Entwicklung und Analyse eines Bayes-Inversion-Verfahrens zur Identifizierung der Materialparameter in viskoelastischen Strukturen

Dissertation

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

> von Rebecca Rothermel



Saarbrücken 2023

Tag des Kolloquiums:

Dekan: Vorsitzender: Berichterstatter:

Protokollführer:

27.06.2023

Prof. Dr. Jürgen SteimleProf. Dr. Christian BenderProf. Dr. Thomas SchusterProf. Dr. Dr. h.c. mult. Alfred K. LouisDr. Andreas A. Buchheit

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei meinem Betreuer und Mentor Professor Thomas Schuster bedanken, der mich von meiner Bachelorarbeit bis zur Doktorarbeit begleitet hat. Ich danke ihm für die Möglichkeit zu dieser Promotion, für die Freiheit, die er mir während dieser Arbeit geschenkt hat und für die Unterstützung, die er stets bereit war zu geben.

An zweiter Stelle möchte ich mich bei Professor Alfred K. Louis bedanken, der sich bereit erklärt hat als Gutachter zu fungieren. Dankbar bin ich auch, dass ich das Glück hatte eine der letzten Vorlesungen von ihm zu besuchen.

Außerdem möchte ich Professor Stefan Diebels danken, der zustimmte ein Gutachten zu übernehmen. Dank seiner Zusammenarbeit mit Prof. Schuster kam es erst zu diesem spannenden Thema. Für die interessanten und erkenntnisreichen Treffen möchte ich ihm und Anne Jung danken.

Ebenfalls möchte ich meiner Arbeitsgruppe einen Dank aussprechen. Dazu gehörten am Anfang noch Anne Wald, Julia Seydel und Jens Tepe. Die längste Zeit jedoch teilte ich mir den Flur mit Clemens Meiser, Lukas Vierus und zuletzt auch Alice Oberacker. Konstanten waren aber stets Claudia Stoffer, Petra Schuster-Gentes und Dimitri Rothermel. Ihnen allen möchte ich danken für ihre Freundschaft, Unterstützung und die vielen anregenden Gespräche.

Für das Korrekturlesen und Ausbügeln meiner Fehler möchte ich mich bei Dimitri Rothermel, meiner Mutter Inge Felten-Klein und natürlich Prof. Schuster bedanken.

Zu guter Letzt schulde ich meiner Familie einen riesigen Dank. Meinen Eltern Inge und Richard und meiner Schwester Katharina möchte ich für die moralische Unterstützung danken, die ich während meines Studiums und meiner Promotion von ihnen erhalten habe. Des Weiteren möchte ich auch meinen Schwiegereltern Natali und Jörg danken, die mir stets ihre Zeit geschenkt haben. Der letzte Dank gilt meinem Mann Dimitri und meiner Tochter Leana. Ersterem dafür, dass er mir stets Kraft spendet und endlose Unterstützung gibt. Leana möchte ich dafür danken, dass sie mir jeden Tag Inspiration, Freude und Liebe schenkt.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung Abstract Motivation und Einleitung							
				1	Gru	ındlagen	7
					1.1	Viskoelastische Materialien	7
	1.2	Mathematische Modellierung	12				
	1.3	Der Vorwärtsoperator	15				
	1.4	Das inverse Problem	17				
2	Вау	ves-Inversion	18				
	2.1	Einführung in die statistische Inversionstheorie	19				
	2.2	Anwendung auf das inverse Problem	23				
		2.2.1 Auswirkung der Erfolgswahrscheinlichkeit q auf die Minimierung $\ldots \ldots \ldots$	26				
		2.2.2 Der Bayes-Algorithmus	27				
	2.3	Mathematische Grundlagen zur Konvergenz und Regularisierung	29				
		2.3.1 Lokale Schlechtgestelltheit	30				
		2.3.2 Tikhonov-Regularisierung	31				
	2.4	Konvergenz und Regularisierung des Bayes-Verfahrens	35				
		2.4.1 Lokale Schlechtgestelltheit	35				
		2.4.2 Das Bayes-Verfahren als Regularisierungsverfahren	38				
3	Nu	merische Evaluation	51				
	3.1	Der Cluster-Algorithmus	52				
	3.2	Datensimulation	57				
	3.3	Exakte Daten	59				
	3.4	Gestörte Daten	61				
	3.5	Analyse verschiedener Verschiebungsraten $\dot{\varepsilon}_u$	65				
	3.6	Auswirkung der Erfolgswahrscheinlichkeit q auf die Rekonstruktion	68				
	3.7	Regularisierung durch einen Strafterm bezüglich der Materialparameter	70				
Fa	zit u	and Ausblick	72				
Li	Literaturverzeichnis						

Abbildungsverzeichnis

1.1	Dehnungskurve $\varepsilon(t)$ mit Dehnrate $\dot{\varepsilon}$ und maximalem Dehnungswert $\bar{\varepsilon}$	8
1.2	Feder und Dämpfer	9
1.3	Normprobe und verallgemeinertes Maxwell-Modell mit unbekannter Anzahl an	
	Maxwell-Elementen n und $2n + 1$ Materialparametern $\ldots \ldots \ldots \ldots$	10
2.1	Die Binomialverteilung $\rho_0(n)$ und $\phi_0(n)$ für $q = 0.1 \dots \dots \dots \dots \dots$	26
2.2	Die Binomialverteilung $\rho_0(n)$ und $\phi_0(n)$ für $q = 0.5$ und $q = 0.8$	27
3.1	Dehnungs-Zeit-Kurven für verschiedene Verschiebungsraten $\dot{\varepsilon}_u$	57
3.2	Synthetische Spannungs-Zeit-Daten, die von einem Modell erzeugt werden, das	
	aus einer Feder in Kombination mit drei Maxwell-Elementen für drei verschie-	
	dene Verschiebungsraten besteht $\ldots \ldots \ldots$	58
3.3	Dehnungs- und Spannungs-Zeit-Kurven mit und ohne Rauschen für Verschie-	
	bungsrate $\dot{\varepsilon}_u = 10 \text{mm/s}$	61
3.4	Einzelne Spannungskomponenten für eine Verschiebungsrate von 10 mm/s $$.	66
3.5	Einzelne Spannungskomponenten für eine Verschiebungsrate von 1 mm/s $$	67

Zusammenfassung

Diese Arbeit befasst sich mit dem nichtlinearen inversen Problem der Identifizierung der Materialparameter in viskoelastischen Strukturen. Zur Beschreibung eines viskoelastischen Materials nutzen wir ein verallgemeinertes Maxwell-Modell. Mithilfe von Simulationen eines Relaxationsversuchs werden Spannungsdaten erzeugt, die zur Rekonstruktion der Materialparameter genutzt werden. Zwei Besonderheiten treten bei der Modellierung auf. Die Anzahl der Maxwell-Elemente und somit auch die der Materialparameter ist unbekannt. Dadurch ist die Anzahl der Materialparameter abhängig von der Lösung des inversen Problems. Diese Modellierung sorgt dafür, dass wir eine spezielle Konstruktion des Vorwärtsoperators benötigen, der auf einem kartesischen Produkt einer Halbgruppe und einem Hilbertraum in Form des Raums der natürlichen Zahlen \mathbb{N} und des Folgenraums $\ell^2(\mathbb{N})$ arbeitet. Um dieses Problem zu lösen, leiten wir uns ein Verfahren mithilfe der statistischen Inversionstheorie her, welches alternierend nach einer passenden Lösung für die Anzahl der Maxwell-Elemente und nach den Werten der Materialparameter sucht. Dies führt uns zu der Minimierung eines Tikhonov-Verfahrens mit einem speziellen Strafterm bezüglich der Anzahl der Maxwell-Elemente. Wir definieren, wie die Begrifflichkeiten der lokalen Schlechtgestelltheit und Regularisierung in diesem Setting auszusehen haben und beweisen anschließend diese Eigenschaften für unser inverses Problem. Dazu gehören auch der Beweis der Existenz, Stabilität sowie Konvergenz der regularisierten Lösung des Bayes-Verfahrens. Anschließend zeigen wir verschiedene numerische Ergebnisse des Bayes-Algorithmus. Als Vergleichsalgorithmus ziehen wir einen eigens konzipierten Cluster-Algorithmus hinzu, welcher zuvor motiviert und hergeleitet wird. Zusammenfassend besitzt diese Arbeit die folgenden Neuerungen:

- Vorwärtsoperator auf dem kartesischen Produkt $\mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N})$,
- Abhängigkeit der Anzahl der Materialparameter von einem Teil der Lösung des inversen Problems,
- Bayes-Verfahren mit alternierender Minimierung zur Bestimmung der Lösung,
- Beweis der Existenz, Stabilität und Konvergenz der regularisierten Lösungen des Bayes-Verfahrens.

Abstract

This work deals with the nonlinear inverse problem of identifying the material parameters in viscoelastic structures. We use a generalized Maxwell model to describe a viscoelastic material. With the help of a relaxation experiment, stress data are generated which are used to reconstruct the material parameters. Two peculiarities occur in the modeling. The number of Maxwell elements is unknown and this determines the number of material parameters. Thus, the number of material parameters depends on the solution of the inverse problem. This modeling ensures that we need a special construction of the forward operator that operates on a Cartesian product of a semigroup and a Hilbert space in the form of the space of natural numbers N and the sequence space $\ell^2(\mathbb{N})$. To solve this problem, we derive a procedure using statistical inversion theory, which alternately searches for a suitable solution for the number of Maxwell elements and the material parameters. This leads us to the minimization of a Tikhonov method with a special penalty term with respect to the number of Maxwell elements. We define what the concepts of local ill-posedness and regularization look like in this setting, and then prove these properties for our inverse problem. This includes the proof of existence, stability as well as convergence of the regularized solution of the Bayes method. We then show various numerical results of the Bayes algorithm. In summary, this work has the following innovations:

- forward operator on the Cartesian product $\mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N})$,
- dependence of the number of material parameters on a part of the solution of the inverse problem,
- Bayes method with alternating minimization to determine the solution,
- proof of existence, stability and convergence of regularized solutions of Bayes method.

Motivation und Einleitung

In dieser Arbeit werden wir uns mit der Identifizierung der Materialparameter in viskoelastischen Strukturen beschäftigen. Dies ist einzuordnen in das Themengebiet der inversen Probleme. Ein inverses Problem hat die Aufgabe, von einer beobachtbaren Wirkung auf deren unzugängliche Ursache zu schließen. Die Parameteridentifikation ist ein großer Bereich der inversen Probleme. Dazu gehören etwa die Identifizierung der Verzerrungsenergiedichte hyperelastischer Materialien [4, 25, 41, 66, 67, 77], die oberflächenenthalpieabhängigen Wärmeströme von Stahlplatten [58, 59], inverse Streuprobleme [9] oder der Brechungsindex durch Terahertz-Tomographie [74]. Ein großes Problem bei der Rekonstruktion der Materialparameter ist, dass inverse Probleme häufig schlecht gestellt sind. Das bedeutet kleine Fehler in der beobachteten Wirkung führen zu großen Fehlern in den zugehörigen Ursachen. Diese Fehlerverstärkung muss im Lösungsprozess durch eine sogenannte Regularisierung berücksichtigt werden. Verschiedene Methoden zur Lösung inverser Probleme finden sich in Standardlehrbüchern wie [15, 40, 43, 57]. Für Einsichten zu nichtlinearen Problemen verweisen wir auf [38, 57, 72, 73].

