

# Mathematische Optimierung kann helfen!

Stefan Volkwein

Fachbereich Mathematik und Statistik, Universität Konstanz

Antrittsvorlesung, 17. Juli 2010  
Lange Nacht der Wissenschaften

# Beitrag der Mathematischen Optimierung im interdisziplinären Team

Anwendung

⇓ Modellierung

mathematisches Modell

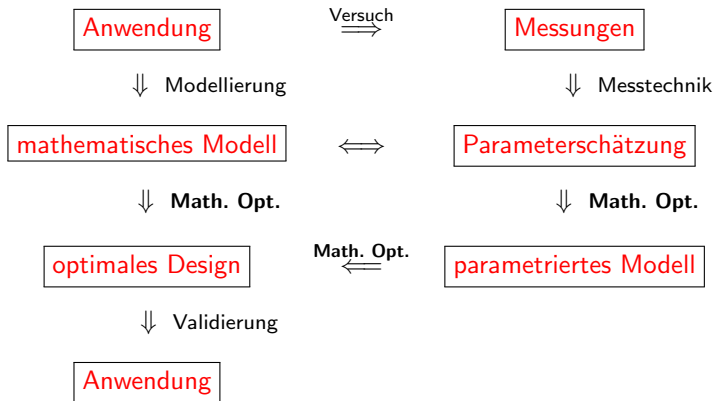
⇓ **Math. Opt.**

optimales Design

⇓ Validierung

Anwendung

# Beitrag der Mathematischen Optimierung im interdisziplinären Team

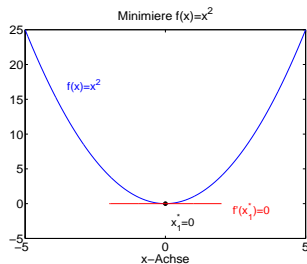


## Eine Minimierungsaufgabe

**Aufgabe:**  $\min \{f(x) : -\infty < x < \infty\}$

**Bedingung:**  $f'(x_1^*) \stackrel{!}{=} 0$  mit  $f'(x) = 2x$

**Lösung:**  $x_1^* = 0$



# Eine Minimierungsaufgabe mit Nebenbedingungen

**Aufgabe:**  $\min \{f(x) : -\infty < x < \infty\}$

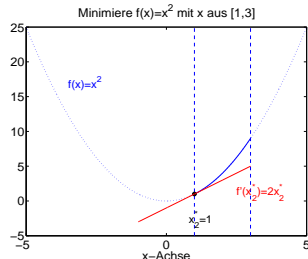
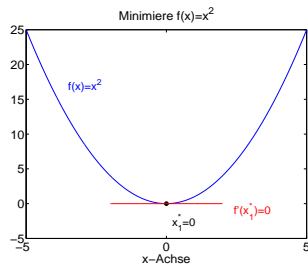
**Bedingung:**  $f'(x_1^*) \stackrel{!}{=} 0$  mit  $f'(x) = 2x$

**Lösung:**  $x_1^* = 0$

**Aufgabe:**  $\min \{f(x) : 1 \leq x \leq 3\}$

**Bedingung:** 
$$\begin{pmatrix} f'(x_2^*) + \mu_b^* - \mu_a^* \\ \mu_a^*(1 - x_2^*) \\ \mu_b^*(x_2^* - 3) \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

**Lösung:**  $x_2^* = 1, \mu_a^* = 2, \mu_b^* = 0$

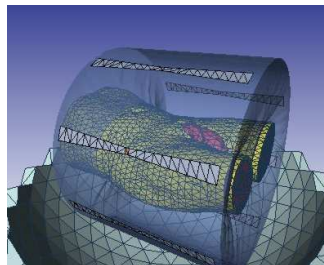


## Beispiel 1

# Parameteridentifikation bei der Hyperthermie

Kooperation mit Dr. M. Weiser (Zuse Institut Berlin) und Charité

# Parameteridentifikation bei der Hyperthermie — 1



## Parameteridentifikation bei der Hyperthermie — 2

## Modell: Differentialgleichung

$$(*) \quad -\operatorname{div}(\kappa(x)\nabla u(x)) + c(x)w(x)(u(x) - u_a) = f(x)$$

mit Leitfähigkeit  $\kappa$ , Absorptionsrate  $f$ , spezifischer Wärme  $c$ , Körpertemperatur  $u$  und konstanter systemischer Temperatur  $u_a = 37^\circ\text{C}$

