch für weniger gut gewählte Startwerte nach einer vertretbaren Anzahl von Iterationen der optimale Parameter bestimmt werden.

Startnaecherung	Iterationen	Opt. Parameter	Wert ZF
1	18	2.000001e+00	1.310976e-03
1.10	13	2.001473e+00	5.417692e-02
1.20	10	2.000993e+00	3.665399e-02
1.30	8	2.000261e+00	1.041594e-02
1.40	6	2.001469e+00	5.403555e-02
1.50	5	2.000536e+00	2.017870e-02
1.60	4	2.000751e+00	2.792364e-02
1.70	3	2.002168e+00	7.986060e-02
1.80	3	2.000057e+00	3.263120e-03
1.90	2	2.000359e+00	1.389130e-02
2	1	1.999988e+00	8.553405e-04
2.10	2	2.000242e+00	9.749734e-03
2.20	3	2.000003e+00	1.399186e-03
2.30	3	2.000246e+00	9.903120e-03
2.40	3	2.001619e+00	5.954886e-02
2.50	4	2.000041e+00	2.716813e-03
2.60	4	2.000371e+00	1.431017e-02
2.70	4	2.001719e+00	6.321984e-02
2.80	5	2.000034e+00	2.448291e-03
2.90	5	2.000284e+00	1.124281e-02
3	5	2.001299e+00	4.777677e-02

Tabelle A.6: Ergebnisse mit der Tschebyschev-Norm mittels sequentieller linearer Optimierung für Problem (A).

Problem (C) Für die Tschebyschev-Norm war mit schlechten Startnäherungen keine Iteration erfolgreich. Selbst für gute Startnäherungen ist die sequentielle lineare Optimierung nur bedingt durchführbar, wie Tab. A.7 zeigt. Dort wurde der Algorithmus selbst mit Start in $(-7.08, 4.00, -0.0645, -0.0960)$ nach nur zwei Iterationen abgebrochen.

It.	P(1)	P(2)	P(3)	P(4)	ZF	Abbr.
1	-2.046968e+02	2.013454e+02	-4.166840e-01	8.573612e-01	2.714324e-01	a
2	-1.975442e+06	-2.065281e+05	-1.336456e+04	8.524244e+01	1.211431e+44	b

Tabelle A.7: Ergebnisse mit der Tschebyschev-Norm mittels sequentieller linearer Optimierung für Problem (C).

Die Abbruchkriterien sind:

- a: Optimization terminated.
- b: Exiting: One or more of the residuals, duality gap, or total relative error has stalled:

the dual appears to be infeasible (and the primal unbounded).
(The primal residual < TolFun=1.00e-08.)

Der Grund für den Abbruch der Optimierung ist in der Lösung der ODE zu finden, welche in jedem Iterationsschritt neu bestimmt wird. Diese kann selbst mit dem ODE-Löser für steife Probleme nicht für das erforderliche Zeitintervall gelöst werden, ohne dass die Schrittweite kleiner als der minimale Wert von $2.842171e - 14$ gewählt wird. Die Integration bricht beim Zeitpunkt $t = 8.005860e + 00$ ab.

Warning: Failure at t=8.005860e+00.

Unable to meet integration tolerances without reducing the step size below the smallest value allowed (2.842171e-14) at time t.

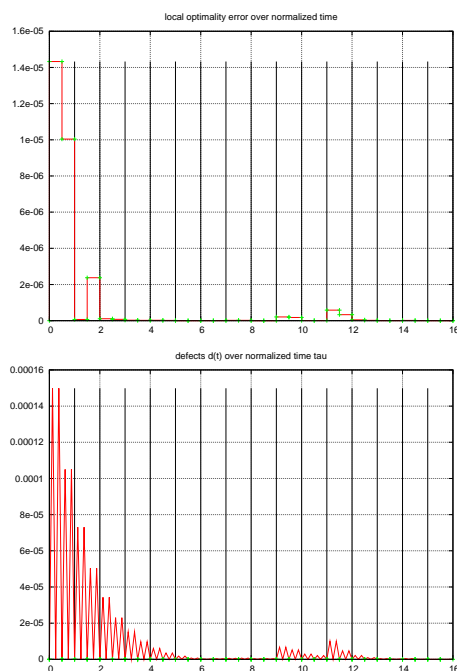
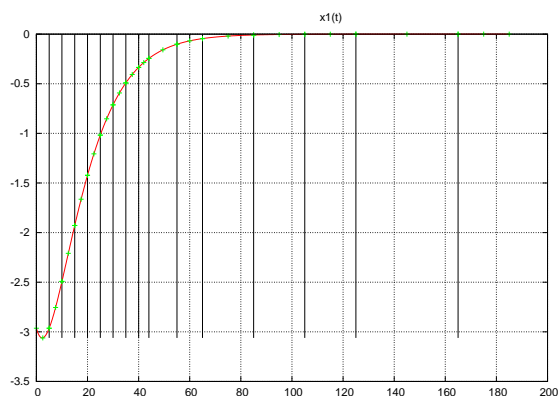
Beim anschließenden Zugriff auf die Lösung x an dieser Stelle kommt es zu einem Fehler. Das in der zweiten Iteration aufzustellende lineare Optimierungsproblem ist fehlerhaft und führt zu einem Abbruch des Verfahrens mit Hinweis auf Unlösbarkeit des Problems.

Attempting to evaluate the solution outside the interval
[0.000000e+00, 8.005860e+00] where it is defined.
Error in ==> xintP1DeltaP=deval(sol1,t);