Das Verständnis dafür, wie sich ein Material bei Krafteinwirkung verformt, ist für viele Wirtschaftszweige entscheidend, von der Lebensmittelindustrie bis hin zum Produktdesign [5]. In der Lebensmittelverarbeitung etwa hängt die Beschaffenheit von Brot sehr stark von seinen mechanischen Eigenschaften ab, die wiederum durch den Herstellungsprozess bestimmt werden [42, 70]. Bei der additiven Fertigung werden Kunststoffe in Form von Polymerfäden geschmolzen und dann schichtweise zu einem dreidimensionalen Werkstück aufgebaut. Das Fließverhalten des genutzten Materials wirkt sich sowohl auf die Verarbeitungszeit als auch auf die Festigkeit des gedruckten Gegenstandes aus [10, 45]. Die mechanische Reaktion von Polymeren kann genutzt werden, um den Aufbau ihrer Mikrostruktur zu bestimmen [26, 61]. Die wissenschaftliche Untersuchung der Materialverformung wird als Rheologie bezeichnet. Diese wird sowohl in der Physik, der Physikalischen Chemie, den Ingenieur- und Werkstoffwissenschaften, als auch der pharmazeutischen Technologie, und in den letzten Jahrzehnten vermehrt in den Bio- oder Geowissenschaften genutzt.

In der rheologischen Modellierung gibt es drei Grundmodelle, die das idealisierte Verhalten von Materialien beschreibt: Elastizität, Viskosität und Plastizität. Die meisten Materialien zeigen in der Realität allerdings keines dieser Idealmodelle, sondern immer eine Kombination aus verschiedenen Eigenschaften, die in verschiedener Ausprägung auftreten [49]. Elastische Körper sind Festkörper, die bei Einwirkung von Kraft ohne zeitliche Verzögerung auf diese reagieren und bei Entlastung wieder zurück in ihren Ausgangszustand gehen. Ein simples Beispiel dafür ist ein Gummiball. Wird dieser fallengelassen, so verformt er sich beim Aufprall und springt danach wieder in seine Ursprungsform zurück.

Viskose Materialien sind hingegen Flüssigkeiten, die bei Einwirkung von Kraft zerfließen. Diese Kraft löst sich während der Verformung vollkommen auf. Diese wird also nicht wie bei einem elastischen Material im Körper gespeichert. Das klassische Beispiel dafür ist ein Wassertropfen, der nach Aufprall auf eine Oberfläche unter Einwirkung der Schwerkraft verläuft. Plastische Materialien hingegen haben eine sogenannte Fließgrenze. Bleibt die einwirkende Kraft unterhalb dieser Grenze, so verhält sich ein idealer plastischer Körper wie ein Starrkörper und es kommt erst zu einer Verformung, wenn diese Grenze überschritten wird. Im Gegensatz zu einem elastischen Material bleibt diese Verformung auch nach Wegfall der Krafteinwirkung bestehen. Eine Kugel aus Knetmasse ist ein gutes Beispiel für ein plastisches Material. Bei einem Aufprall aus geringer Höhe zeigt diese keine Verformung. Lässt man diese jedoch aus einer größeren Höhe fallen, wird die Knetmasse zu einer Halbkugel deformiert und diese Verformung beibehalten [52].

Wir betrachten in dieser Arbeit viskoelastische Materialien, die sowohl viskose als auch elastische Eigenschaften unter Krafteinwirkung aufzeigen. Nahezu alle Polymere zeigen viskoelastisches Materialverhalten. Ein viskoelastisches Modell sollte dabei zwei typische Vorgänge beschreiben können: Relaxation und Kriechen. Erstere beschreibt den Vorgang, dass viskoelastische Materialien bei gleichbleibender Deformation relaxieren, das heißt die Spannung im Material wird geringer. Wird auf ein viskoelastisches Material eine Kraft aufgebracht, so tritt die Deformation mit einer zeitlichen Verzögerung auf. Dies wird als Kriechen bezeichnet. Wie genau dies modelliert wird, werden wir in Kapitel 1 herleiten. Weitere Theorie zur Rheologie und Materialverhalten viskoelastischer Materialien findet sich in [71, 76].

In Kapitel 1.2 werden wir die mathematische Modellierung des inversen Problems besprechen. Im Gegensatz zu elastischen Materialmodellen sind für viskoelastische Materialien die Konstitutivgleichungen oftmals nicht bekannt und es gibt eine Vielzahl verschiedener Modelle, um ein viskoelastisches Material zu beschreiben. Diese basieren häufig auf Evolutionsgleichungen, die die Veränderung der Spannung in Abhängigkeit von den Materialparametern wie Steifigkeit, Viskosität oder Relaxationszeit messen.

Wir stellen hier ein verallgemeinertes Maxwell-Modell vor, welches eine unbekannte Anzahl an Maxwell-Elementen und Materialparametern aufweist. Der Vorwärtsoperator, den wir in Abschnitt 1.3 konstruieren, bildet die Materialparameter und die Anzahl der Maxwell-Elemente auf die Spannungsfunktion ab. Diese Funktion beschreibt den zeitlichen Spannungsverlauf im Material während einem Relaxationsexperiment, bei dem eine Dehnung auf das Material aufgebracht wird und konstant gehalten wird. Damit wird die erste Besonderheit dieser Arbeit sichtbar. Der Vorwärtsoperator arbeitet auf einem kartesischen Produkt einer Halbgruppe und einem Hilbertraum in Form von dem Raum der natürlichen Zahlen \mathbb{N} und dem Folgenraum $\ell^2(\mathbb{N})$. Dies ist eine ungewöhnliche Konstellation.

In Abschnitt 1.4 werden wir das inverse Problem definieren. Dieses versucht aus der Spannungsfunktion die Anzahl der Maxwell-Elemente sowie die Materialparameter des viskoelastischen Materials zu bestimmen. Dies zeigt das zweite besondere Merkmal dieser Arbeit. Die Anzahl der zu bestimmenden Materialparameter ist unbekannt und muss im inversen Problem durch die Anzahl der Maxwell-Elemente mitbestimmt werden.

Wir können also keinen simplen Vektorraum \mathbb{R}^n für die Materialparameter nutzen, da deren Anzahl unbekannt ist. Daher verwenden wir, wie oben bereits erwähnt, den Hilbertraum $\ell^2(\mathbb{N})$, um so die Anzahl der Materialparameter variieren zu können.

Zur Bestimmung von Materialparametern in verschiedenen Strukturen wird in der technischen Mechanik als Standardansatz das Residuum minimiert [6, 27]. Eine alternative Herangehensweise ist die Sensitivitätsanalyse, um die möglichen Abweichungen der Parameter aufgrund von Rauschen zu bestimmen [19, 23, 24, 46]. Diese Arbeiten betrachten verschiedene Modelle für hyperelastische oder viskoplastische Materialien. Veröffentlichungen zur Identifikation von Materialparametern viskoelastischer Strukturen mit verschiedenen Lösungsansätzen sind etwa [13, 14, 17, 53, 69]. Keine dieser Arbeiten berücksichtigt jedoch die Anzahl der Maxwell-Elemente als unbekannten, zu bestimmenden Parameter oder eine lösungsabhängige Anzahl von Materialparametern. Daher sind die dort gewählten Lösungsansätze für unser Setting nicht geeignet. Auch reichen Regularisierungsverfahren, wie sie in den klassischen Textbüchern zu inversen und schlecht gestellten Problemen zu finden sind, nicht aus [39, 43, 54, 57]. Die Autorin selbst hat einen auf dieses Problem angepassten Cluster-Algorithmus entwickelt. Aber dieser zeigt eine starke Fehleranfälligkeit gegenüber verrauschten Daten und stellt somit keine zufriedenstellende Lösung dar [60]. Als Lösung schlagen wir in Kapitel 2 ein neu entwickeltes Verfahren vor, welches mithilfe des Bayes-Theorem aus der statistischen Inversionstheorie eigens auf diese Problematik angepasst ist. Dieses nutzt einen Prior, der uns ein gutes Tool liefert, um die Anzahl der Maxwell-Elemente sinnvoll zu bewerten und somit bessere Rekonstruktionen zu ermöglichen. Die Herleitung dieses Verfahrens geschieht in Abschnitt 2.2.

Der entwickelte Algorithmus sucht alternierend nach einer passenden Lösung für die Anzahl der Maxwell-Elemente und die Materialparameter. Dadurch minimiert er ein Tikhonov-Funktional mit einem durch die statistische Inversionstheorie motivierten Strafterm für die Anzahl der Maxwell-Elemente.

Im nächsten Schritt werden wir in Kapitel 2.3 die bekannte Theorie zu Tikhonov-Funktionalen (vergleiche [31, 32, 64, 65]) nutzen, um Konvergenz- und Regularisierungseigenschaften des neu entwickelten Bayes-Verfahrens zu zeigen. Dabei müssen diese Begriffe zuerst auf die Form unseres inversen Problems angepasst werden. Die bekannten Definitionen lassen sich nicht auf den Vorwärtsoperator mitsamt dem kartesischen Produkt auf Halbgruppe und Hilbertraum übertragen. Wir starten mit der lokalen Schlechtgestelltheit, deren Definition wir auf unser inverses Problem adaptieren und danach beweisen. Danach gehen wir im Detail auf die Existenz, Stabilität und Konvergenz einer regularisierten Lösung ein.

In Kapitel 3 wenden wir uns der numerischen Evaluation zu. Dazu führen wir den erwähnten Cluster-Algorithmus ein, um Vergleiche zwischen den Rekonstruktionen der verschiedenen Algorithmen ziehen zu können. Wir führen Experimente mit verschiedenen Datensätzen durch, angefangen bei exakten Daten. Im nächsten Schritt stören wir die Daten durch additives Rauschen. Für diese analysieren wir verschiedene Verschiebungsraten der Dehnungsfunktion im Relaxationsversuch. Danach betrachten wir die Auswirkung der Erfolgswahrscheinlichkeit der Binomialverteilung des Priors auf die Rekonstruktionen. Im letzten Unterkapitel führen wir einen Strafterm bezüglich der Materialparameter ein und analysieren, wie sich die Ergebnisse hinsichtlich verschiedener Strafterme verbessern.

Kapitel 1

Grundlagen

In dem folgenden Kapitel werden wir uns die Grundlagen unserer Arbeit anschauen. Dazu werden wir im ersten Teilkapitel die Eigenschaften eines viskoelastischen Materials kennenlernen und darauf folgend die mathematische Modellierung anschauen. Wir schließen das Kapitel ab mit der Konstruktion des Vorwärtsoperators sowie des inversen Problems.

1.1 Viskoelastische Materialien

Wir werden im folgenden Teilkapitel das rheologische Modell eines viskoelastischen Materials kennenlernen, welches wir als Ausgangspunkt unseres inversen Problems nutzen. Dieses Modell stammt aus dem Gebiet der Materialwissenschaften, genauer der Kontinuumsmechanik. Wir wollen die Materialparameter eines viskoelastischen Materials durch Messungen der Spannung bei einem Relaxationsexperiment bestimmen. Dazu werden wir uns in diesem Kapitel den folgenden Fragen widmen: Was ist ein Relaxationsexperiment? Was ist ein viskoelastisches Material? Welche Materialparameter wollen wir rekonstruieren und was beschreiben diese? Wie sieht das Modell aus, welches uns den Zusammenhang zwischen der gemessenen Spannung bei einem solchen Experiment und den Materialparametern eines viskoelastischen Materials beschreibt?

Für umfassende Einführungen in das phänomenologische Verhalten und die Modellierung der Viskoelastizität verweisen wir auf Lehrbücher wie [71, 76].

