
**Ein Verfahren zur Lösung inverser
Wärmetransferprobleme mit implizitem
Vorwärtsoperator zur Modellierung des
Kühlprozesses von Stahlplatten**

Dissertation

zur Erlangung des Grades des
Doktors der Naturwissenschaften
der Fakultät für Mathematik und Informatik
der Universität des Saarlandes

von

Dimitri Rothermel



**UNIVERSITÄT
DES
SAARLANDES**

Saarbrücken
2020

Tag des Kolloquiums:

29.10.2020

Dekan:

Prof. Dr. Thomas Schuster

Vorsitzender:

Prof. Dr. Christian Bender

Berichterstatler:

Prof. Dr. Thomas Schuster

Prof. Dr. Dr. h.c. mult. Alfred K. Louis

Akademische Mitarbeiterin:

Dr. Anne Wald

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit behandeln wir ein inverses 1D Wärmetransferproblem zur Bestimmung oberflächenenthalpieabhängiger Wärmeflüsse aus inneren Enthaltpiemesungen. Das mathematische Modell, ein nichtlineares Anfangsrandwertproblem motiviert in dem ACC-Kühlprozess bei der Herstellung von TMCP-Stahl, beschreibt dabei die Evolution der räumlich und zeitlich abhängigen Enthalpie. Da eine Darstellung des Lösungsoperators aufgrund der Enthalpieabhängigkeit der Wärmeflüsse nur implizit angegeben werden kann, schlagen wir einen Parametrisierungsansatz durch Interpolation (PCHIP-Ansatz) vor, um die Implizität des Operators zu umgehen. Damit entkoppeln wir das Problem und erhalten einen explizit definierten Lösungs- und Vorwärtsoperator mit dem das inverse Problem nach klassischem Muster gelöst werden kann, indem wir iterativ ein Zielfunktional unter Nebenbedingungen minimieren. In dieser Arbeit implementieren wir dazu ein Quasi-Newton Projektionsverfahren (PQN), welches als ein Gradientenskalierungsverfahren die Kenntnis des Gradienten des Zielfunctionals voraussetzt. Nachdem wir die Existenz und Eindeutigkeit klassischer, sowie starker Lösungen für das zugrundeliegende Modell diskutiert und somit die Wohldefiniertheit des Lösungsoperators in den entsprechenden Räumen gerechtfertigt haben, leiten wir den angesprochenen Gradienten her. Abschließend testen wir den PCHIP-Ansatz und das PQN-Verfahren für das inverse Wärmetransferproblem und vergleichen die Ergebnisse zum gedämpften Landweber-Verfahren.

Abstract

In this work, we deal with an inverse 1D heat transfer problem in determining the surface enthalpy dependent heat fluxes from internal enthalpy measurements. The mathematical model, a nonlinear initial boundary value problem motivated in the ACC cooling process in the production of TMCP steel, describes the evolution of the spatially and temporally dependent enthalpy. Since a representation of the parameter-to-solution operator can only be given implicitly due to the enthalpy dependence of the heat fluxes, we propose a parameterization approach by interpolation (PCHIP approach) to overcome the implicitness of the operator. This way, we decouple the dependencies and obtain an explicitly defined parameter-to-solution (and forward) operator with which the inverse problem can be solved in the classical way by iteratively minimizing an objective functional under box-constraints. In this thesis, we implement a Projected Quasi-Newton (PQN) Method, which, as a gradient scaling method, requires the knowledge of the gradient of the objective functional. After discussing the existence and uniqueness of classical and strong solutions for the underlying model and thus justifying the well-definedness of the parameter-to-solution operator in the corresponding spaces, we derive the mentioned gradient. Finally, we test the PCHIP approach and the PQN method for the inverse heat transfer problem and compare the results to the attenuated Landweber method.

Danksagung

Zunächst möchte ich mich bedanken bei meinem Betreuer und Förderer Prof. Thomas Schuster. Zum einen für die Chance, die er mir an seinem Lehrstuhl gegeben hat, zum anderen, dass er mir während meiner Promotionszeit viel Freiraum ließ, zugleich aber stets ein offenes Ohr hatte und sich Zeit nahm, wenn ich seine Unterstützung in Anspruch genommen habe.

Bei Prof. Alfred K. Louis möchte ich mich bedanken, dass er sich bereit erklärt hat das Zweitgutachten zu erstellen. Dankbar bin ich auch, dass ich während des Mathematikstudiums einige seiner letzten Vorlesungen besuchen durfte, die mein Interesse an der angewandten Mathematik entfacht haben.

An unseren Projektpartner, die Dillinger Hütte, richte ich meinen Dank für das Vertrauen und die spannende Fragestellung, die mich in den letzten Jahren angetrieben hat. Ein großes Dankeschön gilt dabei Dr. Martin Peglow und Dr. Roland Schorr, die mich immer unterstützt haben und von denen ich auch persönlich sehr viel gelernt habe.

Meiner Arbeitsgruppe bestehend aus Dr. Anne Wald, Petra Schuster-Gentes, Clemens Meiser und Lukas Vierus, sowie insbesondere Frau Claudia Stoffer, danke ich für das stets angenehme Arbeitsklima, die freundschaftlichen Gespräche und den guten Kaffee.

Für das Korrekturlesen der Arbeit möchte ich mich vielmals bei Rebecca Klein und Inge Felten-Klein bedanken.

Danke auch an meine Eltern Natali und Jörg, die mein Leben geprägt haben, mich ermutigt haben Fragen zu stellen und mir immer den Rücken freihielten, sodass ich mich auf Schule und Studium konzentrieren konnte.

Zu guter Letzt schulde ich meiner geliebten Rebecca unendlichen Dank für ihre immerwährende Unterstützung. Ohne sie wäre diese Arbeit, so wie viele andere Dinge, nicht möglich gewesen.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung	1
Abstract	3
1 Einleitung	13
1.1 Nichtlineare inverse Probleme	13
1.2 IHTPs und Implizität des Vorwärtsoperators	17
1.3 Motivation	21
1.4 Ziele und Aufbau der Arbeit	27
2 1D Wärmeleitungsgleichung	29
2.1 Mathematische Modellierung	29
2.2 Existenz und Eindeutigkeit klassischer Lösungen	35
2.3 Starke Lösungen abstrakter Cauchy-Probleme	39
2.3.1 Der stationäre Fall	41
2.3.2 Der instationäre Fall	45
2.3.3 Existenz und Eindeutigkeit einer starken Lösung	47
3 Das inverse Wärmetransferproblem	57
3.1 Der Lösungsoperator S	59
3.2 Der Beobachtungsoperator Q	63
3.3 Der Gradient des Zielfunktional	65
3.3.1 Herleitung des Gradienten	67
4 Numerische Experimente	73
4.1 PQN-Verfahren	75
4.2 Experimentelles Setting	79
4.3 Numerische Resultate	83
5 Numerische Bestimmung des Wärmeleitverhaltens	89
Fazit und Ausblick	97
A PCHIPs	99
A.1 Konstruktion	99

A.2	Approximationseigenschaft	102
A.3	Gradientenberechnung	105
B	Gedämpftes Landweber-Verfahren	107
C	Tabelle physikalischer Größen	111
	Literaturverzeichnis	119

Abbildungsverzeichnis

1.1	Erhitzte Stahlplatte vor dem Walzgerüst, danach erfolgt die (ACC) Kühlung aus der Walzhitze, © Dillinger	21
1.2	Skizze einer ACC Kühlanlage	22
1.3	Wärmeflusskizze und Leidenfrostpunkt, wir nähern uns im Abkühlprozess von rechts nach links, d.h. von hohen zu niedrigen Oberflächentemperaturen . . .	23
1.4	Typische Länge-Dicke-Kombinationen liegen im Bereich zwischen (A) 30 m zu 30 mm (Faktor 1000), und (B) 10 m zu 200 mm (Faktor 50)	25
1.5	Minimalbeispiel mit 3 Thermoelementen und die jeweiligen Temperaturmessungen während einer Kühlung	26
1.6	Versuchsblech (vor der Kühlung) zur Generierung von realen Messdaten, Datenlogger mit Schutz gegen die Hitze angebracht, © Dillinger	27
4.1	Temperatur-zu-Enthalpie Transformation	79
4.2	Enthalpieleitfähigkeit $\alpha'(u)$ in Abhängigkeit der Enthalpie u	80
4.3	Exakte Wärme Flüsse, um u^δ zu simulieren	80
4.4	Approximierte Lösung von u^{ex}	81
4.5	Vergleich der exakten Wärme Flüsse mit PCHIP-Interpolanten zu (a) dem Anfangsparameter $\beta^{(0)}$, (b) dem optimierten Parameter $\beta^{(k_*)}$ für das PQN-Verfahren, (c) dem Parameter $\beta^{(K)}$ für das gedämpfte Landweber-Verfahren nach $K = 10000$ Iterationen	85
4.6	Logarithmus der Residuen für die ersten $k_* = 1028$ Iterationen und dem Schwellenwert $c_{stop} = \log(\rho\delta\ u^\delta\ _Y^2)$ für das Abbruchkriterium (4.2)	85
4.7	Algorithmus zur Lösung von (3.23) mithilfe des PQN-Verfahrens	87
5.1	Ausschnitt der Stahlplatte mit 3 Thermoelementen, vgl. Abbildung 1.4	90
5.2	Gemessene (und interpolierte) Temperaturen	90
5.3	Exakte Materialparameter k^{ex} , $C^{ex} \in \mathcal{C}^1(\Theta)$	92
5.4	Vergleich der Startwerte und den exakten (simulierten), sowie optimierten Materialparametern im Temperaturintervall $\tilde{\Theta}$	93
5.5	Vergleich exakter und optimierter Temperaturleitfähigkeiten	94
5.6	Vorwärtsrechnung mit physikalisch plausiblen Literaturwerten kann die Kern-Messung nicht reproduzieren	95
5.7	Vorwärtsrechnung mit optimierten Werten, Kern-Messung kann reproduziert werden, Materialparameter sind physikalisch plausibel.	96
A.1	Hermite-Basisfunktionen (A.1) mit $h_i := 1$	100

A.2	Datenpunkte (x_i, f_i) mit $x_i = i - 1$ und $f_i \in [0, 10]$ für $i = 1, \dots, 11$, Vergleich PCHIP vs. Kubische Splines	101
A.3	Funktion $f(x)$ (blau gepunktet) vs. PCHIP Interpolanten $p^{(i)}(x)$ (schwarz) für $i = 1, \dots, 4$; rote Regionen entsprechen $X^{(i)}$ für $\varepsilon = 0.2$	104

1. Einleitung

Wir möchten an dieser Stelle die Aufgabenstellung der Arbeit motivieren und abschließend einen Ausblick der folgenden Kapitel angeben. Zunächst gehen wir kurz auf nichtlineare inverse Probleme im Allgemeinen und inverse Wärmetransferprobleme im Speziellen ein.

1.1 Nichtlineare inverse Probleme

Die Verwendung von nichtlinearen Modellen ist oft unumgänglich, um Prozesse und Zusammenhänge in der Natur, Technik oder etwa der Finanzwelt adäquat zu beschreiben. So wird typischerweise ein Bezug zwischen einer Ursache $x \in X$ und deren Wirkung $y \in Y$ durch die Gleichung

$$F(x) = y \tag{1.1}$$

mit dem nichtlinearen Vorwärtsoperator $F : \mathcal{D}(F) \subset X \rightarrow Y$ beschrieben.

Das *direkte Problem* erfordert die Auswertung einer bekannten Ursache $x \in X$, um die Wirkung $y \in Y$ zu erhalten. Dies geschieht zum Beispiel, je nach Problem, durch das Lösen eines Integrals, eines Randwertproblems oder sogar einer Evolutionsgleichung. Oft gibt es dabei keine analytische Lösung, sodass auf numerische Lösungsverfahren zurückgegriffen werden muss.

Umgekehrt sprechen wir vom *inversen Problem*, wenn die Rekonstruktion der Ursache $x \in X$ zu einer beobachteten Wirkung $y \in Y$, in dem Zusammenhang auch *Daten* genannt, erforderlich ist. Im Kontext von partiellen Differentialgleichungen spricht man dabei auch oft von Parameteridentifikationsproblemen, siehe [38], [39]. Charakteristisch bei solchen Problemen ist, dass die Daten aus Messverfahren gewonnen werden, welche Messfehler aufweisen. Oft quantifiziert man dabei den Messfehler durch den Rauschlevel $\delta > 0$. Die direkte Inversion der Operatorgleichung (1.1) für verrauschte Daten y^δ statt y mit

$$\|y - y^\delta\|_Y^2 \leq \delta \tag{1.2}$$

führt zu unbrauchbaren Ergebnissen, falls das inverse Problem *schlecht gestellt* ist.

Das klassische Konzept von Schlechtgestellttheit nach Hadamard ([31], [53], [43]) für lineare Operatoren läuft dabei auf den folgenden entscheidenden Aspekt hinaus: Der inverse Operator ist nicht stetig, d.h. die Lösung hängt nicht stetig von den Daten ab. Im Wesentlichen gilt dieses Problem auch für nichtlineare Operatoren, wobei dort das Konzept auf *lokale Schlechtgestellttheit* verallgemeinert wird, siehe [59]. Um trotz verrauschter Daten eine stabile Lösung des inversen Problems zu erhalten, werden Regularisierungsmethoden benötigt.

Klassische Verfahren für nichtlineare inverse Probleme sind zum Beispiel die Tikhonov-Phillips-Regularisierung, das Verfahren der approximativen Inverse und insbesondere iterative Methoden wie das nichtlineare Landweber-Verfahren, sowie Verfahren vom Newton-Typ, siehe [23], [52], [40], [65]. Der iterative Prozess besteht im Minimieren des Zielfunktional

$$f(x) = \frac{1}{2} \|F(x) - y^\delta\|_Y^2. \quad (1.3)$$

Ausgehend von einem Startwert $x^{(0)}$ wird die Iterationsvorschrift

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k p_k \quad (1.4)$$

durchgeführt, wobei sich die Berechnung der Schrittweite $\lambda_k > 0$ und der Abstiegsrichtung p_k je nach Verfahren stark unterscheidet. Muss der Parameter $x \in X$ noch Nebenbedingungen genügen, so sind zusätzliche Projektionsschritte notwendig. Bezüglich der Abstiegsrichtung wird zum Beispiel für das klassische Landweber-Verfahren in jedem Iterationsschritt k die negative Gradientenrichtung des Zielfunktional (1.3) berechnet, also

$$p_k = -\nabla f(x^{(k)}) = -F'(x^{(k)})^*(F(x^{(k)}) - y^\delta), \quad (1.5)$$

wobei F' die sogenannte Fréchet-Ableitung und $(F')^*$ der zugehörige adjungierte Operator ist, vergleiche [40], [65]. Newton-Verfahren oder Quasi-Newton-Verfahren nutzen die Gradientenrichtung zusammen mit Krümmungsinformationen (Hessematrix) um eine Suchrichtung zu generieren. Die Schrittweitensteuerung basiert dabei oft auf Liniensuchalgorithmen wie der *Backtracking Liniensuche*, siehe [3].

Wie in [32] und [40] für die Landweber-Methode oder in [74] für die sogenannten Trust-Region Methoden diskutiert, ist eine Konvergenz nur dann zu erwarten, wenn die Iteration (1.4) entsprechend gestoppt wird, z.B. mit Morozovs a-posteriori Dis-

krepanzprinzip, siehe [56], [64]. Dabei wird die Iteration bis zum Abbruchindex k_* durchgeführt, sodass

$$f(x^{(k_*)}) \leq \rho \delta < f(x^{(k)}) \quad (1.6)$$

für alle $k < k_*$ und $\rho > 1$ gilt.

1.2 IHTPs und Implizität des Vorwärtsoperators

Inverse Wärmetransferprobleme, auch *Inverse Heat Transfer Problems* (IHTPs) im Englischen genannt, erlebten ihre Geburtsstunde bereits Ende der 50er Jahre mit den ersten Weltraumprogrammen der UdSSR und der USA. Ein typisches Problem war etwa die Hitzeschilderwärmung beim Wiedereintritt von Raumfahrzeugen in die Erdatmosphäre, die so stark war, dass keine Messsensoren auf der Oberfläche des Schildes angebracht werden konnten. Um trotzdem Informationen zu gewinnen, wurden Messsensoren unter der Oberfläche eingebaut, um auf die Oberflächentemperatur rückzuschließen. Aus einer beobachteten Wirkung (Temperatur im Schildinneren) wurde die Ursache (Temperatur an Oberfläche des Schildes) bestimmt - ein inverses Wärmetransferproblem und ein nichtlineares zugleich. Aufgrund der enormen Temperaturentwicklungen kommt es zu Phasenverschiebungen und thermischen Ausdehnungen im Material, was schließlich zu der Modellierung von temperaturabhängigen Materialparametern führt.

Weitere Beispiele für inverse Wärmetransferprobleme sind etwa die Bestimmung von Wärmeflüssen und ebensolcher Materialparameter zur Charakterisierung des Wärmeübergangs an den Grenzflächen bzw. Wärmeleitverhaltens im Material aus inneren Temperaturmessungen. Dabei werden solche Wärmetransferprobleme in der oft englischsprachigen Literatur weiter klassifiziert. In [58] etwa unterscheidet der Autor zwischen *IHTP of conduction* (Wärmeleit-), *IHTP of convection* (Wärmeübergangs-), *IHTP of surface radiation* (Abstrahlungs-) oder auch *IHTP of phase change* (Phasenumwandlungsproblemen).

(Allgemeiner klassifiziert man auch bezüglich des zugrundeliegenden Anfangsrandwertproblems: *IHTP of boundary conditions*, *initial condition*, *source term* etc., also inversen Randwert-, Anfangswert- und Quelltermproblemen.)

Lange glaubte man, dass schlecht-gestellte inverse Probleme schlicht unlösbar sind bzw. dass die Lösungen keine praktische Bedeutung hätten. Infolgedessen verloren Mathematiker und Ingenieure eine Zeit lang das Interesse an inversen Wärmetransferproblemen. Die allgemeine Regularisierungstheorie von Tikhonov ([70], [69]) als Initialzündung und insbesondere auch die Monographien zu inversen Wärmetransferproblemen von Alifanov ([1]) und Beck ([4]) entfachten das Interesse von Neuem.

Heutzutage sind inverse Wärmetransferprobleme, auch aufgrund der zusätzlich gestiegenen Rechenleistung von Computern, nicht mehr aus der Wissenschaft wegzudenken. Speziell in Anwendungsbereichen, in denen praktische Experimente besonders zeitintensiv oder mit hohen Kosten verbunden sind, ist der Wunsch nach einem 'digitalen Zwilling' ([9]) und die Nachfrage nach numerischen Simulationen und inverser Modellierung groß. Einige wenige Anwendungsbereiche sind: Raketentechnik, Motorentechnik, chemische Verfahrenstechnik, Nuklearforschung oder Astrophysik.

Ein weiteres Anwendungsbeispiel, die *Metallurgie*, ist für diese Arbeit besonders erwähnenswert. Dabei handelt es sich um die Wissenschaft, die das physikalische und chemische Verhalten von metallischen Elementen und ihren Legierungen untersucht, siehe [21]. Aufgrund der oft ganz spezifischen Aufgabenstellung erfordern inverse Wärmetransferprobleme eine eigenständige Modellierung, die es zu einer schwierigen, aber auch gleichzeitig spannenden Aufgabe macht.

Wegen des hohen Individualitätsgrades überrascht es nicht, dass es bereits eine Vielzahl von Publikationen bezüglich inverser Wärmetransferprobleme in verschiedensten Zusammenhängen (Existenz und Eindeutigkeitsaussagen, Numerische Verfahren, Konvergenzuntersuchungen, Regularisierungstechniken) gibt, wobei oft von unterschiedlichen Modellen, Messdatensätzen und Suchgrößen ausgegangen wird. Im Folgenden möchten wir nur ein paar Beispiele von Forschungsergebnissen in diesem Bereich nennen, um die Vielfalt zu verdeutlichen:

In [22] beweisen die Autoren die Eindeutigkeit von Lösungen des inversen Problems bezüglich eines Modells mit konstanten Neumann-Randbedingungen und einer einzelnen Randtemperaturmessung, indem sie Cannon's Eindeutigkeitsergebnis (siehe [16]) für den instationären Fall erweitern. Weitere einfache Modelle, unter der Voraussetzung homogener Anfangstemperaturen und konstanten Temperaturleitfähigkeiten, werden diesbezüglich auch von Cannon et al. diskutiert, siehe [15]. Weitere Forschungsergebnisse zur Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen, sowie einige numerische Analysen zum Abschreckprozess für ein Modell mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen finden sich in [60], [68] und den darin enthaltenen Referenzen.

Inverse Wärmeleitprobleme ('inverse heat *conduction* problems') umfassen ebenfalls unterschiedliche Modelle, bei denen die Materialparameter nur von der Raumvariablen

([5], [26]) oder nur von der Zeitvariablen abhängen, siehe [36]. Auch die Bestimmung von zeitlich *und* räumlich variierenden Materialparametern (in dem Fall Diffusionskoeffizienten) sind üblich, siehe [44] und die darin enthaltenen Verweise. Methoden zur Lösung der inversen Wärmeleitprobleme sind ebenfalls zahlreich vertreten. In [33] zum Beispiel verwenden die Autoren eine auf dem Verfahren der konjugierten Gradienten basierende Gleichungsfehlermethode ('Equation error method'), indem sie ein System von linearen Operatorgleichungen für den Diffusionsparameter lösen. Cui et al. ([18]) studieren die Sensitivitätsanalyse der ihnen zugrundeliegenden gradientenbasierten Verfahrensweise unter Verwendung der Complex-Variable-Differentiation Methode (CVDM). Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass das Verfahren in der Lage ist die temperaturabhängigen Materialparameter, d.h. die Koeffizienten von Polynomen zweiter Ordnung, zu identifizieren. Anstatt die Materialparameter drastisch zu vereinfachen (durch z.B. Polynome zweiter Ordnung), haben die Autoren in [34] ein Modell mit erhöhten Freiheitsgraden untersucht, indem sie die temperaturabhängigen Materialparameter zu räumlich und zeitlich abhängigen Funktionen transformiert haben.

Bei inversen Wärmeübergangsproblemen ('inverse heat *convection* problems') zur Bestimmung von Wärmeflüssen, variieren die Modelle ebenfalls je nach Anwendung. Die Wärmeflüsse (oder Variationen davon) sind dabei oft nur von der Zeitvariablen, nur von der Raumvariablen oder von beiden abhängig, vgl. [67], [35], [78]. Modelle mit temperatur- oder enthalpieabhängigen Wärmeflüssen, um etwa Leidenfrost-Effekte abzubilden, sind zwar keine Neuheit, aber doch eher eine Seltenheit. Erwähnenswert diesbezüglich sind die mathematischen Modelle der Forschungsgruppe um Engl et al. zur Bestimmung optimaler Kühlstrategien im Stranggussverfahren von Stahl mit variabler Gießgeschwindigkeit, siehe [24], [25], [8], [30]. Im Speziellen verweisen wir auch auf die Arbeit [46], in der die Autoren die optimale Ansteuerung eines Laminarkühlsystems untersuchen. Dabei haben alle vorangegangenen Referenzen etwas gemeinsam: Die Wärmeflüsse hängen zwar von der Temperatur bzw. Enthalpie ab, im zugrundeliegenden inversen Wärmetransferproblem sind diese Funktionen aber als bekannt vorausgesetzt.

Die Bestimmung temperatur- oder enthalpieabhängiger Wärmeflüsse in Bezug auf inverse Wärmetransferprobleme scheint in der aktuellen Literatur wenig untersucht zu sein, obwohl das Leidenfrost-Phänomen ein bekanntes Problem ist und mehr Aufmerksamkeit erhält, wenn es um experimentelle Forschung für verschiedene Kühlspezifika-

tionen geht, vgl. [29], [7].

Der Grund dafür ist der folgende: Typischerweise repräsentiert der Vorwärtsoperator F den Ursache-zu-Wirkung Zusammenhang. Eine Ursache x wird einer Wirkung y zugeordnet. Ist die Ursache selbst eine Funktion von der Wirkung, so ist eine explizite Darstellung einer Operatorgleichung der Form (1.1) schlicht nicht möglich. Vielmehr ist der Zusammenhang implizit gegeben, bei entsprechender Definition etwa durch

$$F(x(y), y) = 0. \quad (1.7)$$

Die Behandlung solcher inverser Probleme nach klassischem Muster ist nicht möglich. Üblicherweise behilft man sich, indem man die Darstellung $x(y)$ derart vereinfacht, dass durch eine Entkopplung wieder eine explizite Darstellung möglich ist. Als Beispiel erwähnen wir den Polynomialansatz

$$x(y) = \sum_{i=1}^n x_i y^{i-1}. \quad (1.8)$$

der so auch in inversen Wärmetransferproblemen Anwendung findet, siehe [54], [18]. So kann die Implizität umgangen werden und statt (1.7) definiert man den Vorwärtsoperator explizit durch

$$F(\mathbf{x}) = y, \quad (1.9)$$

wobei $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)^T \in \mathbb{R}^n$. Hinsichtlich inverser Probleme sind solche Darstellungen jedoch problematisch und meist nur in einem simulierten Setting zu gebrauchen. Wir diskutieren diesen Zusammenhang in Kapitel 3 und schlagen dort den PCHIP-Interpolationsansatz vor, mit dem wir die Implizität überwinden können ohne die Struktur der Lösung einzuschränken.

1.3 Motivation

Ein Optimalsteuerungsproblem

Die zugrundeliegende Aufgabenstellung dieser Arbeit findet Motivation in einem Optimalsteuerungsproblem ([80], [72]) in der Stahlindustrie, insbesondere im sogenannten ACC (**A**ccelerated **C**ooling, s. [20]) Kühlprozess. Dabei sollen Kontrollparameter so eingestellt werden, dass gewisse Strategieparameter erfüllt sind.

Der Zusammenhang ist hierbei der folgende: Der ACC Prozess ist eine Schlüsseltechnologie bei der Herstellung von TMCP (**T**hermo-**M**echanically **C**ontrolled **P**rocessed, s. [57]) Stahlplatten. Dabei werden solche Platten zunächst einem Walzprozess und anschließend einer starken Kühlung unterzogen.



Abbildung 1.1: Erhitzte Stahlplatte vor dem Walzgerüst, danach erfolgt die (ACC) Kühlung aus der Walzhitze, © Dillinger

Diese thermische Behandlung führt zu einer Gefügeveränderung und komplexen Mikrostruktur im Material, was eine erhöhte Festigkeit und Bruchzähigkeit zur Folge hat, siehe [71], [49]. Dabei wird ebendiese Mikrostruktur stark durch die Temperaturentwicklung während des Kühlprozesses sowie durch Eigenspannungen und Ebenheitsverformungen beeinflusst. Durch das Studium des Zusammenhangs der Temperaturentwicklung und den Werkstoffeigenschaften können metallurgisch fundierte Prognosen getroffen werden. Die Einstellung eines vorgegebenen Temperaturverlaufs (Strategieparameter) durch die richtige Wahl der Kontrollparameter, so die Idee, führt dann zum gewünschten Produkt. In Hinblick auf das Plattendesign und die Verarbeitung des Materials ist von daher die vollständige Kontrolle der Temperaturentwicklung erstrebenswert. Sie kann nur durch eine thermophysikalische Charakterisierung des Materials und des Kühlsystems erreicht werden. Wir möchten im Folgenden die Wahl der Kontrollparameter genauer erläutern. Dazu skizzieren wir eine typische ACC Kühlanlage, siehe Abbildung 1.2.

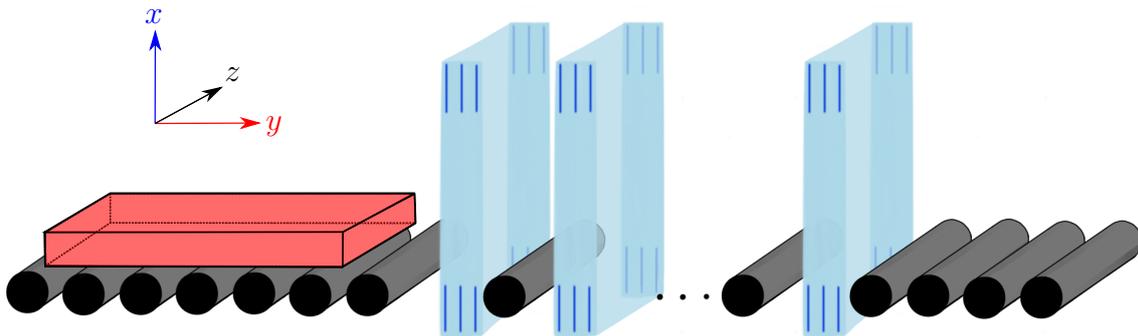


Abbildung 1.2: Skizze einer ACC Kühlanlage

Das Kühlverfahren kann dann wie folgt vereinfacht beschrieben werden. Mehrere Transportrollen befördern die noch heiße Stahlplatte (ca. 1000 – 1200 K) in y -Richtung zur Kühlanlage, welche aus mehreren Wasserkühlzonen besteht.¹ Der Stahl wird in jeder solcher Zonen vollflächig jeweils oben und unten in Bezug auf die $y-z$ -Ebene mit Wasser beaufschlagt. Die Abkühlodynamik an einer heißen Grenzfläche ist dabei aufgrund auftretender Leidenfrost-Effekte hoch komplex, siehe [73].

¹Durch die Punkte in der Abbildung ist angedeutet, dass es sich in der Tat um mehr als nur 3 Wasserkühlzonen handelt. Eine typische Konfiguration einer z.B. 30 m langen Kühlanlage umfasst 30 Kühlzonen.