A.4 Direkte Kollokation

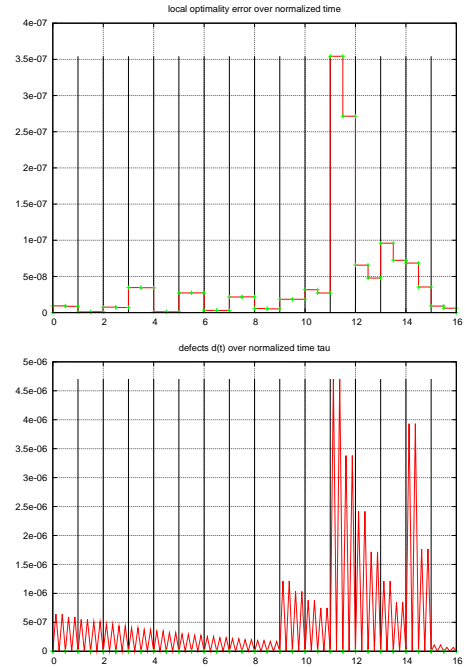
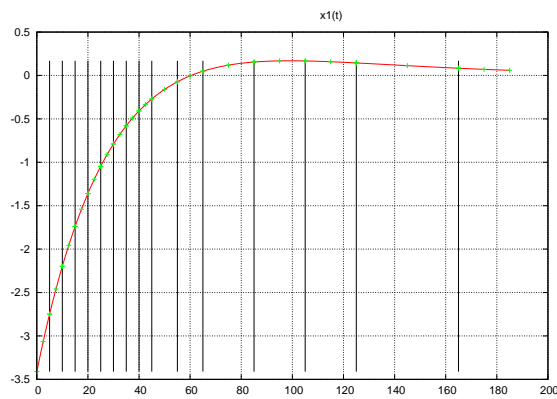
Dargestellt sind die Zustandsfunktionen für die Lösungen von Problem (C) mit Betragssummennorm, welche mittels der Software DIRCOL ermittelt wurden. Abb. A.1 zeigt die erste Komponente der Zustandsfunktion für den Parametervektor $(-11.88, 8.92, -0.08, -0.12)$.

Abbildung A.1: Problem (C) mit Betragssummennorm: $x(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für den Parametervektor (gerundete Werte) $(-11.88, 8.92, -0.08, -0.12)$



Die erste Komponente der Zustandsfunktion mit dem Vektor $(-25, 22, -0.03, -0.02)$ ist in Abb. A.1 zu sehen.

Abbildung A.2: *Problem (C) mit Betragsummennorm: $x(t)$, $d(t)$ und Optimalitätsfehler für den Parametervektor (gerundete Werte) $(-25, 22, -0.03, -0.02)$*



Für beide Lösungen war der Zielfunktionswert um einen Betrag von knapp 1 größer als der Zielfunktionswert des optimalen Parametervektor.

Anhang B

Besonderheiten der Implementierung in DIRCOL

Nachfolgend sind die Besonderheiten der Umsetzung der einzelnen Normen in das Software-Paket DIRCOL dargestellt. Die Einzelheiten zu Anforderungen der Problems in DIRCOL sowie die Herleitung der Umformungen sind in Abschn. 7.2.1 beschrieben.

In DIRCOL mögliche Eingaben	Umsetzung des Problems mit der Euklidischen Norm
<p>Die ZF als Summe der ZF-Werte in den einzelnen Phasen-Punkten \mathcal{E}: $\mathcal{FOBJ} = \mathcal{FOBJ}(\mathcal{E}(1)) + \dots + \mathcal{FOBJ}(\mathcal{E}(\mathcal{M}))$ wobei $\mathcal{FOBJ}_i = \mathcal{FOBJ}((x(\mathcal{E}(i)^-), x(\mathcal{E}(i)^+))$</p>	<p>Summe über quadratische Abweichungen $\mathcal{FOBJ} = \mathcal{FOBJ}(t_0) + \dots + \mathcal{FOBJ}(t_M)$, d.h $\mathcal{M} = M + 1$, mit $\mathcal{FOBJ}(t_i) = (x(t_i, P) - m_i)^2$</p>
<p>phasenweise Angabe der rechten Seite der DGL möglich: $\mathcal{PHASE} = i : \dot{x} = h(x, P) \forall i = 1, \dots, \mathcal{M}1$</p>	<p>hier in jeder Phase die gleiche rechte Seite der DGL $\dot{x} = h(x, P) \forall$ Phasen i</p>
<p>RB können (auch phasenweise) gegeben oder frei sein: - für die AB sind wenn, dann nur Konstanten zugelassen: $x(t_0)$ - EB explizit $x(t_f) = \mathcal{R}(x(t_0), P, t_0, t_f)$ - oder implizit $\mathcal{R}(x(t_0), t_0, P, x(t_f), t_f) = 0$ zugelassen.</p>	<p>hier entweder $x(t_0) = x_0$ gegeben oder $x(t_0)$ in Abhängigkeit der Parameter; beispielsweise $x(t_0) = P$.</p>
<p>SB in Form impliziter Bedingungen: $\mathcal{R}(x(t_i^-), x(t_i^+), P, t_i) = 0$</p>	<p>Stetigkeitsbedingung an den Switch-Stellen: $x(t_i^-) - x(t_i^+) = 0$</p>
<p>Nichtlineare Ungleichungen: $\mathcal{G}_i(x, P, t) \geq 0, \forall t \in [\mathcal{E}(i), \mathcal{E}(i + 1)]$</p>	<p>keine vorhanden</p>
<p>Nichtlineare Gleichungen: $\mathcal{H}_i(x, P, t) = 0, \forall t \in [\mathcal{E}(i), \mathcal{E}(i + 1)]$</p>	<p>keine vorhanden</p>
<p>ZF: - Zielfunktion, RB: - Randbedingungen, SB: - Switch-Bedingungen, AB: - Anfangsbedingungen, EB: - Endbedingungen</p>	

Tabelle B.1: Die Umsetzung der Aufgabenstellung mit Euklidischer Norm (rechts) in DIRCOL (links).

In DIRCOL mögliche Eingaben

Die ZF als Summe der ZF-Werte in den einzelnen Phasen-Punkten \mathcal{E} :
 $\mathcal{F}OBJ = \mathcal{F}OBJ(\mathcal{E}(1)) + \dots + \mathcal{F}OBJ(\mathcal{E}(\mathcal{M}))$
 wobei $\mathcal{F}OBJ_i = \mathcal{F}OBJ((x(t_i^-), x(t_i^+)))$

phasenweise Angabe der rechten Seite der DGL möglich:
 $\mathcal{P}HASE = i : \dot{x} = h(x, P) \forall i = 1, \dots, \mathcal{M}$

RB können (auch phasenweise) gegeben oder frei sein:
 - für die AB sind wenn, dann nur Konstanten zugelassen: $x(t_0)$
 - EB explizit $x(t_f) = \mathcal{R}(x(t_0), P, t_0, t_f)$
 - oder implizit $\mathcal{R}(x(t_0), t_0, P, x(t_f), t_f) = 0$ zugelassen.

