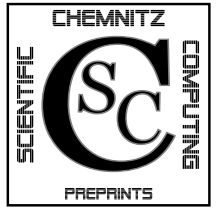
TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Torsten Hein Marcus Meyer

Simultane Identifikation voneinander unabhängiger Materialparameter – numerische Studien

CSC/07-05



Chemnitz Scientific Computing Preprints

Chemnitz Scientific Computing Preprints – ISSN 1864-0087

Impressum:

Chemnitz Scientific Computing Preprints — ISSN 1864-0087
(1995–2005: Preprintreihe des Chemnitzer SFB393)

Herausgeber:
Professuren für
Numerische und Angewandte Mathematik
an der Fakultät für Mathematik
der Technischen Universität Chemnitz

Postanschrift:
TU Chemnitz, Fakultät für Mathematik
09107 Chemnitz
Sitz:
Reichenhainer Str. 41, 09126 Chemnitz

http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/csc/

$X = Q + LX^{-1}L^{\top}$. September 2006.

06-03 P. Benner, H. Mena, J. Saak. On the Parameter Selection Problem in the Newton-ADI Iteration for Large Scale Riccati Equations. October 2006.

06-04 J. M. Badía, P. Benner, R. Mayo, E. S. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí, A. Remón. Balanced Truncation Model Reduction of Large and Sparse Generalized Linear Systems. November 2006.

07-01 U. Baur, P. Benner. Gramian-Based Model Reduction for Data-Sparse Systems. February 2007.

07-02 A. Meyer. Grundgleichungen und adaptive Finite-Elemente-Simulation bei „Großen Deformationen“. Februar 2007.

07-03 P. Steinhorst. Rotationssymmetrie für piezoelektrische Probleme. Februar 2007.

07-04 S. Beuchler, T. Eibner, U. Langer. Primal and Dual Interface Concentrated Iterative Substructuring Methods. April 2007.

The complete list of CSC and SFB393 preprints is available via
`http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/csc/`

TECHNISCHE UNIVERSITÄT CHEMNITZ

Chemnitz Scientific Computing Preprints

Torsten Hein **Marcus Meyer**

Simultane Identifikation voneinander unabhängiger Materialparameter – numerische Studien

CSC/07-05

Zusammenfassung

In einem Modellproblem wird die Aufgabe der gleichzeitigen Identifikation zweier unabhängiger Parameterfunktionen bei elliptischen Differentialgleichungen untersucht. Es werden Parameterfunktionen betrachtet, die stückweise konstant sind. In einer ausführlichen Fallstudie wird auf unterschiedliche Fragestellungen eingegangen. Hierbei handelt es sich zum einen um den Vergleich von verschiedenen bekannten Lösungsalgorithmen, um für dieses Problem geeignete Varianten auszuwählen. Des Weiteren wurden der Einfluss von Messfehlern auf die Qualität der Lösung sowie die Wahl von Schranken für die zu ermittelnden Parameter untersucht. Darüber hinaus wird die Wirkung der konkreten Wahl der Randbedingungen auf die Identifizierbarkeit der zu bestimmenden Werte untersucht.

CSC/07-05 ISSN 1864-0087 **Juni 2007**

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung **1**

2 Das kontinuierliche inverse Problem **3**

3 Finite-Elemente-Diskretisierung **7**

4 Der diskrete Operator der Vorwärtsaufgabe **9**

5 Numerische Lösung des inversen Problems **11**

6 Numerische Fallstudien **13**

6.1 Numerische Umsetzung 16
6.2 Effizienz der Lösungsalgorithmen 18
6.3 Einfluss des Datenfehlers 21
6.4 Einfluss der FE-Diskretisierung auf Lösungsfehler und Rechenzeit 22
6.5 Einfluss der Randbedingungen 24
6.6 Singularität der Jacobi-Matrix 28
6.7 Wahl des Definitionsgebietes 30

7 Zusammenfassung und Ausblick **31**

Author's addresses:

Torsten Hein
Marcus Meyer
TU Chemnitz
Fakultät für Mathematik
Reichenhainer Str. 41
D-09107 Chemnitz

http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/num_analysis/
http://www.tu-chemnitz.de/mathematik/inverse_probleme/

05-05 P. Benner, J. Saak. Linear-Quadratic Regulator Design for Optimal Cooling of Steel Profiles. April 2005.

05-06 A. Meyer. A New Efficient Preconditioner for Crack Growth Problems. April 2005.

05-07 A. Meyer, P. Steinhorst. Überlegungen zur Parameterwahl im Bramble-Pasciak-CG für gemischte FEM. April 2005.

05-08 T. Eibner, J. M. Melenk. Fast algorithms for setting up the stiffness matrix in hp-FEM: a comparison. June 2005.

05-09 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Vergleich der Fehlerindikatoren in Bezug auf die Netzsteuerung Teil I. June 2005.

05-10 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Vergleich der Fehlerindikatoren in Bezug auf die Netzsteuerung Teil II. July 2005.

05-11 A. Meyer, R. Unger. Subspace-cg-techniques for clinch-problems. September 2005.

05-12 P. Ciarlet, Jr, B. Jung, S. Kaddouri, S. Labrunie, J. Zou. The Fourier Singular Complement Method for the Poisson Problem. Part III: Implementation Issues. October 2005.

05-13 T. Eibner, J. M. Melenk. Multilevel preconditioning for the boundary concentrated *hp*-FEM. December 2005.

05-14 M. Jung, A. M. Matsokin, S. V. Nepomnyaschikh, Yu. A. Tkachov. Multilevel preconditioning operators on locally modified grids. December 2005.

05-15 S. Barrachina, P. Benner, E. S. Quintana-Ortí. Solving Large-Scale Generalized Algebraic Bernoulli Equations via the Matrix Sign Function. December 2005.

05-16 B. Heinrich, B. Jung. Nitsche- and Fourier-finite-element method for the Poisson equation in axisymmetric domains with re-entrant edges. December 2005.

05-17 M. Randrianarivony, G. Brunnett. C^0-paving of closed meshes with quadrilateral patches. December 2005.

05-18 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Quadrilateral removal and 2-ear theorems. December 2005.

05-19 P. Benner, E. S. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí. Solving linear-quadratic optimal control problems on parallel computers. December 2005.

06-01 T. Eibner, J. M. Melenk. p-FEM quadrature error analysis on tetrahedra. October 2006.

06-02 P. Benner, H. Faßbender. On the solution of the rational matrix equation

Some titles in this CSC and the former SFB393 preprint series:

04-01 A. Meyer, F. Rabold, M. Scherzer. Efficient Finite Element Simulation of Crack Propagation. February 2004.

04-02 S. Grosman. The robustness of the hierarchical a posteriori error estimator for reaction-diffusion equation on anisotropic meshes. March 2004.

04-03 A. Bucher, A. Meyer, U.-J. Görke, R. Kreißig. Entwicklung von adaptiven Algorithmen für nichtlineare FEM. April 2004.

04-04 A. Meyer, R. Unger. Projection methods for contact problems in elasticity. April 2004.

04-05 T. Eibner, J. M. Melenk. A local error analysis of the boundary concentrated FEM. May 2004.

04-06 H. Harbrecht, U. Kähler, R. Schneider. Wavelet Galerkin BEM on unstructured meshes. May 2004.

04-07 M. Randrianarivony, G. Brunnett. Necessary and sufficient conditions for the regularity of a planar Coons map. May 2004.

04-08 P. Benner, E. S. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí. Solving Linear Matrix Equations via Rational Iterative Schemes. October 2004.

04-09 C. Pester. Hamiltonian eigenvalue symmetry for quadratic operator eigenvalue problems. October 2004.

04-10 T. Eibner, J. M. Melenk. An adaptive strategy for hp-FEM based on testing for analyticity. November 2004.

04-11 B. Heinrich, B. Jung. The Fourier-finite-element method with Nitsche-mortaring. November 2004.

04-12 A. Meyer, C. Pester. The Laplace and the linear elasticity problems near polyhedral corners and associated eigenvalue problems. December 2004.

04-13 M. Jung, T. D. Todorov. On the Convergence Factor in Multilevel Methods for Solving 3D Elasticity Problems. December 2004.

05-01 C. Pester. A residual a posteriori error estimator for the eigenvalue problem for the Laplace-Beltrami operator. January 2005.

05-02 J. Badía, P. Benner, R. Mayo, E. Quintana-Ortí, G. Quintana-Ortí, J. Saak. Parallel Order Reduction via Balanced Truncation for Optimal Cooling of Steel Profiles. February 2005.

05-03 C. Pester. CoCoS – Computation of Corner Singularities. April 2005.

05-04 A. Meyer, P. Nestler. Mindlin-Reissner-Platte: Einige Elemente, Fehlerschätzer und Ergebnisse. April 2005.

1 Einleitung

In den letzten Jahren wurden große Fortschritte bei der numerischen Simulation von 2D- und 3D-Problemen in der Mechanik erzielt. Solche Aufgaben zeichnen sich oft dadurch aus, dass sie aufgrund ihrer hohen Komplexität eine sehr feine Diskretisierung benötigen, um hinreichend genaue Ergebnisse zu erzielen. Modernste Rechentechnik bietet sowohl genügend Speicherkapazität als auch steigende Rechengeschwindigkeiten, um immer größer werdende Systeme in immer kürzeren Rechenzeiten zu bewältigen. Parallel dazu wurden effektive numerische Verfahren wie adaptive Finite-Elemente-Methoden (siehe z.B. [2] bzw. [4]) entworfen, mit deren Hilfe der Rechenaufwand deutlich reduziert werden kann.

Dieser Trend liefert die Motivation für die Entwicklung neuer genauerer (und damit komplizierterer) Modelle, um mechanische Vorgänge mathematisch zu beschreiben. Solche Modelle enthalten eine steigende Anzahl von Parametern. Das können zum einen Konstanten (z.B. Materialkonstanten) sein, die global für das gesamte System oder lokal für ein Teilsystem (z.B. bei unterschiedlichen Materialien) gelten und sich während der gesamten Simulation nicht ändern. Zum anderen treten auch Parameter mit funktionellen Zusammenhängen auf, d.h. Parameter die als Funktion z.B. vom Ort oder (bei zeitlichen Abläufen) von der Zeit abhängen können. Bei der Durchführung der numerischen Simulation mit gegebenen Parametern spricht man von einem direkten Problem.

Bei inversen Problemen (oder auch Modellkalibrierung) geht man davon aus, dass diese Parameter zum Teil unbekannt sind. Man versucht sie dann so zu bestimmen, dass die entsprechende Simulation mit Messungen aus zuvor durchgeführten praktischen Experimenten übereinstimmt. Dabei treten eine Reihen von Fragen auf:

- Finden sich Parameter, so dass das Modell die Praxis beschreibt und sind diese auch realistisch? Es kann also untersucht werden, ob das Modell die Praxis hinreichend genau wiederspiegelt.
- Ist die gegebenen Datenmenge hinreichend, um die Parameter eindeutig zu ermitteln bzw. wie muss das Experiment gestaltet werden, um ausreichend Daten zur Parameteridentifikation zu erhalten?
- Wie beeinflussen Messfehler in den gegebenen Daten die ermittelten Parameter? Sind Regularisierungsansätze nötig?

Letzterer Punkt bezieht sich auf sogenannte Inkorrektheitsphänomene, die insbesondere bei Materialfunktionen häufig auftreten. Dabei können bereits kleinste Fehler in den Daten einen beliebig großen Einfluss auf die Lösung des inversen Problems haben, so dass das gewonnene Ergebnis unbrauchbar wäre. Zur Überwindung dieser Probleme werden Regularisierungsverfahren angewendet (siehe z.B. [9], [13] bzw. [20]), die Stabilität der Lösungen gegenüber Fehlern in den

Daten gewährleisten.

Die numerische Lösung solcher inverser Probleme zeichnet sich auch dadurch aus, dass in der Regel eine große Anzahl von direkten Problemen gelöst werden muss. Damit verbunden ist der Rechenaufwand bei inversen Aufgaben deutlich höher einzuschätzen als bei der eigentlichen Simulation. Dies ist ein Hauptgrund, warum die Entwicklung numerischer Verfahren zur Identifikation von Parametern bei praktischen Anwendungen noch am Anfang steht. Numerische Studien beschränken sich in der Regel auf vereinfachte Referenzprobleme, bei denen entsprechende direkte Rechnungen bereits bei verhältnismäßig groben Diskretisierungen (und damit geringem Rechenaufwand) hinreichend genaue Ergebnisse liefern. Darüber hinaus werden in der Regel nur Aufgaben betrachtet, bei denen ein konkreter (funktioneller) Parameter zu bestimmen ist. Praktisch treten jedoch häufig mehrere unbekannte Parameter auf. Deren parallele Identifizierung stellt durch zusätzlich auftretende Inkorrektheitsphänomene eine weitere Herausforderung dar, auch wenn die zu ermittelnden Parameter als globale oder lokale Konstanten vorausgesetzt werden können.

An diesem Punkt soll in dieser Arbeit angesetzt werden. Wir betrachten ein zweidimensionales elliptisches Modellproblem, welches aufgrund der L-förmigen Geometrie eine relativ hohe Diskretisierung benötigt, um eine hinreichend genaue Lösung zu erzielen. Darüber hinaus betrachten wir den Fall, dass sowohl der Diffusions- als auch der Reaktionsterm unbekannte Parameter enthalten, die mit Hilfe von Messdaten an konkreten Punkten bestimmt werden sollen. Durch die zusätzliche Einbeziehung unterschiedlicher Randbedingungen soll der Einfluss untersucht werden, den das der Datenbeschaffung zugrunde liegende Experiment auf die Identifizierbarkeit der unbekannten Parameter besitzt. Auf Basis einer ausführlichen Fallstudie sollen die Möglichkeiten der Identifizierbarkeit der gesuchten Parameter unter verschiedenen praktischen Gesichtspunkten getestet und entsprechende Ergebnisse präsentiert werden.

Dementsprechend gestaltet sich der Aufbau dieser Arbeit. Im Abschnitt 2 wiederholen wir kurz die allgemeine Lösungstheorie elliptischer Randwertprobleme und definieren den Operator der direkten Aufgabe, der einem Parameterpaar die Lösung des dazugehörigen Randwertproblems zuordnet. Anschließend untersuchen wir die Existenz und Stetigkeit von Ableitungen nach den Parametern und leiten entsprechende adjungierte Operatoren her. In Abschnitt 3 und 4 betrachten wir die Finite-Elemente-Diskretisierung des Randwertproblems sowie die diskrete Darstellung des Vorwärtsoperators und seiner Ableitung. Verschiedene numerische Verfahren zur Lösung des inversen Problems werden im Abschnitt 5 vorgestellt und auf bekannte Vor- bzw. Nachteile der einzelnen Verfahren hingewiesen. Darauf folgt die Vorstellung des konkreten Modellproblems mit anschließender Fallstudie. Zunächst wird die Effizienz der einzelnen Lösungsalgorithmen untersucht. Danach werden weitere interessante Fragestellungen wie der Einfluss von

[21] Scherzer, O.: *A convergence analysis of a method of steepest descent and a two-step algorithm for nonlinear ill-posed problems.* Numer. Funct. Anal. and Optim. 17 (1996), 197-214.

[22] Schwetlick, H.: *Numerische Lösung nichtlinearer Gleichungen.* VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin, 1979.

[23] Shanno, D.F.: *Conditioning of Quasi-Newton Methods for Function Minimization.* Mathematics of Computation, Vol. 24 (1970), 647–656.

[24] The MathWorks, Inc.:*Partial Differential Equation Toolbox Users's Guide.* Software-Dokumentation, www.mathworks.com, 2006.

[25] Tröltzsch, F.: *Optimale Steuerung partieller Differentialgleichungen.* Vieweg, 2005.

[5] Burger, M.; Mühlhuber, W.: *Iterative regularization of parameter identification problems by sequential quadratic programming methods.* Inverse Problems 18 (2002) 943–969.

[6] Colonius, F.; Kunisch K.: *Stability for parameter estimation in two-point boundary value problems.* J. Reine Angew.Math. 370 (1986), 1–29.