Der Effekt lässt sich wie folgt vereinfacht erklären. Wegen der heißen Oberfläche der Stahlplatte bildet sich zunächst eine Dampfschicht, die den direkten Kontakt mit der Kühlflüssigkeit verhindert. Diese Dampfschicht hemmt den Wärmeentzug zunächst und bricht erst bei Unterschreitung einer kritischen Oberflächentemperatur (Leidenfrostpunkt, [6]) ein. Der nun direkte Kontakt der noch heißen Platte zur Kühlflüssigkeit (Wasser bei Raumtemperatur) führt schließlich zu einem sprunghaften Anstieg im Wärmefluss und somit einem stärkeren Wärmeentzug, siehe Abbildung 1.3. Das erneute Abklingen des Wärmeflusses lässt sich darauf zurückführen, dass die Oberfläche die Temperatur des Kühlwassers annimmt und mit der Zeit kein effektiver Wärmeentzug mehr vorhanden ist. Die gesamte Temperaturentwicklung während des Kühlpro-

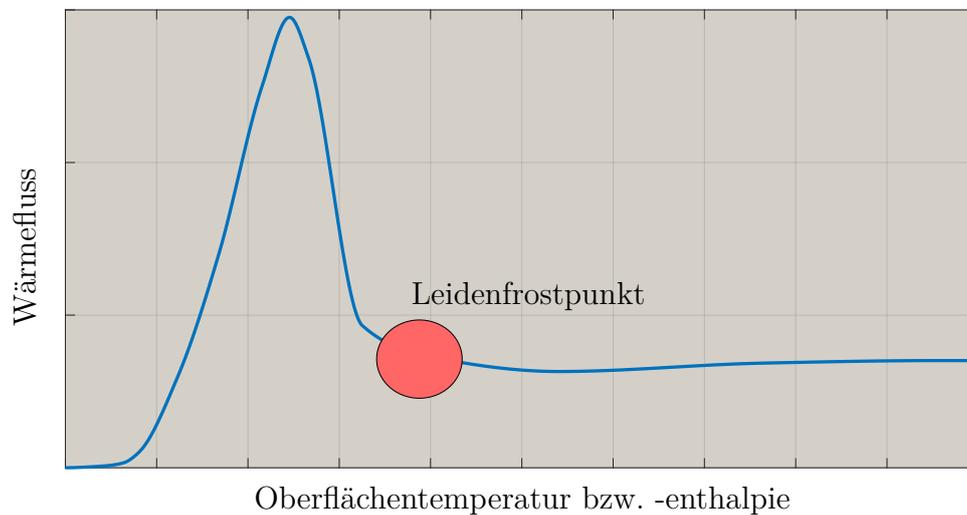


Abbildung 1.3: Wärmeflusskurve und Leidenfrostpunkt, wie wir nähern uns im Abkühlprozess von rechts nach links, d.h. von hohen zu niedrigen Oberflächentemperaturen

zesses hängt dabei auch wesentlich vom gefahrenen Kühlplan ab. Ein Kühlplan wird (vereinfacht) spezifiziert durch

- (i) die Vorschubgeschwindigkeit v der Stahlplatte, sowie
- (ii) die Wasserbeaufschlagungsmengen w aller Kühlzonen.

Im Sinne des angesprochenen Optimalsteuerungsproblems sind dies die sogenannten Kontrollparameter. Zu gegebenen Strategieparametern (z.B. Abkühlrate, Endkühltemperatur, etc.), welche metallurgisch gewisse Werkstoffeigenschaften implizieren, soll also ein Kühlplan (v, w) bestimmt werden.

Nicht untypisch für solche Optimalsteuerungsprobleme, müssen auch in unserem Fall sowohl die Kontroll- als auch die Strategieparameter Nebenbedingungen erfüllen. Die Kontrollparameter, beschränkt von der maximalen Vorschubgeschwindigkeit und den maximalen Wasserbeaufschlagungsmengen, erfüllen klassische Box-Constraints, während die Strategieparameter einer physikalischen Differentialgleichung, genauer einem nichtlinearen Anfangsrandwertproblem, genügen müssen, siehe Kapitel 2.

Problematisch ist hierbei, wenn Funktionen des Anfangsrandwertproblems unbekannt sind. Deswegen möchten wir (für einen festen Kühlplan) eine Vorgehensweise entwickeln, die diese Funktionen aus inneren Temperaturmessungen identifiziert. Insbesondere handelt es sich dabei um die Bestimmung des Wärmeübergangsverhalten an den Grenzflächen, speziell die Oberflächenenthalpieabhängigkeit der Wärmeflüsse.

Im Folgenden möchten wir das eindimensionale Setting des Modells motivieren.

Messaufbau für 1D Modell

In der Regel sind die Stahlplatten sehr dünn (x -Richtung) im Vergleich zu ihrer Länge (y -Richtung) und Breite (z -Richtung), siehe Abbildung 1.4 für eine verzerrte Darstellung der Abmessungen. Eine Wasserbeaufschlagung der $y-z$ -Grenzflächen bei solchen

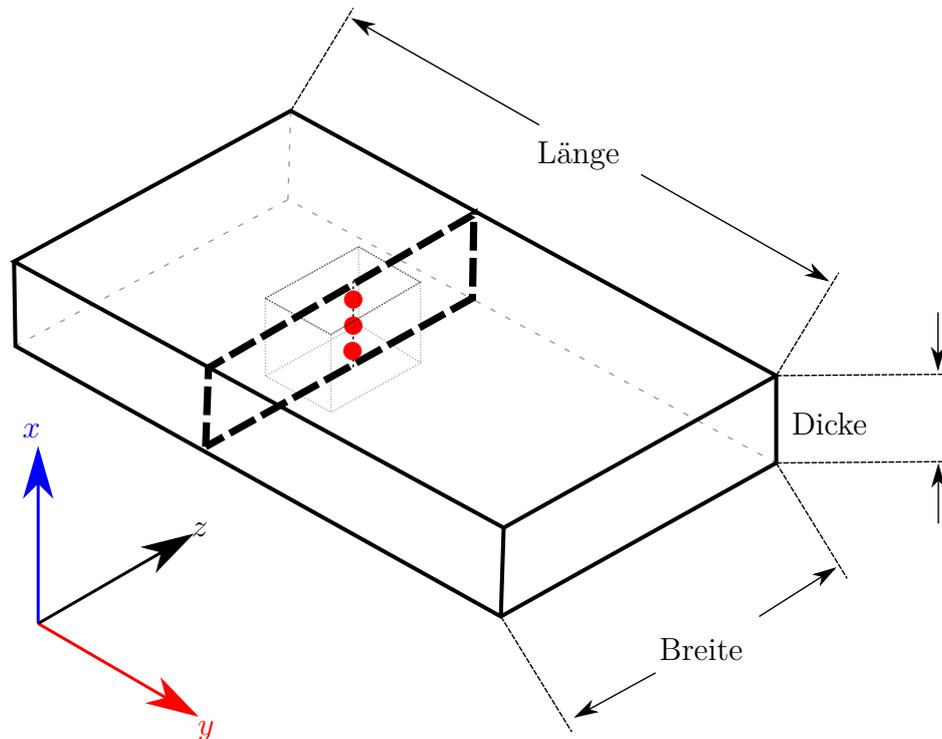


Abbildung 1.4: Typische Länge-Dicke-Kombinationen liegen im Bereich zwischen (A) 30 m zu 30 mm (Faktor 1000), und (B) 10 m zu 200 mm (Faktor 50)

Stahlplatten führt offensichtlich zu einem Wärmeentzug, der hauptsächlich über die Dicke in x -Richtung abgetragen wird. Da jede Stelle der Platte in Längsrichtung y durch die ACC Kühlanlage fährt, also insbesondere die gleiche Kühlung erfährt, können wir ein dimensionsreduziertes Modell betrachten, bei dem die Temperaturverteilung von 3D Stahlplatten in der ACC Kühlung durch eine 1D Wärmeleitungsgleichung über die Dicke der Platte beschrieben werden kann. Um für ein solches 1D Modell Daten zu generieren, werden Temperaturmessungen während des Kühlprozesses benötigt, die bestenfalls mehrere Messtiefen (für verschiedene x -Werte) abgreifen.

Wie in Abbildung 1.4 durch die roten Punkte angedeutet, geschieht das durch das Einsetzen von sogenannten Thermoelementen.

Dabei ist hier nur exemplarisch die Mindestanzahl von drei Thermoelementen skizziert, die für das Setting dieser Arbeit empfohlen werden. In dem Beispiel messen zwei

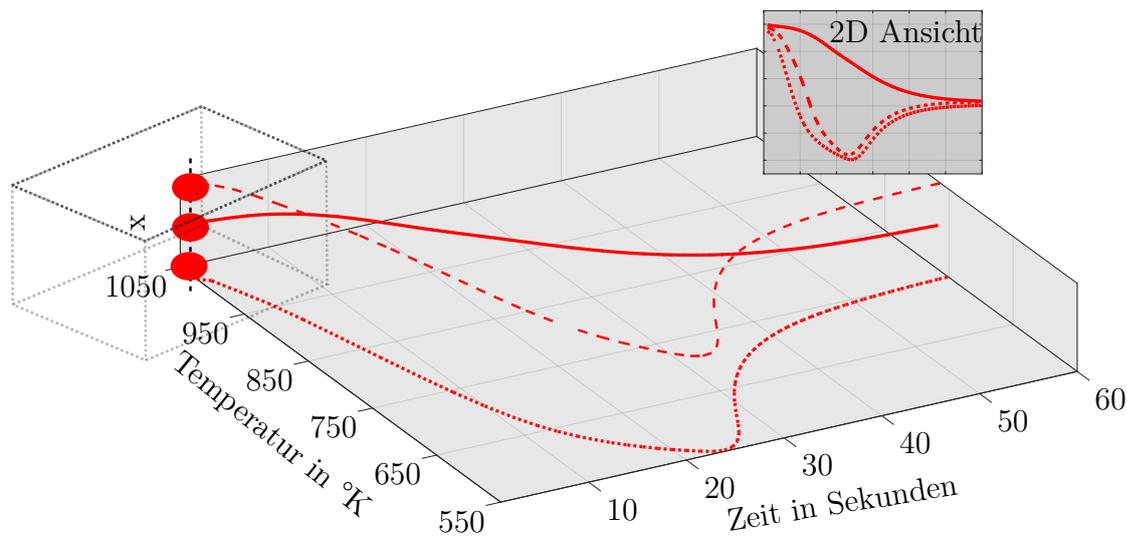


Abbildung 1.5: Minimalbeispiel mit 3 Thermoelementen und die jeweiligen Temperaturmessungen während einer Kühlung

oberflächennahe Thermoelemente die unmittelbare Temperatureuswirkung bei Wasserbeaufschlagung (0 – 25 s) und der anschließenden Erholung an der Luft (25 – 60 s), während eine Kernmessung die zeitverzögerte Kühlung im Inneren des Materials aufzeichnet, siehe Abbildung 1.5.

Die Instrumentalisierung einer Stahlplatte zur Generierung von realen Messdaten ist in Abbildung 1.6 verdeutlicht. Ein Coupon mit Thermoelementen wird in die Mitte der Stahlplatte eingesetzt und die Temperaturen werden im Datenlogger aufgenommen.

Im Allgemeinen modellieren wir in dieser Arbeit $d > 0$ Thermoelemente, die in den Messtiefen x_j für $j = 1, \dots, d$ platziert werden. Jedes Thermoelement misst dabei die Temperatur zum Zeitpunkt t_i für $i = 1, \dots, m$. Die Messdaten können anschließend in einer Temperatur- bzw. Enthalpiematrix¹ $u^\delta \in \mathbb{R}^{d \times m}$ zusammengefasst werden.

¹Wie wir später sehen werden, ist die Enthalpie in unserer Arbeit lediglich eine Transformierte der Temperatur.



Abbildung 1.6: Versuchsblech (vor der Kühlung) zur Generierung von realen Messdaten, Datenlogger mit Schutz gegen die Hitze angebracht, © Dillinger

1.4 Ziele und Aufbau der Arbeit

In Kapitel 2 modellieren wir zunächst, zusammen mit den Anfangs- und Randbedingungen, die enthalpieabhängige 1D Wärmetransfergleichung, welche die wichtigsten Phänomene des ACC Kühlprozesses mit einbezieht. Anschließend untersuchen wir die Existenz und Eindeutigkeit von Enthalpielösungen u des vollständigen Anfangsrandwertproblems (ARWPs), indem wir verschiedene Ansätze verfolgen. Zum einen untersuchen wir klassische Lösungen im 1D Setting unter Anwendung der von Ladyzhenskaya et al. ([45]) vorgeschlagenen Theorie. Zum anderen prüfen wir die Existenz sogenannter starker Lösungen, indem wir das ARWP in ein abstraktes Cauchy-Problem transformieren und den von Brezis in [10] eingeführten Ansatz der pseudomonotonen Operatoren studieren. Dies führt zu einer Lösung $u \in \mathcal{U}$ in einem schwächeren Sinne, bei dem die Anforderungen an die am ARWP beteiligten Funktionen nicht so streng sind wie bei klassischen Lösungen. Insbesondere spezifizieren wir den Lösungsraum \mathcal{U} in diesem Kapitel.

In Kapitel 3 gehen wir auf das inverse Wärmetransferproblem zur Bestimmung der unbekanntes Wärmeflüsse ein. Wir definieren den Beobachtungsoperator \mathcal{Q} und den explizit definierten Lösungsoperator S , indem wir dessen Implizität durch einen Parametrisierungsansatz auflösen, ohne das Modell einzuschränken. Dabei motivieren wir den PCHIP-Interpolationsansatz und vergleichen diesen mit anderen Parametrisierungsansätzen. Anschließend definieren wir das (unter Nebenbedingungen) zu minimierende Zielfunktional und bestimmen eine Vorschrift zur Berechnung des Gradienten. Zur Bestimmung des sogenannten *adjungierten Zustands* leiten wir eine auf der Lösung eines Endwertproblems basierende Integraldarstellung her.

Das Ziel in Kapitel 4 ist die Implementierung des von Kim et al. ([42]) vorgeschlagenen iterativen Quasi-Newton-Projektionsverfahrens, auch PQN-Verfahren genannt. Wir testen das PQN-Verfahren, sowie das gedämpfte Landweber-Verfahren, auf Basis des hergeleiteten Gradienten des Zielfunktional, indem wir ein experimentelles Setting festlegen, verrauschte Messdaten generieren und das inverse Wärmetransferproblem lösen. Wir schließen das Kapitel mit einem Vergleich der numerischen Resultate.

Zusätzlich geben wir in Kapitel 5 eine Kurzzusammenfassung eines weiteren inversen Wärmetransferproblems an, welches auf die Grundidee des Auflöserns eines implizit definierten Lösungsoperators durch geschicktes Parametrisieren zurückgreift. Speziell handelt es sich dabei um die Bestimmung des Wärmeleitverhaltens im Inneren des Körpers, insbesondere den temperaturabhängigen Materialparametern. Dieses Kapitel ist heuristisch motiviert und dient lediglich zur Vermittlung der Idee und des numerischen Ansatzes. Wir schließen die Arbeit mit einem Fazit und Ausblick für zukünftige Forschung.

2. 1D Wärmeleitungsgleichung

2.1 Mathematische Modellierung

In diesem Kapitel möchten wir ein 1D Wärmetransfermodell herleiten, das zwar die ACC Kühlanlage nicht vollständig abdeckt, aber zumindest die charakteristischen Phänomene mit einbezieht. Dazu zählt insbesondere

- (i) die Phasenumwandlung des Materials aufgrund hoher Temperaturgradienten,
- (ii) sowie die Leidenfrost-Effekte an den gekühlten Rändern.

Wir begegnen beiden Punkten durch die Einführung temperaturabhängiger Funktionen, wobei wir uns auf fundamentale Erhaltungssätze der Thermodynamik berufen, siehe [37].

Sei $L > 0$ die Dicke der Stahlplatte und $T > 0$ die Untersuchungszeit des Kühlvorgangs. Außerdem sei

$$\theta : I \times \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}_+ \tag{2.1}$$

die Temperatur im Raumpunkt $x \in \Omega := (0, L)$ zur Zeitvariablen $t \in I := [0, T]$. Mit $\bar{\Omega}$ bezeichnen wir wie üblich den Abschluss von Ω . Der Rand $\partial\Omega$ von Ω besteht dabei aus den zwei Punkten $x = 0$ und $x = L$, die wir mit der Plattenunterseite bzw. -oberseite in Verbindung setzen.

Mit

$$u(t, x) := \hat{C}(\theta(t, x)) := \int_{\underline{\theta}}^{\theta(t, x)} C(\xi) \, d\xi > 0, \tag{2.2}$$

definieren wir die Enthalpie, wobei in unserem Fall $\underline{\theta} = 273.15 \text{ K}$ ($= 0^\circ \text{ C}$) ist. Hierbei ist $C : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$ die temperaturabhängige Wärmekapazität, also das Produkt aus Materialdichte und spezifischer Wärmekapazität. In der Hinsicht ist die Enthalpie eine Temperatur-Transformierte (via \hat{C}) und ein Maß für die gespeicherte Energie zum Zeitpunkt t im Punkt x .

Da $\hat{C}' = C(\theta) > 0$, existiert die Enthalpie-zu-Temperatur-Abbildung \hat{C}^{-1} mit

$$\theta = \hat{C}^{-1}(u). \quad (2.3)$$

Die gespeicherte Wärmemenge $Q(t)$ in einem beliebigen Teilintervall $[a, b] \subset \Omega$ für $0 < a < b < L$ zum Zeitpunkt $t \geq 0$ ist gegeben durch

$$Q(t) = \int_a^b u(t, x) \, dx. \quad (2.4)$$

Die zeitliche Änderung der Wärmemenge Q hat dann die Gestalt

$$\frac{d}{dt}Q(t) = \int_a^b u_t \, dx = \int_a^b C(\theta)\theta_t \, dx, \quad (2.5)$$

wobei wir im Laufe der Arbeit zur besseren Lesbarkeit wie hier manchmal auf die Variablen (t, x) verzichten und die Ableitungen $\frac{d}{dt}(\cdot)$ und $\frac{d}{dx}(\cdot)$ durch $(\cdot)_t$ bzw. $(\cdot)_x$ abkürzen.

Andererseits kann sich die Wärmemenge nach dem Prinzip der Energieerhaltung nur dann ändern, wenn Wärme nach außen verloren geht oder von außen aufgenommen wird. Wir definieren zunächst die Vorzeichenfunktionen

$$s_a(t) := \operatorname{sgn}(\theta_x(t, a)), \quad (2.6)$$

$$s_b(t) := \operatorname{sgn}(\theta_x(t, b)). \quad (2.7)$$

Laut dem Fourier'schen Gesetz ist der Betrag eines Wärmeflusses $|q|$ proportional zu $\operatorname{sgn}(\theta_x)\theta_x$. Der Proportionalitätsfaktor ist dabei die Wärmeleitfähigkeit $k: \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}_+$. Wir erhalten somit

$$|q_a| = s_a k(\theta)\theta_x > 0, \quad t \in I, \, x = a, \quad (2.8)$$

$$|q_b| = s_b k(\theta)\theta_x > 0, \quad t \in I, \, x = b. \quad (2.9)$$

Ob nun bei $x = a$ und $x = b$ ein Wärmezuffluss oder -abfluss stattfindet hängt wiederum von θ_x ab. Für $\theta_x(t, a) < 0$ handelt es sich um einen Zufluss, für $\theta_x(t, a) > 0$ um einen Abfluss. Bei $x = b$ gilt das Umgekehrte. Für $\theta_x(t, b) < 0$ sprechen wir von einem Abfluss, während $\theta_x(t, b) > 0$ auf einen Zufluss hindeutet.

Die zeitliche Änderung der Wärmemenge, also die Summe aus allen Zu- und Abflüssen, kann dann kompakt geschrieben werden durch

$$\frac{d}{dt}Q(t) = -s_a|q_a| + s_b|q_b|. \quad (2.10)$$

Einsetzen von (2.8) - (2.9) liefert

$$\frac{d}{dt}Q(t) = k(\theta)\theta_x|_{x=b} - k(\theta)\theta_x|_{x=a} = \int_a^b (k(\theta)\theta_x)_x \, dx. \quad (2.11)$$

Da die Herleitung der Integrale in (2.5) und (2.11) für $t \in I$ und beliebige Teilintervalle $[a, b] \in \Omega$ gilt, können wir annehmen, dass die Integranden punktweise in $(t, x) \in I \times \Omega$ übereinstimmen müssen. Somit erhalten wir die quasilineare¹ 1D Wärmeleitungsgleichung zweiter Ordnung mit

$$C(\theta)\theta_t = (k(\theta)\theta_x)_x \quad t \in I, \quad x \in \Omega, \quad (2.12)$$

die mithilfe der temperaturabhängigen Materialparameter C und k die oben erwähnte Phasenumwandlung in das Modell integrieren.

Eine Darstellung von (2.12) in Abhängigkeit von der Enthalpie u ist möglich mithilfe der Kirchhoff Transformierten

$$\alpha(u) := \int_{\underline{\theta}}^{\theta} k(\xi) \, d\xi \stackrel{(2.3)}{=} \int_{\underline{\theta}}^{\hat{C}^{-1}(u)} k(\xi) \, d\xi, \quad \text{sodass} \quad (2.13)$$

$$\alpha'(u) = k\left(\hat{C}^{-1}(u)\right) \left(\hat{C}^{-1}(u)\right)' = \frac{k(\theta)}{C(\theta)}. \quad (2.14)$$

Der Quotient $\frac{k}{C}$ ist dabei die Temperaturleitfähigkeit. In dem Sinne ist α' ein enthalpieabhängiger Repräsentant (die Enthalpieleitfähigkeit) für diese Größe, welche häufig in der Literatur nur in Abhängigkeit von der Temperatur angegeben wird.

¹Dabei nennen wir eine Differentialgleichung quasilinear, wenn die höchste Ableitung im Ort nur mit einer Funktion niedriger Ordnung multipliziert ist. In unserem Fall gilt

$$(k(\theta)\theta_x)_x = k(\theta)\theta_{xx} + k'(\theta)\theta_x^2.$$

Wegen $u_t = C(\theta)\theta_t$ und $u_x = C(\theta)\theta_x$ kann die Wärmeleitungsgleichung (2.12) alternativ durch

$$u_t = (\alpha'(u)u_x)_x, \quad t \in I, \quad x \in \Omega \quad (2.15)$$

dargestellt werden.

Um das mathematische Modell zu vervollständigen, geben wir im Folgenden noch Anfangs- und Randinformationen an. Dazu sei mit

$$\theta = \theta_0, \quad t = 0, \quad x \in \bar{\Omega} \quad (2.16)$$

eine Anfangstemperatur fixiert.

Für $x \in \partial\Omega$ betrachten wir die Newton-Randbedingungen

$$q_0 = h_0(\theta) (\theta - \theta_w), \quad t \in I, \quad x = 0, \quad (2.17)$$

$$q_L = h_L(\theta) (\theta - \theta_w), \quad t \in I, \quad x = L, \quad (2.18)$$

wobei $\theta_w > 0$ die Temperatur des Kühlwassers und h_0 und h_L die sogenannten Wärmeübergangskoeffizienten sind. Um die genannten Leidenfrost-Effekte zu modellieren, wird hier von h_0 und h_L die Abhängigkeit von der Oberflächentemperatur gefordert, vergleiche Abbildung 1.3.

Da es sich in beiden Randpunkten um Wärmeabflüsse handelt, können wir annehmen, dass $\theta_x(t, 0) > 0$ und $\theta_x(t, L) < 0$. Gleichsetzen von (2.17) - (2.18) mit

$$q_0 = +k(\theta)\theta_x, \quad t \in I, \quad x = 0, \quad (2.19)$$

$$q_L = -k(\theta)\theta_x, \quad t \in I, \quad x = L, \quad (2.20)$$

liefert uns schließlich das Anfangsrandwertproblem (ARWP)

$$C(\theta)\theta_t = (k(\theta)\theta_x)_x, \quad t \in I, \quad x \in \Omega, \quad (2.21)$$

$$k(\theta)\theta_x = h_0(\theta) (\theta - \theta_w), \quad t \in I, \quad x = 0, \quad (2.22)$$

$$-k(\theta)\theta_x = h_L(\theta) (\theta - \theta_w), \quad t \in I, \quad x = L, \quad (2.23)$$

$$\theta = \theta_0, \quad t = 0, \quad x \in \bar{\Omega}. \quad (2.24)$$

Da die Kenntnis einer alternativen Darstellung des ARWPs bzgl. der Enthalpie wichtig für das weitere Vorgehen ist, betrachten wir

$$u_t = (\alpha'(u)u_x)_x, \quad t \in I, \quad x \in \Omega, \quad (2.25)$$

$$\alpha'(u)u_x = \beta_0(u), \quad t \in I, \quad x = 0, \quad (2.26)$$

$$-\alpha'(u)u_x = \beta_L(u), \quad t \in I, \quad x = L, \quad (2.27)$$

$$u = u_0, \quad t = 0, \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (2.28)$$

und wählen die Anfangsenthalpie durch $u_0(x) := \hat{C}(\theta_0(x))$. Damit die beiden Anfangsrandwertprobleme denselben Prozess beschreiben und die enthalpieabhängigen Wärme Flüsse kompatibel sind, nutzen wir (2.3) und setzen

$$\beta_0(u) := h_0(\hat{C}^{-1}(u))(\hat{C}^{-1}(u) - \theta_w), \quad (2.29)$$

$$\beta_L(u) := h_L(\hat{C}^{-1}(u))(\hat{C}^{-1}(u) - \theta_w). \quad (2.30)$$

Für das ARWP (2.25) - (2.28) wird die Wärmeleitung im Inneren durch α' (an Stelle von C und k) bestimmt, während der Wärmeübergang am Rand durch $\beta_0, \beta_L > 0$ (anstatt $h_0, h_L > 0$) vorgeschrieben wird. Die Phänomene Phasenumwandlung und Leidenfrost sind dabei durch die jeweilige Enthalpieabhängigkeit abgedeckt.

Ein wichtiger Aspekt hinsichtlich der weiteren Betrachtung inverser Probleme ist die Frage nach der Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen u des ARWPs (2.25) - (2.28). Wir möchten dieser Frage in den nachfolgenden Abschnitten nachgehen, indem wir zwei verschiedene Ansätze verfolgen. Zum einen betrachten wir kurz klassische Lösungen unter Anwendung der von Ladyzhenskaya et al. vorgeschlagenen Theorie, siehe [45]. Auf der anderen Seite untersuchen wir die Existenz sogenannter starker Lösungen, indem wir das ARWP in ein abstraktes Anfangswertproblem (auch Cauchy-Problem genannt) umformulieren und anschließend die von Brezis in [10] eingeführte Theorie pseudomonotoner Operatoren nutzen. Der zweite Ansatz der starken Lösungen wird dabei viel ausführlicher behandelt und führt zu einer Lösung in einem schwächeren Sinne, d.h. die Anforderungen an die an dem ARWP beteiligten Funktionen sind nicht so streng. Am Ende des Kapitels geben wir einen geeigneten Lösungsraum \mathcal{U} an, mit dem wir in der Lage sind einen wohldefinierten Vorwärtsoperator zu definieren.

2.2 Existenz und Eindeutigkeit klassischer Lösungen

Sei ausnahmsweise für diesen Abschnitt $I := (0, T)$ das offene Zeitintervall. Außerdem sei $\bar{Q} := \bar{I} \times \bar{\Omega}$ und $l \in (0, 1)$. Mit $H^{2+l, 1+l/2}(\bar{Q})$ bezeichnen wir den Hölder-Raum bestehend aus stetigen Funktionen $u \in \mathcal{C}^{2,1}(\bar{Q})$, d.h. die Funktionen sind 2-mal stetig differenzierbar in $x \in \bar{\Omega}$ und 1-mal stetig differenzierbar in $t \in I$, die zusätzlich noch hölderstetig in x bzw. t mit Exponent l bzw. $l/2$ sind. Letzteres heißt, dass eine Konstante $C > 0$ existiert, sodass

$$\max_{x_1, x_2 \in \bar{\Omega}} |u(t, x_1) - u(t, x_2)| \leq C|x_1 - x_2|^l, \quad \forall t \in \bar{I}, \quad (2.31)$$

$$\max_{t_1, t_2 \in I} |u(t_1, x) - u(t_2, x)| \leq C|t_1 - t_2|^{l/2}, \quad \forall x \in \bar{\Omega}. \quad (2.32)$$

Um die Existenz und Eindeutigkeit einer klassischen Lösung $u \in H^{2+l, 1+l/2}(\bar{Q}) \subset \mathcal{C}^{2,1}(\bar{Q})$ nachzuweisen, modifizieren wir das ursprüngliche Ergebnis von Ladyzhenskaya et al. ([45]) im nachfolgenden Lemma auf unseren 1D-Fall.

Lemma 2.2.1. *Gegeben sei das Anfangsrandwertproblem zweiter Ordnung*

$$u_t = a(x, t, u)u_{xx} - b(x, t, u, u_x), \quad t \in I, \quad x \in \Omega, \quad (2.33)$$

$$a(0, t, u)u_x = \Phi(0, t, u), \quad t \in I, \quad x = 0, \quad (2.34)$$

$$-a(L, t, u)u_x = \Phi(L, t, u), \quad t \in I, \quad x = L, \quad (2.35)$$

$$u = \Phi_0, \quad t = 0, \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (2.36)$$

wobei die folgenden Bedingungen erfüllt sind:

$$a(x, t, u) > 0, \quad \text{für } (t, x) \in \bar{\Omega} \times (0, T], \quad (2.37)$$

$$-ub(x, t, u, 0) \leq c_1 u^2 + c_2, \quad \text{für } (t, x) \in \Omega \times (0, T], \quad c_1, c_2 \geq 0, \quad (2.38)$$

$$-u\Phi(x, t, u) < 0, \quad \text{für } |u| > 0, \quad (t, x) \in \bar{I} \times \{0, L\}. \quad (2.39)$$

Für beliebige p , $(t, x) \in \bar{Q}$ und $|u| < \infty$ seien die Funktionen $a(x, t, u)$, $b(x, t, u, p)$ und

$\Phi(x, t, u)$ außerdem stetig differenzierbar in ihren Argumenten so, dass gilt:

$$a(x, t, u) \leq c, \quad (2.40)$$

$$|a_u, a_x, a_t, a_{uu}, a_{ut}, a_{ux}, a_{xt}| \leq c, \quad (2.41)$$

$$|\Phi, \Phi_u, \Phi_x, \Phi_t, \Phi_{uu}, \Phi_{ut}, \Phi_{ux}| \leq c, \quad (2.42)$$

$$|b(x, t, u, p)| \leq c(1 + p^2), \quad (2.43)$$

$$|b_p|(1 + |p|) + |b_u| + |b_t| \leq c(1 + p^2), \quad \text{für } c > 0. \quad (2.44)$$

Weiterhin seien für $|p| < \infty$ und $l \in (0, 1)$ die Funktionen $a_x(x, t, u)$, $b(x, t, u, p)$ und $\Phi_x(x, t, u)$ hölderstetig in x mit Exponent l . Die Funktion $\Phi_x(x, t, u)$ sei zusätzlich noch hölderstetig in t mit Exponent $l/2$. Gilt schließlich

$$\Phi(0, 0, 0) = \Phi(L, 0, 0) = 0, \quad (2.45)$$

so besitzt das Anfangsrandwertproblem (2.33) - (2.36) eine eindeutige Lösung $u \in H^{2+l, 1+l/2}(\bar{Q})$.