## Ziel

Identifikation der Perfusion aus Messwerten für Temperatur und Perfusion

## Mathematische Optimierung

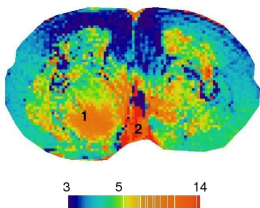
Minimiere |Modell-Messung| durch Wahl von  $w$  in  $(*)$



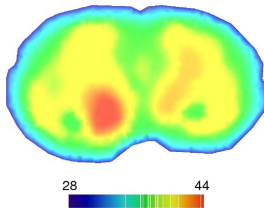
## Parameteridentifikation bei der Hyperthermie — 3

## Numerische Lösungsstrategie

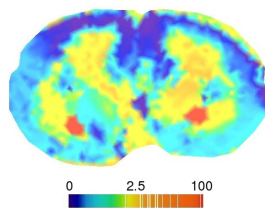
- eigens entwickeltes, effizientes **Optimierungsverfahren** (SQP)
- passende **Approximation des Modells**



Messwerte



identifizierte Temperatur



identifizierte Perfusion

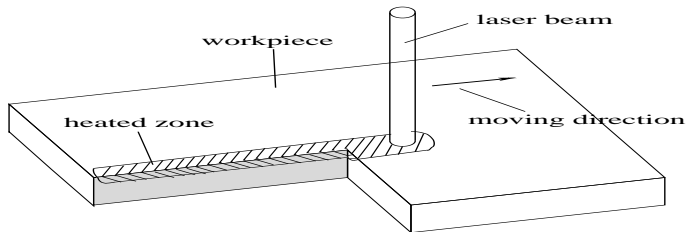
## Beispiel 2

# Optimales Design beim Laseroberflächenhärten

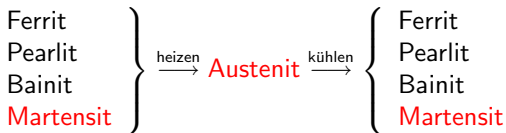
Kooperation mit Prof. D. Hömberg (TU Berlin und WIAS Berlin)

# Optimales Design beim Laseroberflächenhärten — 1

- **Vorgehen:**



- **Phasenübergänge im Stahl:**



## Optimales Design beim Laseroberflächenhärten — 2

### Problem in der Praxis

### Optimales Design der Laserintensität

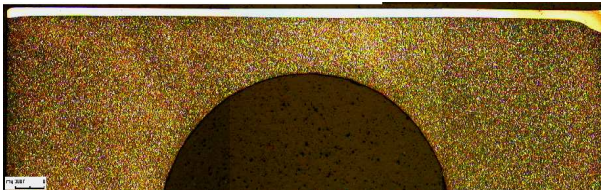
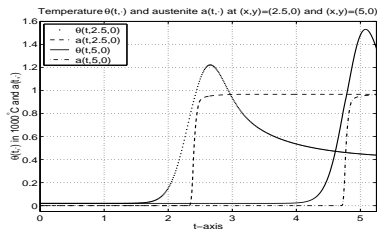
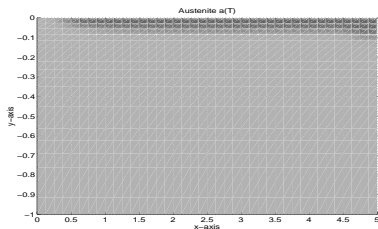