Ein viskoelastisches Material zeichnet sich durch eine Kombination von viskosem wie auch elastischem Verhalten aus. Viskosität beschreibt im Allgemeinen die Zähigkeit von Flüssigkeiten oder Gasen. Das heißt hier beobachtet man bei Krafteinwirkung Verformungen, die unbegrenzt und irreversibel sind. Im Gegensatz dazu beschreibt Elastizität die Fähigkeit eines Körpers sich nach Wegfall der einwirkenden Kraft in seine Ursprungsform zurückzuverformen. In diesem Fall handelt es sich also um begrenzte reversible Verformungen. Kombiniert man diese Eigenschaften, so erhält man ein viskoelastisches Material. Dieses Verhalten wird von verschiedenen polymeren Materialien wie Klebstoffen, Elastomeren und Gummi gezeigt.

In Abbildung 1.3 ist die typische Form einer Normprobe dargestellt. Die Probe wird an den dicken Enden eingespannt und in Richtung der Pfeile belastet. Nach dem Saint Venantschen

Prinzip sind die Störungen, die durch die Einspannungen an den Probenenden verursacht werden, nach kurzer Entfernung abgeklungen. Daher kann man davon ausgehen, dass der Dehnungs- und Spannungszustand im Zentrum der Probe homogen ist und wir können ein ein-dimensionales Modell nutzen. Die Kraft und die Verlängerung der Probe werden gemessen und können zu direkten Berechnungen von der Dehnung und Spannung genutzt werden. Diese nutzen wir in unserem inversen Problem als Ausgangspunkt, um die Materialparameter zu bestimmen.

Die Dehnung beschreibt dabei das folgende Relaxationsexperiment: Für eine gegebene Dehnrate $\dot{\varepsilon}$ und einen maximalen Dehnungswert $\bar{\varepsilon}$ ist die Dehnung in einem Zeitintervall $t \in [0, T]$ gegeben als

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} \dot{\varepsilon} \cdot t, & 0 \le t \le \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}} \\ \bar{\varepsilon}, & \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}} < t \le T. \end{cases}$$
(1.1)

Die Funktion ist in Abbildung 1.1 dargestellt und beschreibt das folgende Verfahren. Das Material wird gedehnt bis ein maximaler Dehnungswert $\bar{\varepsilon}$ bei einer Dehnrate $\dot{\varepsilon}$ erreicht wird. Die Dehnrate ist im Versuch bekannt, indem die von der Prüfmaschine vorgegebene Verschiebungsrate $\dot{\varepsilon}_u$ durch die Probenlänge l_0 dividiert wird, das heißt $\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{\varepsilon}_u}{l_0}$. Die maximale Dehnung wird demnach zum Zeitpunkt $t = \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}}$ erreicht. Danach wird die aufgebrachte Dehnung konstant gehalten.



Abbildung 1.1: Dehnungskurve $\varepsilon(t)$ mit Dehnrate $\dot{\varepsilon}$ und maximalem Dehnungswert $\bar{\varepsilon}$

Wir beschreiben die Spannung im Material durch ein rheologisches Multiparameter-Modell, das uns als Modell für ein viskoelastisches Material dient.

In der Rheologie wird linear elastisches Verhalten durch eine Feder modelliert, auch bekannt als Hooke-Element (s. Abbildung 1.2). Je höher die aufgebrachte Dehnung, desto größer die gemessene Spannung in der Feder. Die entsprechende Proportionalitätskonstante wird auch als Elastizitätsmodul bezeichnet. Alternativ kann auch durch das Hookesche Gesetz die Verschiebung und die Kraft mithilfe der Federsteifigkeit verknüpft werden. Die Feder reagiert sofort auf die aufgebrachte Dehnung, allerdings ist die Deformation begrenzt und wirkt keine Kraft mehr auf den Körper, so geht die Feder wie ein idealer elastischer Körper zurück in ihre Ausgangslage.

Das zweite für uns relevante Element in der Rheologie ist ein Dämpfer oder auch Newton-Element, ebenfalls dargestellt in Abbildung 1.2. Während beim Hookeschen Körper die gemessene Kraft proportional zur Verschiebung ist, ist sie beim Newton-Körper proportional zur Geschwindigkeit. Die Proportionalitätskonstante wird als Dämpfungskonstante bezeichnet und entspricht der Viskosität. Dieses Modell für viskoses Materialverhalten reagiert auf Krafteinwirkung mit einer zeitlichen Verzögerung. Im Gegensatz zu einem elastischen Körper ist die Deformation unbegrenzt, solange die Kraft wirkt. Dabei ist die Verformung irreversibel und die Deformationsgeschwindigkeit proportional zur Spannung.

Die Parallelschaltung einer Feder und eines Dämpfer wird als Kelvin-Voigt-Körper bezeichnet. Wird eine Dehnung auf solch einen Körper aufgebracht und konstant gehalten, so verformt sich die Feder elastisch, wird aber durch den Dämpfer gebremst, sodass die Deformation zeitlich verzögert auftritt. Dies wird auch als Kriechvorgang bezeichnet und ist typisch für ein viskoelastisches Material.

Diese Zusammensetzung kann allerdings nur Kriechvorgänge, jedoch keine Relaxationsvorgänge eines viskoelastischen Materials beschreiben. Letztere können durch ein Maxwell-Element, der seriellen Zusammensetzung aus einer Feder und einem Dämpfer umgesetzt werden. Wirkt eine Kraft auf einen Maxwell-Körper, so reagiert er mit einer Deformationsgeschwindigkeit, die von der Größe der Kraft sowie ihrer Änderungsgeschwindigkeit abhängig ist. Wird die angelegte Dehnung allerdings wie bei dem Relaxationsexperiment konstant gehalten, so relaxiert die Spannung im Maxwell-Körper gegen den Wert Null, da der Dämpfer sich gemäß seiner Relaxationszeit entspannt. Diese ist gegeben durch das Verhältnis von Viskosität zu Steifigkeit. Damit stellt ein einfacher Maxwell-Körper ein viskoelastisches Fluid dar, kann aber keinen viskoelastischen Festkörper modellieren.



Abbildung 1.2: Feder und Dämpfer

Um diesen beschreiben zu können, ist das einfachste Modell ein Drei-Parameter Modell, bestehend aus einer Parallelkombination eines Maxwell-Elements mit einer Feder (vergleiche [21, 35, 62]).

Bringt man auf ein solches Festkörpermodell eine Dehnung auf, so dehnen sich beide Federn.

Wird die Dehnung dann im weiteren Verlauf des Experiments konstant gehalten, so weitet sich der Dämpfer entsprechend seiner Relaxationszeit auf. Ist dieser vollständig relaxiert, so erreicht die Feder im Maxwell-Element ihre ursprüngliche unverformte Position und die Spannung wird vollständig von der Einzelfeder übernommen.

Daher kann das Modell mit einem einzigen Maxwell-Element nur eine Relaxationszeit für die gesamte Dauer der Entspannung des Materials simulieren. Viskoelastische Materialien zeigen jedoch Relaxationsverhalten mit unterschiedlichen Relaxationszeiten [21, 68]. Damit wir dieses Verhalten modellieren können, müssen wir das gesamte Relaxationsspektrum abdecken (vergleiche [5, 33, 62, 68]). Dieses kann in verschiedene Bereiche unterteilt werden, wie den Fließbereich, den Verschränkungsbereich, den Übergangsbereich und den glasartigen Bereich [2]. Die Anordnung, die Länge und die Verschränkung der Polymerketten auf molekularer Ebene erklärt die unterschiedliche Steifigkeit während des Relaxationsspektrums. Eine kürzere Kette entspannt sich schneller als eine längere Kette und trägt daher nach ihrer Relaxation nicht zur Steifigkeit des Materials bei [3]. Um dieses Verhalten in unsere Modellierung aufzunehmen, verwenden wir anstatt einem Maxwell-Element eine unbekannte Anzahl n. Das führt uns zu dem verallgemeinerten Maxwell-Modell, auch bekannt als Maxwell-Wiechert Modell (vergleiche Abbildung 1.3).



Abbildung 1.3: Normprobe und verallgemeinertes Maxwell-Modell mit unbekannter Anzahl an Maxwell-Elementen n und 2n + 1 Materialparametern

Die Anzahl der Maxwell-Elemente kann auf eine beliebige Zahl n mit der Relaxationszeit τ_j in jedem der Dämpfer und der Steifigkeit der Feder μ_j in jedem der Maxwell-Elemente erweitert werden. Die Steifigkeit der einzelnen Feder wird mit μ gekennzeichnet. Wenn alle Maxwell-Elemente bis zum Spannungswert Null relaxieren, wird die Gleichgewichtslage erreicht, und die einzelne Feder mit der Steifigkeit μ stellt die Grundsteifigkeit des Materials dar, die gewährleistet, dass das Material in seiner ungestörten Lage eine Steifigkeit aufweist und sich nicht wie eine Flüssigkeit verhält. Die durch den Dehnungswert ε dargestellte Verformung des Materials wird in jedem der Maxwell-Elemente in eine elastische Komponente ε_j^i und eine inelastische Komponente ε_j^i aufgeteilt. Die elastische Komponente entspricht der Dehnung des Dämpfers. Da die Dehnung des

Dämpfers von seiner Relaxationszeit abhängt, wird eine auf dem Entropie-Prinzip basierende Evolutionsgleichung verwendet, um die Änderung der inelastischen Dehnung mit der Zeit zu modellieren [34, 55]. Für kleine Verformungen ist die Evolutionsgleichung gegeben durch

$$\dot{\varepsilon}_{j}^{i}(t) = \frac{\varepsilon(t) - \varepsilon_{j}^{i}(t)}{\tau_{j}/2},$$
(1.2)

wobei $\dot{\varepsilon}_{j}^{i}$ die zeitliche Ableitung darstellt. Die im System erzeugte Gesamtspannung ist dann durch die Summe der in jeder der Federn induzierten Spannungen gegeben. Unter der Annahme eines linear elastischen Verhaltens der Federn ist die Spannung gegeben durch

$$\sigma(t) = \mu \,\varepsilon(t) + \sum_{j=1}^{n} \,\mu_j(\varepsilon(t) - \varepsilon_j^i(t)).$$
(1.3)

Das inverse Problem ist somit die Identifizierung der Materialparameter durch die gemessene Spannung mithilfe der Gleichung (1.3). Zu den Materialparametern zählt die Steifigkeit der einzelnen Feder μ , sowie die Steifigkeiten μ_1, \ldots, μ_n und Relaxationszeiten τ_1, \ldots, τ_n der Maxwell-Elemente. Ebenfalls unbekannt ist die Anzahl der Maxwell-Elemente n. Auch diese gilt es als Lösung des inversen Problems zu bestimmen. Die Dehnung ε ist bekannt und die inelastische Dehnung ε_j^i muss für alle Maxwell-Elemente $i = 1, \ldots, n$ aus der Evolutionsgleichung (1.2) bestimmt werden.

1.2 Mathematische Modellierung

Die Gesamtspannung (1.3) ist die Summe der Spannung der einzelnen Feder, sowie der verschiedenen Maxwell-Elemente. Letztere ist abhängig von den inelastischen Komponenten der Dehnung, die über die Evolutionsgleichung (1.2) bestimmt werden. Im folgenden Abschnitt werden wir sehen, dass wir diese Gleichung mithilfe des vorhandenen Wissens über den Versuchsaufbau lösen können, um so eine explizite Formulierung des Vorwärtsoperators in Kapitel 1.3 konstruieren zu können.

Dazu wollen wir uns zunächst auf die Berechnung der inelastischen Komponente des Dehnungswertes ε_j^i konzentrieren. Eine Evolutionsgleichung wie (1.2) wird oft mit numerischen Methoden wie dem Crank-Nicolson-Verfahren gelöst. Diese Methoden haben jedoch den Nachteil von Näherungsfehlern. Da wir es mit einem schlecht gestellten inversen Problem zu tun haben, ist es wünschenswert, solche Fehler bei der Berechnung des Vorwärtsproblems zu vermeiden. Zu diesem Zweck erörtern wir im nächsten Abschnitt die analytische Lösung der Evolutionsgleichung.