SB in Form impliziter Bedingungen:
 $\mathcal{R}(x(t_i^-), x(t_i^+), P, t_i) = 0$

Nichtlineare Ungleichungen:
 $\mathcal{G}_i(x, P, t) \geq 0, \forall t \in [\mathcal{E}(i), \mathcal{E}(i+1)]$

Nichtlineare Gleichungen:
 $\mathcal{H}_i(x, P, t) = 0, \forall t \in [\mathcal{E}(i), \mathcal{E}(i+1)]$

Umsetzung des Problems mit der Tschebyschev-Norm

man möchte hier keine Summe, sondern das Maximum über alle $\mathcal{F}OBJ$!!!
 Idee: Intervall-Transformation: $\mathcal{F}OBJ = \mathcal{F}OBJ(t_M)$, d.h $\mathcal{M} = M + 1$, mit
 $\mathcal{F}OBJ(t_M) = \max |x_1(t_M) - m_1|, \dots, |x_M(t_M) - m_M|$
 $\mathcal{F}OBJ(t_M) = \xi$

hier in der einen Phase $[t_0, t_M]$ für jedes t_i eine DGL
 $\dot{x}_1 = h(x_M, P)$
 \vdots
 $\dot{x}_M = h(x_M, P)$

hier in der einen Phase $x_i(t_0) = x_{M0}$ und
 $x_M(t_0)$ in Abhängigkeit der Parameter; beispielsweise $x(t_0) = P$.

Stetigkeitsbedingung an den Switch-Stellen:
 $x(t_i^-) - x(t_i^+) = 0$

$\xi - (x(t_i, P) - m_i) \geq 0$!!!
 $\xi + (x(t_i, P) - m_i) \geq 0$!!!

keine vorhanden

ZF: - Zielfunktion, RB: - Randbedingungen, SB: - Switch-Bedingungen, AB: - Anfangsbedingungen, EB: - Endbedingungen

Tabelle B.2: Die Umsetzung der Aufgabenstellung mit Tschebyschev-Norm Norm (rechts) in DIRCOL (links). Hier tritt das gleiche Problem wie in der Betragssummen-Norm auf. Die Ungleichung muss auf der ganzen Phase erfüllt sein, was nicht der ursprünglichen Forderung entspricht. Zusätzlich dazu wird erzwungen, durch die lineare Intervall-Transformation für die Zeitpunkte t_i weitere ODEs einzuführen.

In DIRCOL mögliche Eingaben	Umsetzung des Problems mit der Betragssummennorm
Die ZF als Summe der ZF-Werte in den einzelnen Phasen-Punkten \mathcal{E} : $\mathcal{FOBJ} = \mathcal{FOBJ}(\mathcal{E}(1)) + \dots + \mathcal{FOBJ}(\mathcal{E}(\mathcal{M}))$ wobei $\mathcal{FOBJ}_i = \mathcal{FOBJ}((x(t_{-i}), x(t_i^+)))$	Summe über Abweichungen im Betrag $\mathcal{FOBJ} = \mathcal{FOBJ}(t_0) + \dots + \mathcal{FOBJ}(t_M)$, d.h $\mathcal{M} = M + 1$, mit $\mathcal{FOBJ}(t_i) = \xi_i$
phasenweise Angabe der rechten Seite der DGL möglich: $\mathcal{PHASE} = i : \dot{x} = h(x, P) \forall i = 1, \dots, \mathcal{M}$	hier in jeder Phase die gleiche rechte Seite der DGL $\dot{x} = h(x, P) \forall$ Phasen i
RB können (auch phasenweise) gegeben oder frei sein: - für die AB sind wenn, dann nur Konstanten zugelassen: $x(t_0)$ - EB explizit $\mathcal{R}(x(t_f), P, t_0, t_f)$ - oder implizit $\mathcal{R}(x(t_0), t_0, P, x(t_f), t_f) = 0$ zugelassen.	hier in Phase 1 entweder $x(t_0) = x_0$ gegeben oder $x(t_0)$ in Abhängigkeit der Parameter; beispielsweise $x(t_0) = P$.
SB in Form impliziter Bedingungen: $\mathcal{R}(x(t_i^-), x(t_i^+), P, t_i) = 0$	Stetigkeitsbedingung an den Switch-Stellen: $x(t_i^-) - x(t_i^+) = 0$
Nichtlineare Ungleichungen: $\mathcal{G}_i(x, P, t) \geq 0, \forall t \in [\mathcal{E}(i), \mathcal{E}(i + 1)]$	$\xi_i - (x(t_i, P) - m_i) \geq 0$!!! $\xi_i + (x(t_i, P) - m_i) \geq 0$!!!
Nichtlineare Gleichungen: $\mathcal{H}_i(x, P, t) = 0, \forall t \in [\mathcal{E}(i), \mathcal{E}(i + 1)]$	keine vorhanden
ZF: - Zielfunktion, RB: - Randbedingungen, SB: - Switch-Bedingungen, AB: - Anfangsbedingungen, EB: - Endbedingungen	

Tabelle B.3: Die Umsetzung der Aufgabenstellung mit Betragssummennorm Norm (rechts) in DIRCOL (links). Man beachte, dass hier bisher die nicht ganz zulässige Umsetzung der Ungleichungsnebenbedingungen erfolgte. DIRCOL lässt nur Ungleichungen auf einem ganzen Phasenintervall zu. Eigentlich möchte man aber, dass die obigen Ungleichungen nur an den Zeitpunkten t_i erfüllt werden müssen! Was entnimmt man daraus? Der Versuch, zwei Switching-Punkte gleich zu wählen, so dass die Ungleichung auf einem Intervall bestehend aus einem Punkt erfüllt sein müssen, ist nicht möglich, da für die Switching-Punkte Ungleichheit gefordert wird. Nichts desto trotz läuft das Programm durch. Allerdings sind die Ergebnisse durch die veränderte Aufgabenstellung nicht zu gebrauchen. Probiert werden kann noch eine Gleichungsnebenbedingung mit Betrag $\xi = |x(t_i, P) - m_i|$, diese ist dann aber nicht mehr differenzierbar.

Anhang C

Programm-Dokumentation

C.1 Lineare Gleichungssysteme

Problem (A)

