

Praktikum Dynamische Prozessoptimierung

Versuch DynPO-1, Sommersemester 2020

Numerische Lösung von Optimalsteuerungsaufgaben

Autor: Dr.-Ing. E. Arnold

Verantwortlicher Hochschullehrer: Prof. Dr.-Ing. habil. Pu Li

Versuchsverantwortlicher: Dr.-Ing. S. Hopfgarten, M.Sc. B. Juris

Name, Vorname	Matrikel-Nr.
Mitarbeiter in der Praktikumsgruppe	
Datum, Note, Unterschrift	

1 Einführung

Das Praktikum dient der Vertiefung der Kenntnisse aus den zugehörigen Lehrveranstaltungen [1] und veranschaulicht das Vorgehen bei der numerischen Lösung von Optimalsteuerungsaufgaben. Schwerpunkt soll dabei nicht die Wirkungsweise des numerischen Verfahrens an sich sein, sondern das Studium von Lösungsstrukturen und des Einflusses von Parameter- und Beschränkungsänderungen auf die Lösungstrajektorien von ausgewählten Optimalsteuerungsproblemen.

2 Problemstellung und Lösungsverfahren

Ausgangspunkt ist ein allgemeines, möglicherweise nichtlineares und beschränktes Optimalsteuerungsproblem der Form:

Zustandsgleichung

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \bar{\mathbf{f}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t), \quad t \in [0, t_f], \quad \mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{u}(t) \in \mathbb{R}^m$$

Zielfunktional

$$\bar{J} = \bar{F}(\mathbf{x}(t_f)) + \int_0^{t_f} \bar{f}_0(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) dt \longrightarrow \min! \quad (1)$$

Beschränkungen:

Anfangszustand	$\mathbf{g}_0(\mathbf{x}(0)) \leq \mathbf{0}$
Endzustand	$\mathbf{g}_1(\mathbf{x}(t_f)) \leq \mathbf{0}$
Steuerung und Zustand	$\bar{\mathbf{g}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \leq \mathbf{0}$

Der Optimierungshorizont (bzw. die Endzeit) t_f soll fest sein, d. h. Probleme mit freier Endzeit sind geeignet umzuformen. Die Beschränkungen sollen insbesondere die praktisch wichtigen Fälle

fester Anfang	$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$
festes Ende	$\mathbf{x}(t_f) = \mathbf{x}_{t_f}$
Zustandsschranken	$\mathbf{x}_{min} \leq \mathbf{x}(t) \leq \mathbf{x}_{max}$
Steuerschranken	$\mathbf{u}_{min} \leq \mathbf{u}(t) \leq \mathbf{u}_{max}$

einschließen.

Eine mögliche Vorgehensweise zur numerischen Lösung von (1) besteht darin, Steuer- und Zustandsgrößen zeitlich zu diskretisieren, beispielsweise durch Anwendung eines Integrationsverfahrens zur Lösung der Zustandsdifferentialgleichung (Zustands-Dgl.).

Mit $\mathbf{x}^k = \mathbf{x}(t^k)$, $\mathbf{u}^k = \mathbf{u}(t^k)$, $0 = t^0 < t^1 < \dots < t^N = t_f$ wird aus (1) das zeitdiskrete Optimalsteuerungsproblem

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{f}^k(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k), \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \\ J &= F(\mathbf{x}^N) + \sum_{k=0}^{N-1} \mathbf{f}_0^k(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k) \longrightarrow \min! \\ \mathbf{g}^k(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k) &\leq \mathbf{0}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \\ \mathbf{g}^N(\mathbf{x}^N) &\leq \mathbf{0} \end{aligned} \quad (2)$$

Wird zur Diskretisierung beispielsweise ein Euler-Verfahren mit konstanter Schrittweite $\Delta t = t^{k+1} - t^k = \frac{t_f}{N}$ und $\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}^k = \text{const.}$ für $t^k \leq t < t^{k+1}$ gewählt, so gilt

$$\begin{aligned} \mathbf{f}^k(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k) &= \mathbf{x}^k + \Delta t \cdot \bar{\mathbf{f}}(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k, t^k) \\ F(\mathbf{x}^N) &= \bar{F}(\mathbf{x}(t^N)) \\ \mathbf{f}_0^k(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k) &= \Delta t \cdot \bar{\mathbf{f}}_0(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k, t^k) \end{aligned}$$