Abgeschen von der mechanischen Anwendung [56] wird die Evolutionsgleichung (1.2) auch in anderen Anwendungen wie der Magnetic Particle Imaging [11] zur Modellierung der Relaxation verwendet. Ihre Lösung kann analytisch formuliert werden als

$$\varepsilon_j^i(t) = \int_0^t \varepsilon(\tilde{t}) \frac{2}{\tau_j} \exp\left(-2\frac{t-\tilde{t}}{\tau_j}\right) d\tilde{t}.$$

Durch Einsetzen der stückweisen linearen Dehnung (1.1) erhalten wir das folgende Ergebnis:

Lemma 1.1. Die inelastische Dehnung ε_j^i des *j*-ten Maxwell-Elements mit der entsprechenden Relaxationszeit τ_j zum Zeitpunkt $t \in [0, T]$ ist gegeben durch

$$\varepsilon_{j}^{i}(t) = \begin{cases} \frac{\tau_{j}}{2}\dot{\varepsilon}\exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t\right) + \dot{\varepsilon}t - \frac{\tau_{j}}{2}\dot{\varepsilon}, & 0 \le t \le \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} \\ \frac{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}{2}\exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t\right) \left[1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right)\right] + \bar{\varepsilon}, & \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} < t \le T. \end{cases}$$
(1.4)

Beweis. Wir betrachten zunächst $0\leq t\leq \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}}$ und können somit $\varepsilon(t)=\dot{\varepsilon}t$ verwenden,

$$\begin{split} \varepsilon_j^i(t) &= \frac{2}{\tau_j} \dot{\varepsilon} \exp\left(-\frac{2}{\tau_j} t\right) \int_0^t \tilde{t} \exp\left(\frac{2}{\tau_j} \tilde{t}\right) d\tilde{t} \\ &= \frac{2}{\tau_j} \dot{\varepsilon} \exp\left(-\frac{2}{\tau_j} t\right) \frac{\tau_j^2}{4} \left[\exp\left(\frac{2}{\tau_j} t\right) \left(\frac{2}{\tau_j} t - 1\right) + 1 \right], \end{split}$$

wobei wir $\int_{0}^{t} \tilde{t} \exp\left(a\tilde{t}\right) d\tilde{t} = \frac{1}{a^2} \left(\exp\left(at\right)\left(at-1\right)+1\right)$ für $a \in \mathbb{R}$ im letzten Schritt benutzen. Dann folgt

$$\varepsilon_j^i(t) = \frac{\tau_j}{2} \dot{\varepsilon} \exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right) \frac{2}{\tau_j} t \exp\left(\frac{2}{\tau_j}t\right)$$

$$-\frac{\tau_j}{2}\dot{\varepsilon}\exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right)\exp\left(\frac{2}{\tau_j}t\right)$$
$$+\frac{\tau_j}{2}\dot{\varepsilon}\exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right)$$
$$=\frac{\tau_j}{2}\dot{\varepsilon}\exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right)+\dot{\varepsilon}t-\frac{\tau_j}{2}\dot{\varepsilon}.$$

Als Nächstes untersuchen wir den Fall $\frac{\overline{\varepsilon}}{\varepsilon} < t \leq T$, in dem wir das Integral aufteilen müssen, um den entsprechenden Wert für $\varepsilon(t)$ verwenden zu können:

$$\varepsilon_j^i(t) = \frac{2}{\tau_j} \exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right) \left[\dot{\varepsilon} \int_0^{\frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}}} \tilde{t} \exp\left(\frac{2}{\tau_j}\tilde{t}\right) d\tilde{t} + \bar{\varepsilon} \int_{\frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}}}^t \exp\left(\frac{2}{\tau_j}\tilde{t}\right) d\tilde{t}\right].$$

Für diese Integrale erhalten wir dann

$$\int_{0}^{\frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}}} \tilde{t} \exp\left(\frac{2}{\tau_{j}}\tilde{t}\right) d\tilde{t} = \frac{\tau_{j}^{2}}{4} \left[\exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) \left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}} - 1\right) + 1 \right],$$
$$\int_{\frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}}}^{t} \exp\left(\frac{2}{\tau_{j}}\tilde{t}\right) d\tilde{t} = \frac{\tau_{j}}{2} \left[\exp\left(\frac{2}{\tau_{j}}t\right) - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) \right].$$

Setzt man diese Ergebnisse ein, erhält man

$$\begin{split} \varepsilon_{j}^{i}(t) &= \frac{2}{\tau_{j}} \exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t\right) \left[\dot{\varepsilon} \frac{\tau_{j}^{2}}{4} \left[\exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) \left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}} - 1\right) + 1 \right] + \bar{\varepsilon} \frac{\tau_{j}}{2} \left[\exp\left(\frac{2}{\tau_{j}}t\right) - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) \right] \\ &= \frac{2}{\tau_{j}} \exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t\right) \\ &\left[\dot{\varepsilon} \frac{\tau_{j}^{2}}{4} \frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}} \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) - \dot{\varepsilon} \frac{\tau_{j}^{2}}{4} \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) + \dot{\varepsilon} \frac{\tau_{j}^{2}}{4} + \bar{\varepsilon} \frac{\tau_{j}}{2} \exp\left(\frac{2}{\tau_{j}}t\right) - \bar{\varepsilon} \frac{\tau_{j}}{2} \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) \right] \\ &= \exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}t}\right) \left[\exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) \left(\bar{\varepsilon} - \frac{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}{2} - \bar{\varepsilon}\right) + \frac{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}{2} + \exp\left(\frac{2}{\tau_{j}t}\right) \bar{\varepsilon} \right] \\ &= -\frac{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}{2} \exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t + \frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) + \frac{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}{2} \exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t\right) + \bar{\varepsilon} \\ &= \frac{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}{2} \exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t\right) \left[1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right) \right] + \bar{\varepsilon}. \end{split}$$

Wir verwenden dieses Ergebnis, um die Spannungsantworten der einzelnen Maxwell-Elemente zu erhalten. Dies ist auch für die Analyse verschiedener Dehnraten $\dot{\varepsilon}$ in Kapitel 3 nützlich.

Lemma 1.2. Die Spannung σ_j des j-ten Maxwell-Elements mit j > 1 und der entsprechenden Steifigkeit μ_j und Relaxationszeit τ_j zum Zeitpunkt $t \in [0,T]$ ist gegeben als

$$\sigma_{j}(t) = \begin{cases} \frac{\mu_{j}\tau_{j}\dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t\right)\right), & 0 \le t \le \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} \\ -\frac{\mu_{j}\tau_{j}\dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_{j}\dot{\varepsilon}}\right)\right) \exp\left(-\frac{2}{\tau_{j}}t\right), & \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} < t \le T. \end{cases}$$
(1.5)

Die Spannung der einzelnen Feder, bezeichnet mit σ_0 , kann mit der entsprechenden Steifigkeit μ angegeben werden als

$$\sigma_0(t) = \begin{cases} \mu \dot{\varepsilon}t, & 0 \le t \le \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} \\ \mu \bar{\varepsilon}, & \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} < t \le T. \end{cases}$$
(1.6)

Nach diesen Berechnungen kann die Gesamtspannung als die Summe der Spannungen der Einzelfeder und der Maxwell-Elemente geschrieben werden, das heißt

$$\sigma(t) = \sum_{j=0}^{n} \sigma_j(t) = \begin{cases} \mu \dot{\varepsilon}t + \sum_{j=1}^{n} \frac{\mu_j \tau_j \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right) \right), & 0 \le t \le \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} \\ \mu \bar{\varepsilon} - \sum_{j=1}^{n} \frac{\mu_j \tau_j \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_j \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right), & \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} < t \le T. \end{cases}$$
(1.7)

Beweis. Wir beginnen mit der Spannung der einzelnen Feder. Diese wird berechnet durch $\sigma_0(t) = \mu \varepsilon(t)$. Setzt man (1.1) für die verschiedenen Zeitintervalle ein, so erhält man (1.6). Die Spannung der Maxwell-Elemente wird durch $\sigma_j(t) = \mu_j(\varepsilon(t) - \varepsilon_j^i(t))$ berechnet wie in Gleichung (1.3) angegeben. Durch Berücksichtigung der verschiedenen Zeitintervalle können wir sowohl die Dehnung $\varepsilon(t)$ als auch die inelastische Dehnung $\varepsilon_j^i(t)$ des Maxwell-Elements einsetzen. Daraus ergibt sich für $0 \le t \le \frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{\varepsilon}}$

$$\sigma_j(t) = \mu_j \left(\dot{\varepsilon}t - \frac{\tau_j}{2} \dot{\varepsilon} \exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right) - \dot{\varepsilon}t + \frac{\tau_j}{2} \dot{\varepsilon} \right) = \frac{\mu_j \tau_j \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right) \right)$$

In ähnlicher Weise erhalten wir für $\frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} < t \leq T$

$$\sigma_j(t) = \mu_j \left(\bar{\varepsilon} - \frac{\tau_j \dot{\varepsilon}}{2} \exp\left(-\frac{2}{\tau_j} t\right) \left[1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_j \dot{\varepsilon}}\right) \right] - \bar{\varepsilon} \right)$$
$$= -\frac{\mu_j \tau_j \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_j \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2}{\tau_j} t\right).$$

Die Darstellung der Gesamtspannung (1.7) folgt direkt durch Einsetzen von (1.5) in (1.3). \Box

1.3 Der Vorwärtsoperator

Da die Spannung nun in Abhängigkeit der Anzahl der Maxwell-Elemente und der Materialparameter ausgedrückt werden kann, widmen wir uns der Formulierung des Vorwärtsoperators. Unser Vorwärtsoperator ist gegeben als

$$F: \mathcal{D}(F) \subset \mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N}) \to L^2([0,T]), \qquad (n,x) \mapsto F(n,x) := \sigma.$$

Der Vorwärtsoperator bildet $n \in \mathbb{N}$ und $x \in \ell^2(\mathbb{N})$ auf die Spannung

$$\sigma(t) = \begin{cases} \mu \dot{\varepsilon}t + \sum_{j=1}^{n} \frac{\mu_j \tau_j \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right) \right), & 0 \le t \le \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} \\ \mu \bar{\varepsilon} - \sum_{j=1}^{n} \frac{\mu_j \tau_j \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_j \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2}{\tau_j}t\right), & \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} < t \le T \end{cases}$$
(1.8)

mit $\bar{\varepsilon}, \dot{\varepsilon} > 0$ ab.

Dabei bezeichnet n die Anzahl der Maxwell-Elemente und ist somit eine natürliche Zahl. Da die Anzahl der Materialparameter abhängig von der Anzahl der Maxwell-Elemente ist, können wir nicht von vornherein sagen, wie viele Materialparameter existieren. Wäre die Anzahl an Maxwell-Elementen mit \tilde{n} gegeben, so wären es nach obiger Modellierung $2\tilde{n} + 1$ Materialparameter bestehend aus den Steifigkeiten und Relaxationszeiten der Maxwell-Elemente, sowie der Steifigkeit der einzelnen Feder. Da dieses Wissen allerdings nicht vorhanden ist, sondern im Gegenteil durch das inverse Problem rekonstruiert werden soll, wählen wir $x \in \ell^2(\mathbb{N})$ und ermöglichen so eine variable Anzahl an Materialparametern.

