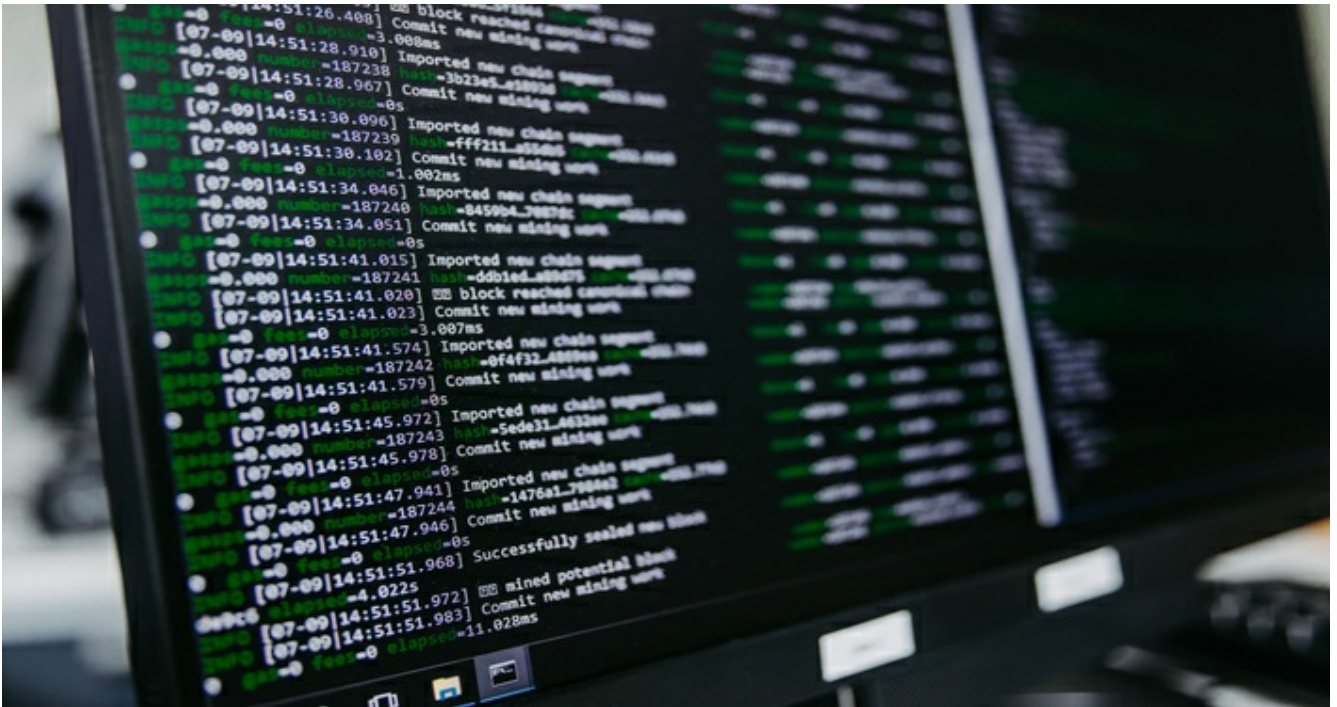


Schlüsseltechnologien

Der Bereich Schlüsseltechnologien widmet sich mathematischen Modellen, die in den betrachteten Systemen eine wichtige Rolle spielen. Neben physikalisch, chemisch oder biologisch motivierten Grundlagenmodellen spielen dabei auch zunehmend datengetriebene Ansätze des maschinellen Lernens und der künstlichen Intelligenz eine wichtige Rolle. Des Weiteren werden im CDS auch neue theoretische Ansätze der modellgestützten mathematischen Optimierung, der Komplexitätsreduktion, der Versuchsplanung und der Steuerung entwickelt und implementiert.

Mathematische Modelle der betrachteten Systeme spielen eine wichtige Rolle. Sie erlauben es, Expertenwissen nutzbar zu machen und stellen die Grundlage für Simulation, Analysen, Optimierung und Steuerung dar. Für viele der betrachteten Systeme und Prozesse haben sich Differentialgleichungen als geeignetes Modellierungswerkzeug erwiesen. Zu der Modellierung gehören aber auch Beschränkungen und Zielfunktionen. Als Vision verfolgen wir hierbei digital twins für die untersuchten dynamischen Systeme, die verschiedene Modelle unterschiedlicher Detailgrade beinhalten. Je nachdem, was untersucht werden soll, können nun geeignete Modelle eingesetzt werden - beispielsweise komplexitätsreduzierte, konvexe Gleichgewichtsmodelle. Eine Unterschätzung für nicht-konvexe transiente Differentialgleichungsmodelle in Optimierungsalgorithmen zur Berechnung von Schranken.

Bei der **Diskretisierung der mathematischen Modelle**, z.B. mit Finite Elemente Methoden, werden die zumeist **unendlich-dimensionalen Probleme durch endlich dimensionale, auf dem Computer abbildbare, Systeme** genähert. Dies führt zu sehr großen Gleichungssystemen oder Optimierungsproblemen, deren Lösung mit Simulationswerkzeugen approximiert werden muss. Die Anforderungen der Anwendung treiben die Problemkomplexität dabei regelmäßig jenseits der Schwelle des mit modernen Computersystemen Realisierbaren. Wir entwickeln und implementieren **parallelisierbare high-performance Tools auf der Basis effizienter Lösungsmethoden**. Für eine Dimensionsreduktion werden fehlerkontrollierte adaptive Steuerung entworfen, welche die Diskretisierung optimal an das untersuchte Modell anpassen und alle auftretenden Fehleranteile kontrollieren. Hier kommen ableitungsbasierte Techniken zur Geltung, die in Form von adjungierten Gleichungen auch bei der Optimierung eine wichtige Rolle spielen. Zur Nutzung moderner Hardware (z.B. Beschleuniger-Karten oder Manycore CPU) werden klassische Diskretisierungstechniken mit Konzepten des maschinellen Lernens in hybriden Ansätzen verbunden.