Prinzipiell sind die meisten der bekannten numerischen Lösungsverfahren für Anfangswertprobleme hierfür geeignet, z. B. auch Runge-Kutta-Verfahren oder selbst implizite Einschrittverfahren. Ist die Zustandsgleichung linear, so kann unter der Annahme $\mathbf{u}(t) = \mathbf{u}^k = \text{const.}$ für $t^k \leq t < t^{k+1}$ auch $\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}(t^{k+1}) = \mathbf{f}^k(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k)$ exakt berechnet werden (Lösung der Bewegungsgleichung in $[t^k, t^{k+1}]$).

Durch theoretische Untersuchungen muss geklärt werden, inwiefern eine Lösung von (2) eine Lösung von (1) approximiert und unter welchen Bedingungen Lösungen von (2) mit $\Delta t \rightarrow 0$ gegen Lösungen von (1) konvergieren.

Das Optimierungsproblem (2) besitzt endlich viele Entscheidungsvariable $(\mathbf{x}^k, \mathbf{u}^k)$ und kann als hochdimensionales und speziell strukturiertes (statisches) nichtlineares Optimierungsproblem gelöst werden. Damit ist die gesamte Vorgehensweise als direktes Lösungsverfahren für (1) einzuordnen.

Zur Lösung des nichtlinearen Optimierungsproblems eignen sich unter anderem Verfahren der sequentiellen quadratischen Programmierung (SQP), die in den letzten Jahren als besonders effektive und robuste Lösungsmethoden für nichtlineare und beschränkte Aufgaben entwickelt wurden. Dabei wird das nichtlineare Ursprungsproblem in jeder Iteration lokal durch ein linear-quadratisches Optimierungsproblem (quadratische Approximation der Zielfunktion, linearisierte Beschränkungen) angenähert. Die Lösung dieses linear-quadratischen Ersatzproblems dient als Suchrichtung, in der eine verbesserte Approximation der Lösung des Ursprungsproblems gefunden werden kann.

2.1 Optimalsteuerungsprobleme mit freier Endzeit

Bei vielen praktischen Optimalsteuerungsaufgaben ist der Optimierungshorizont t_f nicht fest, sondern eine durch die Optimierung zu ermittelnde Entscheidungsvariable (z. B. bei zeitoptimalen Problemen). Wegen des hier verwendeten Lösungsverfahrens sind Probleme mit freier Endzeit in solche mit fester Endzeit zu überführen.

Ist die Endzeit t_f frei, so führt man eine neue unabhängige Variable $\tau = t/t_f$ und eine zusätzliche Zustandsgröße x_{n+1} mit dem freien Anfangswert $x_{n+1}(0) = t_f$ und $\dot{x}_{n+1} = 0$ ein. Wird nun t in der Zustandsgleichung und im Funktional durch τ ersetzt, so entsteht ein Problem mit festem Horizont $0 \leq \tau \leq 1$, insbesondere das Zielfunktional der zeitoptimalen Aufgabe wird von $J = t_f \rightarrow \min!$ zu $J = x_{n+1}(1) \rightarrow \min!$ transformiert.