Beweis. Siehe Satz 7.4 in [45]. □

Bemerkung 2.2.2. Zur besseren Unterscheidung der Ableitungen haben wir im obigen Lemma tiefgestellte u für die entsprechende Ableitung verwendet. Wenn klar ist um welche Ableitung es sich handelt, verwenden wir jedoch auch die Strich-Notation, z.B. $\alpha'(u)$ anstelle von $\alpha_u(u)$.

Satz 2.2.3. Sei für $\alpha \in \mathcal{C}^3$

$$0 < c_1 \leq \alpha' \leq c_2 < \infty, \quad (2.46)$$

$$|\alpha''| \leq c_3, \quad |\alpha'''| \leq c_4, \quad (2.47)$$

und für $0 < \beta_0, \beta_L \in \mathcal{C}^2$

$$|\beta_0, \beta_L| \leq c_5, \quad |\beta'_0, \beta'_L| \leq c_6, \quad |\beta''_0, \beta''_L| \leq c_7, \quad (2.48)$$

für Konstanten $c_1, \dots, c_7 > 0$ erfüllt. Gilt

$$\beta_0(0) = \beta_L(0) = 0, \quad (2.49)$$

so hat das ARWP (2.25) - (2.28) eine eindeutige Lösung $u \in H^{2+l,1+l/2}(\bar{Q}) \subset C^{2,1}(\bar{Q})$ für alle $l \in (0, 1)$.

Beweis. Differenzieren der rechten Seite von (2.25) liefert

$$u_t = \alpha'(u)u_{xx} + \alpha''(u)u_x^2. \quad (2.50)$$

Mit der Wahl

$$\begin{aligned} a(x, t, u) &:= \alpha'(u), & b(x, t, u, p) &:= -\alpha''(u)p^2, & \Phi_0 &:= u_0, \\ \Phi(0, t, u) &:= \beta_0(u) & \text{und} & & \Phi(L, t, u) &:= \beta_L(u) \end{aligned}$$

folgen die Bedingungen (2.37) - (2.40) und (2.45) direkt aus den Voraussetzungen (2.46) und (2.49). Die Beschränktheit der Ableitungen (2.41) - (2.42) resultiert aus (2.47) - (2.48).

Für $c := 2(2c_3 + c_4)$ können wir (2.43) - (2.44) zeigen mit

$$\begin{aligned} |b(x, t, u, p)| &= |-\alpha''(u)p^2| \leq c_3p^2, \quad \text{und} \\ |b_p|(1 + |p|) + |b_u| + |b_t| &= |2\alpha''(u)p|(1 + |p|) + |-\alpha'''(u)p^2| \\ &\leq 2c_3(|p| + p^2) + c_4p^2 \\ &\leq (2c_3 + c_4)(|p| + p^2) \\ &\leq (2c_3 + c_4)(2 + p^2 + p^2) \\ &\leq c(1 + p^2). \end{aligned}$$

Da in unserem Fall $a_x = \Phi_x = 0$ und b nicht explizit von x bzw. t abhängt, sind diese Funktionen Hölder-stetig für beliebige Exponenten l bzw. $l/2$ für $l \in (0, 1)$. Somit folgt die Existenz einer eindeutigen klassischen Lösung $u \in H^{2+l,1+l/2}(\bar{Q})$ aus Lemma 2.2.1. \square

Eine klassische Lösung u von (2.25) - (2.28) hat zwar den Vorteil, dass das ARWP punktweise erfüllt ist, der überwiegende Nachteil liegt aber an den zu strengen Voraussetzungen des Satzes 2.2.3. Außerdem erfordern klassische Lösungen in Bezug auf die weitere Behandlung des inversen Problems aufgrund des Banachraum-Settings zusätzliche technische Werkzeuge, vgl. [65], [41].

Wir zeigen im Folgenden, dass diese Einschränkung umgangen werden kann und wir das weitere Vorgehen in einem Hilbertraum-Setting durchführen können. Aus diesem Grund wollen wir die Theorie der starken Lösungen vorstellen, bei denen Lösungen auch unter schwächeren Annahmen existieren können.

2.3 Starke Lösungen abstrakter Cauchy-Probleme

Wir möchten zunächst die weiteren Schritte motivieren und einen kurzen historischen Rückblick geben. Die mathematischen Begrifflichkeiten werden dabei erst im nächsten Abschnitt definiert.

Die Existenztheorie starker Lösungen ist eng verknüpft mit der Theorie pseudomonotoner Operatoren, welche ursprünglich für die Lösung gewisser stationärer (zeitunabhängiger) Probleme herangezogen wurden. Genauer wurden pseudomonotone Operatoren von Brezis in [10] als eine Verallgemeinerung der monotonen Operatoren und der zugehörigen Theorie von Minty und Browder ([55]) eingeführt, die die Existenz von Lösungen $u \in X$ für abstrakte Operatorgleichungen der Art

$$A(u) = f \quad \text{in } X^* \quad (2.51)$$

garantiert. Hier ist $A : X \rightarrow X^*$ ein monotoner Operator und X ein reflexiver Banachraum mit Dualraum X^* . Mit Hinblick zur Anwendung der Theorie von Minty-Browder, etwa bei Existenzaussagen gewisser Randwertprobleme bestimmt durch elliptische oder parabolische Differentialgleichungen, war es wiederum Browder, der die Verknüpfung zwischen nichtlinearer Funktionalanalysis und nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen untersuchte und umfangreiche Forschungsergebnisse präsentierte, siehe [12, 13, 14].

In [79] erklärt der Autor die Grundidee zur Theorie der nichtlinearen monotonen Operatoren in der Art, dass sie als Verallgemeinerung des folgenden elementaren Ergebnisses zu verstehen ist:

Sei eine nichtlineare Funktion $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ und die Gleichung

$$F(x) = y$$

gegeben. Dann existiert eine Lösung $x \in \mathbb{R}$ für alle $y \in \mathbb{R}$ unter den folgenden Voraussetzungen:

- a) F ist monoton.
- b) F ist stetig.
- c) $F(x) \rightarrow \pm\infty$ für $x \rightarrow \pm\infty$.

Kann man gewährleisten, dass die Funktion F sogar *streng* monoton ist, so ist die Lösung sogar eindeutig. Die Aussage kann mit dem Zwischenwertsatz bewiesen werden.

Die Verallgemeinerung (Satz von Minty-Browder) für abstrakte Operatorgleichungen der Form (2.51) kann als das nichtlineare Analogon zum *Satz von Lax-Milgram* aufgefasst werden, siehe [51]. Der Satz von Minty-Browder besagt, dass ein Operator A surjektiv ist, wenn gilt:

- a') A ist monoton.
- b') A ist hemistetig.
- c') A ist koerziv. (2.52)

Insbesondere bedeutet dies also, dass für alle rechten Seiten $f \in X^*$ eine Lösung $u \in X$ existiert mit $A(u) = f$. Ist der Operator A strikt monoton, so ist die Lösung sogar eindeutig. Die Begrifflichkeiten (Monotonie, Hemi-Stetigkeit, Koerzivität) werden dabei im nächsten Abschnitt definiert. Dem erfahrenen Leser sollte jedoch schon jetzt ins Auge fallen, dass es sich bei der Voraussetzung a'), b') und c') jeweils um eine Verallgemeinerung der Punkte a), b) und c) handelt. Es ist hervorzuheben, dass die Monotonie eines Operators A auf allgemeinen Banachräumen keinen direkten Zusammenhang mit der Monotonie von Abbildungen zwischen endlichdimensionalen Räumen in Bezug auf eine Ordnungsrelation hat, die Idee aber trotzdem sehr anschaulich ist.

In Verbindung mit quasilinearen partiellen Differentialgleichungen und den zugehörigen abstrakten Operatorgleichungen kann man allerdings nicht immer garantieren, dass der Operator A monoton ist. Um den Satz von Minty-Browder für solche Operatoren zu modifizieren, ist eine Abschwächung des Monotonie-Begriffes notwendig, welches zu dem von Brezis angesprochenen Konzept der *pseudomonotonen* Operatoren führte.

Die Vorgehensweisen von Minty-Browder (für monotone und hemistetige) und von Brezis (für pseudomonotone Operatoren) können auf Evolutionsgleichungen erweitert werden. Unter Zunahme einer zeitlichen Variable handelt es sich dann um instationäre Probleme, welche als ein *abstraktes Anfangswertproblem* (auch *abstraktes Cauchy-Problem* genannt) in der Form

$$\begin{aligned} \frac{du}{dt} + A(u(t)) &= f(t) \text{ für fast alle } t \in I, \\ u(0) &= u_0, \end{aligned} \tag{2.53}$$

aufgefasst werden kann.

Wir möchten im Folgenden zunächst auf die mathematischen Grundlagen und die notwendigen Definitionen im stationären Fall (2.51) eingehen, bevor wir im übernächsten Abschnitt zum instationären Fall, also zu den abstrakten Cauchy-Problemen der Form (2.53), übergehen.

2.3.1 Der stationäre Fall

Sei V ein separabler und reflexiver Banachraum mit der Norm $\|\cdot\|_V$ und V^* der zugehörige Dualraum mit der Norm $\|\cdot\|_{V^*}$. Die Bilinearform $\langle \cdot, \cdot \rangle_{V \times V^*}$ ist die sogenannte *duale Paarung*. Gelegentlich schreiben wir einfach $\|\cdot\|$ oder $\langle \cdot, \cdot \rangle$, falls klar ist um welche Norm bzw. duale Paarung es sich handelt. Mit $u_k \rightarrow u$ oder $u_k \rightharpoonup u$ bezeichnen wir wie gewöhnlich die *starke* oder *schwache Konvergenz*. Die Abbildung $A : V \rightarrow V^*$ heißt beschränkt, wenn A beschränkte Mengen in V auf beschränkte Mengen in V^* abbildet. Die folgenden Definitionen und Sätze orientieren sich an Roubíček (siehe [62]) und Zeidler (siehe [79]). Auf Beweise wird an dieser Stelle bewusst verzichtet.

Definition 2.3.1.

- (i) Eine Abbildung $A : V \rightarrow V^*$ ist *monoton*, wenn gilt

$$\langle A(u) - A(v), u - v \rangle \geq 0, \quad \forall u, v \in V.$$

- (ii) Ist die Abbildung A monoton und gilt $\langle A(u) - A(v), u - v \rangle > 0$ für $u \neq v$, so nennen wir A sogar *strikt monoton*.

- (iii) Eine Abbildung $A : V \rightarrow V^*$ heißt *pseudomonoton*, wenn A beschränkt ist und wenn aus

$$\left\{ \begin{array}{l} u_k \rightarrow u \\ \limsup_{k \rightarrow \infty} \langle A(u_k), u_k - u \rangle \leq 0 \end{array} \right\}$$

folgt, dass $\forall v \in V$ gilt

$$\langle A(u), u - v \rangle \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \langle A(u_k), u_k - v \rangle. \quad (2.54)$$

Bemerkung 2.3.2. Man nennt ein Funktional $f : V \rightarrow \mathbb{R}$ *schwach unterhalbstetig*, wenn für alle Folgen $u_k \in V$ mit schwachem Grenzwert $u \in V$ gilt, dass $f(u) \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} f(u_k)$. Die Pseudomonotonie einer Abbildung garantiert nach (2.54) also die schwache Unterhalbstetigkeit der Funktion $f(u) := \langle A(u), u - v \rangle$ für alle $v \in V$.

Definition 2.3.3.

(i) $A : V \rightarrow V^*$ heißt *stetig genau* dann, wenn

$$u_k \rightarrow u \text{ in } V \quad \Rightarrow \quad Au_k \rightarrow Au \text{ in } V^*.$$

(ii) $A : V \rightarrow V^*$ heißt *hemistetig genau* dann, wenn die Abbildung

$$h \mapsto \langle A(u + hv), w \rangle$$

stetig ist auf $[0, 1]$ für alle $u, v, w \in V$.

(iii) $A : V \rightarrow V^*$ heißt *stark stetig genau* dann, wenn

$$u_k \rightarrow u \text{ in } V \quad \Rightarrow \quad Au_k \rightarrow Au \text{ in } V^*.$$

(iv) $A : V \rightarrow V^*$ heißt *kompakt genau* dann, wenn A stetig ist und für jede beschränkte Menge $U \subseteq V$ der Abschluss des Bildes, also $\overline{A(U)}$, kompakt ist.

Satz 2.3.4. *Seien $A : V \rightarrow V^*$ und $B : V \rightarrow V^*$, wobei V ein reflexiver Banachraum ist. Dann gelten die folgenden Implikationen:*

(i) A ist monoton und hemistetig $\Rightarrow A$ ist pseudomonoton.

(ii) A ist stark stetig $\Rightarrow A$ ist kompakt.

(iii) A ist stark stetig $\Rightarrow A$ ist pseudomonoton.

(iv) A und B sind pseudomonoton $\Rightarrow A + B$ ist pseudomonoton.

Beweis. Siehe [79]. □

Definition 2.3.5 (Koerzivität).

Eine Abbildung $A : V \rightarrow V^*$ heißt *koerziv*, falls eine Funktion $\varphi : \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}^+$ existiert, so dass $\lim_{s \rightarrow +\infty} \varphi(s) = +\infty$ und $\langle A(u), u \rangle \geq \varphi(\|u\|)\|u\|$ für alle $u \in V$ mit $\|u\| \rightarrow \infty$ gilt.

Bemerkung 2.3.6. Die Koerzivität eines Operators A wird häufig auch mit der Forderung gleichgestellt, dass

$$\lim_{\|u\| \rightarrow \infty} \frac{\langle A(u), u \rangle}{\|u\|} = +\infty.$$

Satz 2.3.7 (Brezis).

Jeder pseudomonotone und koerzive Operator $A : V \rightarrow V^*$ ist surjektiv, d.h. $\forall f \in V^*$ existiert mindestens eine Lösung der Gleichung

$$A(u) = f.$$

Beweis. Der Beweis beruht auf einer Galerkin-Approximation, d.h. die Operatorgleichung wird auf endlichdimensionale Unterräume $V_k \subset V_{k+1} \subset V$ projiziert. Man zeigt dann zunächst, dass eine Lösung u_k im Unterraum $V_k \subset V$ existiert und nutzt die Koerzivität des Operators A mit einer geeigneten Funktion φ (siehe Definition 2.3.5) um eine *a-priori Abschätzung* in der Form

$$\|u_k\|_V \leq \varphi^{-1}(\|f\|_{V^*})$$

zu erhalten. Die Lösung u_k ist also beschränkt, wobei die Schranke nicht von k abhängt. Man extrahiert anschließend eine Teilfolge, die schwach gegen ein $u \in V$ konvergiert und zeigt schließlich mithilfe der Pseudomonotonie des Operators A , dass es sich bei u um eine Lösung der Operatorgleichung $A(u) = f$ handelt. Die Details findet der interessierte Leser in [62] im Beweis von Theorem 2.6. \square

Bemerkung 2.3.8. Die Umkehrung in Satz 2.3.4 (i) gilt im Allgemeinen nicht. Es handelt sich bei Satz 2.3.7 also tatsächlich um eine Verallgemeinerung des Satzes von Minty-Browder. Der Übergang zu pseudomonotonen Operatoren ist immer dann notwendig, wenn Teile des Operators nicht monoton, sondern z.B. nur stark stetig sind, was bei der Behandlung von quasilinearen Differentialgleichungen nicht unüblich ist. Nach Satz 2.3.4 (ii) sind solche Operatoren kompakt. Zeidler ([79]) schreibt dazu: "Die Theorie der pseudomonotonen Operatoren vereint sowohl Monotonie- als auch Kompaktheitsargumente."

2.3.2 Der instationäre Fall

In Evolutionsgleichungen nimmt der skalare Parameter $t \in I = [0, T]$ ($0 < T < \infty$), als eine Variable für die Zeit, eine besondere Bedeutung ein. Die Zustandsgröße verändert sich zeitlich im System, sodass sich eine gesonderte Betrachtung der zugehörigen Zeitableitung anbietet.

Für $p \geq 1$ bezeichnet $L^p(I; V)$ den Bochnerraum bestehend aus Banachraum-wertigen Funktionen $u : I \rightarrow V$, der mit der Norm

$$\|u\|_{L^p(I; V)} := \left(\int_0^T \|u(t)\|_V^p dt \right)^{1/p} \quad (2.55)$$

selber zum Banachraum wird. Wie üblich bezeichnet

$$p' = p/(p - 1)$$

den konjugierten Exponenten so, dass der zugehörige duale Raum gegeben ist durch $L^{p'}(I; V^*)$, siehe [27]. Die duale Paarung ist definiert mit

$$\langle u, v \rangle_{L^p(I; V) \times L^{p'}(I; V^*)} := \int_0^T \langle u(t), v(t) \rangle_{V \times V^*} dt. \quad (2.56)$$

Als eine Erweiterung der klassischen Sobolev-Räume betrachten wir auch die sogenannten Sobolev-Bochner-Räume

$$W^{1,p,p'}(I; V, V^*) := \left\{ u \in L^p(I; V); \frac{du}{dt} \in L^{p'}(I; V^*) \right\}, \quad (2.57)$$

wobei $\frac{d}{dt} u$ im Sinne einer distributionellen Ableitung zu verstehen ist, d.h. für beliebige Testfunktionen $\phi \in \mathcal{C}_0^\infty([0, T])$ soll gelten

$$\frac{du}{dt}(\phi) = - \int_0^T u(t) \phi'(t) dt. \quad (2.58)$$

Versehen mit der Norm

$$\|u\|_{W^{1,p,p'}(I; V, V^*)} := \|u\|_{L^p(I; V)} + \left\| \frac{d}{dt} u \right\|_{L^{p'}(I; V^*)} \quad (2.59)$$

wird der Sobolev-Bochner-Raum ebenso zu einem Banachraum.

Sei nun $A : V \rightarrow V^*$ und $V \subset H \cong H^* \subset V^*$ ein sogenanntes *Gelfand-Tripel*, wobei V wieder ein separabler und reflexiver Banachraum ist, der stetig, dicht und kompakt in den Hilbertraum $H \cong H^*$ eingebettet ist. Auf diese Weise kann die duale Paarung $\langle \cdot, \cdot \rangle$ auf $V^* \times V$ als eine stetige Fortsetzung des Skalarprodukts (\cdot, \cdot) auf dem Hilbertraum H angesehen werden, d.h. es gilt

$$(u, v) = \langle u, v \rangle \quad \text{für } u \in H \text{ und } v \in V. \quad (2.60)$$

Definition 2.3.9 (Starke Lösung).

Wir nennen $u \in W^{1,p,p'}(I; V, V^*)$ eine *starke Lösung* von (2.53), wenn die erste Gleichung in V^* und die zweite Gleichung in H erfüllt ist.

Bemerkung 2.3.10. Man kann zeigen, dass $W^{1,p,p'}(I; V, V^*)$ stetig eingebettet ist in $C(I; H)$ (siehe Kapitel 7.2 in [62]). Somit ist die Anfangsbedingung in (2.53), als Punktauswertung der Lösung u zum Zeitpunkt $t = 0$, begründet und wohldefiniert.

Definition 2.3.11 (Schwache Koerzivität).

Wir nennen eine Abbildung $A : V \rightarrow V^*$ *schwach koerziv*, falls für $c_1, c_2 > 0$ gilt

$$\langle A(u), u \rangle \geq c_1 \|u\|_V^p - c_2 \|u\|_H^2.$$

Bemerkung 2.3.12. Während für $\|u\| \rightarrow \infty$ für koerzive Operatoren immer gilt, dass $\langle A(u), u \rangle \rightarrow \infty$, so kann für schwach koerzive Operatoren auch $\langle A(u), u \rangle \rightarrow -\infty$ eintreten. Es handelt sich in Definition 2.3.11 also in der Tat um eine Abschwächung des klassischen Koerzivitätsbegriffes.

Satz 2.3.13 (Existenz und Eindeutigkeit der starken Lösung).

Sei $A : V \rightarrow V^*$ ein pseudomonotoner und schwach koerziver Operator.

Weiterhin sei eine monotone wachsende Funktion $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ so gegeben, dass $A(u)$ ($\forall u \in V$) der Wachstumsbedingung

$$\|A(u)\|_{V^*} \leq \varphi(\|u\|_H) (1 + \|u\|_V^{p-1}) \quad (2.61)$$

genügt. Dann besitzt, unter der Voraussetzung, dass $f \in L^{p'}(I; V^*)$ und $u_0 \in H$, das abstrakte Cauchy-Problem (2.53) eine starke Lösung $u \in W^{1,p,p'}(I; V, V^*) \subset C(I; H)$.

Existiert zusätzlich eine Konstante $c > 0 \forall u, v \in V$ für fast alle $t \in I$ mit

$$\langle A(u) - A(v), u - v \rangle \geq -c \|u - v\|_H^2, \quad (2.62)$$

so ist die starke Lösung sogar eindeutig.

Beweis. Es handelt sich bei diesem Satz um leichte Abwandlungen der Theoreme 8.9 und 8.34 in [62]. □

2.3.3 Existenz und Eindeutigkeit einer starken Lösung

Wir verfolgen das Ziel die zu untersuchende Evolutionsgleichung, in unserem Fall das ARWP (2.25) - (2.28), mithilfe einer pseudomonotonen Abbildung zu versehen.

Zunächst legen wir die Räume

$$V := W^{1,2}(\Omega) \text{ und } H := L^2(\Omega) \quad (2.63)$$

fest, wobei der Sobolev-Raum $W^{1,2}(\Omega)$ sogar ein reflexiver Hilbertraum ist.

Für $u \in V$ gilt wegen

$$\|u\|_V^2 = \|u\|_H^2 + \|u_x\|_H^2 \quad (2.64)$$

auch $u \in H$ und $u_x \in H$. Außerdem ist somit $V \subset H \cong H^* \subset V^*$ ein *Gelfand-Tripel*, wobei V ein separabler und reflexiver Banachraum ist, der stetig, dicht und kompakt in den Hilbertraum $H \cong H^*$ eingebettet ist.

Weiterhin gilt mit dieser Wahl für $\Omega = (0, L)$ die kompakte Einbettung

$$V \subset C(\overline{\Omega}), \quad (2.65)$$

siehe [11], [76]. Aus $u_k \rightharpoonup u$ in $W^{1,2}(\Omega)$ folgt dann $u_k \rightarrow u$ in $C(\overline{\Omega})$.

Wir wollen nun eine schwache Formulierung des ARWPs bezüglich der Ortsvariablen x durchführen, um ein abstraktes Cauchy-Problem der Gestalt (2.53) zu erhalten.

Wir multiplizieren dazu die erste Zeile von (2.25) mit einer Funktion $v \in V$, integrieren über Ω und erhalten

$$\int_{\Omega} u_t(t, x)v(x) \, dx - \int_{\Omega} (\alpha'(u(t, x))u_x(t, x))_x v(x) \, dx = 0.$$

Die partielle Integration für das zweite Integral ergibt

$$\int_{\Omega} u_t(t, x)v(x) \, dx - \alpha'(u(t, x))u_x(t, x)v(x) \Big|_{x=0}^{x=L} \\ + \int_{\Omega} (\alpha'(u(t, x))u_x(t, x)) v_x(x) \, dx = 0,$$

wobei durch das Einsetzen der Randbedingungen (2.26) - (2.27) folglich gilt

$$\int_{\Omega} u_t(t, x)v(x) \, dx + \int_{\Omega} (\alpha'(u(t, x))u_x(t, x)) v_x(x) \, dx \\ + \beta_L(u(t, L))v(L) + \beta_0(u(t, 0))v(0) = 0. \quad (2.66)$$

Der erste Integralausdruck in (2.66) stimmt für festes $t \in I$ mit der dualen Paarung

$$\langle u_t, v \rangle_{V^* \times V} = \int_{\Omega} u_t(t, x)v(x) \, dx$$

überein, sodass wir fortan u_t als ein Element im Dualraum $V^* = W^{1,2}(\Omega)^*$ deuten. Die Punktauswertungen am Rand $\partial\Omega = \{0, L\}$ bei der partiellen Integration sind wohldefiniert nach der kompakten Einbettung (2.65).

Das abstrakte Cauchy-Problem kann somit in der Gestalt

$$u_t + A(u(t)) = 0, \quad \text{in } V^*, \quad (2.67)$$

$$u(0) = u_0, \quad \text{in } H \quad (2.68)$$

dargestellt werden, wobei der Operator $A : V \rightarrow V^*$ definiert ist durch

$$\langle A(u(t)), v \rangle_{V^* \times V} := \int_{\Omega} \alpha'(u(t, x))u_x(t, x)v_x(x) \, dx + \beta_L(u(t, L))v(L) + \beta_0(u(t, 0))v(0). \quad (2.69)$$

Die Anfangsbedingung (2.28) ist dabei nun im Hilbertraum-Setting zu verstehen.

Bemerkung 2.3.14. Wir betonen, dass wir uns je nach Kontext manchmal auf

$$u \in V, \quad u \in L^p(I; V), \quad u \in W^{1,p,p'}(I; V, V^*) \text{ oder sogar } u \in \mathbb{R}_+$$

beziehen.¹ Wenn klar ist, welcher Zusammenhang gemeint ist, lassen wir gelegentlich die Variablen t oder (t, x) weg und übergehen dabei die Tatsache, dass eine Gleichung 'für fast alle $t \in I$ ' zu verstehen ist.

Da die Enthalpie u positiv ist (vgl. (2.2)) und wir an den Rändern $x = 0$ und $x = L$ (im zugrundeliegenden Kühlprozess) Wärme entziehen, können wir annehmen, dass

$$u(t, x) \text{ für alle } (t, x) \in I \times \Omega \text{ im Intervall } [0, u_{max}] \text{ liegt,} \quad (2.70)$$

wobei

$$u_{max} \geq \operatorname{ess\,sup}_{x \in \bar{\Omega}} u_0(x). \quad (2.71)$$

Darüber hinaus setzen wir folgende plausible Bedingungen voraus:

$$0 < \beta_0, \beta_L, \alpha \in \mathcal{C}^1([0, u_{max}]), \quad (2.72)$$

$$\max \left\{ \max_u \beta_0(u), \max_u \beta_L(u) \right\} =: \beta_{max} < \infty, \quad (2.73)$$

$$\max \left\{ \max_u \beta'_0(u), \max_u \beta'_L(u) \right\} =: \beta'_{max} < \infty, \quad (2.74)$$

$$0 < c_{min} := \min_u \alpha'(u) \leq \alpha'(u) \leq c_{max} := \max_u \alpha'(u) < \infty. \quad (2.75)$$

Zum Beispiel ist die Bedingung (2.75) aufgrund der Beschränktheit der (positiven) Temperaturleitfähigkeit eines Materials (und wegen (2.14)) physikalisch gerechtfertigt. So kann zusammen mit $u_x, v_x \in H$ die Existenz des Integrals in (2.69) garantiert werden. Zusammen mit (2.73) und (2.65) ist der Operator A schließlich wohldefiniert.

Wir haben somit die erforderliche Ausgangslage geschaffen, um die Existenz und Eindeutigkeit einer starken Lösung gemäß Satz 2.3.13 zu untersuchen.

¹Dazu sei das folgende englische Zitat aus [79] angebracht:

*Use several function spaces for the same problem.
The modern strategy for nonlinear pdes.*

Zunächst möchten wir dafür nachweisen, dass der Operator A pseudomonoton ist:

Durch Aufspaltung von $A : V \rightarrow V^*$ in zwei Operatoren definiert durch

$$\langle A_1(u), v \rangle_{V^* \times V} := \int_{\Omega} \alpha'(u) u_x v_x \, dx \quad \text{und} \quad (2.76)$$

$$\langle A_2(u), v \rangle_{V^* \times V} := \beta_L(u(\cdot, L))v(L) + \beta_0(u(\cdot, 0))v(0), \quad (2.77)$$

sodass $A = A_1 + A_2$, genügt es nach Satz 2.3.4 (iv) dafür die Pseudomonotonie von A_1 und A_2 einzeln zu zeigen.

Für $u_k \rightarrow u$ gilt nach Definition des schwachen Grenzwerts auch $\beta(u_k) \rightarrow \beta(u)$, also insbesondere $\langle A_2(u_k), v \rangle \rightarrow \langle A_2(u), v \rangle$. Der Operator A_2 ist also *stark stetig* nach Definition 2.3.3 und somit nach Satz 2.3.4 (iii) auch pseudomonoton.

Um (2.54) für A_1 zu zeigen, benötigen wir das folgende Lemma, welches von Lemma 2.32 in [62] abgeleitet ist.

Lemma 2.3.15. *Der Operator $B : V \times V \rightarrow V^*$ sei gegeben durch*

$$\langle B(w, u), v \rangle := \int_{\Omega} \alpha'(w) u_x v_x \, dx. \quad (2.78)$$

Dann ist Folgendes erfüllt:

(i) $B(u, u) = A_1(u)$ in V^* für alle $u \in V$.

(ii) Für festes $w \in V$ ist der Operator $B(w, \cdot) : V \rightarrow V^*$ monoton, d.h. es gilt

$$\langle B(w, u) - B(w, v), u - v \rangle \geq 0 \quad (2.79)$$

für alle $u, v \in V$.

Für $u_k \rightarrow u \in V$ ($k \rightarrow \infty$) gilt außerdem:

(iii) $\lim_{k \rightarrow \infty} \langle B(u_k, v), w \rangle = \langle B(u, v), w \rangle$ für alle $v, w \in V$.

(iv) $\lim_{k \rightarrow \infty} \langle B(u_k, v), u_k - u \rangle = 0$ für alle $v \in V$.