[7] Colonius, F.; Kunisch K.: *Output least square stability in elliptic systems.* Appl.Math.Optim. 19 (1989), 33–63.

[8] Engl, H.W.; Kunisch, K.; Neubauer, A.: *Convergence rates for Tikhonov regularisation of nonlinear ill-posed problems.* Inverse Problems 5 (1989) 523–540.

[9] Engl, H.W.; Hanke, M.; Neubauer, A.: *Regularization of inverse problems.* Kluwer-Academic Publ. Dordrecht, 2000.

[10] Görke, U.-J.; Bucher, A.; Kreißig, R.: *Ein Beitrag zur Materialparameteridentifikation bei finiten elastisch-plastischen Verzerrungen durch Analyse inhomogener Verschiebungsfelder mit Hilfe der FEM.* Preprint SFB393 01-03, TU Chemnitz, 2001.

[11] Hackbusch, W.: *Elliptic Differential Equations.* Springer Berlin-Heidelberg, 1992.

[12] Hanke, M.; Neubauer, A.; Scherzer, O.: *A convergence analysis of the Landweber iteration for nonlinear ill-posed problems.* Numer. Math. 72 (1995), 21-37.

[13] Hofmann, B.: *Mathematik inverser Probleme.* Teubner, 1999.

[14] Kantorowitsch, L.W.; Akilow, G.P.: *Funktionalanalysis in normierten Räumen.* Akademie-Verlag, Berlin, 1964.

[15] Meyer, A.: *Programmer's Manual for Adaptive Finite Element Code SPC-PM2Ad.* Preprint SFB393 01-08, TU Chemnitz, 2001.

[16] Meyer, A.; Unger, R.: *Projection methods for contact problems in elasticity.* Preprint SFB393 04-04, TU Chemnitz, 2004.

[17] Neubauer, A.; Scherzer, O.: *A Convergence Rate Result for a Steepest Descent Method and a Minimal Error Method for the Solution of Nonlinear Ill-Posed Problems.* Zeitschrift für Analysis und ihre Anwendungen 14 (1995), No.2, 369–377.

[18] Nocedal, J.; Wright, S.J.: *Numerical Optimization.* Springer, New York, 1999.

[19] Rieder, A.: *On regularization of nonlinear ill-posed problems via inexact Newton iterations.* Inverse Problems 15 (1999), 303–327.

[20] Rieder, A.: *Keine Probleme mit inversen Problemen.* Vieweg, 2003.

Datenfehlern, die Feinheit der Diskretisierung, die Wahl der Randbedingungen sowie die Wahl des zulässigen Bereichs für die zu ermittelnden Parameter näher beleuchtet. Mit einer Zusammenfassung sowie einem Ausblick über weitere Fragestellungen wird diese Arbeit abgeschlossen.

2 Das kontinuierliche inverse Problem

Als Modellproblem wollen wir die elliptische Randwertaufgabe

$$\left\{\begin{array}{rcll} -\mathrm{div}\,(a\nabla u) + c\,u &=& f, & \text{auf } \Omega, \\ a\dfrac{\partial u}{\partial \nu} &=& g, & \text{auf } \Gamma_N, \\ u &=& 0, & \text{auf } \Gamma_D, \end{array}\right. \tag{1}$$

für gegebene Funktionen $f \in L^2(\Omega)$ und $g \in L^2(\Gamma_N)$ betrachten. Dabei ist $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ ein beschränktes Gebiet mit hinreichend glattem Rand $\partial\Omega = \Gamma_N \cup \Gamma_D$. Weiterhin seien $a = a(\xi)$ und $c = c(\xi)$ positive Funktionen auf Ω. Mit $p := (a, c)$ bezeichnen wir ein Paar gegebener Parameter.

Wir definieren den Raum

$$\mathcal{V} := \left\{u \in H^1(\Omega) \,:\, u \equiv 0 \text{ auf } \Gamma_D\right\}$$

und versehen ihn mit dem H^1-Skalarprodukt. Für $u, v \in \mathcal{V}$ gilt dann

$$-\int_\Omega \mathrm{div}\,(a\nabla u)\, v\; d\xi = \int_\Omega a\nabla u\,\nabla v\; d\xi - \int_{\partial\Omega} a\frac{\partial u}{\partial \nu}\, v\; d\sigma = \int_\Omega a\nabla u\,\nabla v\; d\xi - \int_{\Gamma_N} a\frac{\partial u}{\partial \nu}\, v\; d\sigma.$$

Wir bezeichnen mit

$$a(u, v; p) := \int_\Omega a\nabla u\,\nabla v\; d\xi + \int_\Omega c\,u\,v\; d\xi, \qquad u, v \in \mathcal{V},$$

die zu (1) gehörige Bilinearform $a(\cdot,\cdot;p) : \mathcal{V}\times\mathcal{V} \longrightarrow \mathbb{R}$, welche noch vom Parameter p abhängig ist. Diese ermöglicht nun den Begriff einer schwachen Lösung von (1) einzuführen: eine Funktion $u \in \mathcal{V}$ heißt schwache Lösung von (1), falls

$$a(u, v; p) = \langle f, v\rangle_{L^2(\Omega)} + \langle g, v\rangle_{L^2(\Gamma_N)}, \qquad \forall\, v \in \mathcal{V}. \tag{2}$$

Unter gewissen Voraussetzungen an p existiert eine eindeutige Lösung (vgl. z.B. [11, Theorem 7.4.3]).

Lemma 2.1 *Für den Parameter $p = (a, c) \in L^\infty(\Omega) \times L^\infty(\Omega)$ gelte*

$$0 < \underline{a} \le a(\xi) \le \overline{a} < \infty \quad \textit{und} \quad 0 < \underline{c} \le c(\xi) \le \overline{c} < \infty \quad \textit{f.ü. auf } \Omega. \tag{3}$$

Dann existiert für jedes Paar $(f,g) \in L^2(\Omega) \times L^2(\Gamma_N)$ eine eindeutige Lösung $u \in \mathcal{V}$ von (2). Ferner gilt die Abschätzung

$$\|u\|_{H^1} \leq C \left(\|f\|_{L^2} + \|g\|_{L^2} \right), \tag{4}$$

wobei die Konstante C nicht von dem gewählten Parameter p abhängt.

Bemerkung 2.1 *Die Voraussetzungen von Lemma 2.1 können dahingehend abgeschwächt werden, dass es hinreichend ist, $f \in H^1(\Omega)^*$ zu fordern. Das L^2-Skalarprodukt in (2) ist lediglich durch das Dualitätsprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_{H^{1^*}, H^1}$ zu ersetzen. Auch die Abschätzung (4) bleibt erhalten, wenn wir $\|f\|_{L^2}$ durch $\|f\|_{H^{1^*}}$ ersetzen. Diese Überlegung wird später benötigt, wenn wir Ableitungen bzgl. des Parameters a betrachten.*

Mit $\mathcal{X} := L^2(\Omega) \times L^2(\Omega)$ (versehen mit entsprechendem Skalarprodukt) können wir nun den nichtlinearen Operator $F : \mathcal{D}(F) \subset \mathcal{X} \longrightarrow L^2(\Omega)$ durch

$$F(p) := u, \qquad p \in \mathcal{D}(F), \tag{5}$$

mit $u \in \mathcal{V}$ als Lösung von (2) einführen. Dabei ist der Definitionsbereich $\mathcal{D}(F)$ durch

$$\mathcal{D}(F) := \{p = (a,c) \in \mathcal{X} \,:\, a, c \text{ erfüllen } (3)\}$$

bestimmt. Unter Verwendung des Operators F definieren wir nun das inverse Problem.

Definition 2.1 (kontinuierlicher Fall – [IP-(C)]) *Es seien Daten $u_{data} \in H^1(\Omega) \subset L^2(\Omega)$ gegeben. Gesucht ist ein Parameterpaar $p = (a,c) \in \mathcal{D}(F)$, so dass*

$$F(p) = u_{data}. \tag{6}$$

Die eindeutige Identifizierbarkeit eines der beiden Parameter bei gleichzeitiger Kenntnis des anderen wurde bereits in verschiedenen Arbeiten analytisch untersucht. So findet man z.B. in [6] bzw. [8] Untersuchungen zur Inkorrektheit sowie Anwendbarkeit von Regularisierungsverfahren bei dem Problem der Bestimmung des Parameters c im eindimensionalen Fall, während in [7] bzw. [8] der Fall der Identifikation von a betrachtet wird. In [19] findet man eine numerische Studie zur Ermittlung der Funktion c auf dem Einheitsquadrat.

Bei der gleichzeitigen Identifikation beider Parameter können zusätzliche Effekte auftreten. Ohne weitere einschränkende Voraussetzungen an die zu ermittelnden Parameter kann keine Eindeutigkeit von der Lösung von (6) erwartet werden. Auf der anderen Seite ist es durchaus interessant, ob Eindeutigkeit gewährleistet werden kann, wenn wir p aus einer Menge $\tilde{\mathcal{X}} \cap \mathcal{D}(F)$ mit einem Teilraum $\tilde{\mathcal{X}}$ von $\mathcal{X}$ermitteln wollen. Dieser Teilraum kann z.B. dahingehend gegeben sein, dass die Parameter a und c (endliche) Linearkombinationen von gewissen Ansatzfunktionen sind, d.h. $a := \sum a_j \varphi_j^{(a)}$ bzw. $c := \sum c_j \varphi_j^{(c)}$.

zu definierenden Funktionals angesehen wird (siehe z.B. [25]). Eine Übertragung dieser Überlegungen auf inverse Probleme ist prinzipiell möglich (siehe [5]) und bietet möglicherweise die Chance zur Verbesserung der Algorithmen. Demzufolge wollen wir uns auch mit solchen alternativen Lösungskonzepten beschäftigen, um einen Vergleich der möglichen Algorithmen treffen zu können.

Ein weiterer Ansatzpunkt ergibt sich aus der Tatsache, dass vor allem die Lösung der Differentialgleichung mittels FE-Methoden in hohem Maße Ressourcen benötigt. Wir verwenden bisher den Standard-FE-Code der zur Verfügung stehenden MATLAB-Routinen. Eine Erweiterung des genutzten FE-Codes um problemangepasste Pakete wird sicher zur Verringerung des Rechenaufwandes beitragen. Um die Lösung des Parameterproblems effizienter zu gestalten, sollten beispielsweise parallele Algorithmen und adaptive Vernetzungsstrategien verwendet werden. Insbesondere soll die an der TU Chemnitz entwickelte adaptive FE-Software SPC-PM2Ad [15] (siehe auch [16] für eine Anwendung der Software auf mechanische Verschiebungsprobleme mit Hindernissen) so angepasst werden, dass mit ihrer Hilfe die entsprechenden Vorwärtsprobleme effizient gelöst werden können.

Neben der Optimierung der Lösungsalgorithmen werden wir uns damit beschäftigen, problemorientierte und komplexere Materialmodelle in unsere Betrachtungen zu integrieren (siehe z.B. [10] für ein nichtlineares Materialmodell). Das bisher genutzte Referenzproblem mit linearen Differentialgleichungen diente uns zum Erfahrungsgewinn. Da wir nun wissen, wie wir die Parameteridentifikation bei unserem Referenzproblem realisieren können, ist es uns möglich, andere Modelle (bzw. andere Vorwärtsoperatoren) in die inversen Algorithmen einzufügen. Eine Erweiterung um nichtlineare Materialmodelle würde uns beispielsweise die Möglichkeit zur Lösung von Identifikationsproblemen geben, die in Zukunft aus der Zusammenarbeit mit dem Maschinenbau entstehen werden. Insbesondere sollen dann auch solche Probleme betrachtet werden, bei denen Parameter als Funktion entsprechender Materialien nicht stetig sind.

Literatur

[1] Achdou, Y.; Pironneau, O.: *Computational Methods for Option Pricing.* SIAM Frontiers in Applied Mathematics Philadelphia, 2005.

[2] Bangerth, W.; Rannacher, R.: *Adaptive Finite Element Methods for Differential Equations.* Birkhäuser, Basel, 2003.

[3] Baumeister, J.: *Stable Solution of Inverse Problems.* Vieweg, Braunschweig, 1987.

[4] Braess, D.: *Finite Elemente.* Springer Berlin, 2003.

blem numerisch zu lösen. Dabei konnten wir eine Reihe von Erfahrungen zum Lösungsverhalten des inversen Problems sammeln, die bei weiteren Untersuchungen sehr hilfreich sein werden.

Es ist festzustellen, dass das inverse Problem zur Bestimmung der Materialparameter $\underline{c}^\delta$ und $\underline{a}^\delta$ unter gewissen Voraussetzungen gutartige Eigenschaften besitzt. Bezüglich eines Datenfehlers $\delta_{rel} > 0$ liegt keine Instabilität vor, so dass die Lösung des Problems mit hoher Genauigkeit möglich ist. Als schnelle und zuverlässige Lösungsverfahren erweisen sich die Gauß-Newton- und Quasi-Newton-Methoden. Gradientenverfahren scheinen bedingt geeignet, sind aber mit großen Nachteilen durch zu langsame Konvergenz verbunden. Nichtlineare CG-Verfahren müssen als ungeeignet angesehen werden.

Wir hatten drei Teilaufgaben unterschieden, von denen die Berechnung von $\underline{c}^\delta$ zu keinerlei Problemen führte. Bei der Bestimmung von $\underline{a}^\delta$ und $\underline{p}^\delta$ müssen wir hingegen einige Dinge zusätzlich beachten. Die Anzahl der geeigneten Iterationsverfahren ist hier eingeschränkt. In den meisten Fällen führten hier nur das Gauß-Newton- oder das Quasi-Newton-Verfahren zu verlässlichen und effizienten Lösungen. Es fällt auf, dass die Bestimmung von $\underline{p}^\delta$ erhöhten Rechenaufwand benötigt.

Des Weiteren müssen wir die Randbedingungsvarianten der Differentialgleichung (1) berücksichtigen. In gewissen Konstellationen mit (hohem) Neumannrandanteil können bei der Identitifikation von $\underline{a}^\delta$ und $\underline{p}^\delta$ mit fehlerbehafteten Daten sehr ungenaue Lösungen entstehen. Durch die Wahl geeigneter Randbedingungen mit entsprechendem Dirichletanteil kann diese Fehlerquelle ausgeschlossen werden. Im Fall der reinen Neumannbedingung 5 muss zusätzlich die richtige Wahl des Iterationsstartwertes $\underline{p}_0$ beachtet werden, da für Startwerte der Form (22) singuläre Matrizen bei der Berechnung der Suchrichtung auftreten. Ursache hierfür ist die Struktur der Lösung der Differentialgleichung.

Zur Wahrung der Elliptizität der Differentialgleichung (1) setzen wir eine untere Schranke $\varepsilon > 0$ für die Parameter $\underline{p}_k$ ein. Diese darf nicht zu klein gewählt werden, wozu a-priori-Informationen über die Materialparameter a und c wertvolle Hinweise liefern können.

Zusätzlich zu den Erfahrungen, die wir für unser Beispielproblem sammeln konnten, ist eine Reihe von weiterführenden Fragestellungen aufgeworfen worden. Ein Schwerpunkt zukünftiger Untersuchungen wird die Suche nach effizienteren Lösungsmethoden sein. Gelingt es uns, auf diesem Gebiet Fortschritte zu erzielen, dann sind wir in der Lage größere Probleme zu lösen, die meist bei praktischen Aufgabenstellungen entstehen. Hierfür gibt es mehrere Ansatzpunkte. Neben den von uns bisher genutzten Optimierungsalgorithmen existieren andere Lösungszugänge, die möglicherweise schnellere Algorithmen liefern. Einen vielversprechenden Ansatz findet man in der *Optimalen Steuerung*, bei dem die zugrunde liegende Differentialgleichung als Nebenbedingung für die Minimierung eines noch

Wir untersuchen die Differenzierbarkeit von F. Dabei ist zu beachten, dass $\mathcal{D}(F)$ keine inneren Punkte besitzt. Demzufolge können keine Fréchet- oder Gâteaux-Ableitungen im klassischen Sinne existieren, wie sie z.B. in [14] definiert werden. Wir geben deshalb folgendes Resultat an.