2.2 Programmtechnische Realisierung

Das im Fachgebiet entwickelte Programmpaket HQP (**H**uge **Q**uadratic **P**rogramming, [7]) ist eine Realisierung des oben kurz beschriebenen Algorithmus. Es besteht aus den folgenden Hauptkomponenten:

- Meschach [5] – eine Matrizenbibliothek zur dynamischen Verwaltung, Manipulation, Durchführung arithmetischer Operationen und Faktorisierung von Matrizen,

- ADOL-C [10] – zur automatischen Bereitstellung von Ableitungen,
- HQP [7] – ein SQP-Algorithmus zur Lösung beschränkter zeitdiskreter Optimalsteuerungsprobleme unter Ausnutzung der speziellen Problemstruktur und eines Interior-Point-Verfahrens zur Lösung der beschränkten linear-quadratischen Teilaufgaben [11],
- Hilfsmittel zur Diskretisierung kontinuierlicher Optimalsteuerungsprobleme und zur Simulation (Integrationsverfahren für Differentialgleichungen),
- Dialogkomponente – ein Menüsystem zur Bedienerführung, Problemauswahl, Parameterfestlegung und grafischen Auswertung von Simulations- und Optimierungsergebnissen (realisiert unter Verwendung von Tcl/Tk [13]),
- Problembibliothek – Bereitstellung der für jedes der aufbereiteten Optimalsteuerungsprobleme spezifischen Teile des Dialogsystems sowie der Problemdata (Zustandsgleichung, Zielfunktional, Beschränkungen).

Es wurde besonderer Wert auf eine möglichst einfache Bedienerführung mittels einer Menüoberfläche gelegt. Die Menüstruktur geht von einer Einteilung der Bedieneraktionen in die folgenden Gruppen aus:

- Problemauswahl: Selektion des zu untersuchenden Optimalsteuerungsproblems aus der Problembibliothek, Initialisierung
- Simulation: Festlegung von Problemparametern wie Koeffizienten der Zustandsgleichungen und des Zielfunctionals, Beschränkungen, Diskretisierungsmethode und -schrittweite, usw.; simulative Untersuchung des Systemverhaltens (Lösung der Zustandsgleichung für vorgegebene Anfangszustände und Verläufe der Steuervariablen)
- Optimierung: Festlegung von Parametern für die Optimierungsrechnung (z. B. Abbruchschranken); Prüfung der Problemroutinen zur Berechnung von Ableitungen; Berechnung der optimalen Steuerung

Eine Erweiterung der Problembibliothek um neue Optimalsteuerungsaufgaben ist jederzeit möglich.

3 Aufgaben

3.1 Aufgabe 1: Doppelintegrator 1

Ein Doppelintegrator ist energieoptimal aus einem vorgegebenen Anfangszustand in einen vorgegebenen Endzustand zu steuern. Physikalischer Hintergrund ist die Beschreibung der eindimensionalen Bewegung eines Massepunktes unter dem Einfluss einer Kraft (normiert, Masse $m = 1$). Die Steuergröße u ist die auf den Massepunkt wirkende Kraft, die Zustandsgrößen sind

die Geschwindigkeit x_1 und der Weg (Position) x_2 des Massepunktes.

$$\text{Zielfunktional:} \quad J = \frac{1}{2} \int_0^1 u^2(t) dt \longrightarrow \min! \quad (3)$$

$$\text{Zustandsgleichung:} \quad \dot{x}_1(t) = u(t) \quad (4)$$

$$\dot{x}_2(t) = x_1(t) \quad (5)$$

Beschränkungen:

$$\text{Anfangszustand} \quad \mathbf{x}(0) = [0 \ 0]^T \text{ (fest)} \quad (6)$$

$$\text{Endzustand} \quad \mathbf{x}(1) = [0 \ 1]^T \text{ (fest)} \quad (7)$$

$$\text{Steuerbeschränkung} \quad -u_0 \leq u(t) \leq u_0 \quad (8)$$

$$\text{Zustandsbeschränkung} \quad x_1(t) \leq x_{1max} \quad (9)$$

Die Diskretisierung des Problems erfolgt durch Anwendung der analytischen Lösung der Zustandsgleichung für jedes Diskretisierungsintervall. Eine Diskretisierungsschrittweite von $0.05, \dots, 0.01$ (entspricht $20, \dots, 100$ Diskretisierungsschritten) ist dabei ausreichend.

Da das zu lösende zeitdiskrete Optimalsteuerungsproblem ebenfalls linear-quadratisch ist, kann das Ergebnis mit nur einem Schritt des SQP-Verfahrens berechnet werden (beschränktes Newton-Verfahren).