Beweis. Die Aussage (i) ist trivial, während (ii) aus

$$\begin{aligned} \langle B(w, u) - B(w, v), u - v \rangle &= \int_{\Omega} \alpha'(w)(u - v)_x(u - v)_x \, dx \\ &\stackrel{(2.75)}{\geq} c_{\min} \|(u - v)_x\|_H^2 \geq 0 \end{aligned}$$

folgt. Wegen der kompakten Einbettung $V \subset C(\bar{\Omega})$ folgt $u_k \rightarrow u \in C(\bar{\Omega})$. Außerdem ist das Integrationsgebiet beschränkt und α' ist stetig, d.h. mit

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \alpha'(u_k) = \alpha'(u)$$

folgt die Aussage (iii) unmittelbar. Die Gleichung (iv) ist ein Ergebnis aus (iii) und $(u_k - u)_x \rightarrow 0$ in H . \square

Lemma 2.3.16. *Der Operator $A_1 : V \rightarrow V^*$ aus (2.76) ist pseudomonoton.*

Beweis. Die Beschränktheit des Operators für $u \in V$ folgt aus

$$\begin{aligned} \|A_1(u)\|_{V^*} &= \sup_{v \in V, \|v\| \leq 1} |\langle A_1(u), v \rangle| \\ &\stackrel{(2.75)}{\leq} \sup_{v \in V, \|v\| \leq 1} (c_{\max} \|u_x\|_H \|v_x\|_H) \\ &\stackrel{(2.64)}{\leq} \sup_{v \in V, \|v\| \leq 1} (c_{\max} \|u\|_V \|v\|_V) \\ &\leq c_{\max} \|u\|_V. \end{aligned} \tag{2.80}$$

Mit Hinblick auf (2.54) gelte nun

$$\left\{ \begin{array}{l} u_k \rightarrow u \\ \limsup_{k \rightarrow \infty} \langle A_1(u_k), u_k - u \rangle \leq 0 \end{array} \right\}. \tag{2.81}$$

Wie in Lemma 2.32 in [62] definieren wir zunächst

$$u_\varepsilon := (1 - \varepsilon)u + \varepsilon v \in V \tag{2.82}$$

für $\varepsilon \in (0, 1)$. Wenn man die Monotonie (2.79) des Operators B für $w = u_k$, $u = u_k$ und $v = u_\varepsilon$ verwendet, erhält man

$$\langle A_1(u_k), u_k - u_\varepsilon \rangle \geq \langle B(u_k, u_\varepsilon), u_k - u_\varepsilon \rangle. \tag{2.83}$$

Dabei haben wir genutzt, dass $B(u_k, u_k) = A_1(u_k)$. Das Einsetzen von (2.82) führt zu

$$\begin{aligned} \varepsilon \langle A_1(u_k), u - v \rangle &\geq - \langle A_1(u_k), u_k - u \rangle \\ &\quad + \langle B(u_k, u_\varepsilon), u_k - u \rangle + \varepsilon \langle B(u_k, u_\varepsilon), u - v \rangle. \end{aligned}$$

Betrachtet man den Grenzwert $k \rightarrow \infty$ auf beiden Seiten der Ungleichheit, so ergibt sich mit (iii) und (iv) von Lemma 2.3.15 zusammen mit der Voraussetzung (2.81) die Ungleichung

$$\varepsilon \liminf_{k \rightarrow \infty} \langle A_1(u_k), u - v \rangle \geq \varepsilon \langle B(u, u_\varepsilon), u - v \rangle. \quad (2.84)$$

Durch Dividieren von $\varepsilon > 0$ und Bilden des Grenzwerts $\varepsilon \rightarrow 0$ ($u_\varepsilon \rightarrow u$) erhalten wir

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \langle A_1(u_k), u - v \rangle \geq \langle A_1(u), u - v \rangle. \quad (2.85)$$

Erneutes Anwenden der Monotonie (2.79) für $v = u$ ergibt

$$\langle B(u_k, u_k) - B(u_k, u), u_k - u \rangle \geq 0. \quad (2.86)$$

Mit (2.85), (2.86) und (iv) aus Lemma 2.3.15 können wir schließlich (2.54) für den Operator A_1 zeigen durch

$$\begin{aligned} \liminf_{k \rightarrow \infty} \langle A_1(u_k), u_k - v \rangle &= \liminf_{k \rightarrow \infty} \langle A_1(u_k), u_k - u \rangle + \liminf_{k \rightarrow \infty} \langle A_1(u_k), u - v \rangle \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \langle B(u_k, u), u_k - u \rangle + \liminf_{k \rightarrow \infty} \langle B(u_k, u_k) - B(u_k, u), u_k - u \rangle \\ &\quad + \liminf_{k \rightarrow \infty} \langle A_1(u_k), u - v \rangle \geq \langle A_1(u), u - v \rangle. \end{aligned}$$

□

Bemerkung 2.3.17. Wir haben damit schließlich gezeigt, dass der Operator

$$A = A_1 + A_2$$

aus (2.69) als Summe pseudomonotoner Operatoren selber pseudomonoton ist. Als Nächstes möchten wir die schwache Koerzivität des Operators nachprüfen, welche maßgeblich die Festlegung des Lösungsraums beeinflusst.

Lemma 2.3.18. Für $p = 2$ ist der in (2.69) definierte Operator $A : V \rightarrow V^*$ schwach koerziv und genügt der Wachstumsbedingung (2.61).

Beweis. Die schwache Koerzivität folgt direkt aus $\beta_0, \beta_L, u > 0$ und (2.75):

$$\langle A(u), u \rangle \geq c_{\min} \|u_x\|_H^2 = c_{\min} \|u\|_V^2 - c_{\min} \|u\|_H^2.$$

Für die Wachstumsbedingung zeigen wir für $u \in V$, dass gilt

$$\begin{aligned} \|A(u)\|_{V^*} &= \sup_{v \in V, \|v\| \leq 1} |\langle A(u), v \rangle| \\ &\stackrel{(2.80)}{\leq} c_{\max} \|u\|_V + \sup_{v \in V, \|v\| \leq 1} \left(2\beta_{\max} \sup_{x \in \Omega} |v(x)| \right) \\ &\stackrel{(2.73)}{\leq} c_{\max} \|u\|_V + 2\beta_{\max} \sup_{v \in V, \|v\| \leq 1} (c_c \|v\|_V) \\ &\leq c (1 + \|u\|_V), \end{aligned}$$

wobei $c := \max \{c_{\max}, 2\beta_{\max} c_c\}$ und c_c die Norm des Einbettungsoperators $V \rightarrow \mathcal{C}(\bar{\Omega})$ ist. Dies zeigt (2.61) für $p = 2$, da $c > 0$ durch eine beliebig geeignete Funktion φ ersetzt werden kann. \square

Bemerkung 2.3.19. Bisher haben wir nur die Räume bzgl. der Ortsvariablen x festgelegt, vgl. (2.63). Da Lemma 2.3.18 den Exponenten $p = 2$ liefert, sind wir nun auch in der Lage den Bochner-Raum $L^2(I; V)$ bzgl. der Zeitvariablen t zu spezifizieren. Mit $p' = 2$ bietet sich somit der Sobolev-Bochner-Raum

$$\mathcal{U} := W^{1,2,2}(I; V, V^*), \quad (2.87)$$

als potentieller Lösungsraum einer starken Lösung des abstrakten Cauchy-Problems (2.67) - (2.68) an. Dabei ist erwähnenswert, dass \mathcal{U} sogar ein Hilbertraum ist, siehe [2].

Satz 2.3.20. Das abstrakte Cauchy-Problem (2.67) - (2.68) hat eine starke Lösung

$$u \in \mathcal{U} \subset \mathcal{C}(I; H). \quad (2.88)$$

Existiert zusätzlich eine Konstante α'_c mit

$$\alpha'_c \geq c_u := 2\beta'_{\max} c_c^2 > 0 \quad (2.89)$$

mit β'_{max} aus (2.74) und der Norm c_c des Einbettungsoperators $V \rightarrow \mathcal{C}(\bar{\Omega})$ so, dass

$$\int_{\Omega} (\alpha'(u)u_x - \alpha'(v)v_x) (u_x - v_x) \, dx \geq \alpha'_c \int_{\Omega} (u_x - v_x)^2 \, dx = \alpha'_c \|u_x - v_x\|_H^2, \quad \forall u, v \in V, \quad (2.90)$$

so ist die starke Lösung sogar eindeutig.

Beweis. Wir müssen die Voraussetzungen von Satz 2.3.13 nachprüfen, wobei in unserem Fall $f \equiv 0$ gilt. Die Existenzaussage folgt dann direkt aus den Vorarbeiten, insbesondere Lemma 2.3.16 and 2.3.18.

Darüber hinaus können wir (2.62) und somit die Eindeutigkeit der starken Lösungen zeigen mit

$$\begin{aligned} \langle A(u) - A(v), u - v \rangle &\geq \alpha'_c \|u_x - v_x\|_H^2 - |\beta_L(u(L)) - \beta_L(v(L))| \cdot |u(L) - v(L)| \\ &\quad - |\beta_0(u(0)) - \beta_0(v(0))| \cdot |u(0) - v(0)| \\ &\stackrel{(2.74)}{\geq} \alpha'_c \|u_x - v_x\|_H^2 - 2\beta'_{max} c_c^2 \|u - v\|_V^2 \\ &\geq -c_u \|u - v\|_H^2 + (\alpha'_c - c_u) \|u_x - v_x\|_H^2 \\ &\stackrel{(2.89)}{\geq} -c_u \|u - v\|_H^2. \end{aligned}$$

□

Bemerkung 2.3.21. Im Vergleich zu den strengen Voraussetzungen einer klassischen Lösung $u \in H^{2+l, 1+l/2}(\bar{Q})$ sind die Annahmen (2.72) - (2.75) für die Existenz einer starken Lösung $u \in \mathcal{U}$ physikalisch plausibel. Wir erhalten auch das folgende nützliche Ergebnis:

Wegen $\mathcal{U} \subset L^2(I; V) \subset L^2(I; H)$ können wir das Gelfand-Tripel

$$\mathcal{U} \subset L^2(I; H) \subset \mathcal{U}^* \quad (2.91)$$

definieren. Für $Q = I \times \Omega$ gilt wegen

$$\|u\|_{L^2(I; H)}^2 = \int_I \|u(t)\|_H^2 \, dt = \int_I \int_{\Omega} |u(t, x)|^2 \, dx \, dt = \|u\|_{L^2(Q)}^2 \quad (2.92)$$

die isometrische Isomorphie $L^2(I; H) \cong L^2(Q)$.

Ähnlich zu (2.60) können wir die duale Paarung auf $\mathcal{U}^* \times \mathcal{U}$ mit dem Skalarprodukt

auf $L^2(Q)$ identifizieren, d.h. es gilt die Skalarprodukterweiterung

$$\langle u, v \rangle_{\mathcal{U}^* \times \mathcal{U}} = (u, v)_{L^2(Q)} = \int_I \int_{\Omega} u(t, x) v(t, x) \, dx \, dt, \quad \text{für } u \in L^2(Q) \text{ und } v \in \mathcal{U}. \quad (2.93)$$

Diesbezüglich liefert die Lösungstheorie starker Lösungen mit (2.93) ein praktisches Werkzeug zur Berechnung des Gradienten des Zielfunktionals, siehe Kapitel 3.

Nachteilig ist die Lösungstheorie starker Lösungen bezüglich der Eindeutigkeit. Der Nachweis einer Konstanten $\alpha'_c > 0$, sodass (2.89) erfüllt ist, ist lediglich für den konstanten Fall $\alpha'(u) = \alpha'(v)$, $\forall u, v \in \mathbb{R}_+$ trivial. Dies ist nicht unbedingt ein Hinweis darauf, dass die starke Lösung mehrdeutig sein muss. Vielmehr kann die Eindeutigkeit auf diesem Wege nicht einfach nachgeprüft werden.

Um die Eindeutigkeit einer starken Lösung in dem nicht konstanten Fall zu gewährleisten, können wir uns dennoch auf die Theorie der klassischen Lösungen stützen, auch wenn die Voraussetzungen strenger sind. Da jede klassische Lösung auch eine Lösung in einem schwächeren Sinne ist, gewinnen wir auf diese Weise eine eindeutige starke Lösung $u \in \mathcal{U}$.

3. Das inverse Wärmetransferproblem

In diesem Kapitel möchten wir das inverse Wärmetransferproblem zur Bestimmung der unbekanntenen Wärmeflüsse $\beta_0, \beta_L \in \mathcal{C}^1([0, u_{max}])$ aus der Kenntnis der gemessenen Enthalpiematrix $u^\delta \in \mathbb{R}^{d \times m}$ angeben, wobei $d, m > 0$ die Anzahl der Thermoelemente bzw. Messzeiten ist.

Das Modell ist dabei beschrieben durch das ARWP (2.25) - (2.28), wobei die Enthalpieleitfähigkeit $\alpha'(u) \in \mathcal{C}^1([0, u_{max}])$, sowie die Anfangsbedingung u_0 als bekannt vorausgesetzt werden. Wir möchten im Folgenden dazu einen geeigneten nichtlinearen Vorwärtsoperator $F : X \rightarrow Y$ definieren, um das inverse Problem über das Minimieren eines Zielfunktional (1.3) zu lösen. Im Speziellen minimieren wir das Zielfunktional unter Nebenbedingungen, also

$$\min_{x \in X} f(x), \text{ sodass } x \in B, \quad (3.1)$$

wobei $x \in B$ sogenannte Box-Constraints darstellen. Dabei spalten wir den Vorwärtsoperator F auf via

$$F = \mathcal{Q} \circ S. \quad (3.2)$$

Hierbei ist

$$\mathcal{Q} : \mathcal{U} \rightarrow Y \quad (3.3)$$

der *Beobachtungsoperator*, der den Aufbau des Messvorgangs modelliert und die starke Lösung $u \in \mathcal{U}$ des ARWPs vergleichbar zu den Messdaten macht. Mit

$$S : X \rightarrow \mathcal{U}, \quad (3.4)$$

bezeichnen wir den *Parameter-To-Solution Operator*, den wir im Folgenden nur noch *Lösungsoperator* nennen.¹ Dieser bildet gewisse Parameter $x \in X$ auf eine starke Lösung $u \in \mathcal{U}$ des ARWPs ab, wobei wir den Raum X der Parameter, sowie die Box-Constraints $x \in B$, im folgenden Abschnitt motivieren und festlegen.

¹Die deutsche Übersetzung *Parameter-zu-Lösung Operator* klingt etwas unbeholfen.

3.1 Der Lösungsoperator S

Wir nehmen an, dass unter den Voraussetzungen des vorangegangenen Kapitels eine starke Lösung $u \in \mathcal{U}$ für (2.25) - (2.28) existiert. Da die Wärmeflüsse selber enthalpieabhängig sind, also von der eigentlichen Lösung u abhängen, kann ein Lösungsoperator S nur implizit, z.B. bei entsprechender Definition in der Gestalt

$$S(\beta_0(u), \beta_L(u), u) = 0, \quad (3.5)$$

dargestellt werden. Eine Sensitivitätsanalyse eines solchen Operators S bezüglich der Wärmeflüsse erfordert die Anwendung des Satzes impliziter Funktionen in Banach-Räumen, vgl. [48]. Dies macht insbesondere die spätere Berechnung des zugehörigen Gradienten unnötig technisch.

Für die numerische Behandlung des inversen Problems schlagen wir von daher einen einfachen, aber geschickten Parametrisierungsansatz vor, der es uns erlaubt die Implizitität zu überwinden und einen Lösungsoperator explizit zu definieren durch

$$S : B \subset \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathcal{U}, \quad (3.6)$$

$$\beta \mapsto u. \quad (3.7)$$

Ziel des Ansatzes ist dabei, die Parametrisierungsverluste so gering wie möglich zu halten, d.h. Funktionen aus dem Raum $\mathcal{C}^1([0, u_{max}])$ (vgl. (2.72)) sollen beliebig gut approximiert werden können. Hinsichtlich des inversen Problems hat das den Vorteil, dass wir die Struktur der Lösung nicht vorschreiben müssen.

Seien β_0 und β_L Wärmeflüsse, die (2.72) - (2.74) erfüllen, d.h.

$$0 < \beta_0, \beta_L \leq \beta_{max}. \quad (3.8)$$

Wir definieren für $n > 0$ die Partition des Intervalls $U := [0, u_{max}]$ mit

$$\pi_n : 0 = u_1 < u_2 < \dots < u_n = u_{max}. \quad (3.9)$$

Für $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{2n}$ können wir stückweise kubische Hermite Interpolationspolynome (sogenannte PCHIPs¹) $\tilde{\beta}_0$ und $\tilde{\beta}_L$ in $\mathcal{C}^1(U)$ konstruieren, sodass

$$\tilde{\beta}_0(u_i) = \beta_i, \quad \tilde{\beta}_L(u_i) = \beta_{n+i}, \quad \text{für } i = 1, \dots, n. \quad (3.10)$$

Bei geeigneter Wahl von $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{R}^{2n}$ garantieren die Approximationseigenschaften stückweise kubischer Interpolationsmethoden, dass für alle $\varepsilon > 0$ eine Anzahl n von Partitionspunkten existiert, sodass

$$\begin{aligned} \max_{u \in U} |\tilde{\beta}_0(u) - \beta_0(u)| &< \varepsilon, \\ \max_{u \in U} |\tilde{\beta}_L(u) - \beta_L(u)| &< \varepsilon. \end{aligned}$$

Für eine Beweisskizze dieser Approximationseigenschaft, sowie einem numerischen Beispiel zur Bestimmung der Anzahl n an Partitionspunkten zu gegebenem $\varepsilon > 0$ verweisen wir auf Anhang A.2.

Wir können nun, indem wir einen kleinen Fehler vernachlässigen, β_0 und β_L durch $\tilde{\beta}_0$ und $\tilde{\beta}_L$ ersetzen. Zur besseren Lesbarkeit lassen wir die Tilde in $\tilde{\beta}_0$ und $\tilde{\beta}_L$ weg und schreiben einfach β_0 und β_L , wobei wir uns eigentlich auf die Interpolanten $\beta_0(u, \boldsymbol{\beta})$ und $\beta_L(u, \boldsymbol{\beta})$ beziehen.

Bemerkung 3.1.1. Im Vergleich zu anderen Parametrisierungsansätzen, wie zum Beispiel einem Dictionary-Ansatz

$$\beta_0(u) = \sum_{i=1}^n \beta_i B_{0,i}(u), \quad \beta_L(u) = \sum_{i=1}^n \beta_{n+i} B_{L,i}(u), \quad (3.11)$$

bei dem Funktionen durch eine Linearkombination von a-priori bekannten (physikalisch plausiblen) Funktionen

$$\{B_{0,i}\}_{i=1,\dots,n}, \quad \{B_{L,i}\}_{i=1,\dots,n}, \quad (3.12)$$

angenähert werden, verfügt der vorgeschlagene PCHIP-Ansatz über ein lokales Anpassungs-Tool. Das liegt daran, dass die Parameter keine Gewichte einer Linearkombination, sondern vielmehr lokal festgelegte Funktionswerte sind. Folglich wirkt sich eine Änderung der Wärmeflüsse auf einem Teilintervall $[u_a, u_b] \subset U$ nur auf Parameterkomponenten

¹Abkürzung aus dem englischen **P**iecewise **C**ubic **H**ermite **I**nterpolating **P**olynomials

in diesem Teilintervall aus, d.h. nur für $i = 1, \dots, 2n$ mit $\beta_i \in [u_a, u_b]$. Dies kann zusätzlich stabilisierend auf die Lösung des dynamischen (d.h. zeitabhängigen) inversen Problems wirken.

Die wohl bekannteste Parametrisierungsmethode zur Bearbeitung inverser Wärme-transferprobleme mit (enthalpie- oder) temperaturabhängigen Suchgrößen beruht auf dem Polynomialansatz

$$\beta_0(u) = \sum_{i=1}^n \beta_i u^{i-1}, \beta_L(u) = \sum_{i=1}^n \beta_{n+i} u^{i-1}, \quad (3.13)$$

siehe z.B. [54] oder [18], in dem die Autoren die Suchgrößen durch Polynome niedriger Ordnung darstellen. Dabei vereinfacht der Ansatz die Funktionen so drastisch, dass eine Betrachtung des inversen Problems meist nur für experimentelle Simulationen zu gebrauchen ist. Um komplexere Funktionen darstellen zu können, muss die Ordnung des Polynoms deutlich erhöht werden. Da die Koeffizienten der Monome höherer Ordnung sehr klein sein können, treten so jedoch numerische Instabilitäten auf. Nicht unüblich sind auch unerwünschte, starke Oszillationen. Diese Probleme hat der PCHIP-Ansatz nicht, da wir zum einen das inverse Problem nicht bezüglich der Struktur der Lösung einschränken. Zum anderen kann die Erhöhung der Komplexität von Funktionen einfach durch die Anpassung der Anzahl der Partitionspunkte $n > 0$ erfolgen. Im Vergleich zu dem diskutierten Fall (3.13) ist dieses Vorgehen stabiler und numerisch fortgeschrittener.

Die PCHIP-Interpolationsmethode selbst wurde in [28] vorgeschlagen, um eine stückweise kubische Interpolationsmethode einzuführen, die die Monotonie der Funktionswerte respektiert und so einen stetig differenzierbaren Interpolanten (in \mathcal{C}^1) erzeugt. In diesem Sinne ist der Interpolant formerhaltend. Im Rahmen der inversen Probleme ist dieses Verhalten günstig, weil Maxima und Minima des Interpolanten durch den Funktionswertparameter $\beta \in \mathbb{R}^{2n}$ erhalten bleiben, während andere Interpolationsmethoden (z.B. stückweise kubische Splines) Überschwinger erzeugen können, siehe dazu Abbildung A.2 im Anhang A. Dementsprechend können a-priori-Informationen mit dem PCHIP-Ansatz besser eingearbeitet werden. Außerdem wird so mit den Box-Constraints

$$\beta \in B := [0, \beta_{max}]^{2n} \quad (3.14)$$

die Bedingung (3.8) eingehalten, während Interpolanten anderer Interpolationsmetho-

den dies nicht unbedingt tun. Da die Wahl der Interpolationsmethode für allgemeine inverse Probleme mit implizitem Lösungsoperator eigentlich von untergeordneter Bedeutung ist, brechen wir die Ausführung an dieser Stelle ab und verweisen den interessierten Leser für weitere Konstruktionsdetails zu PCHIPs auf den Anhang A.1.

Schließlich können wir den Operator (3.6) spezifizieren:

Für eine fixe Partition π_n und der PCHIP Interpolationsmethode sei $u_0 \in H$ und $\alpha(u) \in \mathcal{C}^1(U)$ bekannt. Dann ist der Lösungsoperator S gegeben durch die folgende Kette von Prozessen

$$\boldsymbol{\beta} \in B = [0, \beta_{max}]^{2n} \xrightarrow{\text{Interpolation}} \beta_0, \beta_L \in \mathcal{C}^1(U) \xrightarrow{\text{Einsetzen in (2.26)-(2.27), löse ARWP}} u \in \mathcal{U}. \quad (3.15)$$

3.2 Der Beobachtungsoperator \mathcal{Q}

Da der Messprozess nicht die vollständige Enthalpielösung $S(\beta) = u \in \mathcal{U}$ des ARWPs (2.25) - (2.28) abdeckt, sondern nur einen gewissen Enthalpiezustand u_s , müssen wir den sogenannten Beobachtungsoperator

$$\mathcal{Q} : \mathcal{U} \rightarrow Y, \quad (3.16)$$

$$u \mapsto u_s, \quad (3.17)$$

definieren. Dieser erlaubt es uns die Lösung u mit den Messdaten u^δ abgleichen zu können.

Um die Motivation dieser Arbeit aufzugreifen, werden beim ACC-Prozess Sensoren (sogenannte Thermoelemente) in verschiedenen Tiefen $x_j \in \Omega$ für $j = 1, \dots, d$ in die Stahlplatte eingesetzt. Jeder dieser Sensoren misst dann die Temperaturen während der Kühlung zu den Zeitpunkten $t_i \in I$ für $i = 1, \dots, m$.

Aus Sicht der Anwendung ist also die Wahl

$$Y := \mathbb{R}^{d \times m}$$

sinnvoll.

Für $u \in \mathcal{U}$ sind die Komponenten des Enthalpiezustandes $u_s \in Y$ dann gegeben durch

$$(u_s)_{j,i} = (\mathcal{Q}u)_{j,i} = u(t_i, x_j). \quad (3.18)$$

Die Wohldefiniertheit der Punktauswertung einer starken Lösung $u \in \mathcal{U}$ in Zeit und Raum haben wir im vorherigen Kapitel gezeigt.

Wir stellen fest, dass der Beobachtungsoperator linear ist, d.h. die Fréchet-Ableitung ist $\mathcal{Q}' = \mathcal{Q}$. Der adjungierte Operator

$$\mathcal{Q}^* : Y = Y^* \rightarrow \mathcal{U}^*, \quad (3.19)$$

$$v \mapsto \sum_{j,i} \delta(\cdot - t_i) \delta(\cdot - x_j) v_{j,i} \quad (3.20)$$

ist leicht zu verifizieren, indem man das Frobenius-Skalarprodukt $(A, B)_Y = \sum_{j,l} A_{jl} B_{jl}$

für zwei reellwertige Matrizen auf Y zusammen mit der Skalarprodukterweiterung (2.93) nutzt, sodass

$$(\mathcal{Q}u, v)_Y = (u, \mathcal{Q}^*v)_{L^2(Q)}. \quad (3.21)$$

3.3 Der Gradient des Zielfunktional

Nachdem wir die Räume X, Y und \mathcal{U} , die Operatoren \mathcal{Q} und S , sowie die Box-Constraints B festgelegt haben, sind wir in der Lage das Zielfunktional

$$f(\boldsymbol{\beta}) := \frac{1}{2} \|F(\boldsymbol{\beta}) - u^\delta\|_Y^2 \quad (3.22)$$

zu definieren und zu deuten.

Zu einem gegebenen Parameter $\boldsymbol{\beta}$ werden die Wärmeflüsse $\beta_0, \beta_L \in \mathcal{C}^1([0, u_{max}])$ durch die PCHIP-Methode interpoliert und in die Randbedingungen des ARWPs eingesetzt. Dessen Lösung wird durch den Beobachtungsoperator formatiert, sodass ein Vergleich zu den Messdaten möglich ist. Die Frobenius-Norm berechnet anschließend die Norm des Residuums. Um das inverse Wärmetransferproblem zu lösen, minimieren wir die Norm des Residuums unter den Nebenbedingungen, d.h. $\boldsymbol{\beta}$ genügt den Box-Constraints. Insgesamt lautet die Minimierungsaufgabe

$$\min_{\boldsymbol{\beta}} f(\boldsymbol{\beta}), \quad \text{u.d.N. } \boldsymbol{\beta} \in B. \quad (3.23)$$

Da die Messdaten verrauscht sind, erfordert der iterative Minimierungsprozess von (3.23) ein Abbruchkriterium, siehe (1.6).

Zunächst sind wir aber daran interessiert eine erste Suchrichtung im Sinne einer Abstiegsrichtung des Zielfunktional bestimmen zu können. Diesbezüglich möchten wir die Berechnung der negativen Gradientenrichtung

$$-\nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)}) = -F'(\boldsymbol{\beta}^{(k)})^*(F(\boldsymbol{\beta}^{(k)}) - u^\delta), \quad (3.24)$$

herleiten, siehe [40], [65]. Das Vorgehen zur Berechnung von $(F(\boldsymbol{\beta}^{(k)}) - u^\delta)$ haben wir oben geklärt. Die wesentliche Arbeit liegt also in der Herleitung des adjungierten Operators der Fréchet-Ableitung $F'(\boldsymbol{\beta})^*$.

3.3.1 Herleitung des Gradienten

Unter der Annahme, dass die Fréchet-Ableitungen von F und S existieren, ergibt sich die Darstellung

$$F'(\boldsymbol{\beta})^* = ((\mathcal{Q} \circ S(\boldsymbol{\beta}))')^* = S'(\boldsymbol{\beta})^* \circ \mathcal{Q}^* \quad (3.25)$$

als ein Standardresultat aus der Funktionalanalysis, siehe z.B. [63], [75].

Wir berechnen zunächst eine Approximation von $F'(\boldsymbol{\beta})^*$, indem wir den Lösungsoperator S durch

$$\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}} : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathcal{U}, \quad (3.26)$$

$$\mathbf{h} \mapsto \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{S(\boldsymbol{\beta} + \varepsilon \mathbf{h}) - S(\boldsymbol{\beta})}{\varepsilon} \quad (3.27)$$

linearisieren und $S'(\boldsymbol{\beta})$ mit $\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}}$ in (3.25) ersetzen.

Ist $(\boldsymbol{\beta} + \varepsilon \mathbf{h}) \in B$ und existiert der Grenzwert in (3.27), so repräsentiert

$$w := \tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}} \mathbf{h} \quad (3.28)$$

die sogenannte Gâteaux-Ableitung, d.h. die Richtungsableitung von S ausgewertet in $\boldsymbol{\beta} \in B$ in Richtung $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^{2n}$. Für eine feste Richtung \mathbf{h} gilt $\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}} \mathbf{h} = S'(\boldsymbol{\beta}) \mathbf{h}$ und dementsprechend auch

$$\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}}^* v = S'(\boldsymbol{\beta})^* v, \quad \forall v \in \mathcal{U}^*. \quad (3.29)$$

Im Folgenden wollen wir die Berechnung von (3.28) und dem adjungierten Zustand $\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}}^* v$ für $v \in \mathcal{U}^*$ herleiten, wobei

$$\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}}^* : \mathcal{U}^* \rightarrow \mathbb{R}^{2n} \quad (3.30)$$

der adjungierte Operator ist, sodass gilt

$$\langle \tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}} \mathbf{h}, v \rangle_{\mathcal{U} \times \mathcal{U}^*} = (\mathbf{h}, \tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}}^* v)_2, \quad \forall v \in \mathcal{U}^*. \quad (3.31)$$

Lemma 3.3.1. *Sei $\beta \in B$ und die zugehörige Lösung $u := S(\beta)$ fest. Dann lässt sich der Operator \tilde{S}_β durch (3.28) berechnen, wobei w die Lösung des folgenden Anfangsrandwertproblems ist:*

$$w_t = (\alpha'(u)w)_{xx}, \quad t \in I, \quad x \in \Omega, \quad (3.32)$$

$$(\alpha'(u)w)_x = \beta'_0(u, \beta)w + \nabla\beta_0(u, \beta) \cdot \mathbf{h}, \quad t \in I, \quad x = 0, \quad (3.33)$$

$$-(\alpha'(u)w)_x = \beta'_L(u, \beta)w + \nabla\beta_L(u, \beta) \cdot \mathbf{h}, \quad t \in I, \quad x = L, \quad (3.34)$$

$$w = 0, \quad t = 0, \quad x \in \bar{\Omega}. \quad (3.35)$$

Mit β'_0 and β'_L bezeichnen wir hier die Ableitungen bezüglich der ersten Variablen, während $\nabla\beta_0$ und $\nabla\beta_L$ die Gradienten bezüglich der zweiten Variable sind.