Lemma 2.2 *Für beliebiges $p_0 \in \mathcal{D}(F)$ und beliebiges $h \in \mathcal{X}$ mit $p_0 + h \in \mathcal{D}(F)$ existiert die Richtungsableitung*

$$F'(p_0; h) := \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{F(p_0 + \varepsilon\, h) - F(p_0)}{\varepsilon}.$$

Diese ist gegeben durch $G(p_0)\, h := z$, wobei $z \in \mathcal{V}$ die Lösung von

$$a(z, v; p_0) = -\left(\langle h_a\, \nabla u_0, \nabla v\rangle_{L^2} + \langle h_c\, u_0, v\rangle_{L^2}\right), \qquad \forall\, v \in \mathcal{V}, \tag{7}$$

bezeichnet. Dabei gelte $u_0 := F(p_0)$ und $h = (h_a, h_c) \in \mathcal{X}$.

Beweis. Sei $h = (h_a, h_c) \in \mathcal{X}$ mit $p_0 + h \in \mathcal{D}(F)$. Wir setzen $u_0 := F(p_0)$ und $u_\varepsilon := F(p_0 + \varepsilon h)$ für $\varepsilon \in (0, 1]$. Weiterhin sei $z_\varepsilon := u_\varepsilon - u_0$. Wir erhalten

$$a(u_\varepsilon, v; p_0 + \varepsilon h) - a(u_0, v; p_0) = 0, \qquad \forall\, v \in \mathcal{V},$$

und somit

$$\begin{aligned}
0 &= \int_\Omega \left((a_0 + \varepsilon h_a)\nabla u_\varepsilon - a_0 \nabla u_0\right) \nabla v \, d\xi + \int_\Omega \left((c_0 + \varepsilon h_c) u_\varepsilon - c_0 u_0\right) v \, d\xi \\
&= \int_\Omega (a_0 + \varepsilon h_a)(\nabla u_\varepsilon - \nabla u_0)\nabla v \, d\xi + \int_\Omega (c_0 + \varepsilon h_c)(u_\varepsilon - u_0) v \, d\xi \\
&\qquad + \varepsilon \left(\int_\Omega h_a \nabla u_0 \nabla v \, d\xi + \int_\Omega h_c u_0 v \, d\xi \right) \\
&= \int_\Omega (a_0 + \varepsilon h_a)\nabla z_\varepsilon \nabla v \, d\xi + \int_\Omega (c_0 + \varepsilon h_c) z_\varepsilon v \, d\xi \\
&\qquad + \varepsilon \left(\int_\Omega h_a \nabla u_0 \nabla v \, d\xi + \int_\Omega h_c u_0 v \, d\xi \right) \\
&=: a(z_\varepsilon, v; a_0 + \varepsilon\, h) + \varepsilon\, \hat{f}(v).
\end{aligned}$$

Da $u_0 \in H^1(\Omega)$ und $h_a, h_c \in L^\infty(\Omega)$ gilt $\hat{f} \in H^1(\Omega)^*$ und folglich wegen Lemma 2.1 bzw. Bemerkung 2.1 die Abschätzung $\|z_\varepsilon\|_{H^1} \le \varepsilon\, C\, \|\hat{f}\|_{H^{1*}}$. Durch Standardargumente folgt nun die Existenz von $z := \lim_{\varepsilon \to 0} \varepsilon^{-1} z_\varepsilon$. Dieser Grenzübergang liefert die schwache Formulierung (7). ■

Dabei verwenden wir, dass unter den Voraussetzung des Lemmas gilt $h_a, h_c \in L^\infty(\Omega)$ und damit $h_a \nabla u_0 \in [L^2(\Omega)]^2$ bzw. $h_c u_0 \in L^2(\Omega)$. Die Richtungsableitung

hängt offensichtlich linear von der gegebenen Richtung $h \in \mathcal{X}$ ab. Sie kann ohne zusätzliche Voraussetzungen jedoch nicht auf beliebige $h \in \mathcal{X}$ erweitert werden. Um dies zu tun, benötigen wir eine höhere Regularität von $u_0 = F(p_0)$. Wir formulieren die folgende Aussage.

Lemma 2.3 *Für $p_0 \in \mathcal{D}(F)$ gelte $u_0 = F(p_0) \in L^\infty(\Omega)$ und $\nabla u_0 \in [L^\infty(\Omega)]^2$. Dann existiert ein linearer beschränkter Operator $G(p_0) : \mathcal{X} \longrightarrow L^2(\Omega)$, so dass*

$$G(p_0)(p - p_0) = F'(p_0; p - p_0), \quad \forall\, p \in \mathcal{D}(F).$$

Beweis. Die Stetigkeit von $G(p_0)$ folgt aus der Beobachtung, dass unter der zusätzlichen Glattheit von u_0 die Abbildung

$$\tilde{f}(v) := \int_\Omega h_a \nabla u_0 \nabla v \, d\xi + \int_\Omega h_c u_0 v \, d\xi$$

ein lineares beschränktes Funktional aus $H^1(\Omega)^*$ ist. Dies folgt aus

$$\begin{aligned}
|\tilde{f}(v)| &\leq \left| \int_\Omega h_a \nabla u_0 \nabla v \, d\xi \right| + \left| \int_\Omega h_c u_0 v \, d\xi \right| \\
&\leq \|h_a\|_{L^2} \|\nabla u_0\|_{L^\infty} \|\nabla v\|_{L^2} + \|h_c\|_{L^2} \|u_0\|_{L^\infty} \|v\|_{L^2} \\
&\leq (\|h_a\|_{L^2} \|\nabla v\|_{L^2} + \|h_c\|_{L^2} \|v\|_{L^2}) \max\{\|u_0\|_{L^\infty}, \|\nabla u_0\|_{L^\infty}\} \\
&\leq (\|h_a\|_{L^2} + \|h_c\|_{L^2}) \, \|v\|_{H^1} \max\{\|u_0\|_{L^\infty}, \|\nabla u_0\|_{L^\infty}\} \\
&\leq \|h\|_{\mathcal{X}} \|v\|_{H^1} \max\{\|u_0\|_{L^\infty}, \|\nabla u_0\|_{L^\infty}\} \ .
\end{aligned}$$

Also gilt $\|\tilde{f}\|_{H^{1*}} \leq \|h\|_{\mathcal{X}} \max\{\|u_0\|_{L^\infty}, \|\nabla u_0\|_{L^\infty}\}$ und folglich wegen Bemerkung 2.1 $\|G(u_0)\| \leq C \max\{\|u_0\|_{L^\infty}, \|\nabla u_0\|_{L^\infty}\}$ für eine Konstante $C > 0$. ■

Alternativ zur geforderten Beschränktheit von u_0 bzw. ∇u_0 kann auch eine höhere Regularität der zu ermittelnden Parameter vorausgesetzt werden (siehe z.B. [9, Example 3.2]). Dieses Lemma rechtfertigt auch die Schreibweise $F'(p_0)\, h := F'(p_0; h)$ für gegebenes $p_0 \in \mathcal{D}(F)$ und $h \in \mathcal{X}$, die wir im weiteren verwenden wollen.

Für die numerische Lösung entsprechender inverser Probleme benötigen wir den (Hilbertraum-)adjungierten Operator $G(p_0)^* : L^2(\Omega) \longrightarrow \mathcal{X}$ zu $G(p_0)$. Dieser ist durch die Beziehung

$$\langle G(p_0)h, v\rangle_{L^2} = \langle h, G(p_0)^* v\rangle_{\mathcal{X}} =: \langle h_a, w_a\rangle_{L^2} + \langle h_c, w_c\rangle_{L^2}, \qquad \forall\ h \in \mathcal{X},\ \forall v \in L^2(\Omega), \tag{8}$$

mit $h = (h_a, h_c)$ und $G(p_0)^* v =: w = (w_a, w_c) \in \mathcal{X}$ definiert. Zur Herleitung von $G(p_0)^*$ beginnen wir mit der rechten Seite von (8). Dabei nehmen wir eine spezielle Struktur von w an: es gelte

$$w_a := -\nabla u_0 \nabla z \quad \text{und} \quad w_c := -u_0 z \quad \text{für ein} \ \ z \in H^1(\Omega). \tag{9}$$

Gauß-Newton				7537 FE-Knoten			29793 FE-Knoten		
$\underline{p}_0$	RB	δ_{rel}	ε	K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{p}^\delta - \underline{p}^\dagger\|_2}{\|\underline{p}^\dagger\|_2}$	K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{p}^\delta - \underline{p}^\dagger\|_2}{\|\underline{p}^\dagger\|_2}$
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.00	0.2000	9	18.4	0.0004	9	131.8	0.0001
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.00	0.1000	9	18.3	0.0004	9	132.3	0.0001
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.00	0.0500	12	23.3	0.0004	12	169.5	0.0001
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.00	0.0100	12	23.7	0.0004	13	188.4	0.0001
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	**0.00**	**0.0010**	**13**	**26.3**	**0.0004**	**22**	**317.0**	**0.0001**
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.00	0.0001	11	21.7	0.0004	13	192.2	0.0001
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.01	0.2000	16	29.1	0.1402	16	219.4	0.1399
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	**0.01**	**0.1000**	**16**	**29.2**	**0.1402**	**16**	**228.9**	**0.1399**
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.01	0.0500	15	27.5	0.1402	15	206.8	0.1399
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.01	0.0100	17	31.0	0.1402	19	265.2	0.1399
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.01	0.0010	16	28.9	0.1402	15	212.7	0.1399
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.01	0.0001	50	149.5	0.6376	20	294.4	0.1399
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	0.01	0.10	16	29.3	0.1402	-	-	-
$(3,3,3,4,5,6)^T$	5	0.01	0.10	15	27.7	0.1402	-	-	-
$(3,3,3,3,3,3)^T$	5	0.01	0.10	26	51.7	0.1402	-	-	-
$(1,2,3,4,4,4)^T$	5	0.01	0.10	Matrix singulär			-	-	-

Tabelle 6: Ergebnisse des Gauß-Newton-Verfahrens zur Berechnung von $\underline{p}^\delta$ bei Einsetzen verschiedener unterer Schranken $\varepsilon > 0$ für den Parameter $\underline{p}_k$

noch die gleichen großen Fehlerwerte wie in Tabelle 4.

Im zweiten Teil von Tabelle 6 kehren wir kurz zum Problem der singulären Matrizen $\underline{G}(\underline{p}_k)$ bei Randbedingungsvariante 5 zurück. Auf den ersten Blick scheint es, dass die Vergrößerung von ε auf 0.1 auch mit dem ungeeigneten Startwert $\underline{p}_0 = (3,3,3,3,3,3)^T$ zum richtigen Ergebnis führt. Die Iterationszahl ist zwar gegenüber den nichtkonstanten Startwerten deutlich erhöht, aber die Singularität bei $\underline{G}(\underline{p}_k)$ tritt nicht auf. Diese scheinbare Verbesserung ist aber nur zufällig, wie das Beispiel $\underline{p}_0 = (1,2,3,4,4,4)^T$ zeigt. In diesem Fall erhalten wir singuläre Matrizen trotz der Schranke $\varepsilon = 0.1$. Wir können also die richtige Wahl des Startwertes nicht durch die Vergrößerung von ε ersetzen.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die numerischen Fallstudien liefern uns wichtige Erkenntnisse für praktische Identifikationsaufgaben. Unter Anwendung der vorgestellten Diskretisierungsmethoden und inversen Algorithmen ist es uns möglich, das untersuchte Referenzpro-

Differentialgleichung für den letztgenannten Parameter zeigt der rechte Teil von Abbildung 4.

Wie Tabelle 5 beweist, wirkt sich die Modifikation von $\underline{p}_0$ positiv auf die Lösung des Problems aus. Der Jacobian hat keine Nullspalten mehr und sämtliche Singulärwerte sind größer als 10^{-3}. Auch die Eigenwerte von $\underline{G}(\underline{p}_k)$ sind stark vergrößert, obwohl die unteren Schranken 10^{-8} und 10^{-7} immer noch klein sind. Die Konditionszahlen bewegen sich mit 10^6 und 10^5 in deutlich kleineren Dimensionen. Mit nichtkonstanten Iterationsstartwerten erhalten wir bei Verwendung des Gauß-Newton-Verfahrens die gleichen Lösungen wie mit der Quasi-Newton-Methode.

6.7 Wahl des Definitionsgebietes

Wir hatten schon zu Beginn der Fallstudien darauf hingewiesen, dass die Elliptizität der Differentialgleichung Voraussetzung für die Lösbarkeit des inversen Problems ist. Gesichert wird die Elliptizität durch den Einsatz einer unteren Schranke $\varepsilon > 0$ für die Iterierten $\underline{p}_k$. Bisher haben wir den Wert $\varepsilon = 0.05$ verwendet, ohne den Einfluss der Schranke ε näher zu untersuchen. Anhand verschiedener Werte von ε wollen wir nun überprüfen, inwieweit sich die konkrete Wahl der Schranke auf die Ergebnisse auswirkt. Wir nutzen dazu das Gauß-Newton-Verfahren mit Randbedingung 5. Die Zusammenfassung der Beispielrechnungen sowohl für gestörte als auch für ungestörte Daten zeigt der erste Teil von Tabelle 6.

Wir erkennen, dass eine Vergrößerung von ε auf 0.1 oder 0.2 eine Verringerung des Rechenaufwandes bewirkt. Dies erscheint logisch, da in unserem Fall eine Erhöhung von ε bedeutet, dass die Iterierten näher am exakten Parameter $\underline{p}^\dagger$ liegen. Umgekehrt müssten kleinere ε auch mit längeren Rechenzeiten einhergehen. Dies ist bei exakten Daten auch bis $\varepsilon = 0.001$ der Fall. Eine weitere Verkleinerung auf $\varepsilon = 0.0001$ zeigt allerdings wieder eine geringere Iterationszahl. Noch deutlicher ist ein derartiges unregelmäßiges Verhalten im Fall gestörter Daten. Hier ist die Anzahl benötigter Iterationen schon ab $\varepsilon = 0.05$ nicht mehr gleichmäßig ansteigend. Für $\varepsilon = 0.0001$ erhalten wir mit dem 7537-Knoten-Netz sogar eine völlig andere Lösung als sonst. Insgesamt deutet alles darauf hin, dass ε nicht zu klein gewählt werden darf. Als geeignet erscheint für unser Beispielproblem die Wahl $\varepsilon \geq 0.1$.

Die Schranke ε muss also einerseits hinreichend groß gewählt werden, darf aber andererseits auch nicht größer als die tatsächlichen Parameter $\underline{p}^\dagger$ sein. Hier sollten a-priori-Informationen über die Parameter a und c sinnvoll eingesetzt werden um geeignete Werte abschätzen zu können.

Erwähnt sei auch, dass die Wahl von ε keine Verbesserung der Qualität der Lösungen bewirkt. Wir erhalten mit Randbedingung 5 im Fall gestörter Daten immer

Dadurch erhalten wir

$$\begin{aligned}\langle h_a, w_a\rangle_{L^2} + \langle h_c, w_c\rangle_{L^2} &= -\left(\langle h_a, \nabla u_0 \nabla z\rangle_{L^2} + \langle h_c, u_0 z\rangle_{L^2}\right)\\ &= -\left(\langle h_a \nabla u_0, \nabla z\rangle_{L^2} + \langle h_c u_0, z\rangle_{L^2}\right)\\ &= a(G(p_0)h, z; p_0) = a(z, G(p_0)h; p_0).\end{aligned}$$

Dabei wurde im letzten Schritt die Symmetrie der Bilinearform $a(\cdot,\cdot; p_0)$ verwendet. Aus der Definition (8) des adjungierten Operators folgt nun

$$\langle G(p_0)h, v\rangle_{L^2} = a(z, G(p_0)h; p_0), \qquad \forall h \in \mathcal{X},\ \forall v \in L^2(\Omega). \tag{10}$$

Wählen wir z als Lösung der Variationsformulierung

$$a(z, u; p_0) = \langle v, u\rangle_{L^2}, \qquad \forall u \in \mathcal{V}, \tag{11}$$

so gilt (10) insbesondere auch für $u = G(p_0)h$ mit beliebigem $h \in \mathcal{X}$. Demzufolge definieren (9) und (11) den adjungierten Operator $G(p_0)^*$.