Im Folgenden ist das Matlab-Programm zum Algorithmus 4.2 dargestellt, welches mittels Iterativer Linearer Ausgleichsprobleme für die Euklidische Norm und Problem A die Lösung bestimmt.

```
function problemA(P0)
% Iteratives Lineares Ausgleichsproblem
% fuer Problem (A)

% Lade Messdaten
t=[0.25; 0.5; 1.0; 2.0; 3.0];
m=[sqrt(exp(1)); exp(1); exp(2); exp(4); exp(6)];
M=length(t);

% Parameter fuer Abbruchkriterien
% maximale Anzahl von Iterationen
    maxIter=100;
% minimale Verbesserung von P
    epsP=0.0001;
% mindest Zielfunktionswert
    epsF=0.1;

% Differentialgleichung
    function diffx=dxdt(t,x)
        diffx=P*x;
    end

% Initialisierungen
% Gute Startnaeherung P0 (wird oben iterativ vorgegeben)
%   P0=1.8;
fprintf('      %f      ',P0)

% damit Abbruchkriterium nicht sofort erfuehlt
    P=P0+2*epsP;
    ZF=epsF+1;
```

```

    n=0;

% Algorithmus
% Solange Abbruchkriterium nicht erfuehlt
    while (n<maxIter)&&(abs(P-P0)>=epsP)&&(ZF>=epsF)
% (a) Loese Normalengleichungen
%   Berechne Matrix A
        P=P0+P0*sqrt(eps);
        sol=ode45(@dxdt,[0,t(M)],1);
        xintPDeltaP=deval(sol,t);
        P=P0;
        sol=ode45(@dxdt,[0,t(M)],1);
        xintP=deval(sol,t);
        A=(xintPDeltaP'-xintP')/(P0*sqrt(eps));
%   Berechne Vektor b=(m_i-x(t_i,P))
        sol=ode45(@dxdt,[0,t(M)],1);
        xint=deval(sol,t);
        b=(m-xint');
%   Loese Lineares Gleichungssystem
        deltaP=(A'*b)/(A'*A);
% (b) Bestimme neue Naeherung P
        P1=P0+deltaP;
        P=P0;
        P0=P1;
        n=n+1;
        ZF=(A*deltaP-b)'*(A*deltaP-b);
    end

% Ausgabe in main
fprintf('    %d    %d    %d',n,P0,ZF)
end

```

Problem (B)

Der Algorithmus 4.2, welcher mittels Iterativer Linearer Ausgleichsprobleme für die Euklidische Norm und Problem (B) die Lösung bestimmt, wurde in Fortran und Matlab programmiert. Das Hauptprogramm zur Berechnung des Parametertripels enthält im wesentlichen die in Kapitel 4, Abschnitt 4.1 skizzierte Herangehensweise. Die eigentlichen Auswertungen der Funktionen beziehungsweise Ableitungen in verschiedenen Zeitpunkten mit den verschiedenen Tripeln erfolgen in den an dem Hauptprogramm folgenden Unterprogrammen.

Zunächst ist hier das Hauptprogramm (MATLAB) dargestellt:

```

function main

    load messdaten.dat
    load parameterTripel.dat
    ZEIT=messdaten(:,1);
    POP=messdaten(:,2);

for j=1:10
    for i=1:11
        FunktionswertN(i)=funktionN(ZEIT(i),parameterTripel);

```

```

        partielleAblB(i)=partAbleitungB(ZEIT(i),parameterTripel);
        partielleAblN(i)=partAbleitungN(ZEIT(i),parameterTripel);
        partielleAblr(i)=partAbleitungr(ZEIT(i),parameterTripel);
        XJ(i)=POP(i)-FunktionswertN(i);
    end
    partielleAblB=partielleAblB';
    partielleAblN=partielleAblN';
    partielleAblr=partielleAblr';
    x=VerbesserungParameter(XJ, partielleAblB,partielleAblN,partielleAblr);
    parameterTripel(1)=parameterTripel(1)+x(2);
    parameterTripel(2)=parameterTripel(2)+x(3);
    parameterTripel(3)=parameterTripel(3)+x(4);
    LSGMATRIX(:,j)=parameterTripel;
end

```

```
LSGMATRIX
```

```
end
```

Die folgenden vier Unterprogramme brechnen jeweils eine Matrix, die die Funktionsbeziehungsweise Ableitungswerte zu den verschiedenen Zeitpunkten beinhaltet.

```

function FUNCN=funktionN(T, RPAR)
    FUNCN=RPAR(1)*RPAR(2)/(RPAR(2)+(RPAR(1)-RPAR(2))*exp(-RPAR(3)*T));
end

function PANB=partAbleitungB(T, RPAR)
    PANB=exp(RPAR(3)*T)*(-1+exp(RPAR(3)*T))*RPAR(2)^2/(RPAR(1)+...
    (-1+exp(RPAR(3)*T))*RPAR(2))^2;
end

function PAN=partAbleitungN(T, RPAR)
    PAN=RPAR(1)^2*exp(RPAR(3)*T)/(RPAR(1)+(-1+exp(RPAR(3)*T))*RPAR(2))^2;
end

function PAR=partAbleitungr(T, RPAR)
    PAR=RPAR(1)*exp(RPAR(3)*T)*(RPAR(1)-RPAR(2))*RPAR(2)*T/(RPAR(1)+...
    (-1+exp(RPAR(3)*T))*RPAR(2))^2;
end

```

Abschliessend ist ein Unterprogramm zur Lösung der linearen Optimierungsaufgabe implementiert, wobei zu beachten ist, dass keine Positivitätsannahmen über die Unbekannten gemacht werden.

```

function x=VerbesserungParameter(XJ,
    ...partielleAblB,partielleAblN,partielleAblr)
    matrix(:,1)=-ones(22,1);
    for i=1:11
        matrix(i,2)=-partielleAblB(i);
        matrix(i,3)=-partielleAblN(i);
        matrix(i,4)=-partielleAblr(i);
        b(i)=-XJ(i);
    end
end

```

```

for i=12:22
    matrix(i,2)=partielleAblB(i-11);
    matrix(i,3)=partielleAblN(i-11);
    matrix(i,4)=partielleAblr(i-11);
    b(i)=XJ(i-11);
end
c=[1;0;0;0];
x,FVAL,EXITFLAG = linprog(c',matrix,b);
EXITFLAG
end

```

Im Vergleich dazu die im Matlab-Programm zum Algorithmus 4.2 mittels Iterativer Linearer Ausgleichsprobleme für die Euklidische Norm und Problem (B) berechnete Lösung.

```

function problemB
% Iteratives Lineares Ausgleichsproblem
% fuer Problem (B)

% Lade Messdaten
load datenProblemB.dat
t=datenProblemB(:,1);
m=datenProblemB(:,2);
M=length(t);

% Parameter fuer Abbruchkriterien
% maximale Anzahl von Iterationen
    maxIter=10;
% minimale Verbesserung von P
    epsP=0.001;
% mindest Zielfunktionswert
    epsF=0.1;

% Differentialgleichung
    function diffx=dxdt(t,x)
        diffx=P(3)*(1-x/P(1))*x;
    end

% Initialisierungen
% Gute Startnaeherung P0
    P0(1)=5.0;
    P0(2)=0.4;
    P0(3)=0.05;
fprintf('Startnaeherung %f\n',P0')
% damit Abbruchkriterium nicht sofort erfuehlt
    P=P0+2*epsP;
    ZF=epsF+1;
    n=0;

% Algorithmus
% Solange Abbruchkriterium nicht erfuehlt
    while (n<maxIter)&&(norm(P-P0)>=epsP)&&(ZF>=epsF)
% (a) Loese Normalengleichungen
%   Berechne Matrix A