In der Definitionsmenge $\mathcal{D}(F)$ wird dann deutlich, dass die Anzahl der echten Materialparameter trotz Folgenraum beschränkt ist, da es nur eine endliche Anzahl an Materialparametern gibt, die echt größer als Null sind:

$$\mathcal{D}(F) = \{ (n, x) \in I \times \ell^2(\mathbb{N}) : I \subset \mathbb{N} \text{ endlich}; x := \{ x_m \}_{m \in \mathbb{N}}, \ x_m \in \mathbb{R}_0^+, \ m \in \mathbb{N}; x_m = 0, \ m > 2n + 1; x_{2i+1} \ge \gamma, \ i = 1, \dots, n, \ \gamma > 0 \text{ beliebig klein, aber fest} \}.$$

Dabei steht I für eine physikalisch sinnvolle, endliche Teilmenge der natürlichen Zahlen, welche die mögliche Anzahl an Maxwell-Elementen in der Modellierung umfasst. Da wir es hier mit einem nichtlinearen inversen Problem zu tun haben, ist es notwendig in einer Umgebung der korrekten Lösung zu liegen. Dies gilt insbesondere auch für die Anzahl der Maxwell-Elemente n. Sei etwa n^* die exakte Lösung, so wäre $I := \{n^* - l, \ldots, n^* + l\}$ für $l \in \mathbb{N}$ eine angemessene Wahl.

Die Folgenelemente x_m sind für m > 2n + 1 gleich Null. Übertragen wir die Schreibweise

 $x := \{x_m\}_{m \in \mathbb{N}}$ auf die bisher benutzte Notation aus der Rheologie, so entspricht

$$x = (\mu, \mu_1, \tau_1, \dots, \mu_n, \tau_n, 0, 0, \dots).$$

Die Steifigkeiten $\mu, \mu_1, \ldots, \mu_n$ sind somit nichtnegativ. Aus der Berechnung der Spannung (1.8) ergibt sich, dass $\tau_i > 0$ gelten muss für $i = 1, \ldots, n$. Damit die Definitionsmenge dennoch abgeschlossen ist, wählen wir ein $\gamma > 0$, sodass für $i = 1, \ldots, n$ die Relaxationszeiten $\tau_i \ge \gamma$ sind. Auf die abgeschlossene Definitionsmenge und warum dies relevant ist, werden wir in Kapitel 2.3 und 2.4 zurückkommen.

Wir werden im Folgenden weiterhin die rheologische Notation verwenden und die Materialparameter mit μ, μ_j und τ_j bezeichnen. Die Darstellung durch die Folgenelemente x_i wird in Kapitel 2.3 wieder aufgegriffen, in dem der physikalische Aspekt in den Hintergrund rückt und es um die mathematische Theorie hinter unserem entwickelten Verfahren geht.

Wir halten uns an die Konvention, dass $\tau_1 \leq \tau_2 \leq \cdots \leq \tau_n$ gilt und die Maxwell-Elemente entsprechend geordnet sind.

Mit $F_n : \mathcal{D}(F_n) \subset \ell^2(\mathbb{N}) \to L^2([0,T])$ wird der Vorwärtsoperator für festes $n \in \mathbb{N}$ bezeichnet, das heißt $F_n(x) = F(n,x)$. Dabei ist entsprechend

$$\mathcal{D}(F_n) = \{x := \{x_m\}_{m \in \mathbb{N}} \in \ell^2(\mathbb{N}) : x_m \in \mathbb{R}^+_0, \ m \in \mathbb{N}; x_m = 0, \ m > 2n + 1; x_{2i+1} \ge \gamma, \ i = 1, \dots, n, \ \gamma > 0 \text{ beliebig klein, aber fest} \}$$

1.4 Das inverse Problem

Nachdem wir den Vorwärtsoperator konstruiert haben, können wir nun das inverse Problem formulieren. Dieses hat die Aufgabe aus gemessenen und verrauschten Spannungsdaten $\sigma^{\delta} \in L^2([0,T])$ die Anzahl der Maxwell-Elemente n und Materialparameter x zu bestimmen, sodass

$$F(n,x) = \sigma^{\delta} \tag{1.9}$$

gilt. Der Vorwärtsoperator F hängt sowohl von einer diskreten Variable, als auch von einem Element aus einem Folgenraum ab. Dabei bestimmt diese natürliche Zahl $n \in \mathbb{N}$ die Anzahl der Maxwell-Elemente und damit die Anzahl der zu bestimmenden Materialparameter. Diese sind in der Folge $x \in \ell^2(\mathbb{N})$ gegeben als die von Null verschiedenen Elemente. Damit hängt die Anzahl der Materialparameter von Teilen der Lösung ab. Dies ist eine ungewöhnliche Situation auf dem Gebiet der inversen Probleme und unterscheidet sich von der Theorie in klassischen Lehrbüchern [15, 38, 43, 57]. Daher werden wir in Kapitel 2 auf die statistische Inversionstheorie zurückgreifen, um ein geeignetes Lösungsverfahren zu konstruieren.

Ein typischer Lösungsansatz wäre es, das Objektfunktional

$$T_{\alpha}(n,x) := \frac{1}{2} \|F(n,x) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \Omega(n,x)$$
(1.10)

zu minimieren, wobei $\alpha > 0$ ein Regularisierungsparameter ist und Ω ein Strafterm bezüglich der Anzahl der Maxwell-Elemente *n* und den Materialparametern *x*. Natürlich ist eine simple Minimierung dieses Funktionals nicht möglich, da wir die Anzahl der Materialparameter nicht kennen. Wie wir allerdings in Kapitel 2 sehen werden, wird durch das Bayes-Theorem ein Funktional mit einer ähnlichen Struktur hergeleitet.

Kapitel 2

Bayes-Inversion

Im folgenden Kapitel wollen wir das Verfahren kennenlernen, welches wir zur Identifizierung der Materialparameter eines viskoelastischen Materials nutzen wollen. Wir haben es hier mit einem Vorwärtsoperator in Abhängigkeit einer diskreten Variable $n \in \mathbb{N}$, sowie einer Folge $x \in \ell^2(\mathbb{N})$ zu tun. Dabei bestimmt diese diskrete Variable auch die Anzahl der zu rekonstruierenden Materialparameter, die als Elemente $x_i > 0$ in x zu finden sind. Um dieses ungewöhnliche inverse Problem zu lösen, nehmen wir die Bayes-Inversion aus der statistischen Inversionstheorie zu Hilfe, um ein Bewertungskriterium der diskreten Variable n, also der Anzahl der Maxwell-Elemente zu erhalten.

Zur Einführung geben wir eine kleine Übersicht über die bisher existierende Literatur zu dieser Thematik. Ergebnisse zur Identifikation von Materialparametern viskoelastischer Strukturen mit einem linearen Modell finden sich in [13, 17]. In [69] werden diskontinuierliche Galerkin-Methoden hoher Ordnung für anisotrope viskoelastische Wellengleichungen genutzt. Außerdem verwenden die Autoren dort eine konstitutive Gleichung mit Speichervariablen. In [53] setzen die Autoren eine Prony-Serienerweiterung zur Bestimmung von Materialparametern durch Lösen eines Systems linearer Gleichungen ein. Emri und Tschoegl [14] betrachten ein lineares viskoelastisches Modell und stabilisieren den Inversionsprozess durch die Verwendung spezifischer Fensterfunktionen, die an den Einfluss des Spektrums auf die Antwort angepasst sind. All diese Methoden berücksichtigen nicht die Anzahl der Maxwell-Elemente als unbekannten, zu bestimmenden Parameter.

Eine Übersicht über verschiedene Methoden zur Lösung inverser Probleme und tiefere Einblicke in die Regularisierungstheorie finden sich in den Standardlehrbüchern [15, 40, 43, 57]. Für nichtlineare Probleme, wie wir hier eines betrachten, müssen diese Methoden entsprechend angepasst werden [38, 57, 72, 73]. Eine Implementierung der Tikhonov-Regularisierung ist in [54] dokumentiert.

Nachdem wir das Bayes-Verfahren hergeleitet haben, werden wir in Abschnitt 2.3 und 2.4 die mathematische Theorie zur lokalen Schlechtgestelltheit nichtlinearer inverser Probleme kennenlernen. Danach betrachten wir die Tikhonov-Minimierung, sowie deren Konvergenzund Regularisierungseigenschaften. Diese Theorie werden wir nutzen, um auch für unser inverses Problem die lokale Schlechtgestelltheit zu zeigen, sowie für das Bayes-Verfahren die Existenz, Stabilität und Konvergenz der regularisierten Lösung zu beweisen.

2.1 Einführung in die statistische Inversionstheorie

Wir werden uns nun der statistischen Inversionstheorie widmen und dazu einige Grundlagen besprechen, die wir dann auf unser Problem anwenden werden. Hierbei orientieren wir uns an den Büchern "Statistical and Computational Inverse Problems" von Kaipio und Somersalo [36] und "The Bayesian Approach to Inverse Problems" von Dashti und Stuart [12].

Ziel der statistischen Inversionstheorie ist es, Informationen über nicht beobachtbare Variablen zu extrahieren und die Unsicherheit dieser Variablen zu bewerten, und zwar auf der Grundlage aller verfügbaren Kenntnisse über den Messprozess sowie der Informationen und Modelle der Unbekannten, die vor der Messung verfügbar sind. Der Ansatz der statistischen Inversion basiert dabei auf den folgenden Grundsätzen:

- 1. Alle im Modell enthaltenen Variablen werden als Zufallsvariablen modelliert.
- 2. Die Zufälligkeit beschreibt den Grad der Information über ihre Realisierungen.
- 3. Der Grad der Information über diese Werte ist in den Wahrscheinlichkeitsverteilungen kodiert.
- 4. Das Ergebnis der Modellierung ist die A-posteriori Wahrscheinlichkeitsverteilung.
- 5. Die Lösung des inversen Problems erhält man durch einen Schätzer für diese Wahrscheinlichkeitsverteilung, wie zum Beispiel den MAP-Schätzer.

Hier werden auch die Unterschiede zur rein deterministischen Regularisierungstheorie deutlich. Diese nutzt keine Zufallsvariablen in ihrer Modellierung und die Lösung des inversen Problems ist im Allgemeinen auf die Werte der gesuchten Unbekannten beschränkt. In der statistischen Inversionstheorie ist es möglich eine gesamte Wahrscheinlichkeitsverteilung zu erhalten und so unterschiedliche Lösungen mit verschiedenen Wahrscheinlichkeiten zu untersuchen. Daher wird in der statistischen Inversionstheorie auch unterschieden zwischen Punktschätzungen und Intervallschätzungen, wobei die klassische inverse Probleme Theorie als eine einzelne Punktschätzung interpretiert werden kann.

Wir nehmen im folgenden Abschnitt an, dass wir ein Modell

$$f(x,e) = y \tag{2.1}$$

betrachten. Dabei handelt es sich bei $y \in \mathbb{R}^m$ um die gemessene Größe und bei $x \in \mathbb{R}^n$ um die gesuchte Unbekannte. Die Funktion $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^m$ beschreibt das Modell, welches Ungenauigkeiten und Parameter enthalten kann, die wir nicht kennen. Außerdem sei die Messung y verrauscht. Durch den Vektor $e \in \mathbb{R}^k$ werden diese zusätzlichen Unbekannten sowie das Rauschen beschrieben.

Wie bereits erwähnt, werden nun alle Variablen des Modells als Zufallsvariablen modelliert, das heißt das Modell (2.1) wird nun umgeformt zu

$$f(X, E) = Y.$$

Da die Zufallsvariablen X, E und Y in diesem Modell voneinander abhängig sind, sind es auch ihre Zufallsverteilungen. Mit Y bezeichnen wir die Zufallsvariable der Messung, wobei $Y = y_{mess}$ ihre Realisierung beschreibt. Die nichtbeobachtbare Zufallsvariable X ist die gesuchte Unbekannte. Dabei benutzen wir die Standardschreibweise eine Zufallsvariable in Großbuchstaben und ihre Realisierung in kleinen Buchstaben zu schreiben.