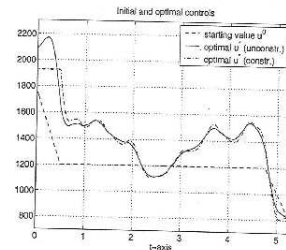
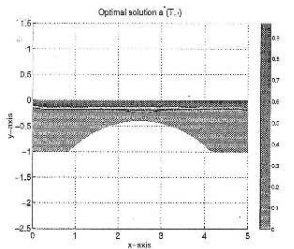
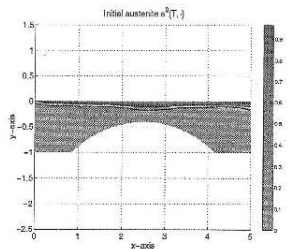
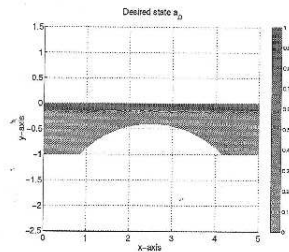
Foto vom WIAS

## Optimales Design beim Laseroberflächenhärten — 3

- **Dimension:** zwei/drei Raum- und eine Zeitdimension  $t$
- **Wärmeleitung für die Temperatur  $\theta$ :**  $\theta_t - \Delta\theta = \alpha u - \beta a_t$
- **Phasenübergang beim Austenit:**  $a_t = f(\theta, a)$
- **Laserintensität:**  $u = u(t)$
- **Ziel:**  $a|_{t=T} \approx a_d$  und  $\theta < \theta_{melt}$



# Optimales Design beim Laseroberflächenhärten — 4



## Beispiel 3

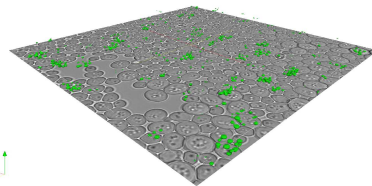
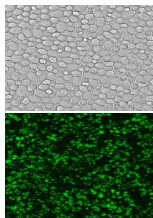
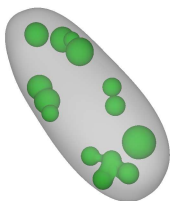
# Segmentierung von Zellrändern

Kooperation mit Dr. K. Bredies (U Graz), Jun.-Prof. D. Merhof  
und T. Treskatis (U Konstanz, INCIDE)

## Segmentierung von Zellrändern — 1

Metabolismus der Hefe *Saccharomyces cerevisiae*

- 2D-Durchlichtmikroskopie  
↔ Zellbegrenzungen (nicht invasiv)
- Ziel: zellbasierte quantitative Analyse
- Dazu: Detektion der Zellgrenzen





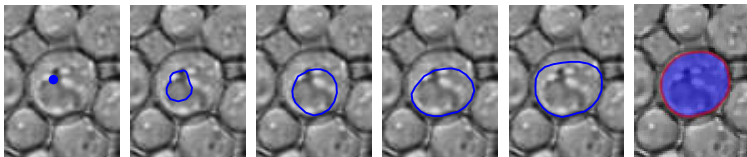
## Segmentierung von Zellrändern — 2

- **Standard-Modell:** helligkeits- und differenzbasierte Randdetektion



- **Snake-Modell:** Zellränder durch numerische Optimierung

$$\min_{\gamma} \int_{S^1} G(\gamma(t)) + \alpha |\gamma'(t)|^2 dt - \left( \frac{\beta}{2} \int_{S^1} \gamma(t) \cdot \gamma'(t)^\perp dt \right)^p$$

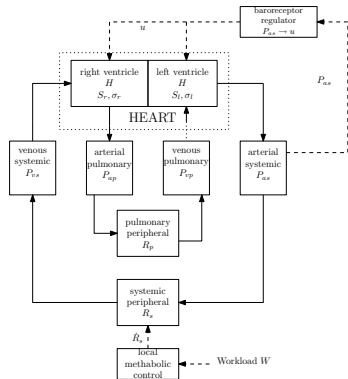


## Beispiel 4

# Herz-Kreislaufsystem

Kooperation mit Prof. F. Kappel (U Graz) und Dr. M. Mutsaers  
(TU Eindhoven)