```

```

% Ableitung bzgl. P(1)
P=P0+[P0(1)*sqrt(eps) 0 0];
sol1=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],P(2));
xintP1DeltaP=deval(sol1,t);
% Ableitung bzgl P(2)
P=P0+[0 P0(2)*sqrt(eps) 0];
sol2=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],P(2));
xintP2DeltaP=deval(sol2,t);
% Ableitung bzgl. P(3)
P=P0+[0 0 P0(3)*sqrt(eps)];
sol3=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],P(2));
xintP3DeltaP=deval(sol3,t);
P=P0;
sol=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],P(2));
xintP=deval(sol,t);
A=[(xintP1DeltaP'-xintP')/(P0(1)*sqrt(eps))
(xintP2DeltaP'-xintP')/(P0(2)*sqrt(eps))
(xintP3DeltaP'-xintP')/(P0(3)*sqrt(eps))]';
% Berechne Vektor b=(m_i-x(t_i,P))
sol=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],1);
xint=deval(sol,t);
b=(m-xint');
% Loese Lineares Gleichungssystem
deltaP=(inv(A'*A))*(A'*b);
% (b) Bestimme neue Naeherung P
P1=P0+deltaP'
P=P0;
P0=P1;
n=n+1
ZF=(A*deltaP-b)'*(A*deltaP-b)
end

fprintf(' %d %d %d',n,P0,ZF)
end

```

Problem (C)

Im Folgenden ist das Matlab-Programm zum Algorithmus 4.2 dargestellt, welches mittels Iterativer Linearer Ausgleichsprobleme für die Euklidische Norm und Problem (C) die Lösung bestimmt.

```

function problemC
% Iteratives Lineares Ausgleichsproblem
% fuer Problem (C)

% Lade Messdaten
load datenProblemC.dat
t=datenProblemC(:,1);
m=datenProblemC(:,2);
M=length(t);

% Parameter fuer Abbruchkriterien
% maximale Anzahl von Iterationen

```

```

    maxIter=10;
% minimale Verbesserung von P
    epsP=0.001;
% mindest Zielfunktionswert
    epsF=0.1;

% Differentialgleichung
    function diffx=dxdt(t,x)
        diffx=zeros(2,1); % x Spaltenvektor
        diffx(1)=x(2);
        diffx(2)=(P(3)+P(4))*x(2)-P(3)*P(4)*x(1);
    end

% Initialisierungen
% Gute Startnaeherung P0
    P0(1)=-7.08;
    P0(2)= 4.0;
    P0(3)=-0.0645;
    P0(4)=-0.096;
fprintf('Startnaeherung \n')
fprintf(' %f %f %f %f\n',P0(1),P0(2),P0(3),P0(4))
% damit Abbruchkriterium nicht sofort erfuehlt
    P=P0+2*epsP;
    ZF=epsF+1;
    n=0;

fprintf('Iteration  P(1)    P(2)    P(3)    P(4)    ZF\n')
% Algorithmus
% Solange Abbruchkriterium nicht erfuehlt
    while (n<maxIter)&&(norm(P-P0)>=epsP)&&(ZF>=epsF)
% (a) Loese Normalengleichungen
%     Berechne Matrix A
%     Ableitung bzgl. P(1)
        P=P0+[P0(1)*sqrt(eps) 0 0 0];
        sol1=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],[P(1)+P(2) P(1)*P(3)+P(2)*P(4)]);
        xintP1DeltaP=deval(sol1,t);
%     Ableitung bzgl P(2)
        P=P0+[0 P0(2)*sqrt(eps) 0 0];
        sol2=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],[P(1)+P(2) P(1)*P(3)+P(2)*P(4)]);
        xintP2DeltaP=deval(sol2,t);
%     Ableitung bzgl. P(3)
        P=P0+[0 0 P0(3)*sqrt(eps) 0];
        sol3=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],[P(1)+P(2) P(1)*P(3)+P(2)*P(4)]);
        xintP3DeltaP=deval(sol3,t);
%     Ableitung bzgl. P(4)
        P=P0+[0 0 0 P0(4)*sqrt(eps)];
        sol4=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],[P(1)+P(2) P(1)*P(3)+P(2)*P(4)]);
        xintP4DeltaP=deval(sol4,t);
        P=P0;
        sol=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],[P(1)+P(2) P(1)*P(3)+P(2)*P(4)]);
        xintP=deval(sol,t);
        A=[(xintP1DeltaP(1,:)-xintP(1,:))/(P0(1)*sqrt(eps))
          (xintP2DeltaP(1,:)-xintP(1,:))/(P0(2)*sqrt(eps))

```

```

        (xintP3DeltaP(1,:)-xintP(1,:))/(P0(3)*sqrt(eps))
        (xintP4DeltaP(1,:)-xintP(1,:))/(P0(4)*sqrt(eps))'];
%   Berechne Vektor b=(m_i-x(t_i,P))
        sol=ode15s(@dxdt,[0,t(M)],[P(1)+P(2) P(1)*P(3)+P(2)*P(4)]);
        xint=deval(sol,t);
        b=(m-xint(1,:))';
%   Loese Lineares Gleichungssystem
        deltaP=(inv(A'*A))*(A'*b);
% (b) Bestimme neue Naehierung P
        P1=P0+deltaP';
        P=P0;
        P0=P1;
        n=n+1;
        ZF=(A*deltaP-b)'*(A*deltaP-b);
        fprintf(' %d %d %d %d %d %d\n',n,P0(1),P0(2),P0(3),P0(4),ZF)
    end
end

```

C.2 Startparameterbestimmung

C.2.1 Algorithmus zur Ausdünnung

Das folgende Programm *AT2thinning* setzt eine Erweiterung des Ausdünnungsalgorithmus von A. Iske auf unser Problem um (vgl. [Is02]). Aus einer Eingabe einer Anzahl M von Messwerten werden K Messwerte nach Alg. 4.5 wie in Kapitel 4 ausgesiebt.

```

function Messpkt=AT2thinning(K)
format long
% K ist Anzahl der Parameter, und wird vom Benutzer uebergeben
% Rueckgabewert soll ein Vektor KZeit mit zugehoerigem Kmess sein,
% in welchen nur die verbliebenen K Messpunkte enthalten sind

% laden der Daten
% M - Anzahl der Messpunkte
% e - speichert die Masse der M Punkte in den M-K Durchlauenen
% index - speichert die Reihenfolge der Entnahme

load Daten.dat;
s=Daten(:,1);
s1=Daten(:,1);
m=Daten(:,2);
m1=Daten(:,2);
M=length(s);
e=zeros(M-K,M);
index=zeros(1,M-K);
Nummer=[1:M];