Vorbereitungsaufgaben:

- 3.1.1 Lösen Sie das unbeschränkte Optimalsteuerungsproblem (3)-(7) analytisch!
- 3.1.2 Wie ändert sich die optimale Steuerung bei aktiver Steuerbeschränkung (8)?
- 3.1.3 Überprüfen Sie die unter 3.1.1 und 3.1.2 abgeleiteten Ergebnisse numerisch, indem Sie zunächst das unbeschränkte Problem mit Hilfe von MATLAB^{®1} oder Octave lösen (siehe **Hinweise**)! Bis zu welchem Wert kann die Betragsschranke u_0 verringert werden, wenn noch eine zulässige Lösung des Problems (3)-(8) existieren soll? Interpretieren Sie die Resultate physikalisch!
- 3.1.4 Welchen Einfluss hat die Wahl des Diskretisierungsverfahrens und die Anzahl der Diskretisierungsschritte auf das Ergebnis?
- 3.1.5 Drucken Sie jeweils die optimalen Zustands- und Steuerungsverläufe als Diskussionsgrundlage im Präsenzmz-Praktikum aus!

Hinweise:

Ein Vorschlag für eine mögliche Vorgehensweise zur Programmierung ist:

- Lösen Sie die Zustandsdifferentialgleichung mit `ode45` für beliebige Eingangsgrößen $u(t)$!
- Erstellen Sie eine Funktion für das Zielfunktional. Bedenken Sie, dass Sie das Zielfunktional diskretisieren müssen ($J(x, u) = \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_f} u(t)^2 dt \Rightarrow J_d(x, u) = \frac{1}{2} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u(i)^2$, wobei N die Anzahl der Diskretisierungsschritte ist)!

¹MATLAB[®] ist ein eingetragenes Warenzeichen der The Mathworks Inc.

- Erstellen Sie eine Funktion für die Nebenbedingungen! Formen Sie die Gleichungsnebenbedingungen zu Ungleichungsnebenbedingungen um, um ein besseres Konvergenzverhalten zu erzielen:

$$\begin{array}{ll} \text{Aus einer Gleichungsnebenbedingung:} & g(x) = 0 \\ \text{werden 2 Ungleichungen der Form:} & g(x) \geq 0 \\ & g(x) \leq 0 \end{array}$$

- Lösen Sie das Optimierungsproblem mit u als Optimierungsgröße mit Hilfe von `fmincon` (MATLAB®) oder auch `sqp` (verfügbar in MATLAB® und Octave)!
- Fügen Sie untere („lower bounds“ (lb)) und obere Beschränkungen („upper bounds“ (ub)) ein!

3.2 Aufgabe 2: Doppelintegrator 2

Es wird das gleiche Problem wie unter 3.1 betrachtet, jedoch sollen (6)-(9) durch folgende Beschränkungen ersetzt werden:

$$\text{Anfangszustand} \quad \mathbf{x}(0) = [1 \ 0]^T \quad (\text{fest}) \quad (10)$$

$$\text{Endzustand} \quad \mathbf{x}(1) = [-1 \ 0]^T \quad (\text{fest}) \quad (11)$$

$$\text{Zustandsbeschränkung} \quad x_2(t) \leq x_{2max} \quad (12)$$

Der Massepunkt soll demnach zum Zeitpunkt 0 am Ort 0 die Geschwindigkeit 1 haben und energieoptimal so umgesteuert werden, dass er sich zum Zeitpunkt 1 wieder am Ort 0 befindet, jedoch die Geschwindigkeit -1 besitzt (energieoptimale Wende). Die Zustandsbeschränkung (12) stellt eine Wegbegrenzung dar.