Die Informationen, die bereits vor der Messung Y über die Zufallsvariable X existieren, werden in der Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_0(x)$ gespeichert, die daher der **Prior** genannt wird. Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Messung bezeichnen wir mit $\rho(y)$.

Wir nehmen an, dass wir nach der Analyse der Messung und aller weiteren Informationen, die über die Variablen zur Verfügung stehen, die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichte von X und Y mit $\rho(x, y)$ gefunden haben. Dann ist der Prior der Unbekannten X gegeben durch

$$\rho_0(x) = \int_{\mathbb{R}^m} \rho(x, y) dy.$$

Wenn wir stattdessen annehmen, dass wir den Wert der Unbekannten X = x kennen, dann wäre die bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte der Messung Y unter diesen Informationen über die Unbekannten, gegeben als

$$\rho(y|x) = \frac{\rho(x,y)}{\rho_0(x)}$$

für $\rho_0(x) \neq 0$. Diese bedingte Wahrscheinlichkeitsdichte von Y wird **Likelihood-Funktion** genannt. Zuletzt nehmen wir an, dass die Messdaten $Y = y_{mess}$ gegeben sind. Dann wird die bedingte Wahrscheinlichkeit

$$\rho(x|y_{mess}) = \frac{\rho(x, y_{mess})}{\rho(y_{mess})}$$

für $\rho(y_{mess}) = \int_{\mathbb{R}^n} \rho(x, y_{mess}) dx \neq 0$ als **A-posteriori-Verteilung** bezeichnet. Diese beschreibt die Wahrscheinlichkeit von X nachdem die Messdaten $Y = y_{mess}$ eingetroffen sind. In der Bayesschen Statistik lässt sich ein inverses Problem also ausdrücken durch die folgende Aufgabe: Für gegebene Daten $Y = y_{mess}$ finde die bedingte Wahrscheinlichkeit $\rho(x|y_{mess})$ der Variable X.

Dies führt uns zu dem **Bayes-Theorem**:

Satz 2.1. Sei X eine Zufallsvariable mit Werten in \mathbb{R}^n und bekanntem Prior $\rho_0(x)$. Sei zusätzlich Y eine Zufallsvariable mit Werten in \mathbb{R}^k und Realisierung y_{mess} mit $\rho(y_{mess}) > 0$. Dann ist die A-posteriori-Wahrscheinlichkeitsverteilung von X bedingt durch die Daten y_{mess} gegeben durch

$$\rho_{post}(x) = \rho(x|y_{mess}) = \frac{\rho_0(x)\rho(y_{mess}|x)}{\rho(y_{mess})}.$$
(2.2)

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden wir der Einfachheit halber auf den Index bei y_{mess} verzichten und stattdessen einfach y schreiben, wenn die A-posteriori-Wahrscheinlichkeitsverteilung ausgewertet wird.

In (2.2) spielt die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(y)$ die Rolle einer Normierungskonstante und ist je nach verwendetem Schätzer bei der Auswertung irrelevant.

Somit gibt es im Allgemeinen drei Schritte um ein inverses Problem über die Bayesformel (2.2) zu lösen.

Im ersten Schritt muss eine Wahrscheinlichkeitsdichte ρ_0 gefunden werden, die alle relevanten Informationen über die Variable X enthält, die vor der Messung zur Verfügung stehen. Es gibt eine Vielzahl von Möglichkeiten den Prior zu wählen. Entscheidend dabei ist das folgende Verhältnis. Für eine Menge V von plausiblen Realisierungen x der Unbekannten X und eine Menge U von unplausiblen bzw. nicht erwarteten Realisierungen sollte gelten, dass

$$\rho_0(x) \gg \rho_0(x'), \quad \text{für } x \in V, x' \in U.$$

Der am häufigsten verwendete Prior ist die Gauß-Verteilung, da sie einfach zu konstruieren ist und dennoch vielseitig einsetzbar. Es gibt noch eine Vielzahl weiterer Möglichkeiten wie etwa Impulsdichten, Diskontinuitäten, Markov Random Fields oder datenbasierten Dichten. Mehr Informationen zu diesen Priors findet man in [36, Kapitel 3].

Der nächste Schritt ist die Wahl der Likelihood-Funktion $\rho(y|x)$, um den Zusammenhang zwischen der Messung und der Unbekannten zu beschreiben. Diese enthält das Vorwärtsmodell, das auch in der klassischen Inversionstheorie verwendet wird sowie alle Informationen über Mess- oder Modellfehler. In den meisten Fällen wird Rauschen additiv und unabhängig von der Unbekannten X modelliert. Da dies auch für unser inverses Problem zutrifft, werden wir auf diesen Fall genauer eingehen. Dann erhalten wir das stochastische Modell

$$Y = f(X) + E, (2.3)$$

mit der Zufallsvariable X mit Werten in \mathbb{R}^n und den Zufallsvariablen Y, E mit Werten in \mathbb{R}^m , wobei X und E unabhängig voneinander sind.

Wir nehmen an, dass die Wahrscheinlichkeitsdichte des Rauschens durch $\rho_{\text{noise}}(e)$ gegeben ist. Wenn wir nun ein feste Realisierung X = x annehmen, so bleibt die Wahrscheinlichkeitsdichte ρ_{noise} unverändert, da X und E unabhängig sind. Mit unserem Modell (2.3) können wir nun folgern, dass Y bedingt durch X = x gleichverteilt wie E sein muss und diese Wahrscheinlichkeitsdichte von E durch f(x) verschoben ist. Das heißt die Likelihood-Funktion kann dann ausgedrückt werden durch

$$\rho(y|x) = \rho_{\text{noise}}(y - f(x)). \tag{2.4}$$

Wenn wir also das Ergebnis (2.2) aus dem Bayes-Theorem nutzen, so erhalten wir für die A-posteriori-Verteilung den folgenden Ausdruck:

$$\rho(x|y) \propto \rho_0(x)\rho_{\text{noise}}(y-f(x)).$$

Für den Fall, dass X und E nicht unabhängig voneinander sind oder andere Störungen anstelle von additivem Rauschen betrachtet werden, wird auf [36, S.56ff] verwiesen.

Im letzten Schritt gilt es eine Methode zu entwickeln, um die A-posteriori-Verteilung in geeigneter Weise auszuwerten. Wie bereits in der Einleitung dieses Kapitels erwähnt gibt es eine Vielzahl an Schätzern. Dabei unterscheidet man grob zwischen Punktschätzungen und Intervallschätzungen. Eine Intervallschätzung könnte zum Beispiel die Frage beantworten: "In welchem Intervall liegen die Werte der Unbekannten mit einer Wahrscheinlichkeit von 90%, wenn der Prior und die Daten gegeben sind?". Eine Punktschätzung hingegen gibt - ähnlich zur klassischen Theorie - eine Antwort zu Fragen wie: "Für gegebene Daten y und Prior-Informationen: Was ist der Wert der Unbekannten X mit der höchsten Wahrscheinlichkeit?" Der beliebteste Schätzer ist der Maximum-A-Posteriori Schätzer (MAP). Für eine gegebene A-posteriori-Verteilung $\rho(x|y)$ der Unbekannten $X \in \mathbb{R}^n$ erfüllt der MAP-Schätzer x_{MAP}

$$x_{\text{MAP}} = \arg \max_{x \in \mathbb{R}^n} \rho(x|y)$$

unter der Voraussetzung, dass ein solcher Maximierer existiert. Es ist zu beachten, dass der Maximierer, sollte er existieren, nicht zwingend eindeutig sein muss. Weitere Punktschätzer sind etwa der Conditional Mean Schätzer (CM) oder der Maximum-Likelihood-Schätzer (ML). Ein typischer Intervallschätzer ist die bedingte Kovarianz. Weitere Informationen zu diesem oder anderen Schätzern und die Auswertung dieser findet sich in [36, Kapitel 3.1, 3.5 und 3.6].

2.2 Anwendung auf das inverse Problem

Im Folgenden wollen wir diese Theorie nutzen, um ein Tool zu entwickeln, welches es uns ermöglicht, eine gute Schätzung der Anzahl der Maxwell-Elemente zu erhalten. Ohne diese Informationen können wir auch die Materialparameter nicht bestimmen, da deren Anzahl davon abhängig ist. Daher konzentrieren wir uns im Folgenden zunächst auf die Rekonstruktion von n, der Anzahl der Maxwell-Elemente.

Das inverse Problem ist gegeben durch

$$F(n,x) = \sigma^{\delta}.$$

Wie wir im vorherigen Abschnitt gesehen haben, wird der erste Schritt sein, dass wir die Variablen unseres inversen Problems als Zufallsvariablen ausdrücken. Seien also Σ , N, X und E Zufallsvariablen, wir schreiben σ für die Realisierung $\Sigma = \sigma$. Damit lässt sich das inverse Problem nun schreiben als

$$\Sigma = F(N, X, E),$$

mit Σ der Zufallsvariable für die Messdaten. Die Zufallsvariable N beschreibt die Anzahl der Maxwell-Elemente, entsprechend X die Materialparameter und E das Rauschen. Wir wollen den zuvor beschriebenen MAP Schätzer bestimmen, nutzen das Bayes-Theorem 2.1 und erhalten

$$n_{\text{MAP}} = \arg \max_{n \in \mathbb{N}} \rho(n|\sigma)$$
$$= \arg \max_{n \in \mathbb{N}} \frac{\rho_0(n)\rho(\sigma|n)}{\rho(\sigma)}.$$

Die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(\sigma)$ von Σ ist unabhängig von n und somit irrelevant für die Bestimmung des Maximums. Dadurch erhalten wir das Maximierungsproblem

$$n_{\text{MAP}} = \arg \max_{n \in \mathbb{N}} \rho_0(n) \rho(\sigma|n).$$

Dieses wandeln wir in ein Minimierungsproblem um durch die Anwendung von $-\log(\cdot)$ und erhalten

$$n_{\text{MAP}} = \arg\min_{n \in \mathbb{N}} \{ -\log(\rho(\sigma|n)) - \log(\rho_0(n)) \}.$$

Wir nutzen die Notation $\Phi(n|\sigma) := -\log(\rho(n|\sigma)), \ \phi(\sigma|n) := -\log(\rho(\sigma|n))$ und $\phi_0(n) := -\log(\rho_0(n))$. Damit können wir unser Minimierungsproblem schreiben als

$$n_{\text{MAP}} = \arg\min_{n \in \mathbb{N}} \Phi(n|\sigma) = \arg\min_{n \in \mathbb{N}} \{\phi(\sigma|n) + \phi_0(n)\}$$

Zuerst widmen wir uns der Konstruktion der Likelihood-Funktion $\rho(\sigma|n)$. In unserem Modell

betrachten wir additives Rauschen

$$\Sigma = F(N, X) + E.$$

Wegen $n \in \mathbb{N}$ dürfen wir davon ausgehen, dass N und E stochastisch unabhängig sind. Außerdem nehmen wir an, dass X und E ebenfalls stochastisch unabhängig sind. Sei $\rho_{\text{noise}}(e)$ die Wahrscheinlichkeitsdichte des Rauschens. Dann können wir analog zur obigen Theorie in (2.4) folgern, dass

$$\rho(\sigma|n) = \rho_{\text{noise}}(\sigma - F(n, x)).$$

Wir gehen von normalverteiltem Rauschen aus, das heißt wir erhalten die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_{\text{noise}}(e) = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} \exp\left(\frac{-\|e\|^2}{2a^2}\right)$ mit Skalierung durch $a \in \mathbb{R}$. Durch die Anwendung von $-\log(\cdot)$ ergibt sich

$$-\log(\rho_{\text{noise}}(e)) = -\log\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}}\right) + \frac{1}{2a^2} ||e||^2.$$

Somit ist die Likelihood-Funktion bestimmt und wir können schreiben

$$\phi(\sigma|n) = \phi_{\text{noise}}(\sigma - F(n, x)) = -\log\left(\rho_{\text{noise}}(\sigma - F(n, x))\right) \propto \|\sigma - F(n, x)\|^2$$

Da wir uns für die Minimierung dieser Funktion interessieren, reicht es aus die Minimierung von $\|\sigma - F(n, x)\|^2$ zu betrachten, da es sich bei den restlichen Anteilen lediglich um Konstanten handelt, die natürlich unabhängig von n und x sind.