Bemerkung 2.2 *Die größten Schwierigkeiten bei der Herleitung von adjungierten Operatoren bereitet die geeignete Wahl des Ansatzes (9). Oftmals kann man sich auch helfen, wenn man die Ableitung als Hintereinanderausführung zweier oder mehrerer linearer Operatoren betrachtet. Dies ist insbesondere der Fall, wenn Operatoren betrachtet werden, die nicht von $L^2 - Räumen$ in $L^2 - Räume$ abbilden. Dann müssen noch Einbettungsoperatoren und deren duale Operatoren berücksichtigt werden. Um diese zusätzliche Komplikation zu vermeiden, haben wir hier wie üblich die entsprechenden Räume gewählt (siehe auch die Bemerkung in [25, S.53]).*

3 Finite-Elemente-Diskretisierung

Der Einfachheit halber betrachten wir nur den Fall $g \equiv 0$ auf dem Neumannrand Γ_N. Sei $\mathbb{V}_N = \operatorname{span}\{\varphi_j\}$ der durch die N Ansatzfunktionen ϕ_j aufgespannte FE-Raum, in dem wir eine näherungsweise Lösung der Differentialgleichung (1) suchen. Wir definieren $\Phi : \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{V}_N$ durch

$$u := \Phi\,\underline{u} = \sum_{j=1}^{N} u_j \varphi_j, \qquad \underline{u} \in \mathbb{R}^N,$$

und versehen diesen Raum $\mathbb{V}_N$ mit dem L^2-Skalarprodukt. Demzufolge ist $\mathbb{V}_N$ ein endlichdimensionaler Hilbertraum. Dann gilt mit $\Phi^* : \mathbb{V}_N \longrightarrow \mathbb{R}^N$ offensichtlich

$$\langle \Phi\,\underline{u}, v\rangle_{\mathbb{V}_N} = \langle \Phi\,\underline{u}, \Phi\,\underline{v}\rangle_{\mathbb{V}_N} = \underline{u}^T \Phi^* \Phi\,\underline{v}.$$

Die Matrix $\underline{M} := (m_{ij}) \in \mathbb{R}^{N\times N}$ sei durch

$$m_{ij} := \int_\Omega \varphi_i \, \varphi_j \, d\xi, \qquad 1 \le i,j \le N.$$

gegeben. Dann ist $\underline{M}$ symmetrisch und es gilt $\underline{M} = \Phi^*\Phi : \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{R}^N$.

Weiterhin wollen wir annehmen, dass die Parameterfunktionen c und a eine spezielle Struktur besitzen. Dazu sei $\Psi_a : \mathbb{R}^l \longrightarrow \mathbb{V}_l^{(a)} = \text{span}\,\{\psi_j^{(a)}\}$ durch

$$a := \Psi_a \underline{a} = \sum_{j=1}^{l} a_j \psi_j^{(a)}, \qquad \underline{a} = (a_1, \ldots, a_l)^T \in \mathbb{R}^l,$$

definiert und $\Psi_c : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{V}_m^{(c)} = \text{span}\{\psi_j^{(c)}\}$ ist bestimmt durch

$$c := \Psi_c \underline{c} := \sum_{j=1}^{m} c_j \psi_j^{(c)}, \qquad \underline{c} = (c_1, \ldots, c_m)^T \in \mathbb{R}^m.$$

Wir setzen im weiteren stets voraus, dass für die Parameter aus (1) die Ansätze $a \in \mathbb{V}_l^{(a)}$ bzw. $c \in \mathbb{V}_m^{(c)}$ gelten.

Schließlich führen wir die Matrizen $\underline{M}_k := (m_{ij}^{(k)}) \in \mathbb{R}^{N\times N}$, $1 \le k \le m$, mit Einträgen

$$m_{ij}^{(k)} := \int_\Omega \psi_k^{(c)} \varphi_i \, \varphi_j \, d\xi, \qquad 1 \le i,j \le N,$$

und $\underline{K}_k = (k_{ij})^{(k)} \in \mathbb{R}^{N\times N}$, $1 \le k \le l$, mit

$$k_{ij}^{(k)} := \int_\Omega \psi_k^{(a)} \nabla\varphi_i \nabla\varphi_j \, d\xi, \qquad 1 \le i,j \le N,$$

ein.

Bemerkung 3.1 *Sei $\Omega = \Omega_1 \cup \ldots \cup \Omega_m$ ein Zerlegung des Gebietes mit $\Omega_i \cap \Omega_j = \emptyset$ für $i \neq j$ und $\psi_j^{(c)} = \chi_{\Omega_j}$, $1 \le j \le m$. Dann gilt offensichtlich $\underline{M} = \underline{M}_1 + \ldots + \underline{M}_m$.*

Die diskretisierte FE-Lösung $u := \Phi\,\underline{u} \in \mathbb{V}_N$ von (1) ist nun definiert als Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\underline{A}(p)\,\underline{u} = \underline{f} \qquad \text{mit} \quad f_j := \langle f, \varphi_j \rangle_{L^2},\ 1 \le j \le N, \tag{12}$$

bzw. $\underline{u} := \underline{A}(p)^{-1}\underline{f}$. Man beachte dabei, dass die Matrix $\underline{A}(p)$ noch vom Parameter p abhängt. In den Funktionenräumen können wir dies auch als $u := A(p)^{-1} f \in \mathbb{V}_N$ schreiben. Wir nehmen $p \in \mathbb{V}_l^{(a)} \times \mathbb{V}_m^{(c)}$ mit $p = (\Psi_a\underline{a}, \Psi_c\underline{c})$ an. Dann gilt

$$\underline{A}(p) := \sum_{j=1}^{l} a_j \underline{K}_j + \sum_{j=1}^{m} c_j \underline{M}_j$$

von $\underline{G}(\underline{p}_k)$, die kleiner als 10^{-10} sind. Die Konditionszahl von $\underline{G}(\underline{p}_k)$ liegt im Bereich von etwa 10^{30}. Insgesamt deutet dies auf einen fast singuläre Matrix $\underline{G}(\underline{p}_k)$ hin. Noch deutlicher wird die Aussage dieser Zahlen durch die Beobachtung, dass die ersten drei Spalten des Jacobians näherungsweise Nullspalten darstellen. Diese können durch die konkrete Wahl des Startwertes erklärt werden. Wählt man nämlich den Parameter $\underline{c}^\dagger$ als konstanten Vektor in der Form

$$\underline{c}^\dagger := C \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad C > 0\,, \tag{22}$$

dann ist die Parameterfunktion $c \in \mathcal{L}^2(\Omega)$ konstant im Gebiet Ω. Daraus folgt wiederum, dass die Lösung u der Differentialgleichung (1) mit Neumannrandbedingung 5 auch eine konstante Funktion in Ω ist. Für konstantes u besteht schlussendlich der $\underline{a}$-Anteil des Jacobians aus Nullspalten. Aufgrund dessen, wie die Matrix $\underline{G}(\underline{p}_k)$ aus dem Jacobian berechnet wird, führen Nullspalten im Jacobian zwingend zu Singularität der Matrix $\underline{G}(\underline{p}_k)$. Dass dieser Effekt auftritt, sobald nur der $\underline{c}$-Anteil in $\underline{p}_0$ konstant gewählt wird, zeigt das Beispiel $\underline{p}_0 = (1,2,3,4,4,4)^T$. Es bringt keine Veränderung der Eigenschaften von Jacobian und $\underline{G}(\underline{p}_k)$, obwohl der $\underline{a}$-Anteil nicht konstant ist. Ein Beispiel für die konstante Lösung der Differentialgleichung ist im linken Teil der Abbildung 4 zu sehen.

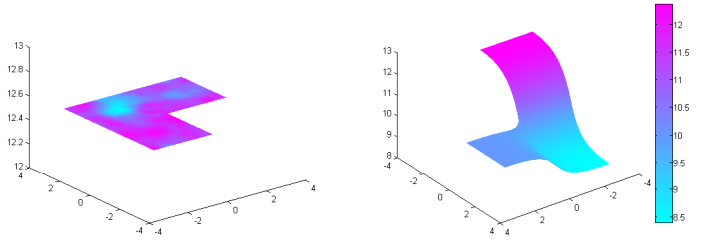


Abbildung 4: Lösung der Differentialgleichung für RB-Variante 5 mit $\underline{p}^\dagger = (1,2,3,4,4,4)^T$ (links im Bild) und $\underline{p}^\dagger = (3,3,3,4,5,6)^T$ (rechts im Bild)

Wir müssen also aufgrund obiger Überlegung davon davon ausgehen, dass Iterationsstartwerte der Form (22) zur Lösung des Problems mit Neumannrand 5 ungeeignet sind. Stattdessen verwenden wir Startwerte mit einem $\underline{c}$-Anteil, der einer nichtkonstanten Parameterfunktion c entspricht. Die Lösung der Differentialgleichung ist dann keine konstante Funktion mehr, was verbesserte Eigenschaften von Jacobian und $\underline{G}(\underline{p}_k)$ erwarten lässt. Getestet wurden die Beispiele $\underline{p}_0 = (1,2,3,4,5,6)^T$ und $\underline{p}_0 = (3,3,3,4,5,6)^T$. Die nichtkonstante Lösung der

6.6 Singularität der Jacobi-Matrix

Wir hatten festgestellt, dass bei Verwendung des Gauß-Newton-Verfahrens zur Berechnung von $\underline{p}^\delta$ in Verbindung mit der Randbedingung 5 Probleme aufgrund sehr schlecht konditionierter Matrizen auftraten. Es wurde noch nicht näher bezeichnet, um welche Matrizen es sich dabei handelt. Das wollen wir nun nachholen. Dazu erinnern wir uns daran, dass in jeder Iteration des Gauß-Newton-Verfahrens das lineare Gleichungssystem

$$\underline{G}(\underline{p}_k)\underline{d} = \underline{H}(\underline{p}_k)^T \underline{W} \left(\underline{y} - \underline{u}_k\right) \tag{21}$$

mit $\underline{G}(\underline{p}_k) := \underline{H}(\underline{p}_k)^T \underline{W}\ \underline{H}(\underline{p}_k)$ gelöst werden muss, um die Schrittweite $\underline{d}_k$ zu bestimmen. Hierbei bezeichnet die Matrix $\underline{H}(\underline{p}_k)$ den Jacobian des diskreten Vorwärtsoperators F_n an der Stelle $\underline{p}_k$. Die Lösung des Gleichungssystems (21) bereitet bei der Randbedingung 5 Probleme. Ursache hierfür ist schlechte Kondition oder sogar Singularität der Matrix $\underline{G}(\underline{p}_k)$. Dies macht die Lösung von (21) entweder unmöglich oder hat wenigstens große Fehler zur Folge.

Um herauszufinden, worin die schlechte Kondition der Gleichung (21) begründet liegt, analysieren wir die Singulärwertzerlegung (SVD) des Jacobians und die Eigenwertzerlegung (EVD) von $\underline{G}(\underline{p}_k)$. Außerdem betrachten wir die Größenordnung der Konditionszahl $\mathrm{cond}(\underline{G}(\underline{p}_k))$. Tabelle 5 zeigt eine Zusammenfassung der Eigenschaften von Jacobian und $\underline{G}(\underline{p}_k)$ bei Verwendung der Randbedingung 5. Ausgewertet wurden hierzu die Matrizen in der jeweils ersten Iteration des Gauß-Newton-Verfahrens. Auch der Einfluss des Iterationsstartwertes $\underline{p}_0$ ist von Interesse. Mehrere vom bisherigen Startwert $\underline{p}_0 = (3,3,3,3,3,3)^T$ abweichende Varianten wurden getestet. Zusätzlich gibt eine Spalte der Tabelle 5 an, ob der Jacobian Nullspalten enthält.

Gauß-Newton		**7537 FE-Knoten**			**Jacobian** $\underline{H}(\underline{p}_0)$		$\underline{G}(\underline{p}_0)$	
$\underline{p}_0$	RB	K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{p}^\delta - \underline{p}^\dagger\|_2}{\|\underline{p}^\dagger\|_2}$	Nullsp.	SVD	EVD	cond
$(3,3,3,3,3,3)^T$	5	Matrix singulär			1., 2., 3.	$3x < 10^{-10}$	$3x < 10^{-10}$	$\approx 10^{30}$
$(1,2,3,4,5,6)^T$	5	12	23.4	0.0004	keine	$> 10^{-3}$	$> 10^{-8}$	$\approx 10^{6}$
$(3,3,3,4,5,6)^T$	5	13	26.5	0.0004	keine	$> 10^{-2}$	$> 10^{-7}$	$\approx 10^{5}$
$(1,2,3,4,4,4)^T$	5	Matrix singulär			1., 2., 3.	$3x < 10^{-10}$	$3x < 10^{-15}$	$\approx 10^{28}$

Tabelle 5: Verhalten des Gauß-Newton-Verfahrens zur Berechnung von $\underline{p}^\delta$ mit RB-Variante 5 für verschiedene Startwerte $\underline{p}_0$, Analyse von Jacobian $\underline{H}(\underline{p}_0)$ und Matrix $\underline{G}(\underline{p}_0)$ in der ersten Iteration ($\delta_{rel} = 0$)

Mit dem Startwert $\underline{p}_0 = (3,3,3,3,3,3)^T$ erhalten wir in der ersten Iteration des Gauß-Newton-Verfahrens je drei Singulärwerte des Jacobians und drei Eigenwerte

Bemerkung 3.2 *Mit $Q : L^2(\Omega) \longrightarrow \mathbb{R}^N$ bezeichnen wir den linearen Operator, der durch $Q f := \underline{f}$ und $f_j := \langle f, \varphi_j \rangle$, $1, \leq j \leq N$ definiert wird. Dann können wir den Operator $\underline{A}(p)^{-1}$ auch durch $A(p)^{-1} = \Phi \underline{A}(p)^{-1} Q$ als Abbildung aus dem Raum $L^2(\Omega)$ in $\mathbb{V}_N$ darstellen.*

4 Der diskrete Operator der Vorwärtsaufgabe

Wir bezeichnen mit $\xi_1, \ldots, \xi_n \in \Omega$ die gegebenen Messpunkte, wobei wir der Einfachheit halber voraussetzen, dass diese auf Gitterpunkten des FE-Netzes liegen. Weiterhin seien $\varphi_{i_1}(\xi), \ldots, \varphi_{i_n}(\xi)$ mit

$$\varphi_{i_k}(\xi_k) = 1, \qquad 1 \leq k \leq n,$$

die zu diesen Gitterpunkten gehörigen Ansatzfunktionen der FE-Diskretisierung. Wir führen mit $\mathcal{Y}_n := \mathrm{span}\{\varphi_{i_k}\}$ den entsprechenden Teilraum von $\mathbb{V}_N$ ein und definieren $\Phi_n := \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathcal{Y}_n$ als

$$\Phi_n \underline{x} := \sum_{k=1}^{n} x_k \varphi_{i_k}.$$

Der Raum $\mathcal{Y}_n$ wird wieder mit dem L^2-Skalarprodukt und entsprechender Norm versehen. Wir definieren $\underline{W} = (w_{jk}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ als

$$w_{jk} := \int_\Omega \varphi_{i_j} \varphi_{i_k}\, d\xi.$$

Dann gilt $\underline{W} = \Phi_n^* \Phi_n : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$ und

$$\langle u, v \rangle_{\mathcal{Y}_n} = \langle \Phi_n \underline{u}, \Phi_n \underline{v} \rangle_{L^2} = \underline{u}^T \underline{W}\, \underline{v}.$$

Der diskrete Operator $F_n : \mathcal{D}(F_n) \subset \mathbb{R}^{m+l} \longrightarrow \mathcal{Y}_n$ bildet nun die $m+l$ Materialparameter auf die Projektion der Lösung von (12) auf $\mathcal{Y}_n$ ab. Dabei ist das Gebiet $\mathcal{D}(F_n)$ der zulässigen Parameter durch

$$\mathcal{D}(F_n) := \left\{ \underline{p} := (a_1, \ldots, a_l, c_1, \ldots, c_m)^T \in \mathbb{R}^{m+l} \ :\ p := (\Psi_a \underline{a}, \Psi_c \underline{c}) \in \mathcal{D}(F) \right\}.$$

gegeben. Des Weiteren schreiben wir $\underline{A}(p) =: \underline{A}(\underline{p})$. Für $\underline{p} \in \mathcal{D}(F_n)$ gilt nun

$$F_n(\underline{p}) = \Phi_n \underline{P}\, \Phi^{-1} A(p)^{-1} f = \Phi_n \underline{P}\, \underline{A}(\underline{p})^{-1} \underline{f},$$

wobei $\underline{P} \in \mathbb{R}^{n \times N}$ die Projektionsmatrix und $\Phi_n \underline{P} \Phi^{-1}$ die Projektion von $u = A(p)^{-1} f \in \mathbb{V}_N$ auf $\mathcal{Y}_n$ bezeichnet.