Vorbereitungsaufgaben:

- 3.2.1 Lösen Sie das unbeschränkte Optimalsteuerungsproblem (3)-(5),(10),(11) analytisch!
- 3.2.2 Wie wird sich eine aktive Beschränkung (12) auf die Lösung auswirken? (qualitative Betrachtung, keine analytische Lösung)
- 3.2.3 Überprüfen Sie die unter 3.2.1 erhaltenen Resultate numerisch! Nutzen Sie dazu ihren Quellcode aus Aufgabe 1!
- 3.2.4 Drucken Sie jeweils die optimalen Zustands- und Steuerungsverläufe als Diskussionsgrundlage im Präsenzmz-Praktikum aus!

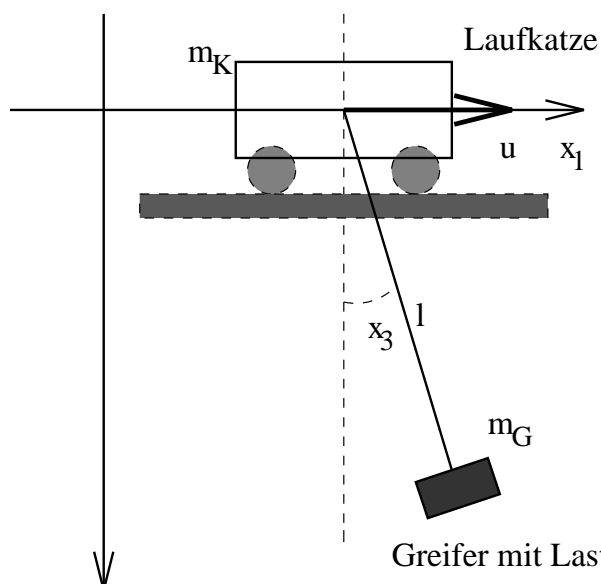
Praktikumsaufgaben (Problemauswahl: Datei/Problem/Di2):

- 3.2.3 Überprüfen Sie die unter 3.2.1 und 3.2.2 erhaltenen Resultate mit Hilfe der Praktikumssoftware numerisch! Wählen Sie dabei zunächst einen so großen Wert für x_{2max} , dass (12) nicht aktiv wird und verringern Sie x_{2max} anschließend schrittweise! Interpretieren Sie die optimalen Trajektorien physikalisch!

3.3 Aufgabe 3: Verladebrücke

Das dynamische Verhalten der Verladebrücke nach Abbildung 1 kann bei vorausgesetzter konstanter Greiferlänge und konstanter Masse von Greifer und Last durch die nichtlineare Zustandsgleichung

$$\dot{x}(t) = \begin{bmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \\ \dot{x}_3(t) \\ \dot{x}_4(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{x_2}{1 + \frac{m_G}{m_K} \sin^2(x_3)} \\ \frac{0.5a_{23} \sin(2x_3) + \frac{m_G}{m_K} l x_4^2 \sin(x_3) + b_2 u}{1 + \frac{m_G}{m_K} \sin^2(x_3)} \\ \frac{x_4}{1 + \frac{m_G}{m_K} \sin^2(x_3)} \\ \frac{-a_{43} \sin(x_3) - 0.5 \frac{m_G}{m_K} x_4^2 \sin(2x_3) - b_4 u \cos(x_3)}{1 + \frac{m_G}{m_K} \sin^2(x_3)} \end{bmatrix} \quad (13)$$



- x_1 – Katzposition
- x_3 – Greiferwinkel
- u – Vortriebskraft Katzmotor
- m_K – Katzmasse
- m_G – Masse (Greifer und Last)
- l – Greiferlänge

$$a_{23} = \frac{m_G}{m_K} g \quad b_2 = \frac{1}{m_k}$$

$$a_{43} = \frac{m_K + m_G}{m_K l} g \quad b_4 = \frac{1}{m_{kl}}$$

Abbildung 1: Verladebrücke

beschrieben werden. Steuergröße u ist die Antriebskraft des Katzmotors, Zustandsgrößen sind die Katzposition (Weg) x_1 , die Katzgeschwindigkeit x_2 , der Greiferwinkel x_3 und die Greiferwinkelgeschwindigkeit x_4 .

Das System (13) soll nun unter Einhaltung gewisser Beschränkungen aus einem vorgegebenen Anfangszustand (erste Ruhelage) in einen vorgegebenen Endzustand (zweite Ruhelage) gesteuert werden.