# Herz-Kreislaufsystem — 1



- $P_{as}$  arterieller System-Blutdruck
- $P_{vs}$  venöser System-Blutdruck
- $P_{ap}$  arterieller Lungen-Blutdruck
- $P_{vp}$  venöser Lungen-Blutdruck
- $R_s$  Widerstand Systemkreislauf (Arbeit)
- $R_p$  Widerstand Lungenkreislauf
- $S_l$  Kontraktibilität der linken Ventrikel
- $S_r$  Kontraktibilität der rechten Ventrikel
- $H$  Herzrate

## Herz-Kreislaufsystem — 2

- **Zustand:**  $x = (P_{as}, P_{vs}, P_{ap}, P_{vp}, S_l, \dot{S}_l, S_r, \dot{S}_r, R_s, H) : [0, T] \rightarrow \mathbb{R}^{10}$
- **Nichtlineares dynamisches System:**

$$\dot{x}(t) = F(x(t), u(t)) \text{ für } t \in (0, T) \quad \text{und} \quad x(0) = x_0$$

mit stetig-differenzierbarem  $F$

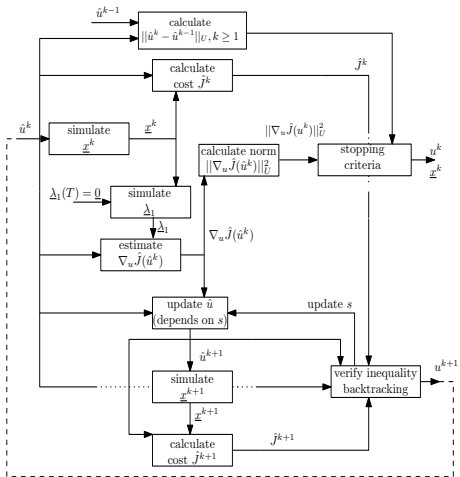
- **Steuermechanismus:**  $\dot{H}(t) = u(t)$
- **Messungen:**  $P_{as}(t)$
- **Optimierung:**

$$\min_{x, u} J(x, u) = \int_0^T (P_{as}(t) - P_{as}^d)^2 + \kappa u(t)^2 dt + (P_{as}(T) - P_{as}^d)^2$$

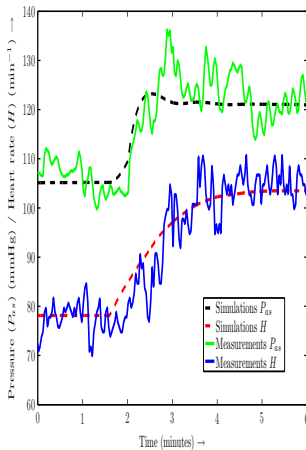
u.d.N.  $u_a \leq u \leq u_b$  in  $[0, T]$  und

$$\dot{x}(t) = F(x(t), u(t)) \text{ für } t \in (0, T) \quad \text{und} \quad x(0) = x_0$$

## Herz-Kreislaufsystem — 3



Simulation results of transition with parameters after estimation



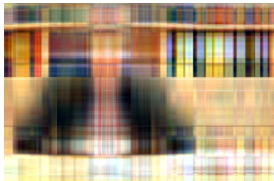
Werkzeug bei komplexen Problemen

# Modellreduktion

Kooperation mit Prof. M. Hinze (U Hamburg),  
Prof. K. Kunisch (U Graz), Prof. K. Urban (U Ulm)