```

In der folgenden Schleife werden zunächst die Maße der einzelnen Messpunkte berechnet und daraus ein Punkt zum Entfernen ermittelt Die Liste *index* wird aktualisiert, da aus ihr später der ursprüngliche Datensatz in richtiger Reihenfolge rekonstruiert werden kann. Die Liste *Nummer* beinhaltet die Indizes der verbliebenen Punkte.

```

% Schleife zum Entfernen von M-K Elementen
for l=1:M-K

```

```

% Schleife zur Berechnung der Masse zu den Zeiten s(i)
for i=2:(M-1)
    lsi=((m(i+1)-m(i-1))*s(i)+m(i-1)*s(i+1)-m(i+1)*s(i-1))/(s(i+1)-s(i-1)));
    e(1,i)=abs(lsi-m(i));
end
mass=e(1,2);
indx=2;
% Schleife zum Auffinden des entfernbaren Punktes s(i)
for i=3:(M-1)
    if e(1,i)<mass
        mass=e(1,i);
        indx=i;
    end
end
index(1)=Nummer(indx);
% Entferne entsprechende Nummer aus Nummernliste
Nummer=[Nummer(1:indx-1) Nummer(indx+1:M-1+1)];
% Entferne Element s(i)
s=[s(1:indx-1); s(indx+1:M-1+1)];
% Entferne Element m(i)
m=[m(1:indx-1); m(indx+1:M-1+1)];
end
Nummer

```

Abschließend werden die verbleibenden Messpunkte für die Ausgabe zusammengestellt.

```

% Konstruktion der Rueckgabeliste aus der index-Liste
for i=1:K
    Messpkt(i,1)=s1(Nummer(i));
    Messpkt(i,2)=m1(Nummer(i));
end
end

```

Ergebnisse des Programms findet der Leser im Kapitel 4, Abschnitt 4.4.3.

C.2.2 Lösung des nichtlinearen Gleichungssystems für Problem (D)

Nach dem Verbleib von K Messwerten ist anschließend lediglich ein nichtlineares Gleichungssystem zu lösen. Diese Aufgabenstellung ist im Allgemeinen nichts besonderes, die bei der beispielsweise iterativen Lösung mit dem Newtonverfahren auftretenden Probleme sind hinreichend bekannt. Die Umsetzung in Matlab für das Problem (D) soll hier dennoch stellvertretend aufgeführt werden, da die analytische Lösung der ODE nicht bekannt ist. Damit erweitert sich die iterative Nullstellensuche um die Lösung der ODE in jedem Durchlauf.

```

function [P,It]=NewtonEnzym
% Funktion zur Berechnung der Nullstelle von f(P)=x(P)-m=0
    eps=1e-06;
    maxIt=10;
    It=0;
    P=[500;900;36000];
    zt=[2.2, 71.5, 2000.9];
    m=1/6.2*[0.1302, 1.5311, 2.7992];

```



```

M=length(zt);
K=length(P);

% Funtkion x(P)
function xw=x(P)

% gegebene Differentialgleichung
function dx = dxdt(t,x)
dx = [-P(1)*(0.35461e-4 - 0.4855322+x(1)+x(2))*x(1)+ ...
      P(3)*(0.4855322-x(1)-x(2)); P(2)*(0.4855322-x(1)-x(2))];
end

% Loesung der Differentialgleichung mit einem Loeser fuer steife DGL's
sol = ode15s(@dxdt,[zt(1),zt(M)],[0.4855322 0]);
% [t,y] = ode15s(@dxdt,[zt(1),zt(M)],[0.4855322 0]);
% plot(t,y)
Sxint = deval(sol,zt);
xw=Sxint(2,:);
end

x(P)
% Berechnung der Partiellen Ableitungen von x nach den Pj = dxdpw
% dabei soll der Punkt P0 uebergeben werden
function dxdpw=dxdp(P0)
xdeltaw=zeros(K,M);           % x mit gestoertem P0
xw=x(P0);                     % x mit P0
dxdpw=zeros(K,M);            % Differenzenquotient

    for j=1:K
        Pdelta=P0;
        if(Pdelta(j)~=0)
% Stoerung des entsprechenden Anteils vpn P
            Pdelta(j)=Pdelta(j)+sqrt(eps)*P0(j);
            xdeltaw(j,:)=x(Pdelta);
            dxdpw(j,:)=(xdeltaw(j,:)-xw)/(sqrt(eps)*P0(j));
        else
            Pdelta(j)=sqrt(eps);
            xdeltaw(j,:)=x(Pdelta);
            dxdpw(j,:)=(xdeltaw(j,:)-xw)/(Pdelta(j));
        end
    end
end

% Newton-Verfahren
while (norm(x(P)-m,2)>eps && It<maxIt)
    P=P-inv(dxdp(P))*(x(P)-m)';
    It=It+1;
end
end

```

Die Ausgabe ist in Kap. 4, Abschn. 4.4.3 dargestellt.

C.3 Modellalgorithmus

In diesem Abschnitt sind auszugsweise Teile des Modellalgorithmus aus Kap. 5 dargestellt.

```

%-----
% Gedampftes Gauss-Newton-Verfahren zur Bestimmung von
%           Parametern aus Messdaten
%-----
%
% Subroutinen:
%
% diffx - Differentialgleichung  $x'=h(x,p_0)$ 
% solve_x - Loesung des AWP  $x'=h(x,p_0)$  mit  $x(t_0)=x_0$ 
% Abweichung - Berechnung von  $\|x(t_i),P_k-m_i\|$  ( $i=1,\dots,M$ )
%           unter Beachtung der Normwahl
% Dbigf - Berechnung der (partiellen) Ableitung nach  $P_k$ 
% LPP - Loesung der linearisierten Optimierungsaufgabe
% Armijo - Berechnung der Armijo-Schrittweite
%
%
% Parameter:
%
% p0 - Startschaezter fuer die Parameter
% M - Anzahl der Messpunkte
% K - Anzahl der Parameter
% norm - Wahl der Norm (Tschebyshev = 0,
% Betragssumme = 1,
% Euklid = 2)
% Itera - maximale Anzahl der Iterationen (Abbruchbed.)
% epsf - Abbruchkriterium  $f(p(k+1))-f(p(k))<eps$ 
% alpha - ArmijoSW-Parameter
% u - ArmijoSW-Parameter

function gedgnv
format long;
load messdaten.dat
M=length(messdaten);
Zeit=messdaten(:,1);
Mess=messdaten(:,2);

norm=0;
Itera=500;
epsf=1.0e-04;

p0=3; % Startparameter p0 mit Dimension K
K=length(p0);

alpha=0.0001;
u=0.5;

%-----
% Subroutine Solve_x(p0) mit Differentialgleichung diffx(t,x)