Analog definieren wir für festes $\underline{p}_0 \in \mathcal{D}(F_n)$ die Ableitung $F_n'(\underline{p}_0)$ durch

$$F_n'(\underline{p}_0)\,\underline{h} := \Phi_n \underline{P}\,\Phi^{-1} A(p_0)^{-1}\left(\hat{f}+\tilde{f}\right) = \Phi_n \underline{P}\,\underline{A}(\underline{p}_0)^{-1}\left(\underline{\hat{f}}+\underline{\tilde{f}}\right), \qquad \underline{h}\in\mathbb{R}^{m+l},$$

wobei wir die rechte Seite der Variationsformulierung (7) in zwei Teile $\underline{\hat{f}} := (\hat{f}_1,\ldots,\hat{f}_N)^T \in \mathbb{R}^N$ und $\underline{\tilde{f}} := (\tilde{f}_1,\ldots,\tilde{f}_N)^T \in \mathbb{R}^N$ teilen. Mit $\underline{u}_0 := \underline{A}(\underline{p}_0)^{-1}\underline{f}$ und

$$\underline{h} := \begin{pmatrix} \underline{h}_a \\ \underline{h}_c \end{pmatrix} = (h_1^a,\ldots,h_l^a,h_1^c,\ldots,h_m^c)^T \in \mathbb{R}^{m+l}$$

erhalten wir mit den Einheitsvektoren $\underline{e}_j$, $1\le j\le N$,

$$\begin{aligned}\tilde{f}_j = -\left\langle \Psi_c \underline{h}_c \Phi\,\underline{u}_0, \varphi_j\right\rangle_{L^2} &= -\sum_{k=1}^m h_k^c \left\langle \psi_k^{(c)}\Phi\,\underline{u}_0, \Phi\,\underline{e}_j\right\rangle_{L^2} \\ &= -\sum_{k=1}^m h_k^c \underline{e}_j^T \underline{M}_k \underline{u}_0 \\ &= -\underline{e}_j^T\left(\sum_{k=1}^m h_k^c \underline{M}_k\right)\underline{u}_0\end{aligned}$$

und damit

$$\underline{\tilde{f}} := -\left(\sum_{k=1}^m h_k^c \underline{M}_k\right)\underline{u}_0.$$

Durch eine analoge Rechnung erhalten wir

$$\underline{\hat{f}} := -\left(\sum_{k=1}^l h_k^a \underline{K}_k\right)\underline{u}_0.$$

Demzufolge führen wir die Matrix

$$\underline{B}(\underline{p}_0) := -\left(\underline{K}_1\underline{u}_0,\ldots,\underline{K}_l\underline{u}_0,\underline{M}_1\underline{u}_0,\ldots,\underline{M}_m\underline{u}_0\right)\in\mathbb{R}^{N\times(m+l)}$$

ein, um die Ableitung $F'(\underline{p}_0)$ nun als

$$F_n'(\underline{p}_0)\,\underline{h} := \Phi_n \underline{P}\,\underline{A}(\underline{p}_0)^{-1}\underline{B}(\underline{p}_0)\,\underline{h} \in \mathcal{Y}_n \tag{13}$$

schreiben zu können. Schließlich betrachten wir noch den adjungierten Operator $F_n'(\underline{p}_0)^* : \mathcal{Y}_n \longrightarrow \mathbb{R}^{m+l}$. Für $v := \Phi_n \underline{v} \in \mathcal{Y}_n$ erhalten wir offensichtlich

$$F_n'(\underline{p}_0)^* v := \underline{B}(\underline{p}_0)^T \underline{A}(\underline{p}_0)^{-1}\underline{P}^T\Phi_n^*\Phi_n\underline{v} = \underline{B}(\underline{p}_0)^T\underline{A}(\underline{p}_0)^{-1}\underline{P}^T\underline{W}\,\underline{v}\in\mathbb{R}^{m+l}.$$

Dabei haben wir bereits verwendet, dass es sich bei $\underline{A}(\underline{p}_0)^{-1}$ um eine symmetrische Matrix handelt.

Mit obigen Überlegungen haben wir alle numerischen Werkzeuge, die wir für die Berechnung von $F_n(\underline{p})$, $F_n'(\underline{p}_0)$ und $F_n'(\underline{p}_0)^*$ benötigen, hergeleitet.

aber gegen Parameterwerte, die große Abweichungen zu den exakten Lösungen aufweisen. Offensichtlich führen bei Randbedingung 4 sehr unterschiedliche Parameterwerte zu beinahe der gleichen Lösung der Differentialgleichung. Dies ist ein Hinweis darauf, dass wir berücksichtigen müssen, ob die Lösung des inversen Problems für gegebene Randbedingungen eindeutig ist.

Als letzte Variante betrachten wir die reine Neumannrandbedingung 5. Diese bringt gegenüber Variante 4 zusätzliche Eigenheiten mit sich. Bei der Berechnung von $\underline{p}^\delta$ mit dem Gauß-Newton-Verfahren treten sehr schlecht konditionierte und beinahe singuläre Matrizen auf. Infolgedessen erhalten wir keine zuverlässige numerische Konvergenz der Gauß-Newton-Iteration. Im nächsten Abschnitt führen wir deshalb weitergehende Untersuchungen dieses Problems durch. Das Verhalten der restlichen Verfahren und deren Ergebnisse sind analog zur Randbedingung 4. Die Abweichungen in $\underline{a}^\delta$ sind zwar für gestörte Daten um etwa 20% geringer als bei Variante 4. Da aber immer noch Fehler von ungefähr 20% auftreten, müssen auch diese Werte als unbrauchbar angesehen werden. Auffällig ist die Tatsache, dass der Großteil des Fehlers bei der Berechnung von $\underline{p}^\delta = (\underline{a}^\delta,\underline{c}^\delta)^T$ im $\underline{a}^\delta$-Anteil liegt. Gut zu erkennen ist dies am folgenden Beispiel

$$\underline{p}^\delta - \underline{p}^\dagger = \begin{pmatrix} 0.7907 \\ 3.0076 \\ 2.8921 \\ 5.0039 \\ 2.0116 \\ 2.9900 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.2093 \\ 0.0076 \\ -1.1079 \\ 0.0039 \\ 0.0116 \\ -0.0100 \end{pmatrix},$$

wobei $\underline{p}^\delta$ mit der Quasi-Newton-Methode für $\delta_{rel} = 0.01$ und Randbedingungsvariante 5 berechnet wurde. Diese Beobachtung deckt sich mit der zuvor gewonnenen Erkenntnis, dass die Bestimmung von $\underline{c}^\delta$ in allen Fällen problemlos und genau erfolgt. Zuletzt überprüfen wir noch, ob die Verwendung ungestörter Daten auch bei Randbedingung 5 die beobachteten Probleme beseitigt. Wir müssen feststellen, dass zwar die Lösungen wieder genau werden, aber die Singularitätsprobleme des Gauß-Newton-Verfahrens weiterhin bestehen.

Schlussendlich zeigen die Testergebnisse aus Tabelle 4, dass bestimmte Randbedingungen der Differentialgleichung (1) Veränderungen bei der Lösung des inversen Problems nach sich ziehen. Ursachen dafür könnten in der Struktur der Lösung der Differentialgleichung liegen. Um dies besser zu verstehen, führen wir weitere Untersuchungen durch.

der Bestimmung von $\underline{c}^\delta$ für alle fünf Varianten gutgestellt ist. Da hierbei keine prinzipiellen Veränderungen im Rechenaufwand und in der Lösungsqualität zu verzeichnen sind, verzichten wir im weiteren Verlauf auf die Auswertung der Ergebnisse für $\underline{c}^\delta$. Im Gegensatz dazu zeigt die Berechnung von $\underline{a}^\delta$ und $\underline{p}^\delta$ ein verändertes Verhalten. Wir untersuchen nun die Testergebnisse zu den Varianten 3, 4 und 5 der Reihe nach näher.

Wir beginnen mit Randbedingungsvariante 3. Während bei den Iterationszahlen keine auffälligen Abweichungen zu den Varianten 1 und 2 an den Tag treten, sind bei den Lösungsfehlern eindeutig Unterschiede zu erkennen. Die Berechnung von $\underline{a}^\delta$ wird um circa 2.5% ungenauer, was einer Verdopplung des Fehlers bezüglich der Randbedingung 1 entspricht. Allerdings könnte man dies angesichts eines relativen Lösungsfehlers von rund 5% noch als geeignete Näherung akzeptieren. Veränderungen sind auch bei der Identifikation von $\underline{p}^\delta$ feststellbar. Die Gradientenverfahren ergeben nun neben der bekannten langsamen Konvergenz um 11% ungenauere Ergebnisse im Vergleich zu den Randbedingungen 1 und 2. Aufgrund der erreichten maximalen Iterationszahl lässt sich hieraus aber keine eindeutige Aussage zur Qualität der Lösungen ableiten. Das Gauß-Newton- und das Quasi-Newton-Verfahren liefern mit Variante 3 und gestörten Daten vergleichbar gute Ergebnisse wie bisher.

Die weitere Verringerung des Dirichletrandanteils in Variante 4 bringt eine deutliche Verschlechterung der Lösungen mit sich. Die Rechenfehler für $\underline{a}^\delta$ im gestörten Fall erreichen nun Werte über 38%. Dies bedeutet Unbrauchbarkeit der numerischen Lösungen, da eine Näherung der exakten Parameter nicht mehr gegeben ist. Auch bei der Bestimmung von $\underline{p}^\delta$ wird die Verwendung gestörter Daten zum Problem. Gauß-Newton- und Quasi-Newton-Verfahren ergeben hier Lösungen mit um 10% erhöhten Fehlern, so dass nunmehr bei keinem Verfahren qualitativ gute Ergebnisse vorliegen. Das Verhalten der Gradientenmethoden bleibt unverändert.

Es stellt sich nun die Frage, worin die Ursache für die schlechten Ergebnisse liegt. Wir haben in unseren Algorithmen auf Regularisierungsverfahren verzichtet, so dass eine mögliche Inkorrektheit des Problems zu großen Fehlern führen könnte. Die Inkorrektheit kann wiederum durch Instabilität oder fehlende Eindeutigkeit der Lösung des inversen Problems ausgelöst werden. Zur Überprüfung, ob Instabilität vorliegt, wiederholen wir die Testrechnungen zu Randbedingung 4 mit exakten Daten. Dies zeigt, dass die Bestimmung von $\underline{a}^\delta$ mit $\delta_{rel} = 0$ sehr genau ist. Die Berechnung von $\underline{p}^\delta$ mit Randbedingung 4 und ungestörten Daten ist ebenfalls fast exakt möglich. Auf den ersten Blick deutet diese Beobachtung auf Instabilität der Iteration hin. Es ist jedoch festzustellen, dass die starken Abweichungen der berechneten von den exakten Parametern nicht durch zu hohe Iterationszahlen verursacht werden. Auch eine Erhöhung der Rechengenauigkeit in den Abbruchkriterien bewirkt keine veränderten Lösungen. Die Iterationsverfahren konvergieren in unserer Beispielrechnung auch im Fall gestörter Daten stabil,

Bemerkung 4.1 *Durch die konkrete Definition der Matrix $\underline{B}(\underline{p}_0)$ haben wir erreicht, dass die Euklidische Norm $\|\cdot\|_2$ im Raum der zulässigen Parameter die 'richtige' Norm ist. Den Lösungsraum $\mathcal{Y}_n$ können wir auch als $\mathbb{R}^n$ betrachten. Doch dann müssen wir das Skalarprodukt $\langle \underline{x}, \underline{y} \rangle := \underline{x}^T \underline{W}\, \underline{y}$ mit entsprechender Norm verwenden. Dabei können wir die Tatsache nutzen, dass $\underline{W}$ symmetrisch und positiv definit ist. Dies ist eine unmittelbare Konsequenz aus der Tatsache, dass die obigen Herleitungen praktisch im FE-Raum $\mathbb{V}_N$ mit entsprechendem L^2-Skalarprodukt durchgeführt wurden.*

5 Numerische Lösung des inversen Problems

Bevor wir numerische Algorithmen zur Lösung der entsprechenden diskreten Aufgabe betrachten, wollen wir das inverse Problem im diskreten Fall exakt definieren.

Definition 5.1 (diskreter Fall – [IP-(D)]) *Es seien die Messpunkte $\xi_1, \ldots, \xi_n \in \Omega$ und Messdaten $\underline{y} := (y_1, \ldots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$ mit $y_i := y(\xi_i)$, $i = 1, \ldots, n$, gegeben. Gesucht ist ein Parameter $\underline{p} \in \mathcal{D}(F_n) \subset \mathbb{R}^{m+l}$, so dass*

$$F_n(\underline{p}) = \Phi_n \underline{y}, \qquad \underline{p} \in \mathcal{D}(F_n). \tag{14}$$

Zur Lösung dieser Aufgabe betrachten wir das Minimierungsproblem

$$J(\underline{p}) := \frac{1}{2} \left\| F_n(\underline{p}) - \Phi_n \underline{y} \right\|_{\mathcal{Y}_n}^2 = \frac{1}{2} (\underline{u} - \underline{y})^T \, \underline{W} \, (\underline{u} - \underline{y}) \to \min_{\underline{p} \in \mathcal{D}(F_n)}, \tag{15}$$

mit $\underline{u} := \Phi_n^{-1} F_n(\underline{p})$. Beginnend mit einem Startwert $\underline{p}_0$ lösen wir (15) iterativ durch eine Folge

$$\underline{p}_{k+1} := \underline{p}_k + \gamma_k \underline{d}_k, \qquad k = 0, 1, \ldots, \tag{16}$$

mit Suchrichtung $\underline{d}_k$ und Schrittweite γ_k. Wir schauen uns einige Varianten näher an. Wir verweisen auf [18] für einen ausführlichen Überblick über Grundlagen und numerische Realisierung verschiedener Optimierungsverfahren.

a) Verfahren vom Gradienten-Typ

Benutzen wir als Gradienten-Verfahren die nichtlineare Landweber-Iteration (siehe z.B. [9] bzw. [12]), so erhalten wir die Iteration

$$\underline{d}_k := -\nabla J(\underline{p}_k) = F_n'(\underline{p}_k)^* \left(\Phi_n \underline{y} - F_n(\underline{p}_k) \right) = \underline{B}(\underline{p}_0)^T \underline{A}(\underline{p}_0)^{-1} \underline{P}^T \underline{W} \left(\underline{y} - \underline{u}_k \right)$$

mit $\underline{u}_k := F_n(\underline{p}_k)$. Die Schrittweite γ_k kann durch einen Bisektionsalgorithmus gesteuert werden, so dass $J(\underline{p}_{k+1}) \leq J(\underline{p}_k)$, $k = 0, 1, \ldots$, in jeder Iteration gilt. Für die Wahl des Startwertes $\overline{\gamma}_k$ dieser inneren Iteration stehen uns verschiedene

