

METHODS FOR MODEL CALIBRATION AND
DESIGN OF OPTIMAL EXPERIMENTS FOR
PARTIAL DIFFERENTIAL EQUATION
MODELS

DISSERTATION

ZUR
ERLANGUNG DES DOKTORGRADES
DER NATURWISSENSCHAFTEN
(DR. RER. NAT)

VORGELEGT DEM

FACHBEREICH FÜR MATHEMATIK UND INFORMATIK

DER

PHILIPPS UNIVERSITÄT MARBURG

VON

GREGOR KRIWET

AUS KASSEL

Angefertigt mit Genehmigung des Fachbereichs Mathematik und Informatik der Philipps-Universität Marburg (Hochschulkennziffer: 1180)

Betreuerin: Prof. Dr. Ekaterina Kostina

Zweitgutachter: Prof. Dr. Stefan Körkel

Drittgutachter: Prof. Dr. Boris Vexler

Eingereicht: 23. Juni 2016

Als Dissertation angenommen am: 19. Juli 2016

Tag der Disputation: 25. Juli 2016

Wissenschaftlicher Werdegang von Gregor Kriwet:

Philipps-Universität Marburg 2009: B.Sc. Wirtschaftsmathematik (Sehr gut)

Philipps-Universität Marburg 2011: M.Sc. Wirtschaftsmathematik (Mit Auszeichnung)

Industriemathematik und Angewandte Mathematik

Gregor Kriwet

**Methods for Model Calibration and Design of Optimal
Experiments for Partial Differential Equation Models**

Shaker Verlag
Aachen 2016

Bibliographic information published by the Deutsche Nationalbibliothek

The Deutsche Nationalbibliothek lists this publication in the Deutsche Nationalbibliografie; detailed bibliographic data are available in the Internet at <http://dnb.d-nb.de>.

Zugl.: Marburg, Univ., Diss., 2016

Copyright Shaker Verlag 2016

All rights reserved. No part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system, or transmitted, in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without the prior permission of the publishers.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-4749-3

ISSN 1615-6390

Shaker Verlag GmbH • P.O. BOX 101818 • D-52018 Aachen

Phone: 0049/2407/9596-0 • Telefax: 0049/2407/9596-9

Internet: www.shaker.de • e-mail: info@shaker.de

Zusammenfassung

In dieser Dissertation werden Methoden für die Modellvalidierung von Prozessen, die durch partielle Differentialgleichungen beschrieben werden, vorgestellt. Die Methoden verbinden die Vorteile moderner Verfahren für die optimale Steuerung partieller Differentialgleichungen mit den etablierten Verfahren für die Modellvalidierung bei Differential-algebraischen Gleichungen.

Validierte Modelle sind von großer Bedeutung für industrielle und wissenschaftliche Zwecke. Ziel der Modellvalidierung ist es sicherzustellen, dass der reale Prozess durch das mathematische Modell quantitative korrekt wiedergegeben wird. Von daher können validierte Modelle für die Simulation von gefährlichen Szenarien und für die Prozessoptimierung eingesetzt werden. Die meisten mathematischen Modelle hängen von unbekanntem Modellparametern ab. Daher ist die zuverlässige Schätzung der Modellparameter ein wichtiger Bestandteil der Modellvalidierung.

Die Modellparameter werden mittels der Methode der kleinsten Quadrate in Verbindung mit einem direkten Mehrzielverfahren geschätzt. Das zugehörige Optimierungsproblem wird mit der Gauß-Newton Methode und einem Kondensierungsverfahren in Funktionenräumen gelöst. Neben der Schätzung der Parameter bestimmt das Verfahren die Kovarianzmatrix der Parameter sowie den Kovarianzoperator der Zustände. Die Kovarianzmatrix ermöglicht es die Schätzfehler bzw. die Konfidenzgebiete der Parameter zu ermitteln. Letztendlich wird die Methode zur Parameterschätzung von stochastischen Differentialgleichung mittels der Fokker Planck Gleichungen verallgemeinert.

In zahlreichen Anwendungen sind die Experimente, die für die Schätzung der Parameter verwendet werden, sehr teuer, führen jedoch nicht zu ausreichend genauen Schätzungen der Parameter. Daher ist es wünschenswert, die zusätzlichen Experimente auf eine optimale Art und Weise durchzuführen. Dies führt zu einem speziellen optimalen Steuerungsproblem, welches die Schätzfehler der Parameter minimiert. Das Ausmaß der Schätzfehler wird durch die Kovarianzmatrix ausgedrückt, daher wird ein geeignetes Funktional der Kovarianzmatrix minimiert.

Entsprechend moderner Verfahren für die Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen wird in dieser Dissertation ein adjungierter Ansatz für die Berechnung des reduzierten Gradienten des optimalen Versuchsplanungsproblems vorgestellt. Der adjungierte Ansatz ermöglicht es, den reduzierten Gradienten unabhängig von der Dimension der Kontrollvariablen durch das Lösen der adjungierten Differentialgleichung zu bestimmen. Letztlich wird der adjungierte Ansatz erweitert, um die reduzierte Hessematrix auswerten zu können. Dies ist die Grundlage für iterative Krylov Verfahren zur Lösung der Optimalitätsbedingungen.

In dieser Dissertation wird außerdem eine alternative Methode basierend auf einer positiv definiten Approximation der reduzierten Hessematrix entwickelt. Die Approximation der reduzierten Hessematrix kann – unabhängig von der Dimension der Steuerungen – durch das Lösen von $n_p \cdot n_p$ adjungierten Problemen bestimmt werden, dabei ist n_p die Anzahl an Parametern.