```

```

function xZeitint=solve_x(p0) % Loesung des AWP mit p0
ta=0;
te=Zeit(M);
tspan=[ta te];
x0=1; % AW der ODE

function dxdt=diffx(t,x)
dxdt=p0*x; % ODe x'=h(x,p0)
end

options=odeset('RelTol',1.0e-10);
sol=ode45(@diffx,tspan,x0,options);

xZeitint=deval(sol,Zeit);
end

%-----
% Subroutine Dbigf(p0)

function partAbl=Dbigf(p0,xZeitint)
xZeitintdelta=zeros(K,M);
partAbl=zeros(K,M);
    for j=1:K
        pdelta=p0;
        pdelta(j)=pdelta(j)+sqrt(eps)*p0(j);
        xZeitintdelta(j,:)=solve_x(pdelta);
        partAbl(j,:)=(xZeitintdelta(j,:)-xZeitint)/(sqrt(eps)*p0(j));
    end
end

%-----
% Subroutine zur Berechnung der Abweichung ||x(t,p0)-m||
% in Abhaengigkeit von der Norm
%
% Norm 0 = Teschbyschev-Norm
% Norm 1 = Betragssummennorm
% Norm 2 = Euklidische Norm

function Summe=Abweichung(norm,xZeit,Mess)
M=length(Mess);

    if (norm==0)
        Summe=0;
        Summe=max(abs(xZeit'-Mess));
    elseif (norm ==1)
        Summe=0;
        for j=1:M
            Summe=Summe+abs(xZeit(j)-Mess(j));
        end
    elseif (norm==2)
        Summe=0;
        for j=1:M
            Summe=Summe+(xZeit(j)-Mess(j))^2;
        end
    end
end

```

```

        end
        else disp('Normwahl!')
        end
    end
end

%-----
% Subroutine zur Loesung des linearisierten Optimierungsproblems
%
% M - Anzahl der Stuetzpunkte
% K - Anzahl der Parameter
% pk - Startschaetzer fuer Parameter (Dimension K)
% norm - Wahl der Norm
% dk - Loesung der Lin. Opt. Aufg.
% fkdk - Funktionswert fk an der optimierten Stelle dk

function [dk,fkdk]=LPp(norm,xZeitint,Mess,PartAbldFdp)

    if (norm==0)
        % Tschebyshev-Norm
        % Optimierungsproblem wird durch Einfuehren zusaetzlicher
        % Variablen zu lin. Opt.Probelm, welches linprog loest

        c=zeros(K+1,1);
        c(1,1)=1;
        A=-eye(2*M,1);
        B=[PartAbldFdp' ; -PartAbldFdp'];
        A=[A B];
        b=[-(xZeitint'-Mess) ; xZeitint'-Mess];
        [d]=linprog(c,A,b,[],[]);
        dk=d(2);
        fkdk=d(1);

    elseif (norm==2)
        % Euklidische Norm
        % Prolem wird zu linearem Ausgleichsproblem
        % in Matlab mit lsqlin geloest

        d=xZeitint'-Mess;
        C=-PartAbldFdp';
        [dk,fkdk]=lsqlin(C,d,[],[],[],[]);
        dk
    end
end

%-----
% Subroutine zur Armijo-Schrittweiten-Berechnung

function t=Armijo(alpha,u,d,Abstand,fkdk)
rho=1;
prho=p+rho*d;
xZeitrho=solve_x(prho);
Abstandprho=Abweichung(norm,xZeitrho,Mess);
    while (Abstandprho>Abstand+alpha*rho*(fkdk-Abstand))

```

```

        rho=u*rho;
        prho=p+rho*d;
        xZeitrho=solve_x(prho);
        Abstandprho=Abweichung(norm,xZeitrho,Mess);
    end
t=rho;
end

%-----
% Gedaempftes Gauss-Newton-Verfahren

i=0;
while (i<Itera) % Abbruchbedingungen
xZeitint=solve_x(p0); % Loese AWP mit p0
Abstand=Abweichung(norm,xZeitint,Mess); % Berechne F=||x-m||
if (Abstand<epsf)
disp('Abbruchbed.: Abstand<epsf');
fprintf('Ein optimaler Parameter p0 ist: %20.16f\n',p0);
fprintf('Anzahl der Iterationen: %d\n',i);
i=Itera;

else
% Loese linearisierte Approximationsaufgabe LPp
% Uebergib dazu dFdp0
PartAbldFdp=Dbigf(p0,xZeitint);
[dk,fkdk]=LPp(norm,xZeitint,Mess,PartAbldFdp);
    if (fkdk=Abstand)

disp('Abbruchbed.: pk ist stationare Lsg. ');
fprintf('Ein optimaler Parameter p0 ist: %20.16f\n',p0);
fprintf('Anzahl der Iterationen: %d\n',i);
i=Itera;

    else

        % berechnung der Armijo-SW
        sw=Armijo(alpha,u,dk,p0,Abstand,fkdk);
        p0=p0+sw*dk;
        i=i+1;
    end
end
end

if (i==Itera && Abstand>=epsf)
disp('Abbruchbed.: maximale Anzahl der Iterationen erreicht');
fprintf('Der Parameter p0 ist: %20.16f\n',p0);
end
fprintf('Die Funktion f hat den Wert: %20.16f\n',Abstand);

end

```


Anhang D

Transformierte Aufgabenstellungen

D.1 Problem (B)

Nach Transformation der Teilintervalle auf $[t_0, t_M]$ besteht Problem (B) aus 10 ODEs mit freien AWe.