Möglichkeiten zur Verfügung. Ein Standardansatz ist die Wahl $\overline{\gamma}_k := 1$. Beim *steepest-descent*-Algorithmus (siehe [17]) wählen wir

$$\overline{\gamma}_k := \frac{\|\underline{d}_k\|_2^2}{\|F_n'(\underline{p}_k)\underline{d}_k\|_{\underline{y}_n}^2} = \frac{\|\underline{d}_k\|_2^2}{\underline{v}_k^T \underline{W}\, \underline{v}_k}$$

mit $\underline{v}_k := \underline{P}\, \underline{A}(\underline{p}_k)^{-1} \underline{B}(\underline{p}_k)\, \underline{d}_k$. Hier ist allerdings die Lösung einer zusätzlichen Differentialgleichung notwendig. Eine Alternative dazu bietet die Formel

$$\overline{\gamma}_k := \frac{\|F_n(\underline{p}_k) - \Phi_n \underline{y}\|_{\underline{y}_n}^2}{\|\underline{d}_k\|_2^2} = \frac{(\underline{u}_k - \underline{y})^T \underline{W} (\underline{u}_k - \underline{y})}{\|\underline{d}_k\|_2^2},$$

die unter dem Namen *minimal-error*-Algorithmus bekannt ist (siehe z.B. [21]).

b) Gauß-Newton-Verfahren

Eine Alternative zu Gradienten-Verfahren liefern Verfahren vom Newton-Typ (siehe [14, Kapitel 18] für das klassische Newton-Verfahren in Banachräumen). Dies kann aber nur für den Fall $m + l = n$ auf die Gleichung (14) angewendet werden. Eine Verallgemeinerung stellt das Gauß-Newton-Verfahren (siehe z.B. [22, Kapitel 10]) dar, welches für Probleme der quadratischen Fehlerminimierung der Form (16) oft eine sehr gute Alternative darstellt. Die Suchrichtung $\underline{d}_k$ ist dann als Lösung der Normalengleichung

$$F_n'(\underline{p}_k)^* F_n'(\underline{p}_k)\underline{d} = F_n'(\underline{p}_k)^* \left(\Phi_n \underline{y} - F_n(\underline{p}_k)\right)$$

gegeben. In der Matrixdarstellung kann diese als

$$\underline{B}(\underline{p}_k)^T \underline{A}(\underline{p}_k)^{-1} \underline{P}^T \underline{W}\, \underline{P}\, \underline{A}(\underline{p}_k)^{-1} \underline{B}(\underline{p}_k)\underline{d} = \underline{B}(\underline{p}_k)^T \underline{A}(\underline{p}_k)^{-1} \underline{P}^T \underline{W} \left(\underline{y} - \underline{u}_k\right)$$

dargestellt werden. Allerdings können wir die Matrix $\underline{A}(\underline{p}_k)^{-1}$ nicht explizit berechnen. Auf der anderen Seite jedoch kann die Matrix

$$\underline{H}(\underline{p}_k) := \underline{P}\, \underline{A}(\underline{p}_k)^{-1} \underline{B}(\underline{p}_k) \in \mathbb{R}^{n \times (m+l)}$$

zeilenweise durch Berechnung von $F_n'(\underline{p}_k)\underline{e}_j$ für die $m + l$ Einheitsvektoren $\underline{e}_j$ ermittelt werden. Dabei geht der Vorteil der schnellen Konvergenz des Gauß-Newton-Verfahren verloren. Für die Berechnung von $\underline{H}(\underline{p}_k)$ müssen wir nun eine zusätzliche Differentialgleichung pro Zeile lösen. Dieser Nachteil kann allerdings durch parallele Algorithmen wieder kompensiert werden.

c) Quasi-Newton-Methoden

Eine Alternative, die ohne explizite Berechnung der Jacobi-Matrix in jedem Iterationsschritt auskommt, bieten Quasi-Newton-Verfahren. Hierbei erfolgt eine

Verf.	RB	δ_{rel}	**Bestimmung von $\underline{c}$**			**Bestimmung von $\underline{a}$**			**Bestimmung von $\underline{p}$**		
			K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{c}^\delta - \underline{c}^\dagger\|_2}{\|\underline{c}^\dagger\|_2}$	K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{a}^\delta - \underline{a}^\dagger\|_2}{\|\underline{a}^\dagger\|_2}$	K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{p}^\delta - \underline{p}^\dagger\|_2}{\|\underline{p}^\dagger\|_2}$
St.-desc.	1	0.01	37	18.8	0.0128	16	10.9	0.0262	500	276.5	0.0334
Min.-err.	1	0.01	500	687.4	0.0131	500	695.7	0.0404	500	739.0	0.0336
Gauß-N.	1	0.01	4	5.9	0.0128	5	7.2	0.0262	7	15.8	0.0347
Quasi-N.	1	0.01	16	8.0	0.0128	15	9.2	0.0262	51	19.5	0.0347
St.-desc.	2	0.01	9	7.4	0.0091	26	16.9	0.0088	500	288.8	0.0319
Min.-err.	2	0.01	26	35.5	0.0091	500	749.9	0.0111	500	734.2	0.0401
Gauß-N.	2	0.01	4	5.9	0.0091	6	8.4	0.0088	7	16.7	0.0399
Quasi-N.	2	0.01	22	10.1	0.0091	15	9.7	0.0088	54	21.0	0.0399
St.-desc.	3	0.01	18	10.7	0.0068	63	33.3	0.0532	500	279.9	0.1469
Min.-err.	3	0.01	500	665.0	0.0069	500	713.4	0.0392	500	801.9	0.1543
Gauß-N.	3	0.01	5	6.3	0.0068	6	7.7	0.0532	8	17.0	0.0283
Quasi-N.	3	0.01	17	8.1	0.0068	22	9.7	0.0532	52	19.4	0.0283
St.-desc.	4	0.01	87	39.3	0.0093	65	32.9	0.3839	500	276.8	0.1609
Min.-err.	4	0.01	500	635.3	0.0093	500	616.1	0.3805	500	704.1	0.1610
Gauß-N.	4	0.01	4	5.7	0.0093	13	12.6	0.3854	21	37.5	0.1312
Quasi-N.	4	0.01	17	8.1	0.0093	29	11.9	0.3854	55	20.4	0.1312
St.-desc.	4	0.00	-	-	-	165	78.7	0.0030	500	279.9	0.1469
Min.-err.	4	0.00	-	-	-	500	553.1	0.0049	500	662.9	0.1536
Gauß-N.	4	0.00	-	-	-	5	7.1	0.0009	10	20.8	0.0005
Quasi-N.	4	0.00	-	-	-	28	11.9	0.0013	55	20.4	0.0005
St.-desc.	5	0.01	105	48.1	0.0077	162	81.7	0.2007	-	-	-
Min.-err.	5	0.01	500	661.8	0.0079	-	-	-	-	-	-
Gauß-N.	5	0.01	5	6.5	0.0077	12	13.7	0.1986	Matrix singulär		
Quasi-N.	5	0.01	15	7.6	0.0077	29	11.8	0.1986	43	16.2	0.1410
St.-desc.	5	0.00	-	-	-	57	30.6	0.0012	-	-	-
Min.-err.	5	0.00	-	-	-	221	197.1	0.0016	-	-	-
Gauß-N.	5	0.00	-	-	-	5	7.6	0.0003	Matrix singulär		
Quasi-N.	5	0.00	-	-	-	31	12.5	0.0003	61	21.3	0.0004

Tabelle 4: Ergebnisse mit verschiedenen RB-Varianten für 7537 FE-Knoten

Quasi-Newton-Methoden sind als die besten Verfahren anzusehen.

Dass die Wahl der Randbedingungen durchaus Einfluss auf die Lösung des entsprechenden inversen Problems besitzt, zeigt die Analyse der Testrechnungen zu den Varianten 3, 4 und 5. Betrachten wir die Testergebnisse dieser Randbedingungskonstellationen, dann ist eine Reihe von Besonderheiten festzustellen. Bevor wir uns näher damit beschäftigen, sei darauf hingewiesen, dass die Teilaufgabe

Verwendung des feinsten Netzes lässt sich durch auftretende Speicherplatzprobleme aufgrund der großen Dimension der verwendeten Matrizen begründen. Wir beschränken uns deshalb im weiteren Verlauf der Fallstudie auf Netze mit bis zu 29793 Knoten.

6.5 Einfluss der Randbedingungen

Im nächsten Abschnitt beschäftigen wir uns näher mit den Randbedingungen der Differentialgleichung (1). Da die Anordnung des Neumann- und Dirichletrandanteils Auswirkungen auf die Lösung der Differentialgleichung hat, ist auch ein Einfluss auf die Lösung des inversen Problems zu erwarten. Wir untersuchen die fünf verschiedenen Varianten der Anordnung von Neumann- und Dirichleträndern, wie sie in Abbildung 2 beschrieben sind. Die Randbedingungsvariante 1 stellt eine gemischte Neumann- und Dirichletrandbedingung dar, bei der an der einspringenden Ecke des Gebietes Ω ein Übergang von Neumann- zu Dirichletrand vorliegt. Die Variante 2 zeigt eine reine Dirichletrandbedingung. In den gemischten Varianten 3 und 4 wird der Anteil des Neumannrandes immer größer gewählt und die Variante 5 bildet schließlich ein reines Neumannproblem. Durch verschiedene Testrechnungen wurde der Einfluss der Randbedingungen auf die Bestimmung von $\underline{c}^\delta$, $\underline{a}^\delta$ und $\underline{p}^\delta$ untersucht. Die daraus erhaltenen Ergebnisse fasst Tabelle 4 zusammen.

In den bisherigen Fallstudien wurde die Randbedingungsvariante 1 bereits ausgewertet. Vergleichen wir nun diese Daten mit den zu Variante 2 gehörigen Ergebnissen, sind Unterschiede festzustellen. Die beobachteten Veränderungen sind allerdings für die verschiedenen Teilaufgaben unterschiedlich ausgeprägt.

Bei der Berechnung von $\underline{c}^\delta$ mit der Dirichletrandbedingung 2 fällt auf, dass die Gradientenmethoden im Gegensatz zu Variante 1 wesentlich weniger Iterationen zur näherungsweisen Lösung des Problems benötigen. Vor allem das *minimal-error*-Verfahren ist deutlich schneller und erreicht nicht die maximal zugelassene Iterationszahl. Die Genauigkeit der Lösungen $\underline{c}^\delta$ verbessert sich geringfügig.

Betrachten wir die Ergebnisse zur Identifizierung von $\underline{a}^\delta$ und $\underline{p}^\delta$ mit Randbedingungsvariante 2, sind hingegen kaum Abweichungen zu erkennen. Es ist hier kein Einfluss auf das ungünstige Verhalten der Gradientenverfahren feststellbar. Bezüglich des Rechenaufwandes sind die Testergebnisse zur Berechnung von $\underline{a}^\delta$ und $\underline{p}^\delta$ mit Variante 2 nahezu identisch mit denen von Variante 1. In der Genauigkeit der Lösungen ist nur für $\underline{a}^\delta$ eine Veränderung zu sehen, die sogar eine Verbesserung um fast 2% bedeutet.

Insgesamt sind die Erkenntnisse aus den Beispielrechnungen mit Variante 1 auch auf die Randbedingungsvariante 2 übertragbar. In beiden Fällen ergeben sich keine Probleme aus der Verwendung gestörter Daten und die Gauß-Newton- und

schrittweise Approximation des Hessians des Zielfunktionals $J(\underline{p})$ in jedem Iterationsschritt. Diese Approximation wird z.B. durch Anwendung der klassischen BFGS-Formel

$$\underline{H}_{k+1} := \underline{H}_k + \frac{\underline{q}_k \underline{q}_k^T}{\underline{q}_k^T \underline{s}_k} - \frac{\underline{H}_k \underline{s}_k \underline{s}_k^T \underline{H}_k}{\underline{s}_k^T \underline{H}_k \underline{s}_k} \in \mathbb{R}^{(m+l)\times(m+l)}$$

(siehe [23]) erreicht. Dabei ist $\underline{H}_0$ eine positiv definite Startmatrix sowie

$$\underline{q}_k := \nabla J(\underline{p}_{k+1}) - \nabla J(\underline{p}_k) \quad \text{und} \quad \underline{s}_k := \underline{p}_{k+1} - \underline{p}_k = \gamma_k \underline{d}_k.$$

Die neue Suchrichtung $\underline{d}_k$ erhalten wir dann durch

$$\underline{d}_k := -\underline{H}_k^{-1} \nabla J(\underline{p}_k).$$

Für alternative und modernere Varianten sowie deren numerische Umsetzung sei auf [18, Kapitel 8] verwiesen.

d) Nichtlineare CG-Verfahren

Abschließend wollen wir noch nichtlineare CG-Verfahren erwähnen. Hier ist die neue Suchrichtung $\underline{d}_k$ als Linearkombination vom Gradienten $\nabla J(\underline{p}_k)$ und der Suchrichtung $\underline{d}_{k-1}$ des vorangegangenen Iterationsschrittes gegeben, d.h.

$$\underline{d}_k := -\nabla J(\underline{p}_k) + \beta_k \underline{d}_{k-1}.$$

Es gibt verschiedene Berechnungsvorschriften für die Wahl von β_k. Wir geben hier die drei bekanntesten an (siehe z.B. [1, S.231]):

$$\beta_k := \frac{\nabla J(\underline{p}_k)^T \nabla J(\underline{p}_k)}{\nabla J(\underline{p}_{k-1})^T \nabla J(\underline{p}_{k-1})}, \tag{17}$$

$$\beta_k := \frac{\nabla J(\underline{p}_k)^T \left(\nabla J(\underline{p}_k) - \nabla J(\underline{p}_{k-1}) \right)}{\nabla J(\underline{p}_{k-1})^T \nabla J(\underline{p}_{k-1})}, \tag{18}$$

$$\beta_k := \frac{\nabla J(\underline{p}_k)^T \left(\nabla J(\underline{p}_k) - \nabla J(\underline{p}_{k-1}) \right)}{\underline{d}_{k-1}^T \left(\nabla J(\underline{p}_k) - \nabla J(\underline{p}_{k-1}) \right)}. \tag{19}$$

Dabei handelt es sich um die Fletcher-Reeves-Formel (17), die Polak-Ribière-Formel (18) sowie die Hestenes-Stiefel-Formel (19).

6 Numerische Fallstudien

Anhand einer numerischen Fallstudie wollen wir nun die Eigenschaften des oben betrachteten inversen Problems [IP-(D)] näher untersuchen. Im Mittelpunkt des

Interesses soll hierbei stehen, welche Lösungsalgorithmen zur Bestimmung der Materialparameter $\underline{a}$ und $\underline{c}$ am besten geeignet sind und welchen Einfluss eine Datenstörung auf die Qualität der berechneten Ergebnisse hat. Weiterhin werden Einflussfaktoren untersucht, die bei der Modellierung des Problems eine Rolle spielen. Dazu zählt z.B. das Verhalten des Problems für verschiedene Randbedingungen der Differentialgleichung. Bei der Anwendung der Lösungsverfahren setzen wir bewusst auf eine sehr einfache Herangehensweise. Wir wollen dadurch feststellen, an welchen Stellen im betrachteten Problem Inkorrektheitsphänomene auftreten, die die Anwendung von Regularisierungsmethoden notwendig machen.