Anfangszustand $x(0) = [25 \ 0 \ 0 \ 0]^T$ (fest) (14)

Endzustand $x(t_f) = [0 \ 0 \ 0 \ 0]^T$ (fest, t_f frei) (15)

Steuerbeschränkung $u_{min} \leq u(t) \leq u_{max}$ (16)

Zustandsbeschränkung $x_{min} \leq x(t) \leq x_{max}$ (17)

Werden diese Beschränkungen eingehalten, so besteht das Steuerungsziel in einer Minimierung der Prozessdauer.

Zielfunktional: $J = t_f \rightarrow \min!$ (18)

Nach der Diskretisierung der Zustandsdifferentialgleichung im gesamten Zeithorizont erfolgt die Zustandsberechnung durch numerische Integration der Zustandsgleichungen mittels Runge-Kutta-Verfahren in jedem Diskretisierungsintervall. Die Wahl der Schrittweite ist im Gegensatz zu den vorangehenden Beispielen kritisch (System instabil!). Gute Resultate werden ab etwa 20 Diskretisierungsschritten erzielt.

Wenn der Greiferwinkel klein bleibt, kann als Näherungslösung auch die Umsteuerung des (in Umgebung der Ruhelage $[0 \ 0 \ 0 \ 0]^T$ linearisierten Systems (19) betrachtet werden.

$$\dot{x}(t) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{23} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -a_{43} & 0 \end{bmatrix} \cdot x(t) + \begin{bmatrix} 0 \\ b_2 \\ 0 \\ -b_4 \end{bmatrix} \cdot u(t) \quad (19)$$

In [14] wird für das System (19) ein Zustandsregler (vollständige Zustandsrückführung) mittels Eigenwertvorgabe entworfen (alle Eigenwerte des geschlossenen Kreises bei -0.6). Der damit erhaltene Verlauf der Steuergröße dient als Startwert für die Optimierung.

Vorbereitungsaufgaben:

3.3.1 Stellen Sie die notwendigen Optimalitätsbedingungen für das steuerbeschränkte Problem (19),(14)-(16),(18) zusammen! Welchen prinzipiellen Verlauf der optimalen Steuerung erwarten Sie? Fertigen Sie eine qualitative Skizze der zu erwartenden, zeitoptimalen Steuerung unter Beachtung der Systemordnung und der Anfangsbedingung an!

3.3.2 Welche Stabilitätseigenschaften besitzt das linearisierte System?

Praktikumsaufgaben (Problemauswahl: Datei/Problem/CCrane):

3.3.3 Untersuchen Sie das Systemverhalten simulativ bei

- konstanter Steuerung (Menü Parameter/Initialsteuerung/konstant; anschließend: Menü Start/Simulation),
- Verwendung des Zustandsreglers (Menü Parameter/Initialsteuerung/Zustandsregler; anschließend: Menü Start/Simulation)!

3.3.4 Berechnen Sie die optimale Steuerung (Menü Parameter/Amplitudenschranke Steuerung, anschließend: Menü Start/Optimierung) für das Problem ohne Zustandsbeschränkungen und vergleichen Sie die Resultate mit Aufgabe 3.3.1! Begründen Sie eventuelle Abweichungen!

3.3.5 Berechnen Sie die optimale Steuerung bei wirksamen Zustandsbeschränkungen (17) (z. B. Greiferwinkel, Menü Parameter/Amplitudenschranke Greiferwinkel)! Interpretieren Sie die optimalen Trajektorien!

3.4 Aufgabe 4: Citronensäure

Betrachtet wird der biotechnologische Prozess der fermentativen Citronensäureherstellung (mikrobielle Produktsynthese) in einem Rührreaktor mit kontinuierlicher Substratzudosierung (kontinuierlicher „fed-batch“-Prozess).