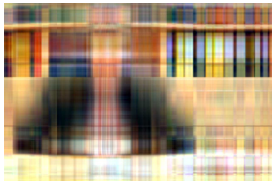
# Modellreduktion — 1

0,5% der Matrixbasis  $\rightarrow$  45% Information



# Modellreduktion — 1

0,5% der Matrixbasis  $\rightarrow$  45% Information

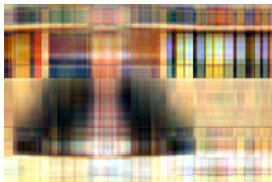


1% der Matrixbasis  $\rightarrow$  56% Information

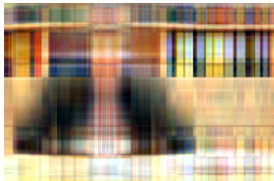




## Modellreduktion — 1

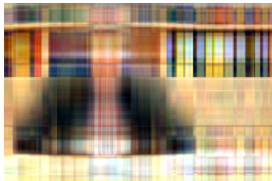
0,5% der Matrixbasis  $\rightarrow$  45% Information1% der Matrixbasis  $\rightarrow$  56% Information5% der Matrixbasis  $\rightarrow$  76% Information

## Modellreduktion — 1

0,5% der Matrixbasis  $\rightarrow$  45% Information1% der Matrixbasis  $\rightarrow$  56% Information5% der Matrixbasis  $\rightarrow$  76% Information10% der Matrixbasis  $\rightarrow$  85% Information

# Modellreduktion — 1

0,5% der Matrixbasis  $\rightarrow$  45% Information



1% der Matrixbasis  $\rightarrow$  56% Information



5% der Matrixbasis  $\rightarrow$  76% Information



10% der Matrixbasis  $\rightarrow$  85% Information



20% der Matrixbasis  $\rightarrow$  92% Information



Originalbild

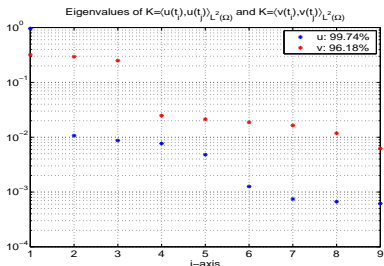
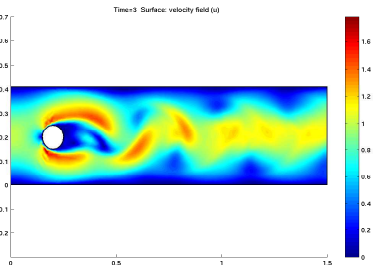
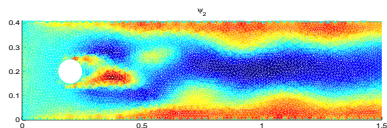
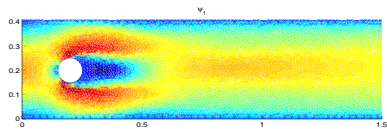


## Modellreduktion — 2

$$\begin{aligned} u_t + uu_x + vv_y + p_x &= \nu \Delta u & \text{in } Q = (0, T) \times \Omega \\ v_t + uv_x + vv_y + p_y &= \nu \Delta v & \text{in } Q \\ u_x + v_y &= 0 & \text{in } Q \end{aligned}$$

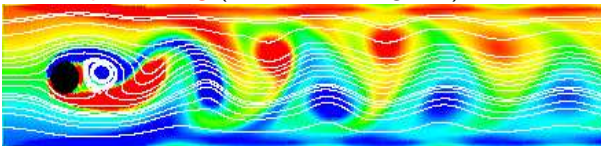
- Navier-Stokes Gleichung
- $3 \times 4804$  Freiheitsgrade
- Integration mit 20 Zeitschritten
- Snapshots span  $\{u(t_1), \dots, u(t_{21})\}$

und span  $\{v(t_1), \dots, v(t_{21})\}$

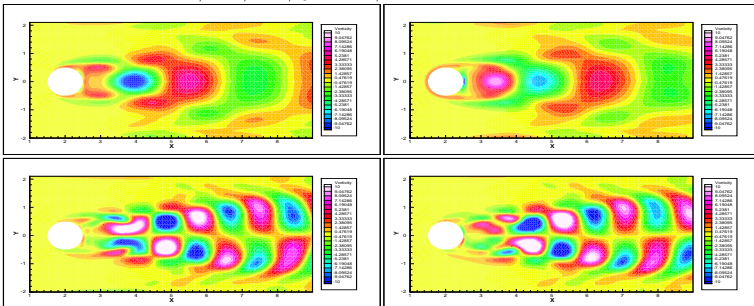


# Modellreduktion — 3

- **Ohne Optimierung** ( $5 \cdot 10^7$  Freiheitsgrade):