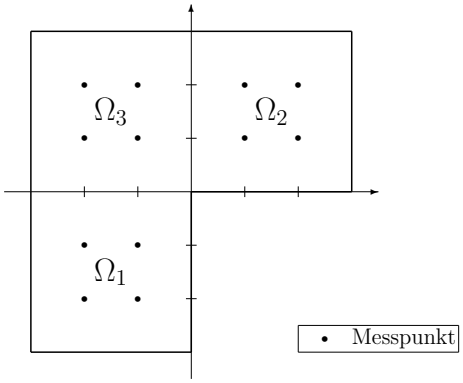


Abbildung 1: Gebiet Ω und Messpunkte

Zu Testzwecken definieren wir nun ein geeignetes Beispielproblem. Das Gebiet Ω sei wie in Abbildung 1 dargestellt in drei disjunkten Teilgebieten Ω_j, $j = 1, 2, 3$, zerlegt. Für die rechte Seite der Differentialgleichung (1) wählen wir die konstante Funktion $f(\xi) \equiv 50$, $\xi \in \Omega$. Weiterhin nehmen wir an, dass die Parameterfunktionen $a(\xi)$ und $c(\xi)$ über den Teilgebieten Ω_j, $j = 1, 2, 3$ konstant sind. Somit gilt für die zugehörigen Ansatzfunktionen

$$\psi_j^{(a)}(\xi) = \psi_j^{(c)}(\xi) := \chi_{\Omega_j}(\xi), \quad \xi \in \Omega,\ j = 1, 2, 3\ .$$

Die Räume $\mathbb{V}_l^{(a)}$ und $\mathbb{V}_m^{(c)}$ haben folglich die Dimension $m = l = 3$. In jedem Teilgebiet Ω_j definieren wir vier Messpunkte, deren Lage ebenfalls in Abbildung 1 angegeben ist. Demzufolge betrachten wir im Beispielproblem insgesamt $n = 12$ Messpunkte. Praktisch bedeutet dies für das inverses Problem, dass $m + l = 6$ Materialparameter aus einem 12-dimensionalen Datenvektor $\underline{y}$ bestimmt werden

Verf.	$\underline{x}$	δ_{rel}	**7537 FE-Knoten** K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{x}^\delta - \underline{x}^\dagger\|_2}{\|\underline{x}^\dagger\|_2}$	**29793 FE-Knoten** K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{x}^\delta - \underline{x}^\dagger\|_2}{\|\underline{x}^\dagger\|_2}$	**118465 FE-Knoten** K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{x}^\delta - \underline{x}^\dagger\|_2}{\|\underline{x}^\dagger\|_2}$
Gauß-N.	$\underline{c}$	0.00	4	5.9	0.0057	4	20.3	0.0023	4	89.5	0.0000
Quasi-N.	$\underline{c}$	0.00	16	8.0	0.0057	19	34.2	0.0023	19	157.1	0.0000
Gauß-N.	$\underline{c}$	0.01	4	5.9	0.0128	4	20.1	0.0105	4	91.5	0.0093
Quasi-N.	$\underline{c}$	0.01	16	8.0	0.0128	18	32.6	0.0105	17	147.2	0.0093
Gauß-N.	$\underline{a}$	0.00	5	7.2	0.0165	4	29.9	0.0069	4	228.9	0.0000
Quasi-N.	$\underline{a}$	0.00	22	14.0	0.0165	18	42.5	0.0069	19	199.3	0.0000
Gauß-N.	$\underline{a}$	0.01	5	7.2	0.0262	5	34.1	0.0168	5	269.4	0.0102
Quasi-N.	$\underline{a}$	0.01	15	9.2	0.0262	16	37.7	0.0168	16	175.9	0.0102
Gauß-N.	$\underline{p}$	0.00	7	15.9	0.0088	6	94.9	0.0038	6	996.8	0.0000
Quasi-N.	$\underline{p}$	0.00	50	19.2	0.0089	59	95.4	0.0039	65	508.1	0.0004
Gauß-N.	$\underline{p}$	0.01	7	15.8	0.0347	7	107.5	0.0307	7	1133.4	0.0279
Quasi-N.	$\underline{p}$	0.01	51	19.5	0.0347	59	96.7	0.0308	63	495.7	0.0280

Tabelle 3: Einfluss der FE-Diskretisierung (RB-Variante 1)

Halbierung der Fehler. Bei der kritischen Betrachtung der Ergebnisse für das 118465-Knoten-Netz muss allerdings berücksichtigt werden, dass die Vorwärtsrechnung zur Datenbeschaffung auf dem gleichen Netz erfolgte. Deshalb konnten in diesem Fall annähernd fehlerfreie Lösungen erzielt werden. Für gestörte Daten ist hingegen zu sehen, dass eine gewisse Fehlerschwelle auch durch genaueres Rechnen nicht unterboten werden kann. Mit einem Datenfehler von 1% können wir $\underline{c}^\delta$ und $\underline{a}^\delta$ bis auf circa 1% genau bestimmen. Bei der Berechnung von $\underline{p}^\delta$ liegt die erreichbare Fehlergrenze etwa bei 2.8%. Dieses Verhalten spiegelt die Zusammensetzung des Gesamtrechenfehlers aus Diskretisierungsfehler und Datenstörung wider. Im Bereich sehr feiner Diskretisierungen dominiert der Datenfehler den Diskretisierungsfehler, so dass weitere Netzverfeinerungen keinen Nutzen erzielen. Wir brauchen also für gestörte Daten nicht feiner diskretisieren als unbedingt nötig ist.

Von großer Bedeutung für die Praxis ist die Tatsache, dass die genaueren Lösungen bei feinerer Diskretisierung durch höhere Rechenzeiten sehr teuer erkauft sind. Vergleichen wir die Lösungsfehler zwischen grober und feinster Diskretisierung, dann liegt die Verbesserung der Genauigkeit lediglich zwischen 0.5% und 1.5%. Der Anstieg der Rechenzeiten beläuft sich aber auf das 15- bis 60-fache, was extrem vergrößerte Laufzeiten der Algorithmen bedeutet. Vor allem bei der Berechnung von $\underline{p}^\delta$ steigt die benötigte Rechenzeit übermäßig stark an. Erwähnt sei hierbei, dass die Iterationszahlen der Verfahren durch verschiedene Diskretisierungen kaum beeinflusst werden. Der sehr starke Anstieg der Rechenzeit bei

Betrachtet man den Anstieg der Rechenfehler genauer, so ist zu erkennen, dass die Berechnung von $\underline{c}^\delta$ und $\underline{a}^\delta$ im Vergleich zum ungestörten Fall um etwa 1% ungenauer wird. Bei der Bestimmung von $\underline{p}^\delta$ ist die Verschlechterung etwas größer und liegt bei circa 2%. Die Ergebnisse für gestörte Daten verschlechtern sich aber gegenüber der exakten Rechnung lediglich um Werte, die in der Größenordnung von δ_{rel} liegen. Das diskrete inverse Problem [IP-(D)] weist somit für die betrachtete Konstellation der Modellrechnung keine Instabilität auf. Die Stabilität der Testrechnungen zeigt uns, dass wir eine Regularisierung durch Diskretisierung (vgl. z.B. [3, Chapter 7]) des kontinuierlichen Problems durchgeführt haben. Das zugrunde liegende kontinuierliche Problem [IP-(C)] ist zwar schlechtgestellt, so dass die Berechnung der Parameterfunktion p^δ ohne den Einsatz von Regularisierungsverfahren instabil wäre. Da wir aber nur den diskreten Parametervektor $\underline{p}^\delta$ bestimmen wollen, ist das diskrete Problem [IP-(D)] stabil.

Nach den bisher gewonnenen Erkenntnissen schränken wir unsere Untersuchungen im weiteren Verlauf der Fallstudie ein. Von den getesteten Iterationsverfahren konzentrieren wir uns auf die Gauß-Newton- und Quasi-Newton-Methoden, da diese mit Abstand die schnellsten Algorithmen sind. Die Gradientenverfahren berücksichtigen wir an einigen Stellen zu Testzwecken. Auf die nichtlinearen CG-Verfahren verzichten wir aufgrund der schlechten Testergebnisse. Da sich das diskrete Problem in diesem Abschnitt als stabil gegenüber dem Einfluss eines Datenfehlers erwiesen hat, können die folgenden Untersuchungen ohne weiteres mit gestörten Daten durchgeführt werden.

6.4 Einfluss der FE-Diskretisierung auf Lösungsfehler und Rechenzeit

Die vorangegangenen Untersuchungen ließen schon den Schluss zu, dass die berechneten Lösungen $\underline{x}^\delta$ sehr gute Näherungen der tatsächlichen Materialparameter $\underline{x}^\dagger$ darstellen. Wir wollen nun genauer auf die Qualität der Lösungen eingehen und dabei den Einfluss der FE-Diskretisierung berücksichtigen. Da klar ist, dass feinere FE-Netze geringere Diskretisierungsfehler und bessere Lösungen nach sich ziehen, wurde für diesen Teil der Studie die Anzahl der FE-Knoten auf 118465 erhöht. Der Einfachheit halber verwenden wir an dieser Stelle zunächst nur gleichmäßige Netzverfeinerungen ohne Adaptivität. Eine Zusammenstellung ausgewählter Testergebnisse für verschiedene Diskretisierungsstufen ist in Tabelle 3 aufgelistet. Hierbei wurde sowohl der gestörte als auch der Fall fehlerfreier Daten untersucht.

Die Ergebnisse der Testrechnungen belegen deutlich die Verringerung der Rechenfehler durch Verfeinerung der Diskretisierung. Im Fall exakter Daten ist zu erkennen, dass die tatsächlichen Parameterwerte beliebig genau angenähert werden können. Eine Halbierung der Netzschrittweite führt in etwa auch zu einer

sollen. In den Testrechnungen verwenden wir, falls nichts anderes erwähnt wird, die exakten Parameterwerte

$$\underline{a}^\dagger := (1,3,4)^T \quad \text{und} \quad \underline{c}^\dagger := (5,2,3)^T \,.$$

Vollständig definiert wird unser Beispielproblem durch die Vereinbarung der Randbedingungen der Differentialgleichung. Hierzu sei der Rand des Gebietes Ω unterteilt in einen Neumannrandanteil Γ_N und einen Dirichletrand Γ_D mit den in (1) angegebenen Randbedingungen. Wir betrachten homogene Randbedingungen und setzen $g(\xi) \equiv 0$, $\xi \in \Gamma_N$. Verschiedene Varianten der Anordnung von Γ_N und Γ_D an der Testgeometrie sind denkbar. Abbildung 2 zeigt, welche Randbedingungsvarianten in der numerischen Fallstudie verwendet werden.

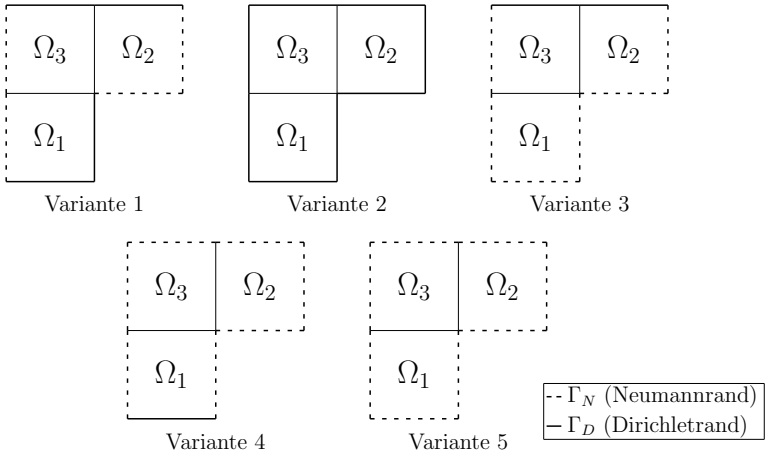


Abbildung 2: Anordnung der Randbedingungen in verschieden Varianten

Die Lösung u der Differentialgleichung (1) unter den oben genannten Bedingungen mit Randbedingungsvariante 1 ist in Abbildung 3 dargestellt. Der Datenvektor $\underline{y}$ ist durch die Funktionswerte von u an den $n = 12$ Messpunkten gegeben.

In der Fallstudie unterscheiden wir drei Aufgabenstellungen. Zum Ersten ist dies die Berechnung von $\underline{c}$ bei bekanntem Parameter $\underline{a}^\dagger$. Im zweiten Fall betrachten wir das umgekehrte Problem und bestimmen mit festgelegtem $\underline{c}^\dagger$ den unbekannten Parameter $\underline{a}$. Als dritte Teilaufgabe, die den Schwerpunkt bildet, untersuchen wir die Bestimmung von $\underline{a}$ und $\underline{c}$ gleichzeitig.

Die getrennte Berechnung der einzelnen Parameter in ähnlichen Aufgabenstellungen wurde auch in früheren Arbeiten (z.B. [19]) untersucht. Wir interessieren uns

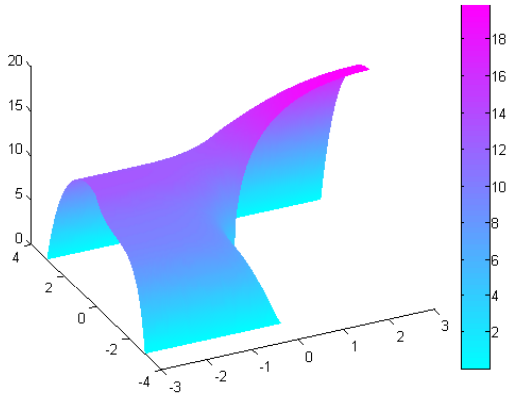


Abbildung 3: Lösung u der Differentialgleichung (1) mit RB-Variante 1

daher in dieser Fallstudie besonders für den Fall, beide Parameter gleichzeitig zu identifizieren. Da hierbei zwei voneinander unabhängige Materialparameter aus den gleichen Messdaten bestimmt werden, ist zu erwarten, dass die Lösung des dritten Problems schwieriger ist als die anderen Teilaufgaben. In den bisherigen Betrachtungen behandelten wir die drei Teilaufgaben zusammengefasst im Gesamtproblem. Im ersten und zweiten Fall erhalten wir jedoch die benötigten Formeln durch Vereinfachung des dritten Falls, indem jeweils die betreffende Komponente von $\underline{p} := (\underline{a}, \underline{c})$ als konstant und bekannt vorausgesetzt wird. Analog bestimmen wir die zugehörigen diskreten Ableitungsoperatoren durch Einsetzen von $\underline{h}_a := \underline{0} \in \mathbb{R}^l$ im ersten bzw. $\underline{h}_c := \underline{0} \in \mathbb{R}^m$ im zweiten Fall.

6.1 Numerische Umsetzung

Zur numerischen Umsetzung des Problems verwenden wir MATLAB R2006. Die numerische Lösung der partiellen Differentialgleichung (1) wird mit den Befehlen der PARTIAL-DIFFERENTIAL-EQUATION-TOOLBOX [24] realisiert. Die Bestimmung der benötigten Rechenzeiten erfolgt unter LINUX auf den CASE-Rechnern der Fakultät für Mathematik der TU Chemnitz. Alle Zeitangaben in den nachfolgenden Abschnitten sind in Sekunden.

Die Daten $\underline{y} \in \mathbb{R}^n$ wurden durch durch eine Vorwärtsrechnung mit den exakten Parametern $\underline{a}^\dagger$ und $\underline{c}^\dagger$ erzeugt. Diese muss mit größtmöglicher Genauigkeit durchgeführt werden, um eine Verfälschung der inversen Rechnungen zu verhindern. In der Fallstudie verwenden wir zur Berechnung von $\underline{y}$ ein FE-Netz mit

sind. Die Gradientenverfahren scheinen in manchen Fällen ebenfalls geeignet zu sein, wogegen die nichtlinearen CG-Methoden für unser Problem keine praktische Bedeutung erkennen lassen.

6.3 Einfluss des Datenfehlers

Bisher haben wir als Eingangsdaten nur exakte Messdaten $\underline{y}$ verwendet, mit denen die Berechnung der Materialparameter problemlos und genau möglich war. Im nächsten Teil der Fallstudie beschäftigen wir uns mit gestörten Daten $\underline{y}^\delta$ und deren Auswirkungen auf die Lösung unseres Problems. Dazu wiederholen wir die Testrechnungen aus Tabelle 1 unter der Annahme einer Datenstörung von 1% ($\delta_{rel} = 0.01$). Die Beispielrechnungen mit fehlerbehafteten Daten sind in Tabelle 2 aufgelistet.