Beweis. Sei $\varepsilon > 0$. Eine Störung des Parameters $\beta \in B$ und den zugehörigen Wärmeflüssen $\beta_0(u, \beta)$ und $\beta_L(u, \beta)$ durch $\varepsilon \mathbf{h} \in \mathbb{R}^{2n}$ führt zu den Wärmeflüssen $\beta_0(u_{\mathbf{h}}, \beta + \varepsilon \mathbf{h})$ und $\beta_L(u_{\mathbf{h}}, \beta + \varepsilon \mathbf{h})$, wobei $u_{\mathbf{h}} := S(\beta + \varepsilon \mathbf{h})$ die Lösung des gestörten Anfangsrandwertproblems ist:

$$u_{\mathbf{h},t} = (\alpha'(u_{\mathbf{h}})u_{\mathbf{h},x})_x, \quad t \in I, \quad x \in \Omega, \quad (3.36)$$

$$\alpha'(u_{\mathbf{h}})u_{\mathbf{h},x} = \beta_0(u_{\mathbf{h}}, \beta + \varepsilon \mathbf{h}), \quad t \in I, \quad x = 0, \quad (3.37)$$

$$-\alpha'(u_{\mathbf{h}})u_{\mathbf{h},x} = \beta_L(u_{\mathbf{h}}, \beta + \varepsilon \mathbf{h}), \quad t \in I, \quad x = L, \quad (3.38)$$

$$u_{\mathbf{h}} = u_0, \quad t = 0, \quad x \in \bar{\Omega}. \quad (3.39)$$

Subtrahieren des ursprünglichen ARWPs (2.25) - (2.28) von (3.36) - (3.39), dividieren des Ergebnisses durch $\varepsilon > 0$ und Grenzwertbildung $\varepsilon \rightarrow 0$ führt schließlich zu dem ARWP (3.32) - (3.35).

Wir bemerken, dass im Vergleich zu (2.25) die Differentialgleichung (3.32) in Bezug auf ihre Lösung linear ist. Von daher ist die Lösbarkeitstheorie (Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen) drastisch vereinfacht. Grundlegende Ergebnisse solcher Anfangsrandwertprobleme mit Lösungen in den klassischen Hölder-Räumen wurden auch von Ladyzhenskaya et al. formuliert, siehe Kapitel 5 in [45], insbesondere Theorem 5.3. Wir verzichten hier auf den detaillierten Beweis, weisen aber darauf hin, dass die Annahmen des Satzes 2.2.3 ausreichend sind, um die Existenz einer eindeutigen Lösung $w = \tilde{S}_\beta \mathbf{h} \in H^{2+l, 1+l/2}(\bar{Q}) \in \mathcal{U}$ für $l \in (0, 1)$ zu garantieren. Der Operator (3.26) ist somit wohldefiniert. \square

Satz 3.3.2. Sei $\beta \in B$ und $u := S(\beta)$. Unter der Annahme, dass für beliebige $v \in \mathcal{U}^*$ eine eindeutige Lösung $\varphi \in Z$ des adjungierten Problems

$$\varphi_t = -\alpha'(u)\varphi_{xx} - v, \quad t \in I, \quad x \in \Omega, \quad (3.40)$$

$$\alpha'(u)\varphi_x = \beta'_0(u, \beta)\varphi, \quad t \in I, \quad x = 0, \quad (3.41)$$

$$-\alpha'(u)\varphi_x = \beta'_L(u, \beta)\varphi, \quad t \in I, \quad x = L, \quad (3.42)$$

$$\varphi = 0, \quad t = T, \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (3.43)$$

existiert, kann der adjungierte Operator (3.30) bzw. der adjungierte Zustand explizit berechnet werden durch

$$\tilde{S}_\beta^* v = \int_0^T (-\nabla\beta_0(u(t, 0), \beta) \varphi(t, 0) - \nabla\beta_L(u(t, L), \beta) \varphi(t, L)) \, dt \in \mathbb{R}^{2n}. \quad (3.44)$$

Beweis. Sei $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^{2n}$ und $w := \tilde{S}_\beta \mathbf{h}$ gegeben. Wegen der Skalarprodukterweiterung (2.93) kann die linke Seite von (3.31) vereinfacht werden zu

$$(w, v)_{L^2(Q)} = \int_I \int_\Omega w(t, x)v(t, x) \, dx \, dt. \quad (3.45)$$

Wir untersuchen nun die rechte Seite von (3.31). Multiplikation von (3.32) mit $\varphi \in Z$, Integration über I und Ω und zweimalige partielle Integration liefern

$$\int_I \int_\Omega w_t \varphi \, dx \, dt = \int_I \int_\Omega (\alpha'(u)w)_{xx} \varphi \, dx \, dt \quad (3.46)$$

$$= \int_I \int_{\partial\Omega} (\alpha'(u)w)_x \varphi \, ds \, dt - \int_I \int_\Omega (\alpha'(u)w)_x \varphi_x \, dx \, dt \quad (3.47)$$

$$= \int_I \int_{\partial\Omega} (\alpha'(u)w)_x \varphi \, ds \, dt + \int_I \int_\Omega (\alpha'(u)w) \varphi_{xx} \, dx \, dt \quad (3.48)$$

$$- \int_I \int_{\partial\Omega} (\alpha'(u)w) \varphi_x \, ds \, dt \quad (3.49)$$

$$= \int_I \int_{\partial\Omega} (\alpha'(u)w)_x \varphi \, ds \, dt + \int_I \int_\Omega (\alpha'(u)w) \varphi_{xx} \, dx \, dt \quad (3.50)$$

$$- \int_I [(\alpha'(u)w) \varphi_x]_{x=L} - [(\alpha'(u)w) \varphi_x]_{x=0} \, dt. \quad (3.51)$$

Durch das Einsetzen der Randbedingungen (3.33) - (3.34) in das erste Integral von (3.50) erhalten wir weiterhin

$$\int_I \int_{\Omega} w_t \varphi \, dx \, dt = \int_I (-\beta'_L(u(t, L), \boldsymbol{\beta}) w(t, L) - \nabla \beta_L(u(t, L), \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{h}) \varphi(t, L) \, dt \quad (3.52)$$

$$+ \int_I (-\beta'_0(u(t, 0), \boldsymbol{\beta}) w(t, 0) - \nabla \beta_0(u(t, 0), \boldsymbol{\beta}) \cdot \mathbf{h}) \varphi(t, 0) \, dt \quad (3.53)$$

$$+ \int_I \int_{\Omega} (\alpha'(u)w) \varphi_{xx} \, dx \, dt. \quad (3.54)$$

$$- \int_I [(\alpha'(u)w) \varphi_x]_{x=L} - [(\alpha'(u)w) \varphi_x]_{x=0} \, dt. \quad (3.55)$$

Bezüglich der Zeitvariablen können wir die linke Seite von (3.52) partiell integrieren, sodass gilt

$$\int_I \int_{\Omega} w_t \varphi \, dx \, dt = \int_{\Omega} w(T, x) \varphi(T, x) \, dx - \int_I \int_{\Omega} w \varphi_t \, dx \, dt, \quad (3.56)$$

wobei die Anfangsbedingung (3.35) verwendet wurde.

Einsetzen der Gleichung (3.56) in (3.52) und Umordnen der Integrale führt schließlich zu

$$\int_I \int_{\Omega} w \{-\varphi_t - \alpha'(u) \varphi_{xx}\} \, dx \, dt \quad (3.57)$$

$$+ \int_I w(t, 0) \{[-\alpha'(u) \varphi_x + \beta'_0(u, \boldsymbol{\beta}) \varphi]_{x=0}\} \, dt \quad (3.58)$$

$$+ \int_I w(t, L) \{[\alpha'(u) \varphi_x + \beta'_L(u, \boldsymbol{\beta}) \varphi]_{x=L}\} \, dt \quad (3.59)$$

$$+ \int_{\Omega} w(T, x) \varphi(T, x) \, dx \quad (3.60)$$

$$= \int_I (-\nabla \beta_0(u(t, 0), \boldsymbol{\beta}) \varphi(t, 0) - \nabla \beta_L(u(t, L), \boldsymbol{\beta}) \varphi(t, L)) \cdot \mathbf{h} \, dt \quad (3.61)$$

$$\stackrel{(3.44)}{=} (\mathbf{h}, \tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}}^* v)_2, \quad (3.62)$$

also der rechten Seite von (3.31). Löst φ das adjungierte Problem (3.40) - (3.43), so verschwinden die Integrale (3.58) - (3.60) und (3.57) wird zu (3.45), also zur linken Seite von (3.31). Der Operator (3.44) erfüllt somit das Gewünschte. \square

Bemerkung 3.3.3. Abschließend erhalten wir für (3.24) mit (3.25) und (3.29) die Darstellung

$$-\nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)}) = -\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}^{(k)}}^* \circ \mathcal{Q}^* (F(\boldsymbol{\beta}^{(k)}) - u^\delta) \in \mathbb{R}^{2n}. \quad (3.63)$$

Bemerkung 3.3.4. Wir bemerken, dass wir von der Existenz einer eindeutigen Lösung $\varphi \in Z$ des adjungierten Problems (3.40) - (3.43) ausgegangen sind, wobei wir den Raum Z nicht spezifiziert haben. Tatsächlich bereitet uns (3.43) als eine Bedingung zum Endzeitpunkt $t = T$ ein Problem. Da (parabolische) Evolutionsgleichungen die Anfangsbedingung in Vorwärtszeit exponentiell glätten, ist die Berechnung rückwärts in der Zeit extrem schlecht-gestellt. Man kann davon ausgehen, dass die Norm solcher Lösungen exponentiell wachsen kann, wenn die Funktion, die den Endzustand beschreibt, nicht glatt genug ist. Trotzdem gibt es Regularisierungsmethoden zur Lösung solcher Probleme, z.B. die allgemeine Methode der Quasireversibilität, vgl. [50], [66]. In dieser Arbeit möchten wir nicht weiter auf dieses Problem eingehen. Da die Endbedingung (3.43) homogen ist, möchten wir annehmen, dass das Problem gut gestellt ist und geben uns mit der Zeittransformation $t := T - t$ zufrieden, welche uns ein Anfangsrandwertproblem ähnlich zu (3.32) - (3.35) liefert. Es wäre denkbar zusätzliche Bedingungen an $v \in \mathcal{U}^*$ zu stellen um den Lösungsraum $Z = H^{2+l, 1+l/2}(\bar{Q})$ zu erhalten. Für Anwendungszwecke wäre dies möglich mit einer Modifikation des Beobachtungsoperators, der statt direkten Punktauswertungen, L^2 -Integrale zur Annäherung der Punktauswertungen nutzt (z.B. mit einem sogenannten Mollifier, siehe z.B. [52]). Trotzdem kann der Raum Z auch kleiner gewählt werden, da lediglich Punktauswertungen von φ wohldefiniert sein müssen: Schließlich benötigen wir den adjungierten Zustand nur zur numerischen Behandlung und erhalten eine stabile Näherungslösung φ von (3.40) - (3.43) durch eine Finite-Differenzen-Methode (FDM).

4. Numerische Experimente

In diesem Kapitel lösen wir das inverse Wärmetransferproblem, also das Minimierungsproblem (3.23). Zum einen implementieren wir dazu das gedämpfte Landweber-Verfahren (mit anschließender Projektion), zum anderen das in [42] eingeführte Quasi-Newton Projektionsverfahren, auch PQN¹-Verfahren genannt. Ausgehend von einem Anfangsparameter $\boldsymbol{\beta}^{(0)} \in B$ sieht ein Iterationsschritt für beide Algorithmen die Berechnung von

$$\boldsymbol{\beta}^{(k+1)} = \mathcal{P}_B (\boldsymbol{\beta}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{p}_k) \quad (4.1)$$

vor, wobei $\mathcal{P}_B : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow B = [0, \beta_{max}]^{2n}$ die metrische Projektion auf B ist.

Dabei ist die Schrittweite λ_k und die Suchrichtung \mathbf{p}_k je nach Algorithmus zu bestimmen. Wir testen und vergleichen die beiden Methoden, indem wir synthetische Messdaten u^δ zu einem bekannten Rauschlevel $\delta > 0$ erzeugen und anschließend das inverse Wärmetransferproblem lösen.

Als Abbruchkriterium für das PQN-Verfahren verwenden wir das Diskrepanzprinzip, welches einen endlichen Abbruchindex k_* liefert, sodass

$$\frac{f(\boldsymbol{\beta}^{(k_*)})}{\|u^\delta\|_Y^2} \leq \rho\delta < \frac{f(\boldsymbol{\beta}^{(k)})}{\|u^\delta\|_Y^2} \quad (4.2)$$

für alle $k < k_*$ und festes $\rho > 1$ gilt.

Das gedämpfte Landweber-Verfahren zur Behandlung nichtlinearer inverser Probleme ist dabei sehr stabil. Die langsame Konvergenzgeschwindigkeit führt aber oft dazu, dass der Iterationsprozess, vor allem bei numerisch komplexen Aufgaben, aus Zeitmangel frühzeitig abgebrochen werden muss, siehe z.B. [23]. Wir erwarten also nicht, dass das gedämpfte Landweber-Verfahren der Bedingung (4.2) genügt und brechen somit die Berechnungen nach einer Maximalanzahl $K > 0$ an Iterationen ab.

Ziel des Algorithmenvergleichs ist dabei zu zeigen, dass die Performance mit dem PQN-Verfahren unter überschaubarem Mehraufwand² drastisch verbessert werden kann. Details zum gedämpften Landweber-Verfahren findet der interessierte Leser im Anhang B, während wir das PQN-Verfahren im nachfolgenden Abschnitt vorstellen möchten.

¹Aus dem Englischen Projected Quasi-Newton.

²Das Verfahren beruht lediglich auf einer geschickten Gradientenskalierung und benutzt somit die gleichen Zutaten wie das gedämpfte Landweber-Verfahren.

4.1 PQN-Verfahren

Das Quasi-Newton Projektionsverfahren (PQN-Verfahren) wurde von Kim et al. in [42] vorgestellt. Dabei handelt es sich um ein Optimierungsverfahren zur Lösung von Problemen der Art (3.23), d.h. der Minimierung eines Zielfunktional unter Box-Constraints. Die Autoren nehmen an, dass das Zielfunktional f zweimal stetig differenzierbar und streng konvex ist. Während Newton-Verfahren in der Regel bei der Berechnung der Abstiegsrichtung auf die Hessematrix H angewiesen sind, versuchen Quasi-Newton-Verfahren die Hessematrix nur über die Kenntnis des Gradienten zu approximieren. Dies ist oft vollkommen ausreichend und hat den Vorteil, dass die aufwändige Berechnung der Hessematrix in jedem Iterationsschritt umgangen werden kann. Die Approximation der Hessematrix, oder vielmehr dessen Inverse, wird dabei in jedem Iterationsschritt aktualisiert und anschließend verwendet, um die Gradientenrichtung zu skalieren. Wir erhalten somit einen approximativen Newton-Schritt als potentielle Suchrichtung zur Minimierung von f .

Die wohl berühmteste Update-Regel für die Hessematrix ist durch den Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) Algorithmus gegeben, welcher Anwendung findet im Quasi-Newton-BFGS-Verfahren für unbeschränkte Minimierungsprobleme. Sei H^k die approximative Hessematrix im k -ten Iterationsschritt und die Vektoren \mathbf{s}_k und \mathbf{g}_k gegeben durch

$$\mathbf{s}_k = \boldsymbol{\beta}^{(k+1)} - \boldsymbol{\beta}^{(k)} \text{ und } \mathbf{g}_k = \nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k+1)}) - \nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)}). \quad (4.3)$$

Die BFGS-Update-Regel für die Hessematrix lautet dann

$$H^{k+1} = H^k + \frac{\mathbf{g}_k \mathbf{g}_k^T}{\mathbf{g}_k^T \mathbf{s}_k} - \frac{H^k \mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T (H^k)^T}{\mathbf{s}_k^T H^k \mathbf{s}_k}. \quad (4.4)$$

Da wir die Suchrichtung \mathbf{p}_k durch das Lösen von

$$H^k \mathbf{p}_k = -\nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)}) \quad (4.5)$$

erhalten, ist die Inversion von H^k notwendig. Dies kann jedoch umgangen werden, indem man direkt die inverse Hessematrix in den Update-Prozess einbezieht. Unter Ausnutzung der Sherman-Morrison-Formel erhalten wir für die Inverse S^k von H^k die

Update-Regel

$$S^{k+1} = S^k + \frac{(\mathbf{s}_k^T \mathbf{g}_k + \mathbf{g}_k^T S^k \mathbf{g}_k)(\mathbf{s}_k \mathbf{s}_k^T)}{(\mathbf{s}_k^T \mathbf{g}_k)^2} - \frac{S^k \mathbf{g}_k \mathbf{s}_k^T + \mathbf{s}_k \mathbf{g}_k^T S^k}{\mathbf{s}_k^T \mathbf{g}_k}, \quad (4.6)$$

und schließlich somit die Suchrichtung im Quasi-Newton-BFGS-Verfahren für unbeschränkte Minimierungsprobleme durch

$$\mathbf{p}_k = -S^k \nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)}). \quad (4.7)$$

Es handelt sich also um ein sogenanntes Gradientenskalierungsverfahren.

Die Methode ist bekannt dafür, dass sie sehr effizient und robust für entsprechend glatte Zielfunktionen ist. In [19] und [77] weisen die Autoren jedoch darauf hin, dass die BFGS-Methode auch für nicht-glatte Funktionen eine sehr gute Performance aufweist, insbesondere in Kombination mit der Armijo-Wolfe-Liniensuche zur Bestimmung der zugehörigen Schrittweite λ_k .

Das PQN-Verfahren kann als eine natürliche Erweiterung des BFGS-Verfahrens auf beschränkte Optimierungsprobleme angesehen werden. Die Besonderheit hierbei ist die Auswahl der Parameterkomponenten, die noch in den Optimierungsprozess einbezogen werden können. Statt (4.7) berechnet man die Suchrichtung

$$\mathbf{p}_k = -\hat{S}^k \nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)}), \quad (4.8)$$

wobei

$$\hat{S}^k = \begin{cases} S_{ij}^k, & \text{wenn } i, j \notin I_1^k \cup I_2^k, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.9)$$

verfolgt, welche Parameterkomponenten fixiert werden und welche noch frei sind. Dabei werden die fixierten Komponenten in der Indexmenge $I_1^k \cup I_2^k$ gesammelt, welche wir im Folgenden definieren möchten. Die Indexmenge

$$I_1^k = \left\{ i : \beta_i^{(k)} = 0 \wedge [\nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)})]_i > 0, \text{ oder } \beta_i^{(k)} = \beta_{max} \wedge [\nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)})]_i < 0 \right\} \quad (4.10)$$

repräsentiert die sogenannten aktiven¹ Komponenten des Parameters, dessen Betrachtung für weitere Iterationen irrelevant ist, da die sonstige Hinzunahme das Zielfunk-

¹Die Parameterkomponente $\beta_i^{(k)}$ liegt bereits auf dem Rand der Box-Nebenbedingung $[0, \beta_{max}]$.

tional nicht weiter verringert. Dann ist z.B. für eine aktive Komponente $\beta_i^{(k)} = 0$, die nicht in I_1^k liegt, noch möglich, dass $\beta_i^{(k+1)} > 0$ mit

$$f(\boldsymbol{\beta}^{(k+1)}) < f(\boldsymbol{\beta}^{(k)}) \quad (4.11)$$

gilt. Der Ausschluss solcher Komponenten lässt sich folglich realisieren mit

$$\bar{S}^k = \begin{cases} S_{ij}^k, & \text{wenn } i, j \notin I_1^k, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (4.12)$$

Da das PQN-Verfahren kein Gradientenverfahren, sondern ein Gradientenskalierungsverfahren ist, kann es sein, dass die Abstiegsbedingung (4.11) doch nicht erfüllt wird.¹ Deswegen fixieren wir solche aktiven Komponenten, die noch unberührt von der Indexmenge I_1^k sind, mit der Indexmenge

$$I_2^k = \left\{ i : \beta_i^{(k)} = 0 \wedge [\bar{S}^k \nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)})]_i > 0, \text{ oder } \beta_i^{(k)} = \beta_{max} \wedge [\bar{S}^k \nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)})]_i < 0 \right\}. \quad (4.13)$$

Für weitere Einzelheiten verweisen wir den interessierten Leser auf [42].

Ist die Suchrichtung (4.8) gegeben, so ist die Bestimmung der Schrittweite λ_k für einen Iterationsschritt (4.1) notwendig. In dieser Arbeit implementieren wir dazu die Backtracking-Liniensuche basierend auf der Armijo-Bedingung, bei der eine Schrittweite $\lambda_k > 0$ akzeptiert wird, wenn

$$f(\boldsymbol{\beta}^{(k)}) - f(\mathcal{P}_B(\boldsymbol{\beta}^{(k)} + \lambda_k \mathbf{p}_k)) \geq -c \lambda_k \nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)})^T \mathbf{p}_k \quad (4.14)$$

für eine Konstante $c \in (0, 1)$ erfüllt ist. Genügt λ_k der Bedingung (4.14) nicht, so reduzieren wir die Schrittweite sukzessive durch $\lambda_k := \tau \lambda_k$ mit $\tau \in (0, 1)$. Wie in der originalen Arbeit von Armijo ([3]) verwenden wir $c = \tau = 0.5$.

Wir wählen $S^0 = I$, sodass die erste Suchrichtung einfach dem steilsten Abstieg entspricht. In den weiteren Iterationsschritten baut das PQN-Verfahren Krümmungsinformationen über (4.6) auf, was den Minimierungsprozess (durch das Einbeziehen der zweiten Ableitung) drastisch beschleunigt.

¹Die Komponente der Abstiegsrichtung ist schließlich $[\bar{S}^k \nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)})]_i$ und nicht $[\nabla f(\boldsymbol{\beta}^{(k)})]_i$.

4.2 Experimentelles Setting

Um das Zielfunktional (3.22) vollständig für numerische Experimente zu beschreiben, müssen wir zum einen das Setting des Anfangsrandwertproblems (2.25) - (2.28) fixieren und zum anderen die verrauchten Messdaten u^δ simulieren.

Um der Motivation dieser Arbeit, dem ACC-Kühlprozess von Stahlplatten, treu zu bleiben, versuchen wir die Größen im experimentellen Setting so nahe wie möglich an physikalisch plausiblen Werten zu orientieren, vernachlässigen dabei aber meist die SI-Einheiten¹.

Wir legen eine Dicke der Stahlplatte von 50 mm fest, d.h. $L = 0.05$ [m] und $\Omega = [0, 0.05]$. Das Zeitintervall $I = [0, T]$ sei durch $T = 30$ [s] fixiert, was einer typischen Gesamtkühlzeit im zugrunde liegenden ACC-Prozess entspricht. Indem wir die temperaturabhängigen Materialparameter k und C in (2.21) definieren, sind wir in der Lage die Temperatur durch (2.2) in Enthalpie umzuwandeln. Wir verweisen auf Abbildung 4.1 für eine Anschauung der Transformation, die genaue Umrechnung von Temperatur zu Enthalpie sei an dieser Stelle aber nicht relevant.

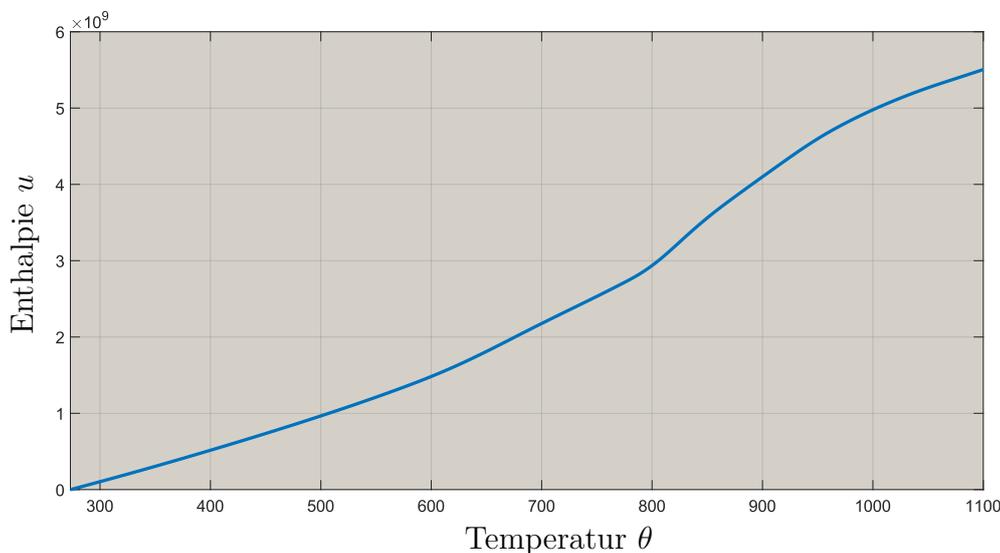


Abbildung 4.1: Temperatur-zu-Enthalpie Transformation

Dementsprechend können wir auch die Temperatur- bzw. Enthalpieleitfähigkeit $\alpha' = \frac{k}{C}$ darstellen, vergleiche (2.14). Da das Ergebnis in unserem Fall eine stückweise kubische Funktion ist, lassen wir hier die analytische Form weg und verweisen auf Abbildung 4.2, um die Nichtlinearität der Enthalpieleitfähigkeit zu bestätigen.

¹Eine Tabelle der SI-Einheiten befindet sich im Anhang C.

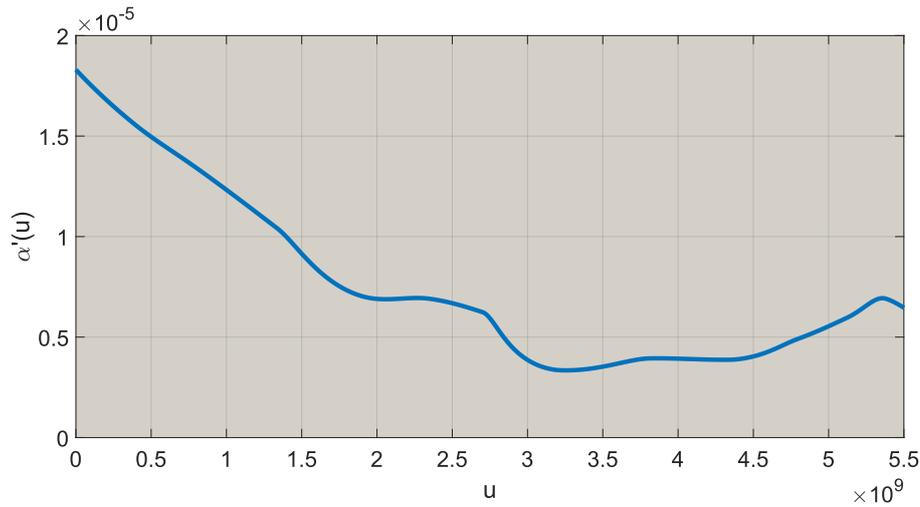


Abbildung 4.2: Enthalpieleitfähigkeit $\alpha'(u)$ in Abhängigkeit der Enthalpie u

Unter der Annahme einer homogenen Anfangstemperatur von ca. 1100 K legen wir außerdem die Anfangsbedingung $u(0, x) = u_0(x) = 5.5 \times 10^9$ fest. Gleichzeitig soll dieser Wert der Enthalpie-Obergrenze u_{max} entsprechen. Somit ist das Setting des ARWPs bis auf die Randbedingungen (2.26) - (2.27) gesetzt.

Wir erzeugen verrauschte Messdaten u^δ , indem wir die (exakten) Wärmeflüsse $\beta_0^{ex}(u), \beta_L^{ex}(u) \in C^1([0, u_{max}])$ aus Abbildung 4.3 in die Randbedingungen einsetzen, die zugehörige Lösung $u^{ex} \in \mathcal{U}$ des nun vollständigen ARWPs berechnen und anschließend mit dem Beobachtungsoperator auswerten.

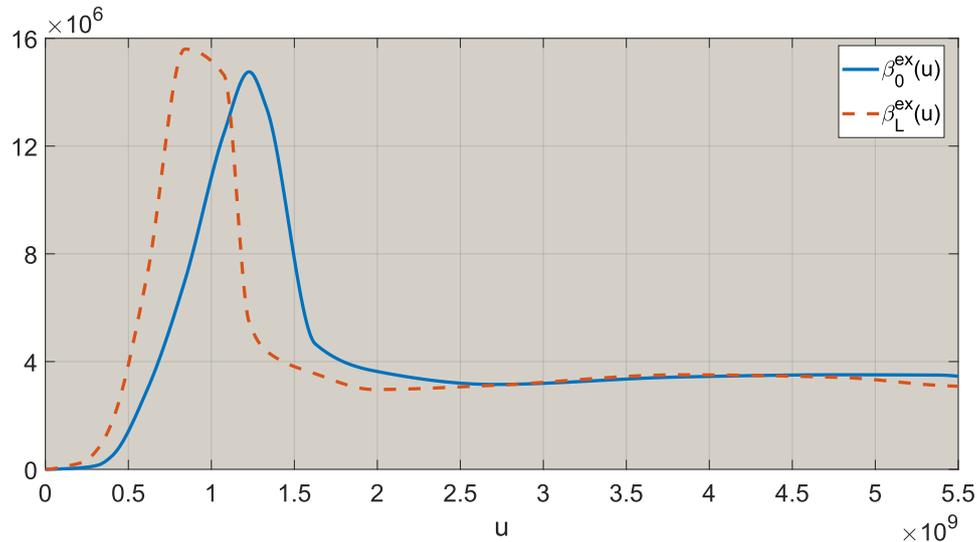
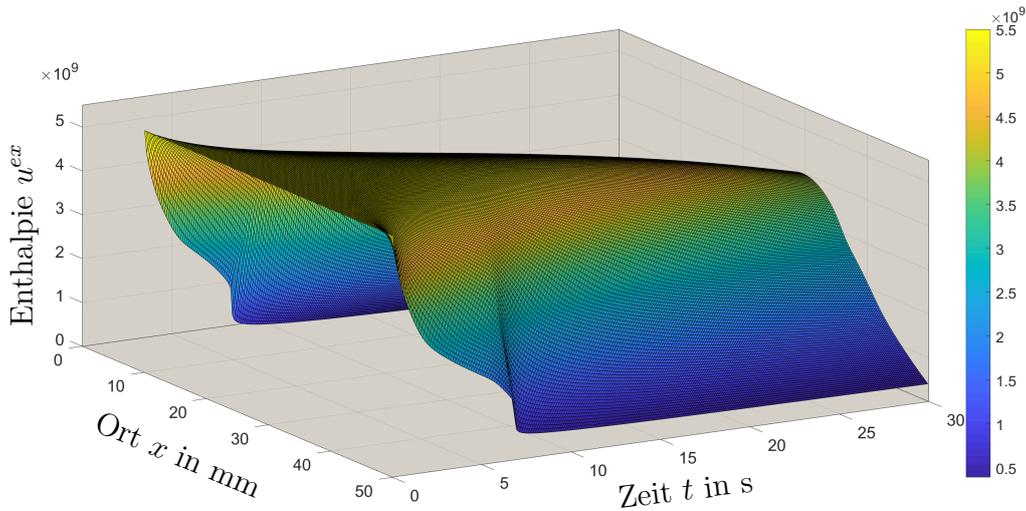


Abbildung 4.3: Exakte Wärmeflüsse, um u^δ zu simulieren

Dabei wird die Lösung u^{ex} durch eine stabile Finite-Differenzen-Methode (FDM) auf einem endlichen Raum- und Zeitgitter approximiert, siehe Abbildung 4.4.

