

Zusammenfassung der Dissertation

Trust-region Methods for Flow Control based on Reduced Order Modelling

von Marco Fahl

In vielen industriellen Anwendungsbereichen lassen sich Optimierungsaufgaben als Kontrollprobleme formulieren, bei denen die Zustandsgleichungen durch partielle Differentialgleichungen gegeben sind, die komplexe physikalische oder chemische Prozesse modellieren.

Dementsprechend führen Standard-Diskretisierungsverfahren (z.B. Finite-Elemente-Methoden) bei einer adäquaten Diskretisierung solcher partiellen Differentialgleichungen für komplexe Vorgänge oftmals zu hochdimensionalen Systemen von, im allgemeinen nichtlinearen, gewöhnlichen Differentialgleichungen und damit zu einer sehr grossen Zahl von Zustandsvariablen. Diese hochdimensionalen Systeme sind durch einen hohen numerischen Berechnungsaufwand für die Lösung der Zustandsgleichung gekennzeichnet und können deshalb oftmals nicht während eines Optimierungsprozesses verwendet werden, da die Zustandsgleichungen dort wiederholt gelöst werden müssen.

Ein Musterbeispiel für diese Art von numerischen Berechnungsproblemen sind Kontrollprobleme, bei denen die zeitabhängigen *Navier-Stokes-Gleichungen* zur Beschreibung von viskosen, inkompressiblen Fluid-Strömungen auftreten. Die Lösung solcher Kontrollprobleme über herkömmliche Diskretisierungsverfahren ist aus den oben genannten Gründen im allgemeinen gar nicht oder nur mittels sehr zeitintensiven Berechnungsverfahren auf Hochleistungsrechnern möglich.

Um die *Large-scale* Problematik zu umgehen, bieten *Reduced Order Modelle* zur Approximation von partiellen Differentialgleichungen im allgemeinen und insbesondere auch der *Navier-Stokes-Gleichungen* eine interessante Alternative. Hierbei steht eine Dimensionreduzierung des die Strömung beschreibenden Modells, also eine Reduktion der Zustandsvariablen, im Vordergrund. Obwohl sich entsprechende Modellierungstechniken zur Analyse und Simulation von Fluid-Strömungen schon seit einiger Zeit etabliert haben, stellt ihre Anwendung bei der Kontrolle von Strömungen ein aktuelles Forschungsgebiet dar, da dort eine neue Problematik auftritt.

Üblicherweise wird ein Reduced Order Modell für eine spezifische Strömungskonfiguration aufgestellt, d.h. für eine vorgegebene Kontrolle berechnet man das Reduced Order Modell, welches dazu dient, die zu dieser Kontrolle gehörende Strömungsdynamik abzubilden. Verwendet man dieses Reduced Order Modell nun während der Lösung des Kontrollproblems zur Berechnung einer Strömung, so steht man der Frage gegenüber, inwieweit ein gegebenes Reduced Order Modell auch für andere Steuerungen verlässliche Zustandsbeschreibungen liefert.

Typischerweise wird ein Reduced Order Modell nur für eine eingeschränkte Bandbreite der Kontrollvariablen verwendbar sein. Dies hat zur Folge, dass während des Optimierungsprozesses unter Zuhilfenahme eines einzigen Reduced Order Modells Reduced Order Lösungen berechnet werden können, welche das tatsächliche zu einer bestimmten Kontrolle gehörige Strömungsverhalten nicht adäquat beschreiben. Aus diesem Grund ist eine iterative Vorgehensweise erforderlich, bei der die Anpassung der Reduced Order Modelle an neue Strömungskonfigurationen mit dem Optimierungsprozess gekoppelt ist. Werden Modelländerungen angemessen durchgeführt, erhält man Reduced Order Modelle, die geeignet sind, das Strömungsverhalten aufgrund von Änderungen in den Kontrollvariablen darzustellen.

Da bei der Strömungskontrolle nicht allein eine adäquate Modellierung der Strömung, sondern vielmehr das Erreichen des Optimierungszieles im Vordergrund steht, bieten sich *Trust-region Methoden* zur Lösung des Kontrollproblems an. Durch die Anwendung eines Trust-region Verfahrens ist es möglich, den Gültigkeitsbereich eines speziellen Reduced Order Modells einzuschränken, indem nach jedem Optimierungszyklus die Qualität einer Reduced Order Lösung mit der Lösung des hochdimensionalen Modells hinsichtlich der Annäherung an das Optimierungsziel verglichen wird. Durch eine solche Vorgehensweise können die Vorteile der Reduced Order Modellierung bzgl. einer effizienten Berechnung einer Näherungslösung für die Zustandsgleichung genutzt werden, ohne in Kauf nehmen zu müssen, zu ungenaue oder vollständig ungeeignete Reduced Order Lösungen während des Optimierungsprozesses zu verwenden.

Vor dem Hintergrund dieser Überlegungen werden in dieser Dissertation Trust-region Methoden im Kontext der Reduced Order Modellierung für die Navier–Stokes–Gleichungen bei Strömungskontrollproblemen untersucht. Als Reduced Order Modellierungstechnik wird hierbei die *Proper Orthogonal Decomposition* (POD) Methode verwendet.