$$\dot{x}_1 = r\left(1 - \frac{x_1}{B}\right)x_1 \frac{14.4}{140.8}, \quad x_1(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.1})$$

$$\dot{x}_2 = r\left(1 - \frac{x_2}{B}\right)x_2 \frac{16.0}{140.8}, \quad x_2(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.2})$$

$$\dot{x}_3 = r\left(1 - \frac{x_3}{B}\right)x_3 \frac{28.8}{140.8}, \quad x_3(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.3})$$

$$\dot{x}_4 = r\left(1 - \frac{x_4}{B}\right)x_4 \frac{30.4}{140.8}, \quad x_4(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.4})$$

$$\dot{x}_5 = r\left(1 - \frac{x_5}{B}\right)x_5 \frac{32.0}{140.8}, \quad x_5(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.5})$$

$$\dot{x}_6 = r\left(1 - \frac{x_6}{B}\right)x_6 \frac{48.0}{140.8}, \quad x_6(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.6})$$

$$\dot{x}_7 = r\left(1 - \frac{x_7}{B}\right)x_7 \frac{72.0}{140.8}, \quad x_7(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.7})$$

$$\dot{x}_8 = r\left(1 - \frac{x_8}{B}\right)x_8 \frac{92.8}{140.8}, \quad x_8(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.8})$$

$$\dot{x}_9 = r\left(1 - \frac{x_9}{B}\right)x_9 \frac{124.8}{140.8}, \quad x_9(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.9})$$

$$\dot{x}_{10} = r\left(1 - \frac{x_{10}}{B}\right)x_{10}, \quad x_{10}(t_0) \text{ frei}. \quad (\text{D.10})$$

Hinzu kommen 9 RWB, welche gewährleisten, dass die AWe übereinstimmen,

$$x_i(t_0) = x_{10}(t_0), \quad \text{für alle } i = 1, \dots, 9,$$

vgl. Gl. (7.5). Die Zielfunktion schreibt sich im Euklidische Fall nach Transformation als

$$\tilde{f}(P) = \sum_{i=1}^M (x_i(t_M) - m_i)^2.$$

D.2 Problem (C)

Für das Problem (C) stellt sich die Aufgabe nach Transformation wie folgt dar, wobei die ersten beiden ODE den ursprünglichen ODE entsprechen:

$$\dot{x}_1 = x_2, \quad x_1(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.11})$$

$$\dot{x}_2 = (C + D)x_2 - CDx_1, \quad x_2(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.12})$$

$$\dot{x}_3 = \frac{5}{185}x_4, \quad x_3(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.13})$$

$$\dot{x}_4 = \frac{5}{185}((C + D)x_4 - CDx_3), \quad x_4(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.14})$$

$$\dot{x}_5 = \frac{10}{185}x_6, \quad x_5(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.15})$$

$$\dot{x}_6 = \frac{10}{185}((C + D)x_6 - CDx_5), \quad x_6(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.16})$$

$$\dot{x}_7 = \frac{15}{185}x_8, \quad x_7(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.17})$$

$$\dot{x}_8 = \frac{15}{185}((C + D)x_8 - CDx_7), \quad x_8(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.18})$$

$$\dot{x}_9 = \frac{20}{185}x_{10}, \quad x_9(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.19})$$

$$\dot{x}_{10} = \frac{20}{185}((C + D)x_{10} - CDx_9), \quad x_{10}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.20})$$

$$\dot{x}_{11} = \frac{25}{185}x_{12}, \quad x_{11}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.21})$$

$$\dot{x}_{12} = \frac{25}{185}((C + D)x_{12} - CDx_{11}), \quad x_{12}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.22})$$

$$\dot{x}_{13} = \frac{30}{185}x_{14}, \quad x_{13}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.23})$$

$$\dot{x}_{14} = \frac{30}{185}((C + D)x_{14} - CDx_{13}), \quad x_{14}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.24})$$

$$\dot{x}_{15} = \frac{35}{185}x_{16}, \quad x_{15}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.25})$$

$$\dot{x}_{16} = \frac{35}{185}((C + D)x_{16} - CDx_{15}), \quad x_{16}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.26})$$

$$\dot{x}_{17} = \frac{40}{185}x_{18}, \quad x_{17}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.27})$$

$$\dot{x}_{18} = \frac{40}{185}((C + D)x_{18} - CDx_{17}), \quad x_{18}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.28})$$

$$\dot{x}_{19} = \frac{45}{185}x_{20}, \quad x_{19}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.29})$$

$$\dot{x}_{20} = \frac{45}{185}((C + D)x_{20} - CDx_{19}), \quad x_{20}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.30})$$

$$\dot{x}_{21} = \frac{55}{185}x_{22}, \quad x_{21}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.31})$$

$$\dot{x}_{22} = \frac{55}{185}((C + D)x_{22} - CDx_{21}), \quad x_{22}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.32})$$

$$\dot{x}_{23} = \frac{65}{185}x_{24}, \quad x_{23}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.33})$$

$$\dot{x}_{24} = \frac{65}{185}((C + D)x_{24} - CDx_{23}), \quad x_{24}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.34})$$

$$\dot{x}_{25} = \frac{85}{185}x_{26}, \quad x_{25}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.35})$$

$$\dot{x}_{26} = \frac{85}{185}((C + D)x_{26} - CDx_{25}), \quad x_{26}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.36})$$

$$\dot{x}_{27} = \frac{105}{185}x_{28}, \quad x_{27}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.37})$$

$$\dot{x}_{28} = \frac{105}{185}((C + D)x_{28} - CDx_{27}), \quad x_{28}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.38})$$

$$\dot{x}_{29} = \frac{125}{185}x_{30}, \quad x_{29}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.39})$$

$$\dot{x}_{30} = \frac{125}{185}((C + D)x_{30} - CDx_{29}), \quad x_{30}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.40})$$

$$\dot{x}_{31} = \frac{165}{185}x_{32}, \quad x_{31}(t_0) \text{ frei}, \quad (\text{D.41})$$

$$\dot{x}_{32} = \frac{165}{185}((C + D)x_{32} - CDx_{31}), \quad x_{32}(t_0) \text{ frei}. \quad (\text{D.42})$$

Die 32 Nebenbedingungen

$$x_1(t_0) = A + B \quad (\text{D.43})$$

$$x_2(t_0) = AC + BD \quad (\text{D.44})$$

$$\text{und } x_i(t_0) = x_1(t_0), \text{ für alle } i = \text{ungerade}, \quad (\text{D.45})$$

$$\text{und } x_i(t_0) = x_2(t_0), \text{ für alle } i = \text{gerade}, \quad (\text{D.46})$$

garantieren die Übereinstimmung der Anfangsbedingungen der transformierten ODEs, vgl. Gl. (7.5). Dass sich die Anzahl der ODE trotz der 17 Messwerte nur auf 32 statt 34 erhöht, resultiert aus der Implementierung der Messwerte bei $t = 0$ in Nebenbedingungen für die Anfangswerte. Das zur Euklidischen Norm zugehörige Zielfunktional ist

$$\sum_{i=1}^M (x_i(t_M) - m_i)^2.$$