Abbildung 4.4: Approximierte Lösung von u^{ex}

Die Wärmeleitung im Inneren, d.h. für $x \in \Omega$, wird hierbei lediglich von der Enthalpieleitfähigkeit α' gesteuert, während der Wärmeübergang an den Rändern $x = 0$ und $x = L$ über die Wärmeflüsse β_0^{ex} und β_L^{ex} bestimmt wird. Den oben erwähnten Leidenfrost-Effekt haben wir dabei in den exakten Wärmeflüssen modelliert. Ausgehend von hohen Enthalpiewerten simuliert der Beginn der Peaks in Abbildung 4.3 den Zusammenbruch der Dampfschichten, was zu erhöhten Wärmeflüssen führt, welche mit niedrigen Enthalpiewerten wieder abklingen.

Für den Messprozess simulieren wir den Einsatz von $d = 5$ Thermoelementen in den Messtiefen

$$x \in (x_1 = 0.002, x_2 = 0.01, x_3 = 0.025, x_4 = 0.04, x_5 = 0.048)^T. \quad (4.15)$$

Dies entspricht dem Kern der Stahlplatte und jeweils 2mm bzw. 10mm unter den Oberflächen. Während der Kühlung erfasst jeder solcher Thermoelemente alle 0.1s die Enthalpie,¹ also zu den Zeitpunkten

$$t \in (t_1 = 0.1, t_2 = 0.2, \dots, t_{300} = T = 30)^T. \quad (4.16)$$

Wir erhalten damit die beobachtete Enthalpiematrix $Qu^{ex} \in Y = \mathbb{R}^{5 \times 300}$, siehe (3.18). Den Messfehler simulieren wir unter der Annahme, dass eine typische Sensorgenauigkeit in dem Fehlerbereich ± 0.5 K liegt. Dementsprechend addieren wir auf jede Komponente

¹Wir simulieren an dieser Stelle einen 10 Hz Logger.

von Qu^{ex} eine gleichverteilte Zufallszahl im Intervall $[-2, 2] \times 10^6$, um schließlich die verrauschten Daten u^δ zu erhalten. Aus der Ermittlung des relativen Rauschlevels mit der Frobenius-Norm durch

$$\frac{1}{2} \|Qu^{ex} - u^\delta\|_Y^2 \leq \delta \|u^\delta\|_Y^2, \quad (4.17)$$

ergab sich der Wert $\delta := 6.65 \times 10^{-8}$. Eine solche Berechnung können wir natürlich nur bei simulierten Messfehlern durchführen. Für reale Daten muss δ natürlich geschätzt werden.

4.3 Numerische Resultate

Mit α' und u_0 aus dem experimentellen Setting ist auch der Vorwärtsoperator (3.2) vollständig beschrieben. Zur Bestimmung des Wärmeflussparameters $\boldsymbol{\beta} \in B$ und den zugehörigen Wärmeflüssen (PCHIP Interpolanten) $\beta_0(u, \boldsymbol{\beta}), \beta_L(u, \boldsymbol{\beta}) \in \mathcal{C}^1([0, u_{max}])$ möchten wir die verrauschten Messdaten u^δ verwenden, um (3.23) zu lösen und anschließend das Ergebnis mit den simulierten exakten Wärmeflüssen vergleichen.

Für π_n aus (3.9) wählen wir eine äquidistante Partition des Intervalls $[0, u_{max}]$ für $n = 20$, d.h. $u_i = u_{max} \cdot \left(\frac{i-1}{n-1}\right)$ für $i = 1, \dots, n$. Für die Box-Nebenbedingung setzen wir $B = [0, \beta_{max}]^{2n}$ mit $\beta_{max} = 16 \times 10^6$, vergleiche Abbildung 4.3.

Als Startwert legen wir $\boldsymbol{\beta}^{(0)} = \mathbf{0} \in \mathbb{R}^{2n}$ fest. Wir gehen also davon aus, dass wir keine a-priori Informationen über die Struktur der Lösung des inversen Wärmetransferproblems kennen.

Ausgehend von dem Parameter $\boldsymbol{\beta}^{(k)}$ für $k = 0, 1, \dots, k_*$ durchlaufen wir die Prozesskette (3.15) des Lösungsoperators S . Auch hier erhalten wir eine approximative Enthalpielösung, indem wir das ARWP durch eine stabile FDM lösen. Hierbei verwenden wir aber ein anderes Raum- und Zeitgitter als in der vorangegangenen Simulation, um das 'inverse Verbrechen' zu vermeiden.¹ An dieser Stelle erwähnen wir, dass die exakten Wärmeflüsse aus Abbildung 4.3 stückweise kubische Interpolanten auf einer völlig anderen Partition als π_n sind. Andernfalls bestünde auch hier der Inversionsprozess lediglich im Invertieren des numerischen Vorwärtsmodells.

Im kontinuierlichen Setting würde die Lösung $S(\boldsymbol{\beta}^{(k)})$ nun auf den Beobachtungsoperator \mathcal{Q} aus (3.18) angewendet werden. Da wir aber nur eine approximierte Lösung auf einem endlichen Raum- und Zeitgitter besitzen, interpolieren wir die bzgl. (4.15) und (4.16) notwendigen Enthalpiewerte. Auf diese Weise erhalten wir eine Approximation der Enthalpiematrix $F(\boldsymbol{\beta}^{(k)})$, welche mithilfe des Zielfunktional (3.22) mit den Messdaten u^δ abgeglichen werden kann.

Um (4.1) in der k -ten Iteration durchzuführen, berechnen wir den Gradienten (3.63) mit \mathcal{Q}^* und $\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}^{(k)}}^*$ aus (3.19) bzw. (3.30). Dabei wird $\tilde{S}_{\boldsymbol{\beta}^{(k)}}^*$ dadurch berechnet, dass das adjungierte Problem (3.40) - (3.43) mit einer stabilen FDM gelöst wird. Die approxi-

¹Der aus [17] bekannte Originalbegriff 'inverse crime' umschreibt das Vorgehen, bei dem Daten mit derselben numerischen Näherung simuliert und invertiert werden.

mative Lösung φ wird anschließend genutzt, um das Integral (3.44) numerisch mit der Trapezregel auszuwerten. Wir bemerken, dass die Gradienten $\nabla\beta_0$ und $\nabla\beta_L$ (bzgl. des Parameters β) analytisch berechnet werden können, wenn die Interpolationsmethode bekannt ist. Für eine Berechnung des Gradienten für einen PCHIP-Interpolanten verweisen wir ausdrücklich an dieser Stelle auf Anhang A.3.

Für den ersten Schritt des PQN-Verfahrens wählen wir $S^0 = I$. Danach werden die Gradienten (3.63) mithilfe der berechneten inversen Hessematrix skaliert, welche in jedem Iterationsschritt durch (4.6) aktualisiert wird. Wir erhalten so eine Suchrichtung via (4.8), indem wir auch die freien und fixierten Komponenten über (4.10) und (4.13) erfassen. Anschließend implementieren wir die Backtracking-Liniensuche (4.14), um eine angemessene Schrittweite $\lambda_k > 0$ zu erhalten.

Dieses Vorgehen wird so lange wiederholt, bis die Diskrepanzprinzip-Bedingung (4.2) erfüllt ist. Da wir Diskretisierungsfehler aufgrund mehrerer Approximationen eingeschlossen haben, wählen wir $\rho = 2$, um die Iterationen rechtzeitig zu stoppen, d.h. $\rho\delta = 1.33 \times 10^{-7}$.

Wir vergleichen dabei die Performance des PQN-Verfahrens zu der des gedämpften Landweber-Verfahrens

$$\beta^{(k+1)} = \mathcal{P}_B(\beta^{(k)} - \lambda \nabla f(\beta^{(k)})) \quad (4.18)$$

für einen konstanten Dämpfungsfaktor $\lambda > 0$, vergleiche Anhang B. Da wir nicht erwarten, dass die Iterationen über (4.2) abgebrochen werden, setzen wir die maximale Iterationszahl auf $K = 10000$.

Die numerischen Ergebnisse sind in Abbildung 4.5 dargestellt.

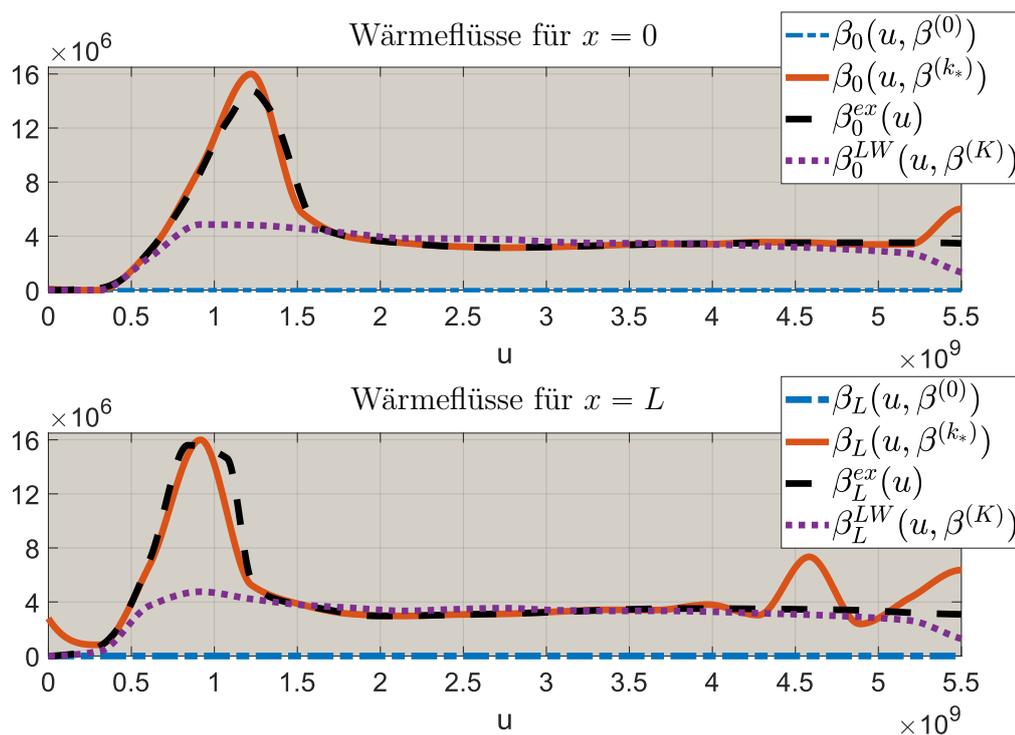


Abbildung 4.5: Vergleich der exakten Wärmefflüsse mit PCHIP-Interpolanten zu (a) dem Anfangsparameter $\beta^{(0)}$, (b) dem optimierten Parameter $\beta^{(k_*)}$ für das PQN-Verfahren, (c) dem Parameter $\beta^{(K)}$ für das gedämpfte Landweber-Verfahren nach $K = 10000$ Iterationen

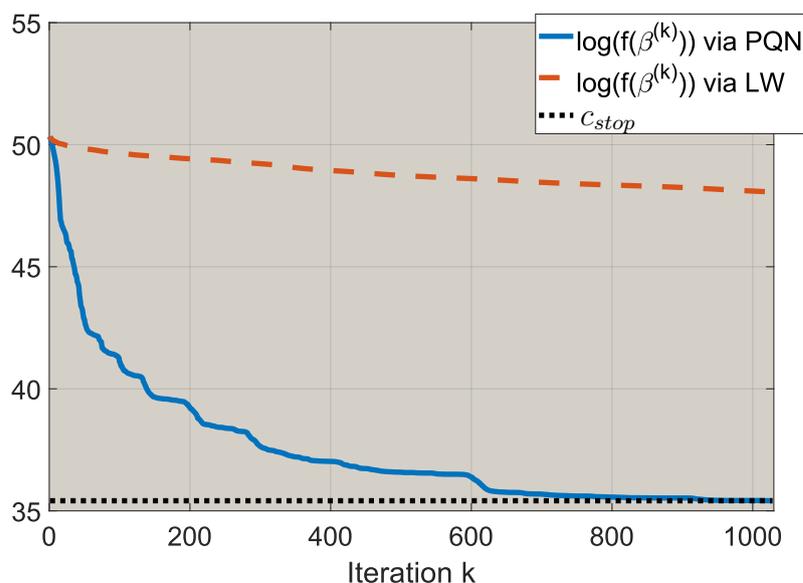


Abbildung 4.6: Logarithmus der Residuen für die ersten $k_* = 1028$ Iterationen und dem Schwellenwert $c_{stop} = \log(\rho\delta\|u^\delta\|_Y^2)$ für das Abbruchkriterium (4.2)

In Abbildung 4.6 ist zu erkennen, dass das PQN-Verfahren der Bedingung (4.2) nach nur $k_* = 1028$ Iterationen genügt, während das gedämpfte Landweber-Verfahren nach $K = 10000$ Iterationen noch sehr weit davon entfernt ist. Bei der Erhöhung des Dämpfungsfaktors $\lambda > 0$ in (4.18) zur Beschleunigung des Landweber-Verfahrens tauchen numerische Instabilitäten auf. Die Verwendung des Backtracking-Liniensuchalgorithmus anstatt λ zu fixieren, liefert auch keine signifikanten Verbesserungen für das gedämpfte Landweber-Verfahren. Es überrascht nicht, dass das PQN-Verfahren aufgrund der Einbeziehung von Krümmungsinformationen überlegen ist. Abbildung 4.5 zeigt, dass die Interpolanten $\beta_0(u, \boldsymbol{\beta}^{(k_*)})$ und $\beta_L(u, \boldsymbol{\beta}^{(k_*)})$ die exakten Wärmeflüsse sehr gut approximieren. Die Schwingungen auf der rechten Seite der Abbildung lassen sich durch die verrauschten Daten und weitere Fehler durch Approximationen erklären, die für das PQN-Verfahren durchgeführt werden müssen. Da die Hauptinformation über den Leidenfrost-Effekt in den Peaks auf der linken Seite liegt, sind diese Fehler vernachlässigbar, insbesondere wenn man die signifikante Reduktion der Rechenzeit berücksichtigt.

Wir verzichten an dieser Stelle auf weitere numerische Experimente, nehmen aber vorweg, dass das PQN-Verfahren in der Lage ist beliebige Wärmeflüsse β_0^{ex} und β_L^{ex} aus dem Raum $\mathcal{C}^1([0, u_{max}])$ zu identifizieren, solange die Anzahl n der Partitionspunkte des Interpolationsansatzes angemessen gewählt wird. Danach sind aber keine a-priori Informationen der Suchgrößen notwendig. Je nach Rauschlevel δ kann das Abbruchkriterium (4.2) angepasst werden, um die Iterationen frühzeitig zu stoppen.

Wir betonen erneut, dass der Vergleich beider Verfahren nicht das einzige Ziel verfolgt eine schnellere Konvergenz des PQN-Verfahrens zu zeigen. Vielmehr wollen wir hervorheben, dass sich beide Verfahren zunächst auf dieselbe Zutat, nämlich der Berechnung des Gradienten (3.63), berufen und dass das PQN-Verfahren unter einem überschaubaren, aber lohnenden Mehraufwand gegenüber dem gedämpften Landweber-Verfahren aufgesetzt werden kann.

Wir fassen in Abbildung 4.7 nochmals den Algorithmus zur Lösung von (3.23) mithilfe des PQN-Verfahrens zusammen.

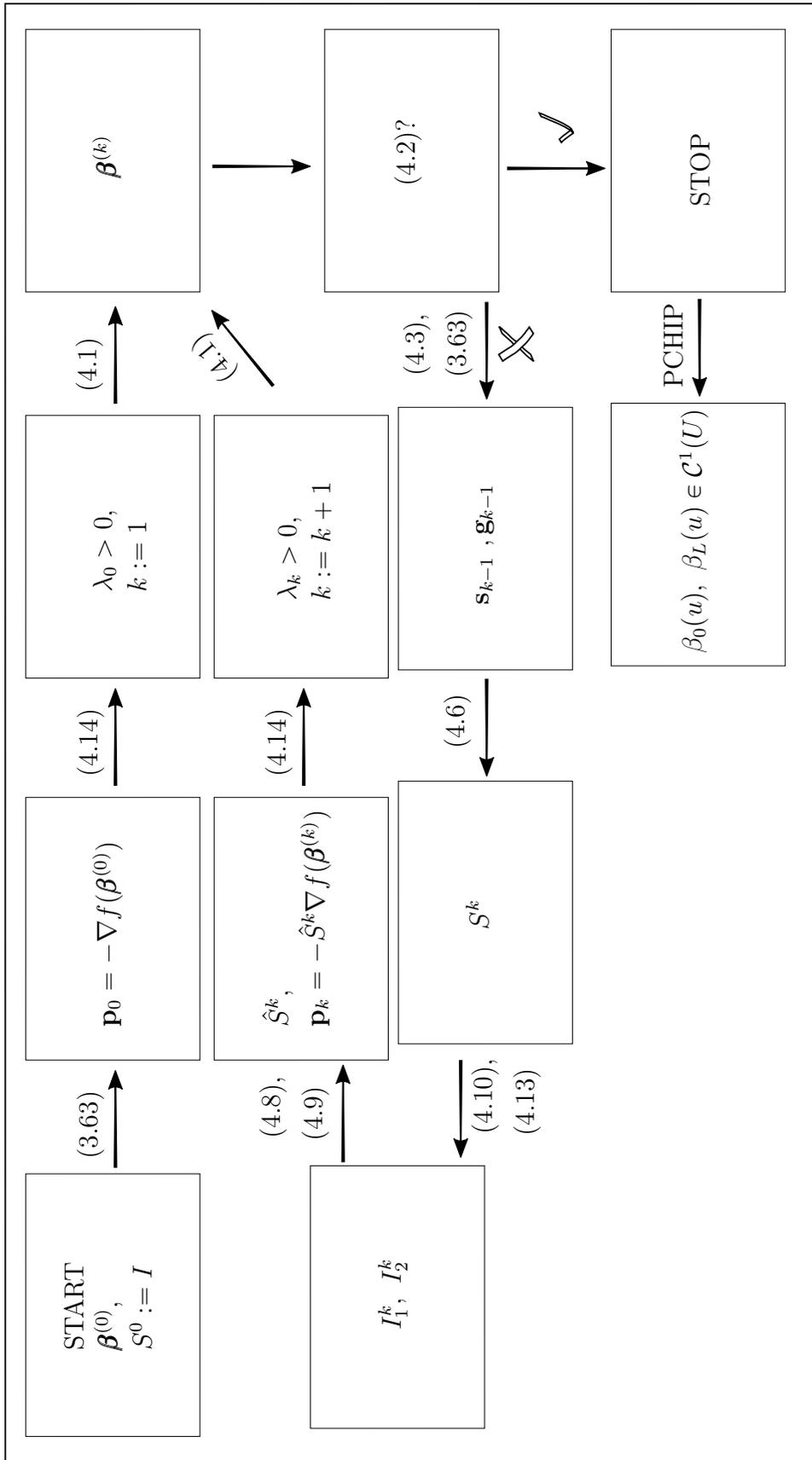


Abbildung 4.7: Algorithmus zur Lösung von (3.23) mithilfe des PQN-Verfahrens

5. Numerische Bestimmung des Wärmeleitverhaltens

In diesem Teil der Arbeit möchten wir eine Kurzzusammenfassung eines anderen inversen Wärmetransferproblems angeben. Dabei stützen wir uns auf die Ergebnisse der Publikation [61], bei der die Bestimmung des Wärmeleitverhaltens des Materials im Inneren behandelt wird. Wir untersuchen das Problem hier bei Weitem nicht so ausführlich wie das vorangegangene. Dieser Abschnitt ist heuristisch motiviert und soll lediglich einen numerischen Fahrplan umreißen, mit dem das Wärmeleitverhalten aus ähnlichen Messungen und Methoden bestimmt werden kann wie zuvor.

In den vorangegangenen Kapiteln haben wir das inverse Wärmetransferproblem zur Identifizierung unbekannter Wärmeflüsse diskutiert und gelöst. Dabei sind wir davon ausgegangen, dass die Enthalpieleitfähigkeit α' bekannt ist. Insbesondere bedeutet dies, dass die Materialparameter (Wärmeleitfähigkeit k , Wärmekapazität C) aus (2.21) gegeben sind, siehe (2.14). In der Praxis ist die Kenntnis von C erforderlich, um die Enthalpietransformation (2.2) durchzuführen und so die Temperaturmessungen der Thermolemente als Enthalpiemessungen darzustellen.

Berechtigerweise kommt die Frage auf, was zu tun ist, sollten die Materialparameter k und C nicht bekannt sein. An dieser Stelle hilft die (äquivalente) temperaturabhängige Modellierung des Wärmetransfers im Sinne des Anfangsrandwertproblems (2.21) - (2.24) aus, wobei wir die Randbedingungen durch Dirichlet-Randbedingungen wie folgt austauschen möchten:

Wir nehmen an, dass der Messprozess aus 3 Thermolementen besteht, die in den Messtiefen

$$x \in (x_1 = \varepsilon, x_2 = L/2, x_3 = L - \varepsilon)^T \quad (5.1)$$

verbaut sind, wobei ε jeweils den Abstand zwischen der Oberfläche und den oberflächennahen Messtiefen x_1 bzw. x_3 kennzeichnet, siehe Abbildung 5.1.

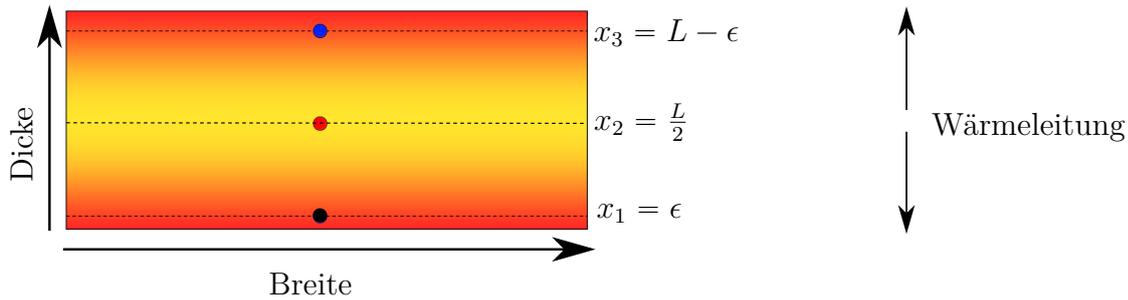


Abbildung 5.1: Ausschnitt der Stahlplatte mit 3 Thermoelementen, vgl. Abbildung 1.4

Die Thermoelemente sind hier farblich kodiert, sodass wir die gemessenen Temperaturkurven in Abbildung 5.2 direkt der entsprechenden Messtiefe zuordnen können, vgl. Abbildung 1.5.

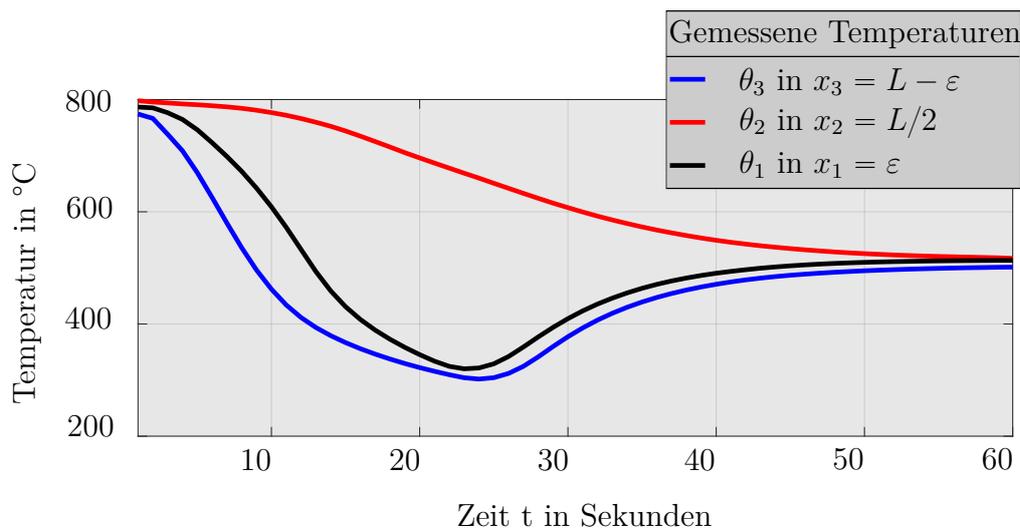


Abbildung 5.2: Gemessene (und interpolierte) Temperaturen

Wir bemerken, dass wir an dieser Stelle die interpolierten Funktionen θ_1 , θ_2 und θ_3 in die Abbildung aufgenommen haben, obwohl die Zeitmessungen wieder diskret sind, d.h. die i -te Komponente von θ_1, θ_2 oder $\theta_3 \in \mathbb{R}^m$ entspricht der Messung zum Zeitpunkt t_i , $i = 1, \dots, m$. Ist ϵ hinreichend klein, so ist die Wärmeleitung im Inneren nahezu vollständig von den Wärmeströmen $x_2 \rightarrow x_1$ und $x_2 \rightarrow x_3$ beschrieben, vergleiche Abbildung 5.1. Wir können das Modell zur Beschreibung der Wärmeleitung im Inneren

von daher durch das ARWP wie folgt beschreiben:

$$C(\theta)\theta_t = (k(\theta)\theta_x)_x, \quad t \in I, x \in \Omega_\varepsilon, \quad (5.2)$$

$$\theta = \theta_1, \quad t \in I, x = x_1, \quad (5.3)$$

$$\theta = \theta_3, \quad t \in I, x = x_3, \quad (5.4)$$

$$\theta = \theta_0, \quad t = 0, x \in \Omega_\varepsilon. \quad (5.5)$$

Hierbei ist $\Omega_\varepsilon := [x_1, x_3] \subset \Omega$ das verkleinerte Ortsintervall. Die Messungen aus den zwei oberflächennahen Thermoelementen werden also aufgegeben, um Dirichlet-Randbedingungen zu erzeugen. Die Kernmessung $\boldsymbol{\theta}_2 \in \mathbb{R}^m$ entspricht dann den Messdaten zu dem folgenden inversen Wärmetransferproblem:

Für gegebene Randtemperaturen θ_1, θ_3 , sowie der Anfangsbedingung θ_0 und den Messdaten $\boldsymbol{\theta}_2$, bestimme die passenden Materialparameter k und C .

Da die Materialparameter von der Temperatur θ abhängen, welche Lösung des Anfangsrandwertproblems (5.2) - (5.5) ist, handelt es sich hierbei also erneut um einen implizit gegebenen Vorwärtsoperator, mit einer entsprechenden Definition, der Gestalt

$$F(k(\theta), C(\theta), \theta) = 0. \quad (5.6)$$

Der PCHIP-Ansatz aus Abschnitt 3.1 erlaubt es uns wieder die temperaturabhängigen Materialparameter durch reellwertige Parameter $(\mathbf{k}, \mathbf{C})^T \in \mathbb{R}^{2n}$ zu ersetzen und den Vorwärtsoperator wieder explizit durch

$$F : \mathbb{R}^{2n} \rightarrow \mathbb{R}^m \quad (5.7)$$

darzustellen. Dabei fassen wir dieses Mal den Beobachtungsoperator direkt in die Prozesskette mit ein:

$$(\mathbf{k}, \mathbf{C})^T \in \mathbb{R}^{2n} \xrightarrow{\text{Interpolation}} k, C \in C^1 \xrightarrow{(5.3)-(5.4), \text{ löse ARWP}} \theta \xrightarrow{\text{Beobachtung}} \theta(\cdot, x_2) \in \mathbb{R}^m. \quad (5.8)$$

Wir fassen die Bestimmung von $\mathbf{p} := (\mathbf{k}, \mathbf{C})^T$ als ein Parameteridentifizierungsproblem auf und minimieren dazu das Least-Squares-Funktional

$$f(\mathbf{p}) := \|F(\mathbf{p}) - \boldsymbol{\theta}_2\|_2^2, \quad (5.9)$$

wobei $\|\cdot\|_2$ die euklidische Norm im \mathbb{R}^m bezeichnet. Erfahrungsgemäß kann das eventuelle Vorhandensein von kleinen Messfehlern in $\boldsymbol{\theta}_2$ vernachlässigt werden. Zur Minimierung des Funktionals (5.9) verwenden wir einen iterativen Löser.

Um das vorgeschlagene Vorgehen auf Machbarkeit zu überprüfen, erzeugen wir Messdaten $\boldsymbol{\theta}_2 \in \mathbb{R}^m$, indem wir simulierte Materialparameter $k^{ex}, C^{ex} \in \mathcal{C}^1(\Theta)$ heranziehen, eine approximierten Lösung θ des Problems (5.2) - (5.5) mithilfe einer stabilen Finiten-Differenzen-Methode berechnen und diese im Kern $x = x_2$ auswerten. Für den Temperaturbereich $\theta \in \Theta = [0, 900]$ (in Grad Celsius) seien die Funktionen durch

$$k^{ex}(\theta) = 60 - \frac{\theta}{30}, \quad (5.10)$$

$$C^{ex}(\theta) = 7650 \cdot \left(475 + 0.0265 \cdot \theta + 0.000855 \cdot \theta^2 - \frac{0.000855 \cdot \theta^2 - 0.1735 \cdot \theta + 140}{1 + e^{-0.1(\theta-700)}} \right), \quad (5.11)$$

festgelegt, siehe Abbildung 5.3.