Verfahren			**7537 FE-Knoten**			**29793 FE-Knoten**		
	$\underline{x}$	δ_{rel}	K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{x}^\delta - \underline{x}^\dagger\|_2}{\|\underline{x}^\dagger\|_2}$	K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{x}^\delta - \underline{x}^\dagger\|_2}{\|\underline{x}^\dagger\|_2}$
Steepest-descent	$\underline{c}$	0.01	37	18.8	0.0128	31	72.6	0.0104
Minimal-error	$\underline{c}$	0.01	500	687.4	0.0131	500	3193.2	0.0112
Gauß-Newton	$\underline{c}$	0.01	4	5.9	0.0128	4	20.1	0.0105
Nichtlin. CG mit (17)	$\underline{c}$	0.01	77	26.0	0.0127	138	196.6	0.0104
Quasi-Newton	$\underline{c}$	0.01	16	8.0	0.0128	18	32.6	0.0105
Steepest-descent	$\underline{a}$	0.01	16	10.9	0.0262	17	53.6	0.0169
Minimal-error	$\underline{a}$	0.01	500	695.7	0.0404	-	-	-
Gauß-Newton	$\underline{a}$	0.01	5	7.2	0.0262	5	34.1	0.0168
Nichtlin. CG mit (17)	$\underline{a}$	0.01	78	25.9	0.0262	159	233.4	0.0168
Quasi-Newton	$\underline{a}$	0.01	15	9.2	0.0262	16	37.7	0.0168
Steepest-descent	$\underline{p}$	0.01	500	276.5	0.0334	500	1699.8	0.0302
Minimal-error	$\underline{p}$	0.01	500	739.0	0.0336	-	-	-
Gauß-Newton	$\underline{p}$	0.01	7	15.8	0.0347	7	107.5	0.0307
Nichtlin. CG mit (17)	$\underline{p}$	0.01	462	147.5	0.0346	-	-	-
Quasi-Newton	$\underline{p}$	0.01	51	19.5	0.0347	59	96.7	0.0308

Tabelle 2: Ergebnisse mit Datenstörung und RB-Variante 1

Ein Vergleich der Ergebnisse aus den Tabellen 1 und 2 offenbart, dass die Datenstörung nur zu einer Erhöhung der Rechenfehler führt. Weder die Iterationszahlen und Rechenzeiten noch das prinzipielle Verhalten der einzelnen Iterationsverfahren ändert sich wesentlich. Wir erhalten also im gestörten Fall bezüglich des Rechenaufwandes nahezu die gleichen Ergebnisse wie im ungestörten Fall. Die Beispielrechnungen der nichtlinearen CG-Verfahren (18) und (19) sind in Tabelle 2 nicht aufgeführt, da auch hier keinerlei Veränderungen auftraten.

eine einzelne Iteration der Gauß-Newton-Methode im Gegensatz zu anderen Algorithmen ist. Vergleicht man die Qualität der erzielten Näherungslösungen, so ist zu erkennen, dass die Berechnung von $\underline{c}^\delta$ mit allen Algorithmen in etwa gleich genau erfolgt. Wir können die Auswahl geeigneter Verfahren also auf das Kriterium des Rechenaufwandes beschränken. Erwähnt sei an dieser Stelle auch, dass wir durch die Verwendung verfeinerter FE-Diskretisierungen genauere Lösungen des Problems erhalten, aber dadurch die Rechnungen deutlich aufwändiger werden. Erhöht man die Anzahl der FE-Knoten zu weit, dann führen Speicherplatzprobleme zu extrem langen Rechenzeiten bei kaum geringeren Lösungsfehlern. Eine ausführlichere Analyse der Fragestellung, wie fein diskretisiert werden sollte, erfolgt im weiteren Verlauf dieser Fallstudie anhand von Tabelle 3.

Wir betrachten nun in Tabelle 1 die Ergebnisse zur Berechnung von $\underline{a}^\delta$. Es bestehen kaum Unterschiede zur Bestimmung von $\underline{c}^\delta$. Die Iterationszahlen und Rechenzeiten weichen nur wenig voneinander ab. Auch im Verhalten der verschiedenen Algorithmen ist keine prinzipielle Veränderung zu erkennen. Lediglich die Genauigkeit der berechneten Lösungen $\underline{a}^\delta$ ist etwas schlechter.

Die Bestimmung von $\underline{c}^\delta$ und $\underline{a}^\delta$ gleichzeitig in $\underline{p}^\delta$ offenbart im Gegensatz zu den anderen Teilaufgaben größere Unterschiede im Lösungsverhalten. Besonders auffällig ist hierbei, dass von den Gradientenverfahren auch die *steepest-descent*-Methode die vorgegebene Maximalzahl von Iterationen erreicht, ohne die geforderte Genauigkeit zu erzielen. Das *steepest-descent*-Verfahren zeigt also bei der Bestimmung von $\underline{p}^\delta$ ein verändertes Konvergenzverhalten und ist deutlich langsamer. Analog zu den bisherigen Betrachtungen erweisen sich die *minimal-error*-Methode und die verschiedenen nichtlinearen CG-Verfahren als nicht effizient, wobei hier keine prinzipiellen Änderungen festgestellt werden können. Als geeignete Algorithmen für diese Teilaufgabe erhalten wir das Gauß-Newton- und das Quasi-Newton-Verfahren. Beide Methoden benötigen ungefähr die gleiche Gesamtrechenzeit und sind diesbezüglich den anderen getesteten Verfahren mindestens um den Faktor 10 überlegen.

Nun vergleichen wir noch die Ergebnisse der drei Teilaufgaben untereinander. Für die Gauß-Newton- und Quasi-Newton-Methoden ergeben sich Unterschiede in den Iterationszahlen. Das Gauß-Newton-Verfahren benötigt zur Berechnung von $\underline{p}^\delta$ nur wenige Iterationen mehr als zur Bestimmung von $\underline{c}^\delta$ und $\underline{a}^\delta$. Bei der Quasi-Newton-Methode ist der Anstieg wesentlich größer auf circa die dreifache Anzahl von Iterationen. Der Zeitaufwand zur Berechnung von $\underline{p}^\delta$ ist etwas größer als die Summe der Rechenzeiten der Teilprobleme. Hinsichtlich der Genauigkeit der Lösung sind kaum Abweichungen zwischen den Teilaufgaben zu erkennen. Die Fehlerwerte der für $\underline{p}^\delta$ erzielten Ergebnisse liegen zwischen denen von $\underline{c}^\delta$ und $\underline{a}^\delta$.

Zusammengefasst ist festzustellen, dass die Gauß-Newton- und Quasi-Newton-Verfahren am besten zur Lösung des untersuchten inversen Problems geeignet

118465 Knoten.

Der so erhaltene Vektor $\underline{y}$ stellt den Fall ungestörter Messdaten dar. Um den Einfluss eines Datenfehlers zu betrachten, geben wir ein relatives Datenfehlerniveau $\delta_{rel} > 0$ vor und stören die exakten Daten $\underline{y}$. Hierzu wird ein Zufallsvektor $\underline{e} \in \mathbb{R}^n$ mit $N(0,1)$-verteilten Einträgen erzeugt und der gestörte Datenvektor $\underline{y}^\delta$ durch

$$\underline{y}^\delta := \underline{y} + \delta_{rel} \frac{\|\underline{y}\|_2}{\|\underline{e}\|_2} \underline{e}$$

definiert. Für den absoluten Datenfehler gilt dann

$$\delta = \delta_{rel} \left\|\underline{y}\right\|_2 .$$

Zur Lösung des inversen Problems mit den Daten $\underline{y}^\delta$ nutzen wir die oben erläuterten iterativen Algorithmen. Als Startwerte der Iterationsverfahren setzen wir hierzu, falls nicht anders erwähnt,

$$\underline{a}_0 = \underline{c}_0 := (3,3,3)^T .$$

Der Abbruch der Iterationsverfahren erfolgt im Schritt K_0, der durch das erstmalige Erfülltsein einer der drei folgenden Abbruchkriterien ermittelt wird. Entweder sei eine maximale Iterationsanzahl erreicht

$$K_0 = k_{max} = 500,$$

für die Norm des Residuums gelte

$$\left\|\Phi_n^{-1} F_n(\underline{p}_{K_0}) - \underline{y}^\delta\right\|_2 \leq 10^{-6}$$

oder die Norm des Suchschrittes ist mit

$$\left\|\underline{d}_{K_0}\right\|_2 \leq 10^{-6}$$

hinreichend klein. Dies sind sehr einfache Abbruchbedingungen, die bei schlechtgestellten inversen Problemen zu Schwierigkeiten führen. Liegt nämlich Instabilität der inversen Aufgabe vor, dann kann die falsche Wahl des Abbruchschrittes K_0 zu drastischen Lösungsfehlern führen. In solchen Fällen muss K_0 geeignet gewählt werden, was einer iterativen Regularisierung entspricht. Wir wollen hier aber möglichst einfach vorgehen, um Inkorrektheiten im betrachteten Identifikationsproblem auf die Spur zu kommen.

Weiterhin müssen wir beachten, dass die Vorwärtsaufgabe nur dann sinnvoll definiert ist, wenn die Elliptizität der Differentialgleichung (1) gewährleistet ist. Würden Iterierte $\underline{p}_k$ mit negativen Komponenten im $\underline{a}$-Anteil auftreten, so wäre die Differentialgleichung nicht mehr elliptisch. Die zur Lösung des Problems

benötigten Vorwärtsrechnungen liefern dann keine brauchbaren Ergebnisse. Um dies auszuschließen, nehmen wir für die Materialparameter eine positive untere Schranke $\varepsilon > 0$ an und fügen in die Rechnungen die folgende Modifikation ein. In jedem Iterationsschritt berechnen wir die Projektion

$$\tilde{\underline{p}}_k := \max\left\{\underline{p}_k, \underline{\varepsilon}\right\} \tag{20}$$

mit dem Vektor $\underline{\varepsilon} := (\varepsilon, \ldots, \varepsilon) \in \mathbb{R}^{m+l}$ als untere Schranke für $\underline{p}_k$. Anschließend wird die Iteration mit $\tilde{\underline{p}}_k$ anstelle von $\underline{p}_k$ fortgesetzt. Eine solche Vorgehensweise schmälert nicht die Übertragbarkeit der Modellrechnung auf praktische Probleme, da derartige Beschränkungen an Materialparameter natürlich sind. Zunächst setzen wir in den Testrechnungen die Schranke

$$\varepsilon := 0.05$$

ein. Der Frage, welchen Einfluss die Wahl von ε auf die Lösung des Identifikationsproblems hat, widmen wir uns am Ende der Fallstudie im Zusammenhang mit der Verwendung von a-priori-Informationen.

6.2 Effizienz der Lösungsalgorithmen

Am Anfang der Fallstudie untersuchen wir die erläuterten Algorithmen hinsichtlich ihrer Effizienz bei der numerischen Lösung des inversen Problems. Dazu ermitteln wir die Iterationszahl K_0 und zusätzlich die tatsächlich benötigte Rechenzeit, da der Rechenaufwand pro Iteration bei den verschieden Verfahren große Unterschiede aufweist.

Wir betrachten zuerst Beispielrechnungen mit exakten Daten, deren Ergebnisse in Tabelle 1 zusammengefasst sind. Als Randbedingung der Differentialgleichung wurde Variante 1 aus Abbildung 2 eingesetzt, was einer gemischten Neumann- und Dirichletrandbedingung entspricht. Die Spalte $\underline{x}$ in der Tabelle gibt an, welche der drei Teilaufgaben vorliegt. Als Kriterium zur Bewertung der Qualität der erzielten Ergebnisse wird der relative Lösungsfehler

$$\frac{\|\underline{x}^\delta - \underline{x}^\dagger\|_2}{\|\underline{x}^\dagger\|_2}$$

angegeben, wobei $\underline{x}^\delta$ jeweils durch $\underline{c}^\delta$, $\underline{a}^\delta$ oder $\underline{p}^\delta$ zu ersetzen ist. Der Index δ bezeichnet die Verwendung gestörter Daten $\underline{y}^\delta$. Weiterhin wurden die Testrechnungen für unterschiedlich feine FE-Diskretisierungen durchgeführt. Anhand der in Tabelle 1 aufgelisteten Daten können wir nun erkennen, welche Iterationsverfahren zur Bestimmung von $\underline{c}^\delta$, $\underline{a}^\delta$ und $\underline{p}^\delta$ geeignet sind.

Für die Berechnung von $\underline{c}^\delta$ erweisen sich die Gradientenverfahren nur teilweise als geeignete Methoden. Das *steepest-descent*-Verfahren ist im Vergleich zu den

Verfahren	$\underline{x}$	δ_{rel}	**7537 FE-Knoten** K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{x}^\delta - \underline{x}^\dagger\|_2}{\|\underline{x}^\dagger\|_2}$	**29793 FE-Knoten** K_0	Zeit	$\frac{\|\underline{x}^\delta - \underline{x}^\dagger\|_2}{\|\underline{x}^\dagger\|_2}$
Steepest-descent	$\underline{c}$	0.00	35	18.4	0.0057	31	73.5	0.0023
Minimal-error	$\underline{c}$	0.00	500	683.7	0.0052	149	953.1	0.0023
Newton-Verfahren	$\underline{c}$	0.00	4	5.9	0.0057	4	20.3	0.0023
Nichtlin. CG mit (17)	$\underline{c}$	0.00	76	25.9	0.0057	137	196.2	0.0023
Nichtlin. CG mit (18)	$\underline{c}$	0.00	500	153.7	0.0057	500	706.5	0.0146
Nichtlin. CG mit (19)	$\underline{c}$	0.00	500	151.6	0.0055	500	707.5	0.0498
Quasi-Newton	$\underline{c}$	0.00	16	8.0	0.0057	19	34.2	0.0023
Steepest-descent	$\underline{a}$	0.00	21	13.4	0.0165	19	59.2	0.0069
Minimal-error	$\underline{a}$	0.00	500	698.2	0.0152	91	556.3	0.0069
Newton-Verfahren	$\underline{a}$	0.00	5	7.2	0.0165	4	29.9	0.0069
Nichtlin. CG mit (17)	$\underline{a}$	0.00	78	26.1	0.0165	159	229.9	0.0069
Nichtlin. CG mit (18)	$\underline{a}$	0.00	500	151.8	0.0166	500	702.7	0.0393
Nichtlin. CG mit (19)	$\underline{a}$	0.00	500	150.9	0.0201	500	702.4	0.0960
Quasi-Newton	$\underline{a}$	0.00	22	14.0	0.0165	18	42.5	0.0069
Steepest-descent	$\underline{p}$	0.00	500	278.8	0.0146	-	-	-
Minimal-error	$\underline{p}$	0.00	500	688.6	0.0177	-	-	-
Newton-Verfahren	$\underline{p}$	0.00	7	15.9	0.0088	6	94.9	0.0038
Nichtlin. CG mit (17)	$\underline{p}$	0.00	428	136.6	0.0087	-	-	-
Nichtlin. CG mit (18)	$\underline{p}$	0.00	500	159.3	0.2514	-	-	-
Nichtlin. CG mit (19)	$\underline{p}$	0.00	500	159.6	0.3066	-	-	-
Quasi-Newton	$\underline{p}$	0.00	50	19.2	0.0089	59	95.4	0.0039

Tabelle 1: Ergebnisse für exakte Daten und RB-Variante 1

schnellsten Verfahren nicht wesentlich langsamer. Die *minimal-error*-Methode ist jedoch ungeeignet. Sie benötigt die längste Rechenzeit aller Verfahren, oder erreicht gar die von uns maximal zugelassene Iterationszahl $k_{max} = 500$. Auch die verschiedenen nichtlinearen CG-Algorithmen bringen keine schnellen Lösungen unseres Problems. Während die Varianten (18) und (19) zu hohe Iterationszahlen benötigen, ist die Variante (17) etwas besser. Jedoch bewirkt hier eine erhöhte Rechengenauigkeit mit dem feineren 29793-Knoten-Netz einen erheblich größeren Anstieg des Rechenaufwandes als bei anderen Verfahren, so dass auch die nichtlineare CG-Methode (17) als ungünstig anzusehen ist. Das schnellste aller betrachteten Verfahren ist das Gauß-Newton-Verfahren. Es benötigt mit Abstand die wenigsten Iterationen und zeigt auch die kürzesten Gesamtrechenzeiten aller Iterationsmethoden. Mit geringem Abstand folgt das Quasi-Newton-Verfahren, das ebenfalls effizient zum Ziel führt. Es bricht zwar erst nach etwa der vierfachen Iterationszahl wie das Gauß-Newton-Verfahren ab, braucht insgesamt aber nicht mehr als die 1.5-fache Rechenzeit. Diese Beobachtung zeigt deutlich, wie teuer