Ein stark vereinfachtes Prozessmodell berücksichtigt folgende Teilprozesse:

- Umwandlung von Substrat (Glucose) in Produkt (Citronensäure) durch die Stoffwechselfähigkeit der Mikroorganismen. Dadurch verringert sich die Substratmenge im Reaktor, während die Produktmenge entsprechend vergrößert wird. Die Produktbildungsrate (gebildete Produktmenge je Zeiteinheit) ist abhängig von
 - Substratkonzentration: zu niedrige Substratkonzentrationen hemmen die Produktbildung (Limitierung), zu hohe ebenfalls (Substratinhibierung); bei mittleren Werten der Substratkonzentration besitzt die Produktbildungsrate ein Maximum.
 - Produktkonzentration: die Produktbildungsrate sinkt mit wachsender Produktkonzentration (Produktinhibierung).
 - Zeit: mit wachsendem Alter der Mikroorganismen (Prozessdauer) sinkt die Produktbildungsrate.
- Zuführung von neuem Substrat von außen. Es wird eine kontinuierliche Substratzudosierung durch Glucoselösung vorausgesetzt, wobei der Substratzufluss (im Volumenstrom) die zu optimierende Steuergröße darstellt. Sowohl die im Reaktor vorhandene Substratmenge als auch das Volumen des Reaktorinhalts werden vergrößert.
- Neutralisierung des Produkts durch Zugabe von NaOH. Die Mikroorganismen sind nur in einem bestimmten pH-Wert-Bereich lebens- und arbeitsfähig. Durch eine untergeordnete pH-Wert-Regelung wird deshalb die Verschiebung des pH-Werts durch die gebildete Citronensäure mittels NaOH-Zugabe kompensiert, wodurch sich gleichzeitig das Volumen des Reaktorinhalts vergrößert.

Die mathematische Formulierung dieses Modells liefert eine Zustandsdifferentialgleichung mit zwei Zustandsgrößen: x_1 – Produktmenge (Citronensäure) im Reaktor, x_2 – insgesamt zugeführte Substratmenge und der Steuergröße u – Substratzufluss

$$\begin{aligned}\dot{x}_1(t) &= g(x_1, x_2, t) \\ \dot{x}_2(t) &= u(t)\end{aligned}\tag{20}$$

Das Volumen des Reaktorinhalts V , die Produktkonzentration c_p und die Substratkonzentration c_s , die in die Funktion $g(\cdot)$ eingehen, sind (nichtlineare) Funktionen von x_1 und x_2 .

Der Anfangszustand $\mathbf{x}(0) = [0 \ 0]^T$ und die Prozessdauer t_f sind fest, der Endzustand $\mathbf{x}(t_f)$ frei. Das Zielfunktional soll folgende, sich teilweise widersprechende Forderungen berücksichtigen:

- die Produktmenge $x_1(t_f)$ am Ende des Prozesses soll maximal sein,
- die Substratzufuhr sollte so gering wie möglich sein und
- der Aufbereitungsaufwand, der mit sinkender Produktkonzentration wächst, sollte ebenfalls gering sein.

Diese Zielgrößen können durch Einführung von Wichtungsfaktoren (Preise) in einem skalaren Zielfunktional vereinigt werden,

$$J = c_1 \cdot x_1(t_f) + c_2 \cdot x_2(t_f) + c_3 \longrightarrow \min!\tag{21}$$

Weiterhin ist die Steuergröße Substratzufluss beschränkt, da je Zeiteinheit nur eine gewisse Menge an Substrat zudosiert werden kann,

$$0 \leq u(t) \leq u_{max}.\tag{22}$$

Die numerische Integration der Zustandsgleichung erfolgt mittels Runge-Kutta-Verfahren. Aus Aufwandsgründen wird nur ein relativ kurzer Optimierungshorizont t_f betrachtet.

Eine recht gute Führung des Prozesses ohne Optimierung wird erreicht, wenn die Substratzudosierung so gestaltet wird, dass die aktuelle Substratkonzentration stets die Produktbildungsrate maximiert. Diese Forderung führt mit (22) auf ein nichtlineares Reglergesetz; die damit berechnete Steuerfunktion $u(t)$ dient als Start- und Vergleichspunkt für die Optimierung.