Ausgehend von einer angemessenen mathematischen Formulierung des Kontrollproblems über eine Variationsformulierung für die Navier–Stokes–Gleichungen, wird die POD Methode zur Ortsdiskretisierung der Zustandsgleichung betrachtet.

Während eine Finite-Elemente-Diskretisierung viele lokale Basisfunktionen zur Diskretisierung einer Variationsformulierung verwendet, wird bei der POD Technik ein anderer Zugang verfolgt. Hier versucht man, mit einer möglichst kleinen Anzahl von globalen, problemspezifischen Basisfunktionen, den POD Basisfunktionen, bei der Diskretisierung auszukommen.

Die Berechnung der POD Basisfunktionen erfolgt mit Hilfe von Momentaufnahmen des Strömungsverhaltens an ausgewählten Zeitpunkten, sogenannten *Snapshots*, für eine gegebene Strömungskonfiguration. Von der Menge der Snapshots ausgehend, werden charakteristische Strukturen im Strömungsverhalten identifiziert, so dass die gesamte Strömung als Zusammenspiel dieser charakteristischen Strömungsmuster dargestellt werden kann. In diesem Zusammenhang werden Parallelitäten zwischen der POD Methode und der *Singulärwertzerlegung* von Datenmatrizen als Mittel zur Mustererkennung in Datensätzen aufgezeigt und ein effizienter Algorithmus zur Berechnung der POD Basisfunktionen, basierend auf einem *Lanczos-Verfahren*, dargestellt.

Die so gewonnenen Basisfunktionen werden zur Diskretisierung der Navier-Stokes-Gleichungen verwendet - man erhält ein POD basiertes Reduced Order Modell. Da die POD Basisfunktionen jedoch mit Hilfe einer Snapshotmenge berechnet werden, die ein spezifisches Strömungsverhalten repräsentiert, ist die eingeschränkte Verwendbarkeit dieses Reduced Order Modells zur Darstellung anderer Dynamiken offensichtlich. Man kann erwarten, dass nur Strömungen mit ähnlichen charakteristischen Strömungsmustern darstellbar sind. Ergebnisse zur numerischen Simulation einer Nischenströmung (*Driven Cavity Flow*) bestätigen und illustrieren diesen Sachverhalt.

Dennoch können POD basierte Reduced Order Modelle zur Berechnung von Näherungslösungen für die Zustandsgleichung bei Strömungskontrollproblemen verwendet werden, wenn man Trust-region Methoden zur Lösung des Optimierungsproblems heranzieht.

Trust-region Methoden werden in der Regel zur Lösung von unrestringierten, nichtlinearen Optimierungsproblemen

$$\min_{u \in \mathbb{R}^n} f(u)$$

verwendet. Hierbei ersetzt man die Zielfunktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ für eine gegebene aktuelle Iterierte $u_k \in \mathbb{R}^n$ durch eine Modellfunktion m_k . Durch sukzessives Lösen von Trust-region Teilproblemen der Form

$$\min_{s \in \mathbb{R}^n} m_k(u_k + s), \quad s.t. \quad \|s\| \leq \delta_k$$

wird hierbei das eigentliche Optimierungsproblem $\min_u f(u)$ gelöst. Dabei definiert der Trust-region Radius $\delta_k > 0$ einen Vertrauensbereich für die Approximationsgüte der Modellfunktion.

Diese Modellierungsphilosophie ist gleichfalls auf den Lösungsansatz des Strömungskontrollproblems mit Reduced Order Modellen übertragbar. Formuliert man das Kontrollproblem als unrestringiertes Optimierungsproblem

$$\min_{u \in \mathbb{R}^n} \hat{f}(y^N(u), u),$$

wobei \hat{f} das Optimierungsziel beschreibe und $y^N(u)$ eine Lösung des hochdimensionalen Modells für die Navier–Stokes–Gleichungen für gegebene Kontrolle u bezeichne, so wird über

$$m_k(u_k + s) = \hat{f}(y^M(u_k + s), u_k + s)$$

eine Modellfunktion für $f(u) = \hat{f}(y^N(u), u)$ an der Stelle u_k definiert. Hierbei bezeichne $y^M(u)$ eine Zustandslösung des Reduced Order Modells für u_k . Die so definierte Modellfunktion m_k kann in einem entsprechenden Trust-region Algorithmus zur Lösung des Kontrollproblems verwendet werden.

Aufgrund der Herleitung der Modellfunktion stellt der resultierende TRPOD-Algorithmus, der die Ideen von klassischen Trust-region Verfahren und der POD basierten Reduced Order Modellierung kombiniert, eine Verallgemeinerung der herkömmlichen Trust-region Methoden, die mit quadratischen Modellfunktionen arbeiten, dar. Neben der numerischen Verwendbarkeit dieser Modellierungs- und Lösungs-idee für Strömungskontrollprobleme bei Nischenströmungen wird zudem auch die globale Konvergenz,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\nabla f(u_k)\| = 0,$$

des TRPOD-Algorithmus im Sinne von Trust-region Methoden gezeigt. Somit ist dieser Zugang auch von theoretischer Seite her gerechtfertigt.

Des weiteren lässt die Implementierung des grundlegenden TRPOD-Algorithmus viel Raum für problemspezifische Modifikationen und Anwendungen. Eine Tatsache, die auch an einem Anwendungsbeispiel aus der Lebensmittelsterilisation illustriert wird.