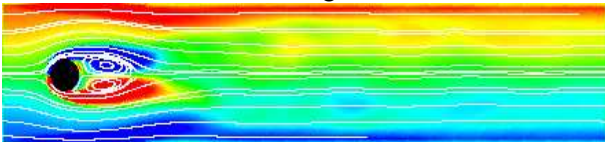


- **Basisfunktionen:**  $\psi_1, \psi_2, \psi_3$  und  $\psi_4$

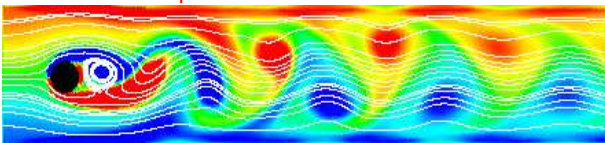


## Modellreduktion — 4

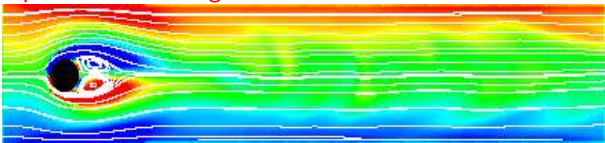
- Ziel: Mittelwert der Strömung



- Startwert des Optimierers



- Optimale Strömung

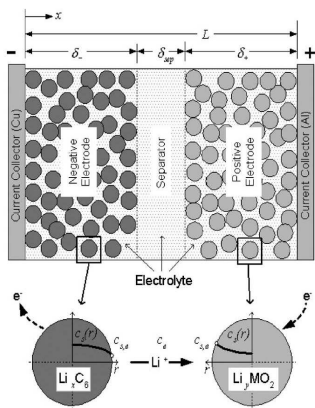


## Lange Nacht der Wissenschaften: Die Zukunft der Energie

# Lithium-Ionen Batterie

- Numerical and analytical methods for elliptic-parabolic systems appearing in the modeling of lithium-ion batteries, Exzellenzinitiative U Konstanz (Denk/Lass/Seeger/V.)
- Prognosesicheres Batteriemodell für Elektro- und Hybridfahrzeuge mit dem ViF in Graz, Österreich (Lass/V.)
- Methodenentwicklung zur Optimierung von Batteriemodellen unter Verwendung von Modellreduktion und Space-Mapping-Techniken mit dem ViF in Graz, Österreich (Mancini/V.)

## Lithium-Ionen-Batterie



Modell [Wu et al.]:

$$\begin{aligned}
 -\nabla \cdot (\kappa(c) \nabla \Phi_e) - S_e(\Phi_s - \Phi_e, c) &= 0 \\
 -\nabla \cdot (\sigma \nabla \Phi_s) + S_e(\Phi_s - \Phi_e, c) + f &= 0 \\
 (\varepsilon_e c)_t - \nabla \cdot (D \nabla c) &= S_c(\Phi_s - \Phi_e, c)
 \end{aligned}$$

Variablen:

elektr. Potential  $\Phi_e$  (Electrolyt-Phase)

elektr. Potential  $\Phi_s$  (Fest-Phase)

Lithium-Ionen Konzentration  $c$  (Elektrolyt)



# Vielen Dank!

## Weitere Informationen im Internet

**SFB:** [www.math.uni-graz.at/mobis](http://www.math.uni-graz.at/mobis)

**Das Virtuelle Fahrzeug:** [www.vif.tugraz.at](http://www.vif.tugraz.at)

**V.:** [www.math.uni-konstanz.de/numerik/personen/volkwein](http://www.math.uni-konstanz.de/numerik/personen/volkwein)