Nun widmen wir uns dem Prior. Wir nutzen eine diskrete Variante der Gauß-Verteilung in Form der Binomialverteilung. Diese beschreibt die Anzahl der Erfolge in einer Serie von unabhängigen Versuchen, die zwei mögliche Ergebnisse haben. Sei M die Anzahl der Versuche und 0 < q < 1 die Erfolgswahrscheinlichkeit bei einem einzelnen Versuch, so ist

$$B(n|q, M) = \binom{M}{n} q^n (1-q)^{M-n}$$

die Wahrscheinlichkeit n Erfolge zu erzielen.

Wir nutzen dies um die Anzahl der Maxwell-Elemente zu bestimmen. Dazu sei die Definitionsmenge der Anzahl der Maxwell-Elemente mit I gegeben und $M := \max I \in \mathbb{N}$ die maximal mögliche Anzahl an Maxwell-Elementen. Die Erfolgswahrscheinlichkeit q gibt in unserem Modell an, wie hoch die Wahrscheinlichkeit ist, dass ein Maxwell-Element existiert. Somit beschreibt die Binomialverteilung die Wahrscheinlichkeit, dass das untersuchte Material durch n Maxwell-Elemente zu beschreiben ist. Damit ist unser Prior gegeben als $\rho_0(n) = B(n|q, M)$ und $\phi_0(n) = -\log(\rho_0(n))$. Insgesamt ergibt sich also für uns die Aufgabe die Minimierung

$$n_{\mathrm{MAP}} = \arg\min_{n\in\mathbb{N}} \left\{ \|\sigma^{\delta} - F(n,x)\|^2 - \log\left(\binom{M}{n}q^n(1-q)^{M-n}\right) \right\}$$

mit 0 < q < 1 durchzuführen, um die maximale A-posteriori-Verteilung n_{MAP} zu finden. Um dieses Funktional auswerten zu können, müssen für jede betrachtete Anzahl an Maxwell-Elementen n die Materialparameter x ausgerechnet werden. In Abschnitt 2.2.2 wird genauer erklärt, wie dies abläuft. Betrachten wir diese Minimierung aus der Sicht der klassischen Inversionstheorie, so haben wir mit dem Bayes-Theorem einen Strafterm gefunden, der uns eine bessere Möglichkeit bietet die Anzahl der Maxwell-Elemente einzuschätzen. Um eine bessere Kontrolle über den Einfluss dieses Strafterms zu haben, nutzen wir einen Regularisierungsparameter $\alpha > 0$, sodass wir die Minimierung abändern zu

$$n_{\text{MAP}} = \arg\min_{n \in \mathbb{N}} \left\{ \|\sigma^{\delta} - F(n, x)\|^2 - \alpha \log\left(\binom{M}{n}q^n(1-q)^{M-n}\right) \right\}.$$
 (2.5)

Wir benötigen hier keine weiteren Anforderungen an die Relaxationszeiten wie in Abschnitt 3.1. Stattdessen wird über den Prior, speziell die Erfolgswahrscheinlichkeit q eine Präferenz für die Anzahl der Maxwell-Elemente festgelegt.
2.2.1 Auswirkung der Erfolgswahrscheinlichkeit q auf die Minimierung

Die Wahrscheinlichkeitsdichte des Priors ρ_0 hängt stark von der Wahl der Erfolgswahrscheinlichkeit $q \in]0, 1[$ ab. Im Folgenden wollen wir uns kurz anschauen, wie verschiedene Werte von q sich auf den Prior ρ_0 beziehungsweise auf ϕ_0 auswirken. Dazu nehmen wir eine maximale Anzahl von M = 10 Maxwell-Elementen an. In Abbildung 2.1 sieht man die Binomialverteilung $\rho_0(n) = B(n|q = 0.1, M = 10)$ in Form von blauen Balken, sowie $\phi_0(n) = -\log(B(n|0.1, 10))$ in Form der roten Linie für n = 0, ..., 10.



Abbildung 2.1: Die Binomialverteilung $\rho_0(n)$ und $\phi_0(n)$ für q = 0.1

Wie wir sehen, bestrafen wir eine höhere Anzahl an Maxwell-Elementen, da die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho_0(n)$ kleiner wird für höhere Werte von n. So ist zum Beispiel in Abbildung 2.1 $\rho_0(1) = 38.74\%$ die höchste Wahrscheinlichkeit und $\rho_0(10) \approx 0$ die geringste. Dies wirkt sich in der Minimierung durch die Werte $\phi_0(1) \approx 0.95$ und $\phi_0(10) \approx 23.03$ aus. Wenn wir für $\alpha = 1$ die Materialparameter x_1 mit einem einzelnen Maxwell-Element zu den Parametern x_{10} mit zehn Maxwell-Elementen vergleichen, muss

$$\|\sigma^{\delta} - F(10, x_1)\|^2 + \phi_0(1) < \|\sigma^{\delta} - F(1, x_{10})\|^2 + \phi_0(10)$$

$$\Leftrightarrow \qquad \|\sigma^{\delta} - F(10, x_1)\|^2 < \|\sigma^{\delta} - F(1, x_{10})\|^2 - 22.08$$

gelten, damit die Rekonstruktion mit zehn Maxwell-Elementen für die gegebenen Daten der Lösung des MAP-Schätzers entsprechen.

In Abbildung 2.2 sehen wir den Vergleich des Priors ρ_0 für q = 0.5 und q = 0.8. Wir erkennen, dass für q = 0.5 die mittlere Anzahl an Maxwell-Elementen in diesem Fall n = 5 bevorzugt wird. Für q = 0.8 werden höhere Anzahlen an Maxwell-Elementen bevorzugt. In den meisten Fällen macht es Sinn q kleiner zu wählen und so eine geringere Anzahl an Maxwell-Elementen zu begünstigen, um eine möglichst gute Beschreibung der Daten durch möglichst wenige Materialparameter zu erhalten.



Abbildung 2.2: Die Binomialverteilung $\rho_0(n)$ und $\phi_0(n)$ für q = 0.5 und q = 0.8

2.2.2 Der Bayes-Algorithmus

Im folgenden Abschnitt werden wir uns den Algorithmus anschauen, der aus der Minimierung von

$$\min_{n \in \mathbb{N}} \Phi(n|\sigma) = \min_{n \in \mathbb{N}} \left\{ \|F(n,x) - \sigma^{\delta}\|^2 - \alpha \log\left(\binom{M}{n} q^n (1-q)^{M-n}\right) \right\}$$

hervorgeht.

Dazu definieren wir mit $R : I \subset \mathbb{N} \to \mathcal{D}(F_n) \subset \ell^2(\mathbb{N}), n \mapsto x$ ein Minimierungsverfahren, welches für eine gegebene Anzahl an Maxwell-Elementen *n* die Materialparameter *x* bestimmt. Wir minimieren dazu für $n \in \mathbb{N}$ das Tikhonov-Funktional der Form

$$\min_{x \in \mathcal{D}(F_n)} T_{\alpha,n}(x) := \min_{x \in \mathcal{D}(F_n)} \left\{ \frac{1}{2} \|F(n,x) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \Omega(x) \right\}$$
(2.6)

mit einem Strafterm $\Omega(x)$ bezüglich der Materialparameter und dem Regularisierungsparameter α .

Wir verwenden die iterative Lösungsmethode mit mehreren Startwerten für die Steifigkeiten und Relaxationszeiten $(\mu^{(0)}, \mu_1^{(0)}, \tau_1^{(0)}, \dots, \mu_n^{(0)}, \tau_n^{(0)}, 0, 0 \dots)$. Die Startwerte werden über den möglichen Bereich der Parameterwerte verteilt. Die Verwendung mehrerer Startwerte ist wegen der Nichtlinearität des Problems notwendig, die im Allgemeinen die Existenz mehrerer lokaler Minima verursacht. Für jeden dieser Startwerte wird das Tikhonov-Funktional (2.6) minimiert. Für diesen Prozess werden die Funktionen *lsqnonlin* und *MultiStart* aus der MATLAB Optimization Toolbox [47] genutzt. Die Funktion *lsqnonlin* benutzt dazu einen Trust-Region-Reflective-Algorithmus. Dabei handelt es sich um eine Subraum-Trust-Region-Methode und basiert auf der in [7, 8] beschriebenen Interior-Reflective-Newton-Methode. Als Abbruchbedingung kann dabei etwa das Diskrepanzprinzip von Morozov genutzt werden [50]. Dazu wählen wir $\zeta \in [1, \infty)$ und brechen die Minimierung ab, sobald $||F_n(x) - \sigma^{\delta}|| \leq \zeta \delta$ mit dem Noise Level δ .

Damit erhalten wir $R(n) := x_n^{\alpha}$, wobei x_n^{α} das Funktional $T_{\alpha,n}$ minimiert.

Der Algorithmus benötigt außerdem die folgenden Werte:

Die Erfolgswahrscheinlichkeit 0 < q < 1 des Priors muss physikalisch sinnvoll gewählt werden und wir brauchen gemessene Daten σ^{δ} . Außerdem muss eine Vorauswahl von möglichen Anzahlen der Maxwell-Elemente in Form von I getroffen sein. Sei $I := \{n_1, \ldots, n_m\} \subset \mathbb{N}$ gegeben mit der Ordnung $n_1 < \cdots < n_m$. Dann ist die maximal mögliche Anzahl an Maxwell-Elementen bestimmt durch $M := \max I = n_m$.

Im ersten Schritt des Algorithmus wählen wir k = 1 und $n_k := n_1$, was somit der kleinsten möglichen Anzahl an Maxwell-Elementen entspricht. Dazu berechnen wir x_1 durch $R(n_1) = x_1$ und berechnen $\Phi(n_k|\sigma)$. Im zweiten Schritt wollen wir $l \in \{1, \ldots, m-k\}$ bestimmen mit der folgenden Eigenschaft

$$\Phi(n_{k+l}|\sigma) < \Phi(n_k|\sigma). \tag{2.7}$$

Dazu muss für jedes geprüfte l eine Minimierung durchgeführt werden, um $x_{k+l} = R(n_{k+l})$ zu berechnen, da dies für die Auswertung des Ausdrucks $\Phi(n_{k+l}|\sigma)$ gebraucht wird. Wir suchen also die Anzahl an Maxwell-Elementen n_{k+l} , sodass wir Materialparameter x_{k+l} finden können, sodass die Ungleichung (2.7) erfüllt ist. Finden wir kein passendes $l \in \{1, \ldots, m-k\}$, so brechen wir den Algorithmus ab und (n_k, x_k) wird als Ergebnis akzeptiert. Haben wir ein solches l gefunden, ersetzen wir k := k + l und gehen wieder zum zweiten Schritt zurück, indem wir wiederum ein neues l suchen, sodass (2.7) gilt. So beginnt der Prozess von Neuem, bis das Abbruchkriterium erfüllt ist. In 2.2 ist der Algorithmus noch einmal schematisch dargestellt.