Abstract

In this thesis methods for model validation of partial differential equation (PDE) models are presented. The methods combine the advantages of recent developments in PDE constrained optimization and model validation of differential algebraic equations.

Validated models are of great importance for manufacturing and engineering purposes. The purpose of model validation is to provide a mathematical model which describes the real process quantitatively correctly, hence validated models can be used for the simulation of dangerous scenarios and for process optimization and control. Several mathematical models depend on unknown model parameters, thus the reliable estimation of the model parameters is a crucial part of model validation.

The model parameters are estimated by a least squares approach in combination with a direct multiple shooting time domain decomposition. The corresponding optimization problem is solved by a Gauß-Newton algorithm in combination with an efficient condensing method in function space. Beside the estimates of the parameters the covariance matrix is computed. With the covariance matrix of the parameters and the covariance operator corresponding to the multiple shooting node values the uncertainty of the parameters and multiple shooting node values are assessed. Finally, the method for parameter estimation is extended to stochastic differential equations by using the Fokker Planck equations.

In several applications the experiments performed to obtain the required measurements are expensive, but nevertheless not sufficient for satisfactory accuracy of the parameter estimates. Hence, it is desirable to design additional experiments in an optimal way. This leads to a special optimal control problem which minimize the uncertainty of the parameters. The uncertainty of the parameters can be expressed by the covariance matrix, thus a suitable function of the covariance matrix is minimized.

Following modern approaches of PDE constrained optimization, this thesis presents an adjoint approach for the computation of the reduced gradient of the optimum experimental design problem. With the adjoint approach the reduced gradient is computed, independent of the dimension of the control variables, by solving the adjoint equations. Furthermore, the adjoint approach is extended for the evaluation of the reduced Hessian. Thus the reduced problem can be solved by iterative Krylov methods.

In this thesis an alternative approach based on a positive definite approximation of the reduced Hessian is developed. The approximation of the reduced Hessian can be computed – independent of the number of controls – by solving $n_p \cdot n_p$ decoupled adjoint problems, where n_p is the number of parameters.

Contents

List of Acronyms	i
Acknowledgements	iii
Introduction	v
Model Validation	v
State of the Art	vi
Contribution of this Thesis	viii
Thesis overview	ix
I. Theoretical Background	1
1. Partial Differential Equation Models	3
1.1. Solutions of Parabolic Partial Differential Equations	4
1.1.1. Sobolev Spaces	4
1.1.2. The Bilinear Form of the Elliptic Operator	6
1.1.3. The Nemytskii Operator	7
1.1.4. Bochner Integral	8
1.1.5. Weak Solutions of Parabolic PDEs	11
1.2. Derivatives of the Solution Operator	15
1.2.1. Computing Directional Derivatives	16
1.2.2. Computing Derivatives of Functionals Using Adjoint Equations	17
1.3. The Reduced Approach for Optimal Control Problems	20
1.3.1. Projected Gradient Method	21
1.3.2. Josephy-Newton Methods	22
1.3.3. Semi-Smooth Newton Method	23
1.3.4. Evaluation of the Reduced Hessian	25
1.4. SQP Method	29
1.4.1. Primal-Dual Active Set Method	31
1.4.2. Summary	32

2. Model Validation	35
2.1. Parameter Estimation	35
2.1.1. The Maximum Likelihood Approach	36
2.1.2. Least Squares Approach	38
2.1.3. Solving the Least Squares Problem	39
2.2. The Uncertainty in the Parameter	41
2.2.1. Covariance matrix	41
2.2.2. Confidence Regions	42
2.3. Design of Optimal Experiments	43
II. Numerical Methods for PDE Models	45
3. Parameter Estimation Problem	47
3.1. The Direct Multiple Shooting Approach	48
3.2. Gauß-Newton Method	49
3.2.1. Efficient Condensing Technique	50
3.2.2. Condensed Parameter Estimation Problem	54
3.3. Efficient Solution and Derivative Generation of PDEs	56
3.3.1. Discretization of the PDE	57
3.3.2. Derivative Generation	59
3.4. Statistical Properties of the Parameter Estimates	62
3.4.1. Covariance Operator of the Shooting Node Values	62
3.4.2. Computation of the Covariance Matrix	63
3.4.3. Error Assessment	65
4. Optimum Experimental Design	69
4.1. The Direct Multiple Shooting Approach	72
4.2. The SQP Method	74
4.2.1. Condensing Technique for Eliminating the Constraints	78
4.2.2. The Reduced Quadratic Problem	87
4.3. Solving the Reduced QP with Iterative Krylov Methods	90
4.3.1. Computation of the Reduced Gradient	93
4.3.2. Evaluation of the Reduced Hessian	98
4.4. An SQP Method with Approximated Hessian	111
4.4.1. Assembling the Reduced QP with Approximated Hessian	117
4.4.2. Solving the Reduced QP with Approximated Hessian	122
4.4.3. Convergence of the SQP Method with Approximated Hessian	125

III. Numerical Examples	129
5. Parameter Estimation of Stochastic Processes	131
5.1. Maximum Likelihood Estimation	131
5.2. Least Squares Estimation	135
5.3. Numerical Example	137
5.4. Conclusion and Summary	139
6. Catalytic Plug Flow Reactor	141
6.1. The Model	141
6.1.1. The Momentum Balance in a Packed Bed	142
6.1.2. The Mass Balance	142
6.1.3. The Energy Balance	144
6.1.4. The Kinetics of the Chemical Reaction	146
6.2. Numerical Results	147
6.2.1. The Estimation of the Kinetic Parameters	149
6.2.2. Design of Optimal Experiments	150
6.2.3. Conclusion and Summary	151
Conclusion and Outlook	153
List of Tables	155
List of Figures	157
Bibliography	159