Wir entwickeln **strukturausnutzende first-discretize-then-optimize Methoden zur Optimierung dynamischer Systeme**. Die sind iterativ, ableitungsbasiert, deterministisch und dafür geeignet, effizient zur Behandlung von Ganzzahligkeiten u Unsicherheiten erweitert zu werden. Die Optimierung ist zudem eine enabling technology für die folgenden Schlüsseltechnologien

Die Regelung und Steuerung komplexer Systeme ist oftmals herausfordernd. **Nebentheoretischen Analysen** bezüglich Stabilität und Steuerbarkeit entwickeln wir **effiziente Methoden der nichtlinearen modellprädiktiven Regelung (NMPC)**, die mit Zustands- und Parameterschätzungen gekoppelt werden können. Auch **Methoden der online Versuchsplanung** oder **dual Steuerung** werden entwickelt und zum Einsatz gebracht. Im CDS werden auch effiziente Methoden entwickelt, die auf Matrix- u Tensorrechnung basieren.

Durch Daten können verschiedene Hypothesen-Modelle diskriminiert, Modellparameter geschätzt, und Neuronale Netze trainiert werden. Die Frage, **welche Daten dazu erzeugt bzw. verwendet werden sollen um eine hohe statistische Aussagekraft zu erhalten**, bezeichnet man als Versuchsplanung. Die Maximierung der verfügbaren Information ist ein besonders strukturiertes Optimierungsproblem, das **Herausforderungen an die statistische Modellierung des Optimierungsproblems und an die verwendeten Methoden** stellt, insbesondere wenn komplexe dynamische Prozesse betrachtet werden.

Das CDS liefert Beiträge zur **Magdeburger KI Forschung** (<https://ki.ovgu.de/index.php?show=forschung>). Diese zeichnen sich durch eine **anwendungsgetriebene interdisziplinäre Erforschung und Entwicklung neuer Ansätze im dynamischen Kontexten** aus. Dies beinhaltet sowohl die Entwicklung neuer Modelle und Algorithmen des Maschinellen Lernens (ML) als auch innovative, anwendungsspezifische Konzepte bei deren Einsatz. Wir verfolgen die Vision einer hohen Akzeptanz der entwickelten Ansätze, indem wir mit effizienten, erklärbaren und sicheren Modellen und Methoden arbeiten. Wir entwickeln hybride Modelle, die die Vorteile des Expertenwissens aus first-principles mit der Flexibilität von datengetriebenen Surrogatmodellen kombinieren. Besondere methodische Schwerpunkte sind i) eine systemtheoretische Sicht und die Entwicklung von hybriden Modellen, ii) effiziente Algorithmen zur Simulation und Optimierung hybrider Modelle, iii) die Analyse und Optimierung (semi-)autonom

komplexer Systeme in Echtzeit und iv) eine mathematisch fundierte und komplexitätsreduzierende Modell- u Methodenentwicklung.



Komplexität ist eine Eigenschaft, die es schwer macht, eine angemessene mathematische Beschreibung eines realen Prozess zu finden, die fundamentalen Strukturen und Eigenschaften von mathematischen Objekten zu erkennen, oder ein gegeben mathematisches Problem algorithmisch effizient zu lösen. **Komplexitätsreduktion** bezeichnet alle Ansätze, die die Schwierigkeiten in einem systematischen Weg lösen und die vorgenannten Ziele erreichen helfen. Für viele Aufgaben sind Approximation und Dimensionsreduktion die Werkzeuge der Wahl, doch wir sehen Komplexitätsreduktion sehr viel allgemeiner und nutzen beispielsweise auch zielführend Einbettungen in höher-dimensionale Räume.

Um die anwendungsgetriebene Entwicklung von Modellen und Methoden voranzutreiben und abzurunden, entwickeln wir **effiziente Algorithmen** und implementieren diese in Softwarepaketen, die in den Anwendungsbereichen des CDS zum Einsatz kommen. Beispiele sind Beiträge zu den Softwarepaketen

casadi > <https://web.casadi.org/> (<https://web.casadi.org/>)

gascoigne > <https://www.gascoigne.de/> (<https://gascoigne.math.uni-magdeburg.de/>)

pymor > <https://pymor.org/> (<https://pymor.org/>)

pycombina > <https://github.com/adbuenger/pycombina> (<https://github.com/adbuenger/pycombina>)

scip > <https://www.scipopt.org/> (<https://www.scipopt.org/>)

und viele projektspezifische Implementierungen.



Kontakt Prof. Dr. rer. nat. habil. Sager

Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg

Fakultät für Mathematik (FMA)

Institut für Mathematische Optimierung (IMO)

Universitätsplatz 2

39106 Magdeburg

Prof. Dr. rer. nat. habil. Sebastian Sager

G02 - R224

Tel.: +49 391 67 58745

✉ sager@ovgu.de

› [Prof. Dr. rer. nat. habil. Sebastian Sager](#)

Forschung

- ▶ [Energiewandlung](#)
- ▶ [Chemische Produktion](#)
- ▶ [Wirkstoffe](#)
- ▶ [Schlüsseltechnologien](#)