Vorbereitungsaufgaben:

3.4.1 Stellen Sie die notwendigen Optimalitätsbedingungen zu (20)-(22) auf! Welchen Charakter der optimalen Steuerung erwarten Sie? Fertigen Sie qualitative Skizzen der zeitlichen Abhängigkeiten des Produkts, des Substrats und der Steuerung (jeweils erwartete optimale Verläufe) an!

Praktikumsaufgaben (Problemauswahl: Datei/Problem/Bio):

Die Durchführung während des Präsenz-Praktikums ist je nach Zeitfonds optional.

3.4.2 Untersuchen Sie für verschiedene $u(t)$ und $c_s(0)$ (der Anfangswert der Substratkonzentration geht als Parameter in die Zustandsgleichung (20) ein) simulativ das Systemverhalten (Menü Parameter/Initialsteuerung/konstant bzw. ... Anfangswert Substratkonzentration; anschließend: Menü Start/Simulation)!

$u(t)$	$c_s(0)$
0.1	0
0.05	12
0.01	30

Tabelle 1: Vorschlag für Kombinationen von $u(t)$ und $c_s(0)$

Nutzen Sie dann den Zustandsregler zur Systemsimulation (Menü Parameter/Initialsteuerung/Zustandsregler bzw. ... Anfangswert Substratkonzentration, hier: $c_s(0) = 12$; anschließend: Menü Start/Simulation)!

3.4.3 Berechnen Sie für verschiedene Werte von $c_s(0)$ (z. B. $c_s(0) = 0, 12, 30$) die optimale Steuerung (Menü Start/Optimierung) und interpretieren Sie die Ergebnisse!

Literatur

- [1] P. Li. *Dynamische Prozessoptimierung*. TU Ilmenau.
- [2] *Taschenbuch Elektrotechnik*. 1. Auflage, Berlin 1977, Bd. 2; 3. Auflage, Berlin 1987 Bd. 1.
- [3] *Lexikon der Optimierung*. Akademie-Verlag, Berlin 1986.
- [4] R. Fletcher. *Practical Methods of Optimization. Vol. 2: Constrained Optimization*. Wiley, Chichester 1980.

- [5] D.E. Stewart. *Meschach: matrix computations in C*. University of Canberra, Australia, 1992
- [6] R. Franke and E. Arnold. *Applying new numerical algorithms to the solution of discrete-time optimal control problems*. In: *2nd European Workshop on Computer-Intensive Methods in Control and Signal Processing.*, pp. 67-72, Prague, 1996
- [7] R. Franke. *Anwendung von Interior-Point-Methoden zur Lösung zeitdiskreter Optimalsteuerungsprobleme*. Diplomarbeit. TU Ilmenau, 1994
- [8] R. Franke. *Integrierte dynamische Modellierung und Optimierung von Systemen mit saisonaler Wärmespeicherung*. Dissertation, TU Ilmenau, 1998.
- [9] HQP: <http://sf.net/projects/hqp>
- [10] A. Griewank, D.Juedes, J. Utke. *ADOL-C: A Package for the Automatic Differentiation of Algorithms Written in C/C++*. ACM TOMS. June 1996
- [11] S.J. Wright. *Interior-Point-Methods for Optimal Control of Discrete Time Systems*. JOTA, 77(1):161-187, 1983.
- [12] C.J. Goh, K.L. Teo. *Control parametrization: A unified approach to optimal control problems with general constraints*. Automatica, 24(1):3-18, 1988.
- [13] J.K. Ousterhout. *Tcl and the Tk Toolkit*. Addison Wesley, 1994.
- [14] O. Föllinger. *Regelungstechnik*. Hüthig, Heidelberg 1990. (6. Auflage, S. 393 ff., 471 ff.)
- [15] M. Pfaff. *Entwurf optimaler Steuerstrategien ausgewählter biotechnologischer Prozesse anhand aggregierter kinetischer Modelle*. Dissertation, TH Ilmenau 1991.