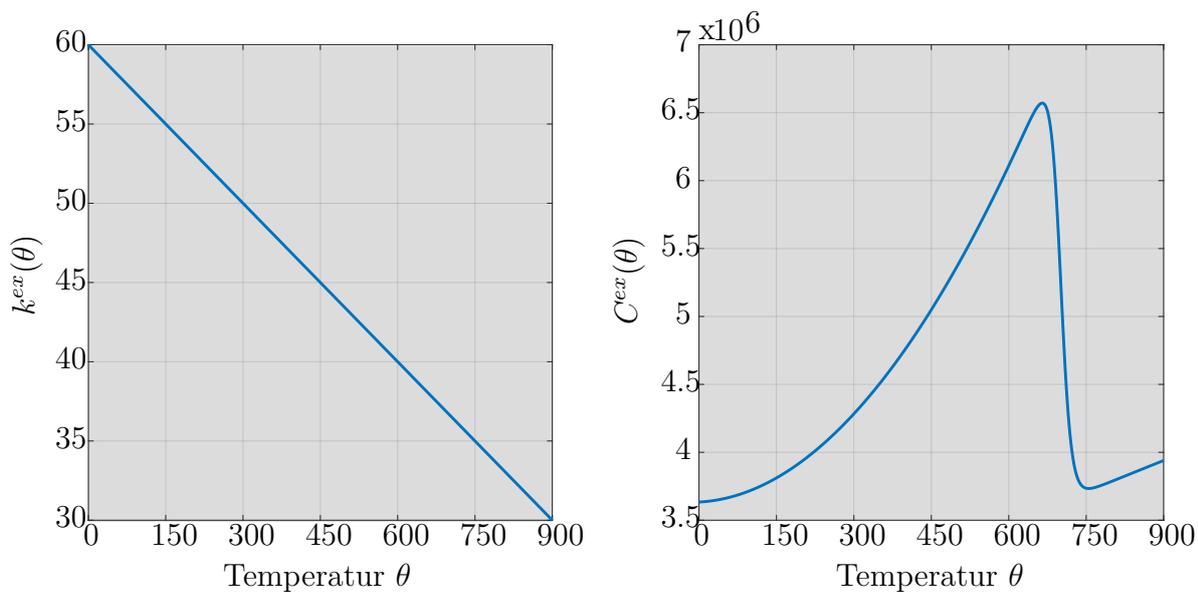


Abbildung 5.3: Exakte Materialparameter $k^{ex}, C^{ex} \in \mathcal{C}^1(\Theta)$

Weiterhin wählen wir eine äquidistante Partition π_n von Θ für $n = 50$ Stützstellen. Um zu betonen, dass wir auch hier keine a-priori Information der Suchgrößen benötigen, legen wir konstante Startwerte

$$\mathbf{k}_0 = \underbrace{(45, \dots, 45)}_{n\text{-mal}}^T \text{ und } \mathbf{C}_0 = 10^6 \cdot \underbrace{(4.5, \dots, 4.5)}_{n\text{-mal}}^T \quad (5.12)$$

fest. Die PCHIP-Interpolanten sind dementsprechend auch

$$k_0(\theta) = 45, \quad (5.13)$$

$$C_0(\theta) = 4.5 \cdot 10^6 \quad (5.14)$$

für alle $\theta \in \Theta$ konstant.

Zur Minimierung von (5.9) wählen wir einen *trust-region-reflective* Algorithmus, der von der Matlab-Toolbox *lsqnonlin* bereitgestellt wird. Das ARWP lösen wir an dieser Stelle erneut approximativ auf einem endlichen Raum- und Zeitgitter. Das Ergebnis, die PCHIP-Interpolanten k_{opt} und C_{opt} , vergleichen wir mit den exakten Materialparametern im Temperaturintervall $\tilde{\Theta} \in \Theta^1$ in Abbildung 5.4.

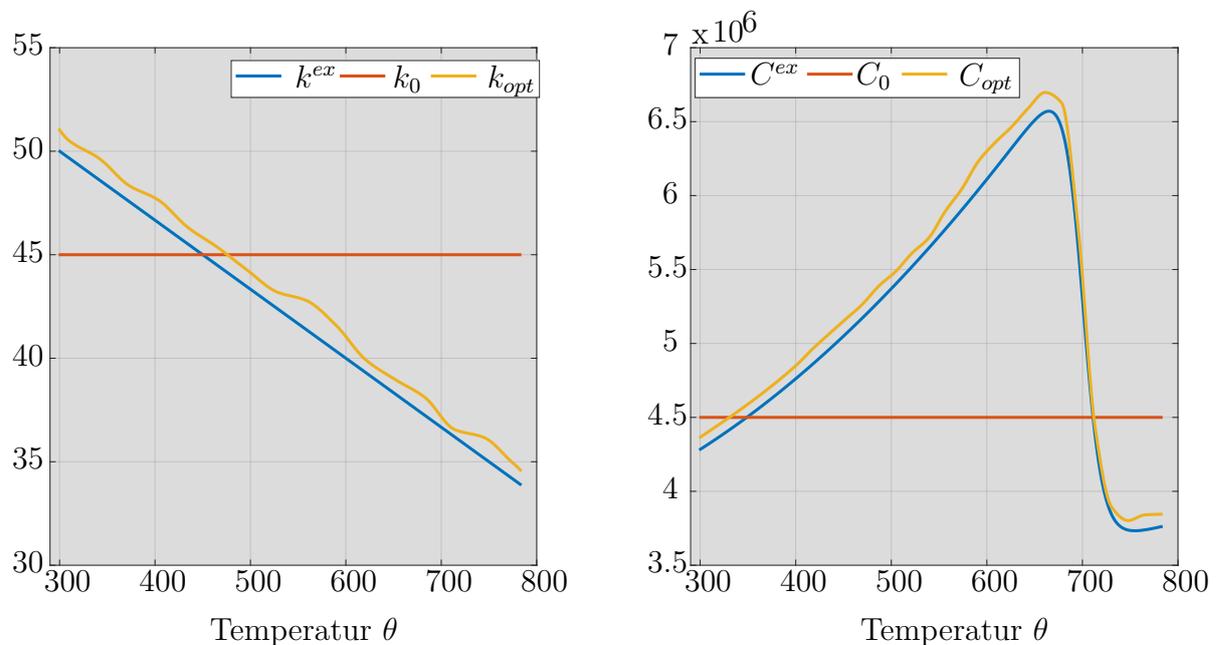


Abbildung 5.4: Vergleich der Startwerte und den exakten (simulierten), sowie optimierten Materialparametern im Temperaturintervall $\tilde{\Theta}$

Aufgrund der offensichtlichen Mehrdeutigkeit des Vorwärtsoperators, d.h. wegen

$$F(\mathbf{p}) = F(\gamma\mathbf{p}), \quad \gamma > 0, \quad (5.15)$$

können wir von dem numerischen Verfahren nur eine Eindeutigkeit des Quotienten $\frac{k}{C}$,

¹Ist $\theta(t, x)$ die Lösung des ARWPs (5.2) - (5.5), so können wir nur Ergebnisse im Temperaturintervall $[\min_{t,x} \theta, \max_{t,x} \theta] =: \tilde{\Theta} \in \Theta$ erwarten, d.h. dem Temperaturintervall, den der Solver 'sieht'.

also der Temperaturleitfähigkeit, erwarten.¹ Der Vergleich von

$$\lambda^{ex} := \frac{k^{ex}}{C^{ex}} \quad \text{und} \quad \lambda_{opt} := \frac{k_{opt}}{C_{opt}} \quad (5.16)$$

in Abbildung 5.5 löst die Mehrdeutigkeit auf.

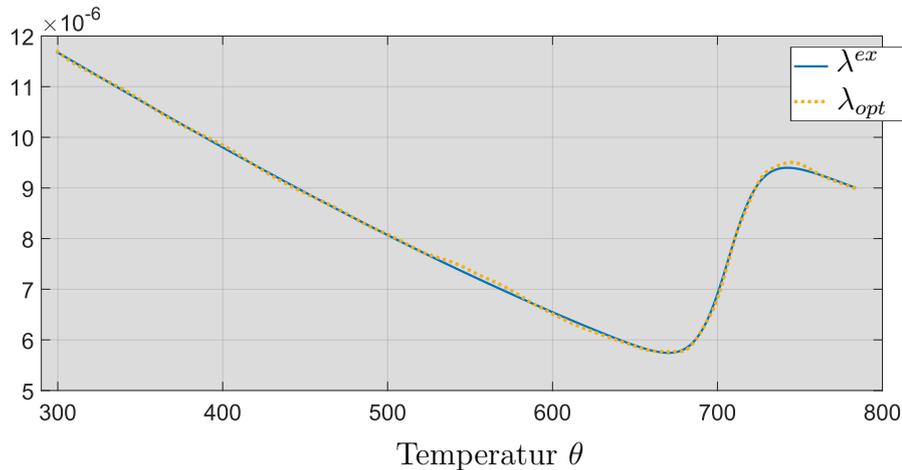


Abbildung 5.5: Vergleich exakter und optimierter Temperaturleitfähigkeiten

Für die Bestimmung der Enthalpieleitfähigkeit α' ist es von daher vollkommen ausreichend, die Materialparameter bis auf eine Konstante γ zu bestimmen, siehe (2.14). Die Enthalpietransformation (2.2) ist dann zwar um einen Faktor gestört, dieser beeinflusst den Wärmetransfer (2.25) - (2.28) aber nicht.

Wir können abschließend zusammenfassen, dass das Verfahren in der Lage ist, das Wärmeleitverhalten im Sinne der Temperaturleitfähigkeit zu bestimmen. Eine Auswertung des Verfahrens für ein Beispiel mit realen Daten ist in den Abbildungen 5.6 und 5.7 zu sehen. Die Messdaten wurden während des Kühlprozesses einer 42 mm dicken Stahlplatte für das Zeitintervall $[0, 60]$ Sekunden aufgenommen, wobei die oberflächennahen Thermoelemente jeweils $\varepsilon = 4$ mm unter der Oberfläche verbaut sind. In beiden Abbildungen handelt es sich um die gemessenen Temperaturkurven θ_1, θ_2 und θ_3 , sowie einer optimierten Kern-Rechnung. Während in Abbildung 5.6 Materialparameter aus der Literatur zur Berechnung der Lösung des Modells (5.2) - (5.5) herangezogen wurden, sind in Abbildung 5.7 die Temperaturkurven zu optimierten (und physikalisch plausiblen) Materialparametern aufgetragen.

¹Der Quotient der Interpolanten $\frac{k}{C} = \frac{\gamma k}{\gamma C}$ ist tatsächlich eindeutig.

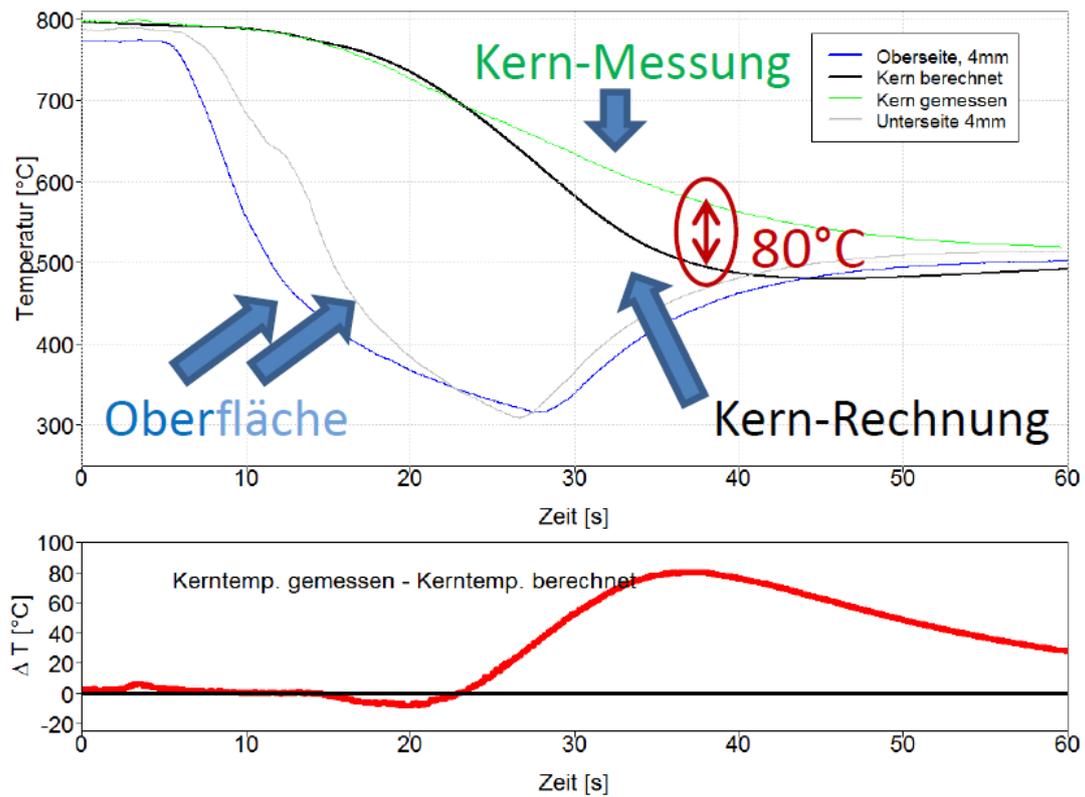


Abbildung 5.6: Vorwärtsrechnung mit physikalisch plausiblen Literaturwerten kann die Kern-Messung nicht reproduzieren

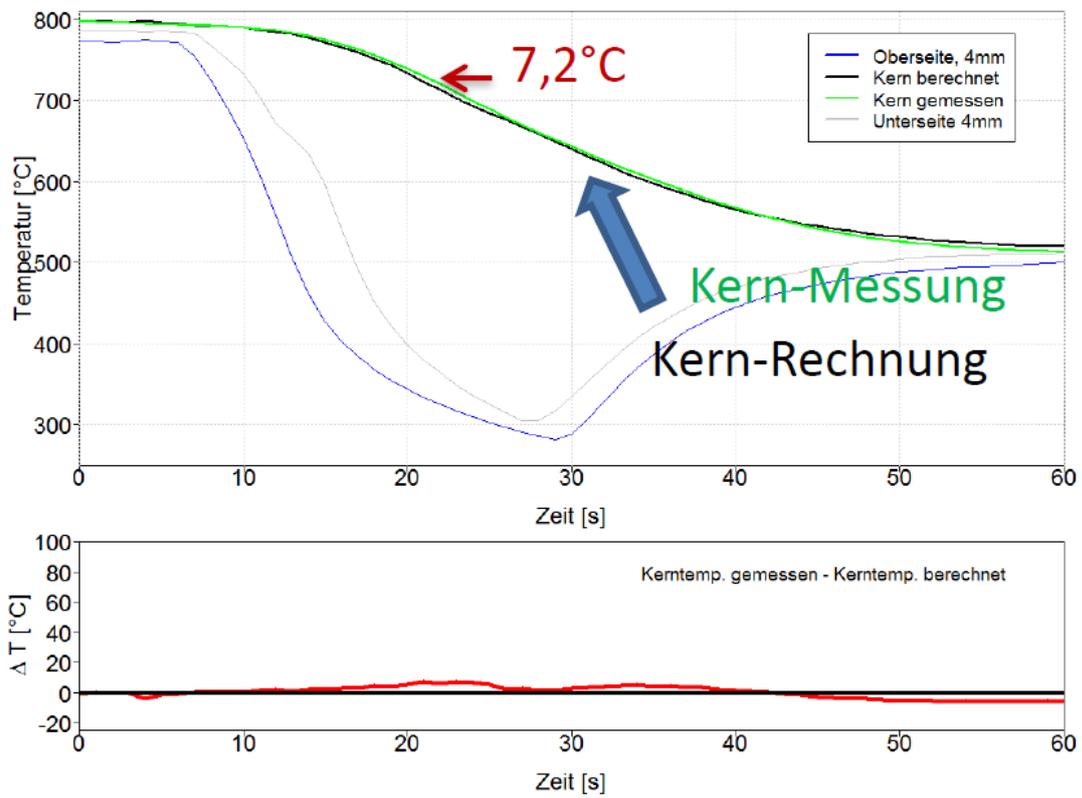


Abbildung 5.7: Vorwärtsrechnung mit optimierten Werten, Kern-Messung kann reproduziert werden, Materialparameter sind physikalisch plausibel.

Fazit und Ausblick

Wir haben in dieser Arbeit ein Verfahren zur Behandlung eines inversen 1D Wärme-transferproblems mit implizitem Lösungsoperator vorgeschlagen. Die Herleitung des Anfangsrandwertproblems haben wir in der Modellierung des Kühlprozesses von Stahlplatten motiviert, wobei wir die Phasenumwandlung des Materials sowie die Leidenfrost-Effekte durch enthalpieabhängige Materialparameter und Wärmeflüsse eingebunden haben. Um die Wohldefiniertheit des Lösungsoperators und eine Enthalpielösung des Anfangsrandwertproblems in einem entsprechenden mathematischen Setting zu gewährleisten, haben wir zwei verschiedene Existenz- und Eindeigkeitstheorien untersucht. Speziell haben wir dabei die Vor- und Nachteile klassischer sowie starker Lösungen diskutiert. Um die Implizität des Lösungsoperators zu überwinden, haben wir die Enthalpieabhängigkeit der Wärmeflüsse durch einen geschickten Parametrisierungsansatz entkoppelt, welcher es uns erlaubt das inverse Problem nach klassischem Muster zu lösen. Der vorgeschlagene PCHIP-Ansatz respektiert dabei die Nebenbedingungen im Sinne der Beschränktheit der Wärmeflüsse. Außerdem schränken wir auf diese Art hinsichtlich des inversen Problems den Raum \mathcal{C}^1 der gesuchten Wärmeflüsse nicht ein. Zur numerischen Behandlung haben wir das PQN-Verfahren mit dem gedämpften Landweber-Verfahren implementiert. Da beide Verfahren die Kenntnis des Gradienten des Zielfunktionals erfordern, haben wir eine Berechnung dessen hergeleitet. Mehrfach ausgenutzt haben wir an dieser Stelle die Theorie starker Lösungen, welche uns eine praktische Skalarprodukterweiterung einer abstrakten dualen Paarung liefert. In einem numerischen Test haben wir die Outperformance des PQN-Verfahrens (bei überschaubarem Mehraufwand) gegenüber dem gedämpften Landweber-Verfahren nachgewiesen. Für ein zusätzliches Beispiel des PCHIP-Ansatzes haben wir ein weiteres inverses Problem heuristisch umrissen.

Für zukünftige Forschung bezüglich der mathematischen Theorie ist, unabhängig von Modell und Anwendung, die Verallgemeinerung des Interpolationsansatzes auf implizit definierte Lösungs- und Vorwärtsoperatoren denkbar. In der Hinsicht ist die Fragestellung interessant, inwiefern bereits die Festlegung der Anzahl $n > 0$ der Partitionspunkte regularisierend auf das Problem wirkt.

Allgemeiner ist auch die Behandlung impliziter Operatorgleichungen in allgemeinen Banachräumen interessant: Zum einen bezüglich der Existenztheorie (Satz von der impliziten Funktion in Banachräumen) von Lösungen, zum anderen auch bezüglich der

Sensitivitätsanalyse, also der Berechnung der Ableitungen, ohne die Kenntnis des expliziten Zusammenhangs.

Für die zukünftige Arbeit hinsichtlich des Anwendungsaspektes steht sicherlich die Behandlung des Optimalsteuerungsproblems der ACC Kühlanlage im Vordergrund. Wir haben Verfahren für einen festen Kühlplan vorgestellt, mit denen das innere Wärmeleitverhalten, sowie das Wärmeübergangsverhalten an den Grenzflächen bestimmt werden kann. Die Auswertung verschiedenster Kühlpläne erlaubt es uns nun, den Zusammenhang zwischen Kühlwirkung und Kühlursache zu modellieren. Somit kann die Nebenbedingung der Zustandsvariablen u , also das vom Kühlplan abhängige Anfangsrandwertproblem, im Optimalsteuerungsproblem vollständig beschrieben werden. Für einen gewünschten Zustand, der metallurgisch begründet ist, lässt sich damit ein Kühlplan prognostizieren.

A. PCHIPs

'Piecewise Cubic Hermite Interpolating Polynomials'

A.1 Konstruktion

Die Interpolationsmethode von Fritsch und Carlson wurde 1980 in [28] publiziert. Wir geben im Folgenden einige Konstruktionsdetails an.

Sei $I = [a, b] \in \mathbb{R}$ und

$$\pi_n : a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$$

eine Partition des Intervalls I . Weiterhin sei $\{f_i : i = 1, 2, \dots, n\}$ eine gegebene Menge an Datenpunkten auf den Partitionspunkten $\{x_i : i = 1, 2, \dots, n\}$. Das Ziel ist es auf π_n eine stückweise kubische Funktion $p(x) \in \mathcal{C}^1[I]$ zu konstruieren, sodass gilt

$$p(x_i) = f_i, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Auf jedem Teilintervall $I_i = [x_i, x_{i+1}]$ soll $p(x)$ außerdem monoton sein, sodass weder Überschwinger noch erhöhte Oszillationen auftreten. Dargestellt werden kann $p(x)$ mit $x \in I_i$ als kubisches Polynom wie folgt:

$$p(x) = f_i H_1^i(x) + f_{i+1} H_2^i(x) + d_i H_3^i(x) + d_{i+1} H_4^i(x),$$

mit $d_j = p'(x_j)$ für $j = i, i + 1$. Dabei handelt es sich bei $H_k^i(x)$ ($k = 1, \dots, 4$) um die üblichen kubischen Hermite-Basisfunktionen für das Intervall I_i :

$$\begin{aligned} H_1^i(x) &= \phi((x_{i+1} - x)/h_i), & H_2^i(x) &= \phi((x - x_i)/h_i), \\ H_3^i(x) &= -h_i \psi((x_{i+1} - x)/h_i), & H_4^i(x) &= h_i \psi((x - x_i)/h_i), \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

mit $h_i = x_{i+1} - x_i$, $\phi(t) = 3t^2 - 2t^3$ und $\psi(t) = t^3 - t^2$, siehe Abbildung A.1.

Die Konstruktion des stückweisen kubischen Interpolanten besteht im Wesentlichen in der Approximation der Ableitungen d_1, \dots, d_n , für die es verschiedene Möglichkeiten gibt, siehe [28]. Betrachten wir, wie in unserer Anwendung eine äquidistante Partition π_n des Intervalls I mit $h_i = h_j =: h$ für alle $i, j = 1, 2, \dots, n$, so können wir die

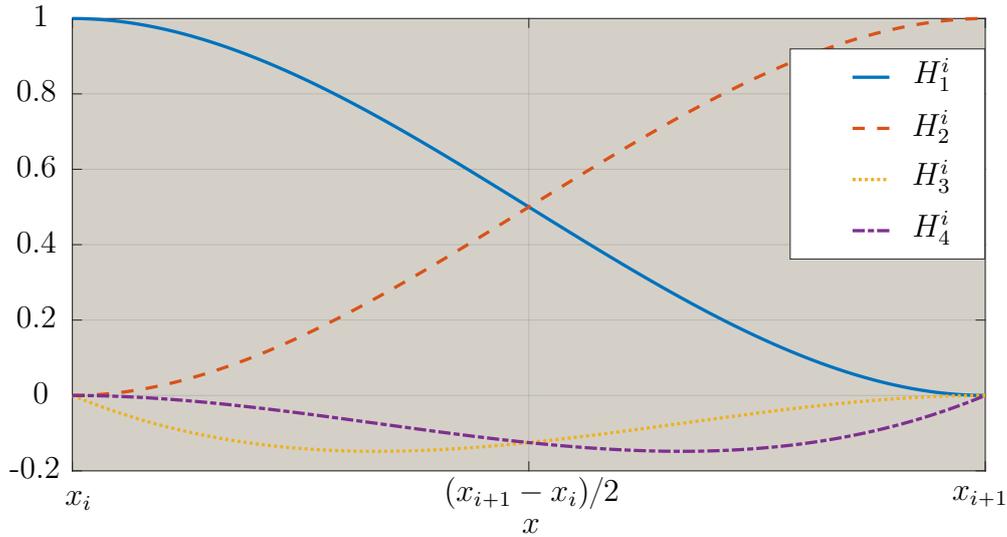


Abbildung A.1: Hermite-Basisfunktionen (A.1) mit $h_i := 1$

Ableitungen d_1, \dots, d_n berechnen durch:

$$d_1 = \frac{3}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2, \quad \dots \quad d_{k+1} = \frac{2|\Delta_k \Delta_{k+1}|}{\Delta_k + \Delta_{k+1}}, \quad \dots \quad d_n = \frac{3}{2}\Delta_{n-1} - \frac{1}{2}\Delta_{n-2},$$

mit $\Delta_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$ für alle $i = 1, \dots, n$. In der Originalarbeit von Fritsch und Carlson wird davon ausgegangen, dass die Datenpunkte durchgehend monoton sind, d.h. $f_i \leq f_{i+1}$ oder $f_i \geq f_{i+1}$ für alle $i = 1, \dots, n - 1$. Diese Voraussetzung ist jedoch mit der nachstehenden Modifikation nicht mehr notwendig:

Ist $\text{sgn}(\Delta_k \Delta_{k+1}) < 0$ so setzen wir $d_{k+1} := 0$.

Der in Abschnitt 3.1 vorgeschlagene PCHIP-Ansatz zur Interpolation unbekannter Suchgrößen respektiert die Monotonie der Funktionswerte. Der Interpolant lässt, im Vergleich zur Spline-Interpolation, keine Überschwinger oder Oszillationen zu. Dies ist wichtig, da wir in dieser Arbeit ein Projektionsverfahren verwenden und die gesuchten Funktionen gewissen Box-Constraints genügen müssen. In Abbildung A.2 machen wir dazu an einem einfachen Beispiel deutlich, dass der Spline-Interpolant die Box-Constraints, sowohl auf der Ober- wie Unterseite, verletzt. Dabei ist der Spline-Interpolant in \mathcal{C}^2 , während der PCHIP-Interpolant nur in \mathcal{C}^1 ist.

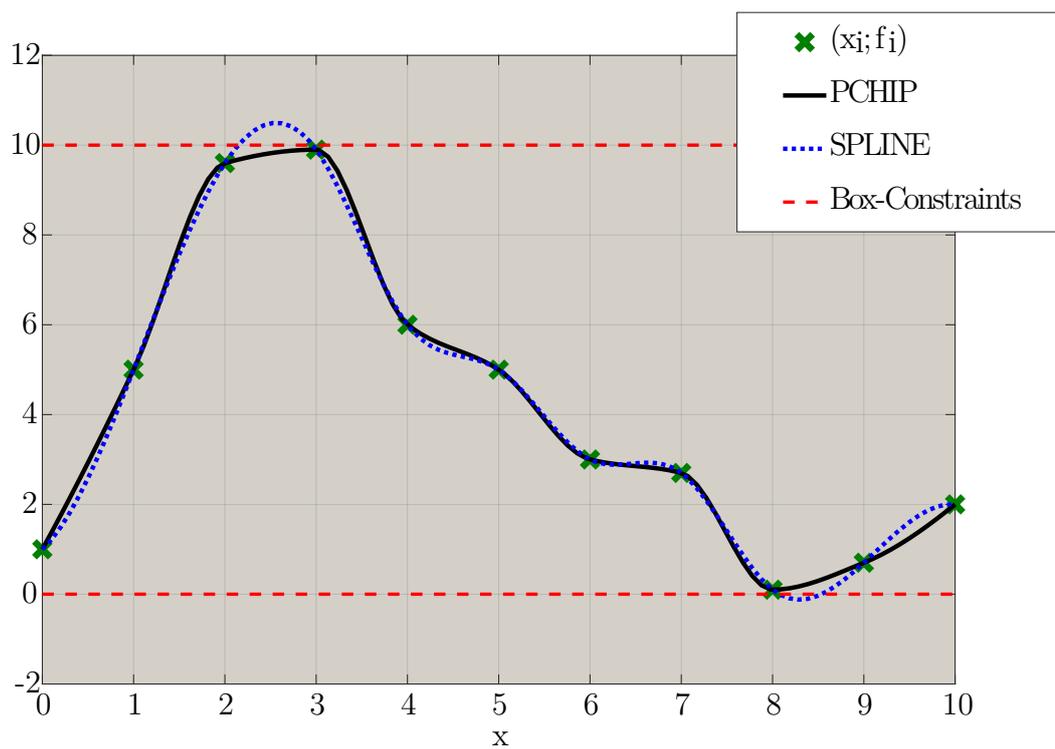


Abbildung A.2: Datenpunkte (x_i, f_i) mit $x_i = i - 1$ und $f_i \in [0, 10]$ für $i = 1, \dots, 11$, Vergleich PCHIP vs. Kubische Splines

A.2 Approximationseigenschaft

Für $f(x) \in \mathcal{C}^1([a, b])$ möchten wir im Folgenden eine Beweisskizze präsentieren, um zu zeigen, dass

$$\forall \varepsilon > 0 \exists n \in \mathbb{N} : \max_{x \in [a, b]} |p(x) - f(x)| < \varepsilon. \quad (\text{A.2})$$

Hierbei ist $p(x)$ das PCHIP Interpolationspolynom zu der äquidistanten Partition

$$\pi_n : a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b, \quad (\text{A.3})$$

welches die Bedingung

$$p(x_j) = f(x_j)$$

für $j = 1, \dots, n$ erfüllt. Die Idee basiert auf dem Prinzip verschachtelter Partitionen.

Wir fixieren $\varepsilon > 0$. Sei außerdem für $i=1,2,\dots$

$$h^{(i)} = 2^{-i}(b - a)$$

die Schrittweite der i -ten Partition

$$\pi^{(i)} := \{x_j^{(i)} = a + (j - 1)h^{(i)} : j = 1, \dots, 2^i + 1\}.$$

Es gilt also $\pi^{(i)} \subset \pi^{(i+1)}$, d.h. jede nachfolgende Partition verfeinert immer die vorangegangene. Die zugehörigen PCHIP Interpolanten für die i -te Partition seien gegeben durch $p^{(i)}(x) \in \mathcal{C}^1([a, b])$, sodass

$$p^{(i)}(x_j^{(i)}) = f(x_j^{(i)})$$

für alle $j = 1, \dots, 2^i + 1$ gilt. Die Menge

$$X^{(i)} = \{x \in [a, b] : |p^{(i)}(x) - f(x)| \geq \varepsilon\}$$

umfasst alle Punkte $x \in [a, b]$, in denen das PCHIP Interpolationspolynom $p^{(i)}(x)$ die Funktion $f(x)$ unzureichend beschreibt.

