# 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



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 unbekannten 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 ermitten. 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 Optimalitätsbedigungen.

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