Wegen

$$\lim_{i \rightarrow \infty} h^{(i)} = 0$$

und der Monotonie der PCHIP Interpolanten $p^{(i)}(x)$ bezüglich der Funktionswerte $f(x_j^{(i)})$ für alle $j = 1, \dots, n$ muss gelten, dass

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \min_j |x_j^{(i)} - x| = 0$$

und

$$\lim_{i \rightarrow \infty} p^{(i)}(x) = f(x)$$

für alle $x \in [a, b]$. Es existiert also ein $i_* \in \mathbb{N}$ mit

$$\max_{x \in [a, b]} |p^{(i_*)}(x) - f(x)| < \varepsilon,$$

d.h. insbesondere gilt $X^{(i_*)} = \{\}$. Für alle $\varepsilon > 0$ existiert schließlich ein PCHIP Interpolationspolynom $p(x)$ zu der Partition (A.3) mit $n = 2^{i_*} + 1$ Stützstellen und den Funktionswerten $f(x_j)$ für $j = 1, \dots, n$ mit

$$x_j = a + (j - 1) \frac{b - a}{n - 1}.$$

Ein numerisches Beispiel zur Bestimmung der Anzahl n der Partitionspunkte für $\varepsilon = 0.2$ ist in Abbildung A.3 illustriert: Das sukzessive Erhöhen von $i = 1$ durch $i := i + 1$ liefert $i_* = 4$ mit $X^{(i_*)} = \{\}$, also $n = 2^{i_*} + 1 = 17$ Stützstellen für den PCHIP Interpolanten $p(x)$. Das Beispiel kann offensichtlich für jedes $\varepsilon > 0$ erweitert werden. Die Approximationsgenauigkeit lässt sich also durch das Anpassen der Anzahl n der Partitionspunkte steuern.

Hinsichtlich der Anwendung des PCHIP Interpolationsansatzes bei inversen Problemen ist ein solches Vorgehen zur Bestimmung von n natürlich ausgeschlossen, da die Suchgröße $f(x)$ unbekannt ist. Nichtsdestotrotz bietet es sich an, die Anzahl n der Partitionspunkte ausreichend groß zu wählen, um komplexere Funktionen beschreiben zu können.

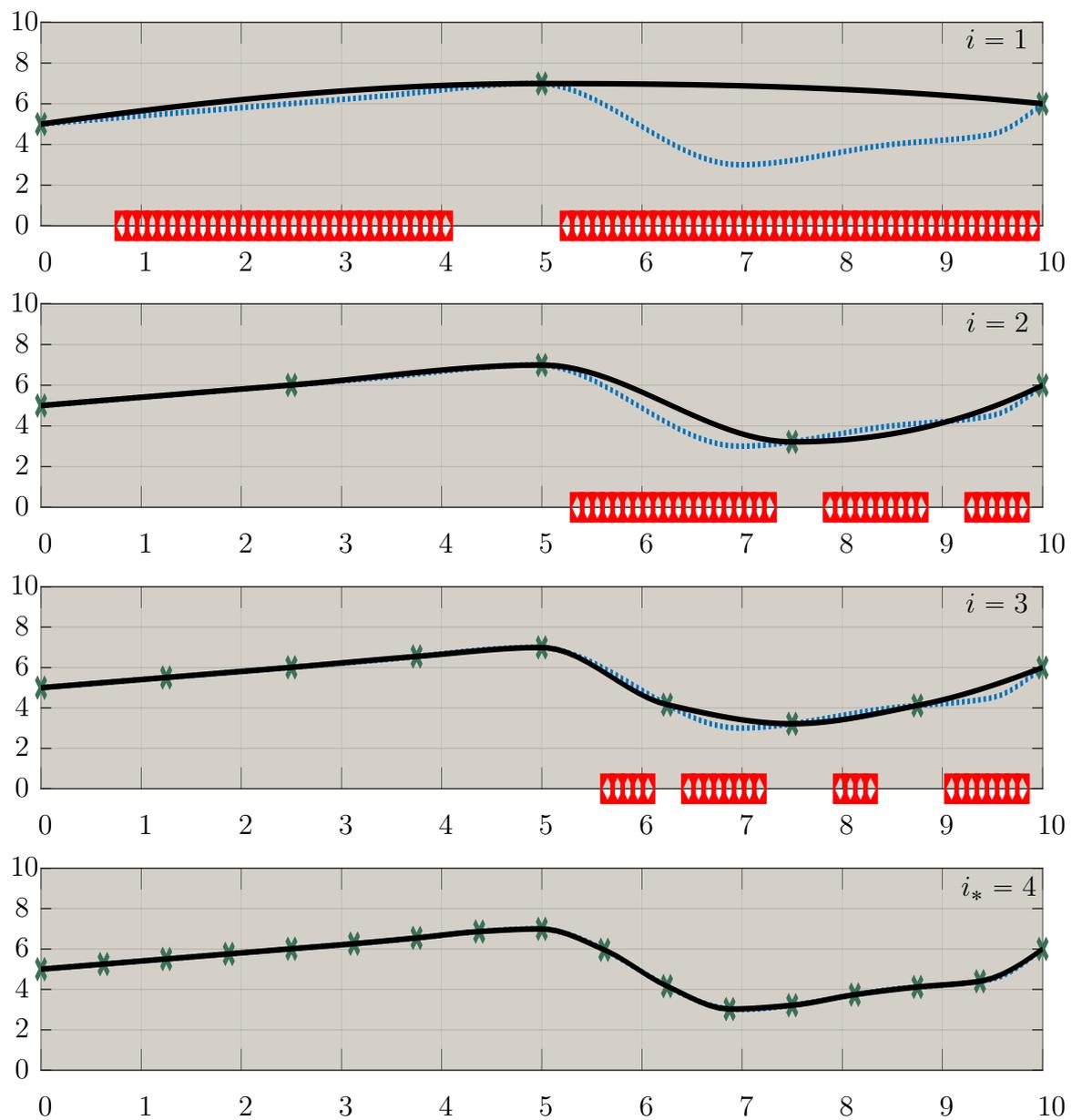


Abbildung A.3: Funktion $f(x)$ (blau gepunktet) vs. PCHIP Interpolanten $p^{(i)}(x)$ (schwarz) für $i = 1, \dots, 4$; rote Regionen entsprechen $X^{(i)}$ für $\varepsilon = 0.2$

A.3 Gradientenberechnung

Im Folgenden wollen wir uns die Sensitivität von $p(x)$ bezüglich f_i für alle $i = 1, 2, \dots, n$ anschauen, das heißt $\frac{\partial p}{\partial f_i}(x)$ für alle $i = 1, \dots, n$. Dabei nehmen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass $\text{sgn}(\Delta_k \Delta_{k+1}) > 0$ gilt. (Ist $d_i = 0$ für ein $i = 1, \dots, n$, so vereinfachen sich die Ableitungen.) Da es sich bei $p(x)$ um eine stückweise definierte Funktion handelt, müssen wir auch die Ableitungen für bestimmte Teilintervalle $I_i = [x_i, x_{i+1}]$ betrachten. Im Folgenden werden die einzelnen Ableitungen aufgelistet, wobei wir zunächst die Sonderfälle $\frac{\partial p}{\partial f_i}(x)$ für $i = 1, 2, 3$ separat betrachten, da diese mitunter von d_1 abhängen:

$$\frac{\partial p}{\partial f_1}(x) = \begin{cases} H_1^1(x) - \frac{3}{2h} H_3^1(x) - \frac{2}{h} \frac{\Delta_2^2}{(\Delta_1 + \Delta_2)^2} H_4^1(x), & x \in [x_1, x_2], \\ -\frac{2}{h} \frac{\Delta_2^2}{(\Delta_1 + \Delta_2)^2} H_3^2(x), & x \in [x_2, x_3], \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$\frac{\partial p}{\partial f_2}(x) = \begin{cases} H_2^1(x) + \frac{2}{h} H_3^1(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_2 - \Delta_1}{\Delta_1 + \Delta_2} H_4^1(x), & x \in [x_1, x_2], \\ H_1^2(x) - \frac{2}{h} \frac{\Delta_2 - \Delta_1}{\Delta_2 + \Delta_3} H_3^2(x) - \frac{2}{h} \frac{\Delta_3^2}{(\Delta_2 + \Delta_3)^2} H_4^2(x), & x \in [x_2, x_3], \\ -\frac{2}{h} \frac{\Delta_3^2}{(\Delta_2 + \Delta_3)^2} H_3^3(x), & x \in [x_3, x_4], \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$\frac{\partial p}{\partial f_3}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2h} H_3^1(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_1^2}{(\Delta_1 + \Delta_2)^2} H_4^1(x), & x \in [x_1, x_2], \\ H_2^2(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_1^2}{(\Delta_1 + \Delta_2)^2} H_3^2(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_3 - \Delta_2}{\Delta_2 + \Delta_3} H_4^2(x), & x \in [x_2, x_3], \\ H_1^3(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_3 - \Delta_2}{\Delta_2 + \Delta_3} H_3^3(x) - \frac{2}{h} \frac{\Delta_4^2}{(\Delta_3 + \Delta_4)^2} H_4^3(x), & x \in [x_3, x_4], \\ -\frac{2}{h} \frac{\Delta_4^2}{(\Delta_3 + \Delta_4)^2} H_3^4(x), & x \in [x_4, x_5], \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Für $3 < i < n - 2$ gilt

$$\frac{\partial p}{\partial f_i}(x) = \begin{cases} \frac{2}{h} \frac{\Delta_{i-2}^2}{(\Delta_{i-1} + \Delta_{i-2})^2} H_4^{i-2}(x), & x \in [x_{i-2}, x_{i-1}], \\ H_2^{i-1}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_{i-2}^2}{(\Delta_{i-1} + \Delta_{i-2})^2} H_3^{i-1}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_i - \Delta_{i-1}}{\Delta_{i-1} + \Delta_i} H_4^{i-1}(x), & x \in [x_{i-1}, x_i], \\ H_1^i(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_i - \Delta_{i-1}}{\Delta_{i-1} + \Delta_i} H_3^i(x) - \frac{2}{h} \frac{\Delta_{i+1}^2}{(\Delta_i + \Delta_{i+1})^2} H_4^i(x), & x \in [x_i, x_{i+1}], \\ -\frac{2}{h} \frac{\Delta_{i+1}^2}{(\Delta_i + \Delta_{i+1})^2} H_3^{i+1}(x), & x \in [x_{i+1}, x_{i+2}], \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Weitere Sonderfälle (wegen d_n) sind:

$$\frac{\partial p}{\partial f_{n-2}}(x) = \begin{cases} \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-4}^2}{(\Delta_{n-3} + \Delta_{n-4})^2} H_4^{n-4}(x), & x \in [x_{n-4}, x_{n-3}], \\ H_2^{n-3}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-4}^2}{(\Delta_{n-3} + \Delta_{n-4})^2} H_3^{n-3}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-2} - \Delta_{n-3}}{\Delta_{n-3} + \Delta_{n-2}} H_4^{n-3}(x), & x \in [x_{n-3}, x_{n-2}], \\ H_1^{n-2}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-2} + \Delta_{n-3}}{\Delta_{n-3} + \Delta_{n-2}} H_3^{n-2}(x) - \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-1}^2}{(\Delta_{n-2} + \Delta_{n-1})^2} H_4^{n-2}(x), & x \in [x_{n-2}, x_{n-1}], \\ -\frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-1}^2}{(\Delta_{n-2} + \Delta_{n-1})^2} H_3^{n-1}(x) + \frac{1}{2h} H_4^{n-1}(x), & x \in [x_{n-1}, x_n], \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$\frac{\partial p}{\partial f_{n-1}}(x) = \begin{cases} \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-3}^2}{(\Delta_{n-2} + \Delta_{n-3})^2} H_4^{n-3}(x), & x \in [x_{n-3}, x_{n-2}], \\ H_2^{n-2}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-3}^2}{(\Delta_{n-2} + \Delta_{n-3})^2} H_3^{n-2}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-1} + \Delta_{n-2}}{\Delta_{n-2} + \Delta_{n-1}} H_4^{n-2}(x), & x \in [x_{n-2}, x_{n-1}], \\ H_1^{n-1}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-1} - \Delta_{n-2}}{\Delta_{n-2} + \Delta_{n-1}} H_3^{n-1}(x) - \frac{2}{h} H_4^{n-1}(x), & x \in [x_{n-1}, x_n], \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$\frac{\partial p}{\partial f_n}(x) = \begin{cases} \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-2}^2}{(\Delta_{n-1} + \Delta_{n-2})^2} H_4^{n-2}(x), & x \in [x_{n-2}, x_{n-1}], \\ H_2^{n-1}(x) + \frac{2}{h} \frac{\Delta_{n-2}^2}{(\Delta_{n-1} + \Delta_{n-2})^2} H_3^{n-1}(x) + \frac{3}{2h} H_4^{n-1}(x), & x \in [x_{n-1}, x_n], \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

B. Gedämpftes Landweber-Verfahren

Wir stellen im folgenden Abschnitt das gedämpfte Landweber-Verfahren vor, wobei wir uns auf die Referenzen [23] und [40] berufen. Auf Beweise verzichten wir an dieser Stelle.

Das von Louis Landweber im Jahre 1951 in [47] eingeführte Landweber-Verfahren ist heutzutage ein beliebtes Iterationsverfahren zur Behandlung linearer und nichtlinearer inverser Probleme.

Wir betrachten das nichtlineare Problem der Form

$$F(x) = y, \quad F : \mathcal{D}(F) \subseteq X \rightarrow Y, \quad (\text{B.1})$$

mit Hilberträumen X und Y , d.h. wir können X und Y mit ihren Dualräumen identifizieren so, dass $X \cong X^*$ und $Y \cong Y^*$. Mit $\mathcal{D}(F)$ bezeichnen wir das Definitionsgebiet des Vorwärtsoperators.

Wir nehmen wieder den folgenden Zusammenhang zwischen den gestörten Daten y^δ und y an:

$$\|y^\delta - y\|_Y^2 < \delta.$$

Definition B.0.1. Die Funktion $F : \mathcal{D}(F) \subset X \rightarrow Y$ heißt Fréchet-differenzierbar in $x \in \mathcal{D}(F)$, wenn eine lineare und stetige Abbildung $A_x : X \rightarrow Y$ existiert, sodass für alle $z \in X$ gilt:

$$\lim_{\|z\|_X \rightarrow 0} \frac{\|F(x+z) - F(x) - A_x z\|_Y}{\|z\|_X} = 0.$$

Wir definieren $F'(x)z := A_x z$ und nennen die Abbildung $F'(x)$ die Fréchet-Ableitung von F in $x \in X$.

Definition B.0.2. Sei ein beschränkter und linearer Operator $A : X \rightarrow Y$ gegeben. Der beschränkte und lineare Operator $A^* : Y \rightarrow X$ definiert durch

$$\langle A^*y, x \rangle := \langle y, Ax \rangle \quad \forall x \in X, y \in Y$$

heißt der zu A adjungierte Operator.

Für einen gegebenen Startwert x_0 ist die Landweberiteration für nichtlineare Probleme gegeben durch

$$x_{k+1} = x_k - F'(x_k)^*(F(x_k) - y^\delta), \quad k \in \mathbb{N}_0, \quad (\text{B.2})$$

wobei $F'(x)^*$ die Adjungierte der Fréchet-Ableitung im Punkt x ist, siehe [40].

Um die Konvergenz des Landweber-Verfahrens zu garantieren, benötigen wir eine geeignete Skalierung des Vorwärtsoperators. Wir nehmen an, dass

$$\|F'(x)\| \leq 1, \quad x \in B_\rho(x_0) \subset D(F)$$

gilt. Dabei bezeichnen wir mit $B_\rho(x_0)$ eine Kugel mit Radius ρ um den Startwert $x_0 \in \mathcal{D}(F)$.

Ist diese Voraussetzung nicht erfüllt, so ist es möglich auf das gedämpfte Landweber-Verfahren auszuweichen. Dabei verwenden wir einen Relaxationsparameter oder auch Dämpfungsparameter

$$\lambda \in \left(0, \frac{1}{C_\rho^2}\right) \quad (\text{B.3})$$

mit der Konstanten

$$C_\rho := \sup\{\|F'(x)\| : x \in B_\rho(x_0)\}.$$

Dann ist das gedämpfte Landweber-Verfahren für nichtlineare inverse Probleme gegeben durch

$$x_{k+1} = x_k - \lambda F'(x_k)^*(F(x_k) - y^\delta), \quad k \in \mathbb{N}_0$$

mit λ aus (B.3). Eine geeignete Wahl des Dämpfungsparameters garantiert dabei die Konvergenz des (gedämpften) Landweber-Verfahrens.

Die Minimierung unter Nebenbedingungen, also z.B. die Forderung $x \in \tilde{X}$, erfordert zusätzlich eine orthogonale Projektion $\mathcal{P}_{\tilde{X}}$, sodass wir schließlich die Iterationsvorschrift

$$x_{k+1} = \mathcal{P}_{\tilde{X}} \left(x_k - \lambda F'(x_k)^* (F(x_k) - y^\delta) \right), \quad k \in \mathbb{N}_0$$

erhalten. Zusammen mit einem Abbruchkriterium, z.B. dem a-posteriori Diskrepanz-Prinzip von Morozov ([56]), wird das gedämpfte Landweber-Verfahren zu einem Regularisierungsverfahren.

C. Tabelle physikalischer Größen

Wir fassen in der nachstehenden Tabelle die wichtigsten physikalischen Größen, wie wir sie in dieser Arbeit benutzt haben, zusammen.

Notation	Bezeichnung	SI-Einheit
L	Dicke der Stahlplatte	m
T	Untersuchungszeit des Kühlvorgangs	s
θ	Temperatur	K (Kap. 5: °C)
C	Wärmekapazität	J/(K · m ³)
k	Wärmeleitfähigkeit	W/(K · m)
k/C	Temperaturleitfähigkeit	m ² /s
q_0, q_L	Wärmeflüsse	W/m ²
h_0, h_L	Wärmeübergangskoeffizienten	W/(K · m ²)
u	Enthalpie	J/m ³
$Q(t)$	Gespeicherte Wärmemenge zum Zeitpunkt t	J/m ²
$\alpha(u)$	Kirchhoff-Transformierte	W/m
$\alpha'(u)$	Enthalpieleitfähigkeit	m ² /s
β_0, β_L	Wärmeflüsse	W/m ²

Literaturverzeichnis

- [1] O. M. Alifanov. *Inverse heat transfer problems*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [2] A. Alphonse, C. M. Elliott, and B. Stinner. An abstract framework for parabolic pdes on evolving spaces. *arXiv preprint arXiv:1403.4500*, 2014.
- [3] L. Armijo. Minimization of functions having lipschitz continuous first partial derivatives. *Pacific Journal of mathematics*, 16(1):1–3, 1966.
- [4] J. V. Beck and K. J. Arnold. *Parameter estimation in engineering and science*. James Beck, 1977.
- [5] G. Ben-yu and J. Zou. An augmented lagrangian method for parameter identifications in parabolic systems. *Journal of mathematical analysis and applications*, 263(1):49–68, 2001.
- [6] J. Bernardin and I. Mudawar. The leidenfrost point: experimental study and assessment of existing models. 1999.
- [7] J. D. Bernardin and I. Mudawar. A leidenfrost point model for impinging droplets and sprays. *J. Heat Transfer*, 126(2):272–278, 2004.
- [8] A. Binder, H. W. Engl, and S. Vessella. Some inverse problems for a nonlinear parabolic equation connected with continuous casting of steel: stability estimates and regularization. *Numerical functional analysis and optimization*, 11(7-8):643–671, 1990.
- [9] S. Boschert and R. Rosen. Digital twin—the simulation aspect. In *Mechatronic futures*, pages 59–74. Springer, 2016.
- [10] H. Brezis. Equations et inéquations non linéaires dans les espaces vectoriels en dualité. In *Annales de l’institut Fourier*, volume 18, pages 115–175, 1968.
- [11] H. Brezis. *Functional analysis, Sobolev spaces and partial differential equations*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [12] E. Browder. Nonlinear functional analysis and nonlinear partial differential equations. *Differential Equations and Their Applications*, pages 45–64, 1967.

- [13] F. E. Browder. Nonlinear elliptic boundary value problems. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 69(6):862–874, 1963.
- [14] F. E. Browder. Variational boundary value problems for quasi-linear elliptic equations of arbitrary order. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 50(1):31, 1963.
- [15] J. Cannon and P. Duchateau. Determining unknown coefficients in a nonlinear heat conduction problem. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 24(3):298–314, 1973.
- [16] J. R. Cannon. Determination of the unknown coefficient $k(u)$ in the equation $\nabla \cdot k(u) \nabla u = 0$ from overspecified boundary data. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 18(1):112–114, 1967.
- [17] D. Colton and R. Kress. *Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory*, volume 93. Springer Nature, 2019.
- [18] M. Cui, X. Gao, and J. Zhang. A new approach for the estimation of temperature-dependent thermal properties by solving transient inverse heat conduction problems. *International Journal of Thermal Sciences*, 58:113–119, 2012.
- [19] F. E. Curtis and X. Que. A quasi-newton algorithm for nonconvex, nonsmooth optimization with global convergence guarantees. *Mathematical Programming Computation*, 7(4):399–428, 2015.
- [20] A. DeArdo. Accelerated cooling: a physical metallurgy perspective. In *Proceedings of the Metallurgical Society of the Canadian Institute of Mining and Metallurgy*, pages 3–27. Elsevier, 1988.
- [21] G. E. Dieter and D. J. Bacon. *Mechanical metallurgy*, volume 3. McGraw-hill New York, 1986.
- [22] H. Egger, J.-F. Pietschmann, and M. Schlottbom. Identification of nonlinear heat conduction laws. *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, 23(5):429–437, 2015.
- [23] H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer. *Regularization of inverse problems*, volume 375. Springer Science & Business Media, 1996.
- [24] H. W. Engl and T. Langthaler. Numerical solution of an inverse problem connected with continuous casting of steel. *Zeitschrift für Operations Research*, 29(6):B185–B199, 1985.

- [25] H. W. Engl, T. Langthaler, and P. Manselli. On an inverse problem for a nonlinear heat equation connected with continuous casting of steel. In *Optimal Control of Partial Differential Equations II: Theory and Applications*, pages 67–89. Springer, 1987.
- [26] H. W. Engl and J. Zou. A new approach to convergence rate analysis of tikhonov regularization for parameter identification in heat conduction. *Inverse Problems*, 16(6):1907, 2000.
- [27] L. C. Evans. *Partial differential equations*, volume 19. American Mathematical Soc., 2010.
- [28] F. N. Fritsch and R. E. Carlson. Monotone piecewise cubic interpolation. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 17(2):238–246, 1980.
- [29] B. Gottfried, C. Lee, and K. Bell. The leidenfrost phenomenon: film boiling of liquid droplets on a flat plate. *International Journal of heat and mass transfer*, 9(11):1167–1188, 1966.
- [30] W. Grever, A. Binder, H. W. Engl, and K. Mörwald. Optimal cooling strategies in continuous casting of steel with variable casting speed. *Inverse Problems in Engineering*, 2(4):289–300, 1996.
- [31] J. Hadamard. *Lectures on Cauchy’s problem in linear partial differential equations*. Courier Corporation, 2003.
- [32] M. Hanke, A. Neubauer, and O. Scherzer. A convergence analysis of the landweber iteration for nonlinear ill-posed problems. *Numerische Mathematik*, 72(1):21–37, 1995.
- [33] M. Hanke and O. Scherzer. Error analysis of an equation error method for the identification of the diffusion coefficient in a quasi-linear parabolic differential equation. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 59(3):1012–1027, 1998.
- [34] C.-H. Huang and Y. Jan-Yuan. An inverse problem in simultaneously measuring temperature-dependent thermal conductivity and heat capacity. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(18):3433–3441, 1995.
- [35] C.-H. Huang and M. Özisik. Inverse problem of determining unknown wall heat flux in laminar flow through a parallel plate duct. *Numerical Heat Transfer*, 21(1):55–70, 1992.

-
- [36] M. Hussein, D. Lesnic, and M. Ivancho. Simultaneous determination of time-dependent coefficients in the heat equation. *Computers & Mathematics with Applications*, 67(5):1065–1091, 2014.
- [37] F. P. Incropera, A. S. Lavine, T. L. Bergman, and D. P. DeWitt. *Fundamentals of heat and mass transfer*. Wiley, 2007.
- [38] V. Isakov. *Inverse problems for partial differential equations*, volume 127. Springer, 2006.
- [39] B. Kaltenbacher. Parameter identification in partial differential equations. *Lecture Notes*, 2006, 2005.
- [40] B. Kaltenbacher, A. Neubauer, and O. Scherzer. *Iterative regularization methods for nonlinear ill-posed problems*, volume 6. Walter de Gruyter, 2008.
- [41] B. Kaltenbacher, F. Schöpfer, and T. Schuster. Iterative methods for nonlinear ill-posed problems in Banach spaces: convergence and applications to parameter identification problems. *Inverse Problems*, 25(6):065003, 2009.
- [42] D. Kim, S. Sra, and I. S. Dhillon. Tackling box-constrained optimization via a new projected quasi-newton approach. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 32(6):3548–3563, 2010.
- [43] A. Kirsch. *An introduction to the mathematical theory of inverse problems*, volume 120. Springer Science & Business Media, 2011.
- [44] K. Kunisch and G. Peichl. Estimation of a temporally and spatially varying diffusion coefficient in a parabolic system by an augmented lagrangian technique. *Numerische Mathematik*, 59(1):473–509, 1991.
- [45] O. Ladyzenskaja, V. Solonnikov, and N. Ural’Ceva. Linear and quasilinear equations of parabolic type, transl. math. *Monographs, Amer. Math. Soc*, 23, 1968.
- [46] G. Landl, H. W. Engl, J. Chen, and K. Zeman. Optimal strategies for the cooling of steel strips in hot strip mills. *Inverse problems in Engineering*, 2(2):103–118, 1995.
- [47] L. Landweber. An iteration formula for fredholm integral equations of the first kind. *American journal of mathematics*, 73(3):615–624, 1951.

- [48] S. Lang. *Fundamentals of differential geometry*, volume 191. Springer Science & Business Media, 2012.
- [49] V. Läßle. *Wärmebehandlung des Stahls:[Grundlagen, Verfahren und Werkstoffe; mit Aufgabensammlung]*. Verlag Europa-Lehrmittel, 2010.
- [50] R. Lattès and J.-L. Lions. *Méthode de quasi-réversibilité et applications*, volume 18. Dunod, 1967.
- [51] P. D. Lax and A. N. Milgram. Parabolic equations. *Selected Papers Volume I*, pages 8–31, 2005.
- [52] A. Louis. Approximate inverse for linear and some nonlinear problems. *Inverse problems*, 12(2):175, 1996.
- [53] A. K. Louis. *Inverse und schlecht gestellte Probleme*. Springer-Verlag, 2013.
- [54] M. Mierzwiczak and J. Kołodziej. The determination temperature-dependent thermal conductivity as inverse steady heat conduction problem. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(4):790–796, 2011.
- [55] G. J. Minty. On a „monotonicity” method for the solution of nonlinear equations in Banach spaces. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 50(6):1038, 1963.
- [56] V. A. Morozov. On the solution of functional equations by the method of regularization. In *Doklady Akademii Nauk*, volume 167, pages 510–512. Russian Academy of Sciences, 1966.
- [57] C. Ouchi. Development of steel plates by intensive use of tmcp and direct quenching processes. *ISIJ international*, 41(6):542–553, 2001.
- [58] M. N. Ozisik. *Inverse heat transfer: fundamentals and applications*. CRC Press, 2000.
- [59] A. Rieder. *Keine Probleme mit inversen Problemen: eine Einführung in ihre stabile Lösung*. Springer-Verlag, 2013.
- [60] M. Rincon, J. Límaco, and I. S. Liu. Existence and uniqueness of solutions of a nonlinear heat equation. *TEMA (São Carlos)*, 6(2):273–284, 2005.

-
- [61] D. Rothermel, T. Schuster, R. Schorr, and M. Peglow. Parameter estimation of temperature dependent material parameters in the cooling process of tmcp steel plates. *arXiv preprint arXiv:1912.12166*, 2019.
- [62] T. Roubíček. *Nonlinear partial differential equations with applications*, volume 153. Springer Science & Business Media, 2013.
- [63] W. Rudin. Functional analysis. 1991. *Internat. Ser. Pure Appl. Math*, 1991.
- [64] O. Scherzer. The use of morozov’s discrepancy principle for tikhonov regularization for solving nonlinear ill-posed problems. *Computing*, 51(1):45–60, 1993.
- [65] T. Schuster, B. Kaltenbacher, B. Hofmann, and K. S. Kazimierski. *Regularization methods in Banach spaces*, volume 10. Walter de Gruyter, 2012.
- [66] R. E. Showalter. The final value problem for evolution equations. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 47(3):563–572, 1974.
- [67] J. Su and G. F. Hewitt. Inverse heat conduction problem of estimating time-varying heat transfer coefficient. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 45(8):777–789, 2004.
- [68] M. Teixeira, M. Rincon, and I.-S. Liu. Numerical analysis of quenching–heat conduction in metallic materials. *Applied mathematical modelling*, 33(5):2464–2473, 2009.
- [69] A. N. Tikhonov and V. Y. Arsenin. Solutions of ill-posed problems. *New York*, pages 1–30, 1977.
- [70] A. N. Tikhonov, A. Tikhonov, and A. TIKHONOV. Solution of incorrectly formulated problems and the regularization method. 1963.
- [71] G. E. Totten. *Steel heat treatment: metallurgy and technologies*. CRC press, 2006.
- [72] F. Tröltzsch. *Optimale Steuerung partieller Differentialgleichungen*. Springer, 2005.
- [73] J. Walker. Boiling and the leidenfrost effect. *Fundamentals of physics*, pages E10–1, 2010.
- [74] Y. Wang and Y. Yuan. Convergence and regularity of trust region methods for nonlinear ill-posed inverse problems. *Inverse Problems*, 21(3):821, 2005.

-
- [75] D. Werner. *Funktionalanalysis*. Springer, 2006.
- [76] J. Wloka. Partial differential equations. 1987. *Cambridge University*.
- [77] Y. Xie and A. Waechter. On the convergence of bfgs on a class of piecewise linear non-smooth functions. *arXiv preprint arXiv:1712.08571*, 2017.
- [78] Y.-C. Yang and W.-L. Chen. A nonlinear inverse problem in estimating the heat flux of the disc in a disc brake system. *Applied Thermal Engineering*, 31(14-15):2439–2448, 2011.
- [79] E. Zeidler. *Nonlinear Functional Analysis and Its Applications: II/B: Nonlinear Monotone Operators*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [80] K. Zhou, J. C. Doyle, K. Glover, et al. *Robust and optimal control*, volume 40. Prentice hall New Jersey, 1996.