Algorithmus 2.2. Input: $0 < q < 1, M := \max I := \max\{n_1, \dots, n_m\}, \sigma \in L^2([0,T]), \zeta \in \mathbb{R}.$

- 1) Sei k = 1 und $n_k := n_1$, berechne $x_k = x_1$ durch $R(n_k) = x_k$.
- 2) Bestimme $l \in \{1, ..., m-k\}$ mit $\Phi(n_{k+l}|\sigma) < \Phi(n_k|\sigma)$ und setze k := k+l. Für jedes l muss $x_{k+l} = R(n_{k+l})$ berechnet werden, um den Ausdruck $\Phi(n_{k+l}|\sigma)$ zu bestimmen.
- 3) Existiert kein solches k, dann STOP, ansonsten weiter bei Punkt 2)

Output: (n_k, x_k)

Wenn wir uns diesen Algorithmus und die Minimierung in (2.5) anschauen, minimieren abwechselnd das Funktional $\Phi(n|\sigma)$ nach n und $T_{\alpha,n}$ nach x. Außerdem ist die Anzahl der möglichen Lösungen für n durch die Menge I endlich, sodass wir durch diese alternierende Minimierung das Funktional

$$\min_{(n,x)\in\mathcal{D}(F)} T_{\alpha}(n,x) := \min_{(n,x)\in\mathcal{D}(F)} \left\{ \frac{1}{2} \|F(n,x) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \left[\Omega(x) - \log\left(\binom{M}{n} q^n (1-q)^{M-n}\right) \right] \right\}$$

minimieren. Wir erhalten also ein Tikhonov-Funktional mit einem weiteren Strafterm zur Beurteilung der Anzahl der Maxwell-Elemente.

2.3 Mathematische Grundlagen zur Konvergenz und Regularisierung

Der restliche Teil dieses Kapitels widmet sich den Konvergenz- und Regularisierungseigenschaften unseres Verfahrens. Das erste Unterkapitel befasst sich mit der bereits erforschten Theorie und wiederholt die Definition eines lokal schlechtgestellten inversen Problems. Danach wenden wir uns dem klassischen Tikhonov-Verfahren zu. Wir betrachten unter welchen Voraussetzungen eine regularisierte Lösung dieses Verfahrens existiert, diese stabil gegenüber den Daten ist und sie konvergiert. Im zweiten Unterkapitel werden wir diese Theorie auf unser Problem adaptieren. Der Begriff der lokalen Schlechtgestelltheit muss umgeformt werden, um auf unseren Vorwärtsoperator zu passen, der von zwei Variablen abhängig ist, die in mathematisch sehr unterschiedlichen Räumen leben. Eine dieser Variablen lebt im Raum der natürlichen Zahlen, das heißt eine Variable ist diskret. Außerdem stammt die Idee hinter unserem Verfahren aus dem Bereich der statistischen Inversionstheorie. Dennoch können wir die klassische Konvergenz-Theorie eines Tikhonov Verfahrens mit gewissen Anpassungen übertragen und so auch für das Bayes-Verfahren die Existenz, Stabilität und Konvergenz einer regularisierten Lösung zeigen. Wir orientieren uns dabei an dem Buch 'Regularization Methods in Banach Spaces' von Schuster, Kaltenbacher et. al [64, Kapitel 3 und 4]. Für weitere Einsichten in diese Thematik empfiehlt sich der Blick in [31, 32] oder [65].

In diesem Unterkapitel wollen wir kurz die für uns relevanten Grundlagen zur Theorie der Inversen Probleme wiederholen. Wir betrachten die lokale Schlechtgestelltheit für nichtlineare inverse Probleme, die Eigenschaften eines Regularisierungsverfahrens, darunter speziell das Tikhonov-Philipps Verfahren. Danach studieren wir die Anforderungen, die wir an das Verfahren stellen wollen. Wir wünschen uns von diesem die Existenz einer regularisierten Lösung, die Stabilität gegenüber den Daten und natürlich Konvergenz gegen die exakte Lösung unter passenden Bedingungen. Diese drei Anforderungen wurden für das Tikhonov Verfahren bereits gezeigt und wir zeigen auf, welche Voraussetzungen dafür gelten müssen.

Wir betrachten im Folgenden eine typische nichtlineare Operatorgleichung der Form

$$F(x) = y, \quad x \in \mathcal{D}(F) \subseteq X, \quad y \in F(\mathcal{D}(F)) \subseteq Y,$$

$$(2.8)$$

mit $\mathcal{D}(F)$ der Definitionsmenge und

$$F(\mathcal{D}(F)) = \{ \tilde{y} \in Y : F(\tilde{x}) = \tilde{y} \text{ für ein } \tilde{x} \in \mathcal{D}(F) \}$$

das Bild des nichtlinearen Operators $F : \mathcal{D}(F) \subseteq X \to Y$, wobei es sich bei X und Y um Banachräume handelt.

2.3.1 Lokale Schlechtgestelltheit

Entsprechend dem lokalen Charakter von Lösungen in nichtlinearen Gleichungen müssen wir auch die Schlechtgestelltheit lokal betrachten, also in der Umgebung einer Lösung der Operatorgleichung (vergleiche [28, 29, 30]). Im Gegensatz dazu konnte man bei linearen Problemen auch die Schlechtgestelltheit global erfassen. Weiterführende Theorie zur Schlechtgestelltheit bei linearen Problemen findet sich in [15, 43, 57, 64].

Einer lokal schlecht gestellten Gleichung (2.8) ist zu eigen, dass eine Lösung x_0 nicht stabil berechnet werden kann, selbst wenn die Störungen auf der rechten Seite $y = F(x_0)$ beliebig klein sind. Mathematisch formuliert bedeutet dies, dass die Fehlernorm $||x_n - x_0||$ einer Folge von Näherungslösungen $\{x_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \mathcal{D}(F)$, die

$$\lim_{n \to \infty} \|F(x_n) - F(x_0)\| = 0$$

erfüllen, nicht gegen Null konvergieren muss.

Definition 2.3. Eine nichtlineare Operatorgleichung (2.8) heißt *lokal schlecht gestellt* im Punkt $x_0 \in \mathcal{D}(F)$, der $F(x_0) = y$ erfüllt, wenn es für beliebig kleine Radien r > 0 eine Folge $\{x_n\}_{n=1}^{\infty} \subset \overline{B}_r(x_0) \cap \mathcal{D}(F)$ gibt, sodass

$$F(x_n) \to F(x_0)$$
 in Y , aber $x_n \not\to x_0$ in X , für $n \to \infty$.

Andernfalls wird die Gleichung als *lokal gut gestellt* bei x_0 bezeichnet.

Diese Schlechtgestelltheit führt zu Problemen, wenn man versucht die Operatorgleichung (2.8) zu lösen, da im Allgemeinen nur verrauschte Daten y^{δ} vorliegen, anstatt der exakten Daten y. Diese erfüllen die Ungleichung

$$\|y^{\delta} - y\| \le \delta$$

mit Noise Level $\delta > 0$.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten ein schlecht gestelltes Problem zu lösen. Dazu sind Regularisierungsmethoden notwendig:

Definition 2.4. Eine Abbildung, die jedes Paar $(y^{\delta}, \alpha) \in Y \times (0, \bar{\alpha})$ mit $0 < \bar{\alpha} \leq +\infty$ in ein wohldefiniertes Element $x_{\alpha}^{\delta} \in \mathcal{D}(F)$ transformiert, heißt *Regularisierung* (Regularisierungsverfahren) für die nichtlineare Operatorgleichung (2.8), wenn es eine geeignete Wahl $\alpha = \alpha(y^{\delta}, \delta)$ des Regularisierungsparameters gibt, sodass für jede Folge $\{y_n\}_{n=1}^{\infty} \subset Y$ mit $\|y_n - y\| \leq \delta_n$ und $\delta_n \to 0$ für $n \to \infty$, die entsprechenden regularisierten Lösungen $x_{\alpha(y_n,\delta_n)}^{\delta_n}$ in einem wohldefinierten Sinn bezüglich einer auf X gegebenen Topologie gegen die Lösung x^+ der Gleichung (2.8) konvergieren. Wenn diese nicht eindeutig ist, müssen regularisierte Lösungen zu Lösungen der Gleichung (2.8) konvergieren, die gewünschte Eigenschaften besitzen, z.B. zu \bar{x} -Minimum-Norm-Lösungen. Im Falle der Nicht-Eindeutigkeit können verschiedene Teilfolgen von regularisierten Lösungen zu verschiedenen Lösungen der Operatorgleichung konvergieren, die alle die gleiche gewünschte Eigenschaft besitzen. Für lineare Probleme sind Regularisierungsverfahren bereits sehr gut erforscht [15, 43, 57]. Viele dieser Verfahren konnten auf nichtlineare Probleme erweitert werden [38, 57], allerdings müssen dort häufig Lösungsverfahren konstruiert werden, die auf das spezifische Problem zugeschnitten sind, so wie wir es im vorangegangen Kapitel getan haben. Wir werden uns im Folgenden auf die Tikhonov-Regularisierung konzentrieren [16, 38, 51, 63]. Weitere bekannte Regularisierungsverfahren sind das Landweber-Verfahren [22, 37, 39], die Approximative Inverse [44] oder das Newton-Verfahren [39].

2.3.2 Tikhonov-Regularisierung

Wir betrachten im Folgenden Tikhonov-regularisierte Lösungen x_{α}^{δ} , die für alle Regularisierungsparameter $\alpha > 0$ als Minimierer des Extremalproblems

$$T_{\alpha}(x) := \frac{1}{p} \|F(x) - y^{\delta}\|^{p} + \alpha \Omega(x) \to \min \text{ mit } x \in \mathcal{D}(F) \subseteq X$$
(2.9)

auf der Basis des Tikhonov-Funktionals T_{α} für nichtlineare Operatorgleichungen (2.8) definiert sind. Bei $\Omega: X \to [0, \infty]$ handelt es sich um den Strafterm bezüglich $x \in X$.

Wie bereits erwähnt stellen wir gewisse Anforderungen an diese Lösungen x_{α}^{δ} . Wir nehmen für den folgenden Abschnitt an, dass die Annahmenblöcke 2.9 und 2.10 erfüllt sind. Diese beziehen sich auf die Räume X und Y, den Vorwärtsoperator F selbst, das Verfahren und die Operatorgleichung (2.8). Diese werden wir erst im weiteren Verlauf dieses Kapitels kennenlernen, um zuerst den Nutzen dieser Annahmen zu verstehen. Sind diese Annahmen erfüllt, so können die folgenden drei wichtigen Sätze gezeigt werden. Die Beweise dazu finden sich in [64].

Satz 2.5. Für alle $\alpha > 0$ und $y^{\delta} \in Y$ existiert eine regularisierte Lösung $x_{\alpha}^{\delta} \in \mathcal{D}(F)$, die das Tikhonov-Funktional $T_{\alpha}(x)$ in (2.9) über alle $x \in \mathcal{D}(F)$ minimiert.

Damit haben wir die Existenz der regularisierten Lösung abgedeckt, die nicht selbstverständlich gegeben ist. Die nächste Eigenschaft, die wir uns von unserem Verfahren wünschen, ist die Stabilität gegenüber den Daten y^{δ} . Das heißt für kleine Änderungen in den Daten y^{δ} sollte auch die regularisierte Lösung x^{δ}_{α} nur geringe Schwankungen aufzeigen.

Satz 2.6. Für alle $\alpha > 0$ sind die Minimierer von (2.9) stabil gegenüber den Daten y^{δ} . Das heißt, für eine Datenfolge $\{y_n\}$, die in der Norm-Topologie von Y gegen y^{δ} konvergiert, also

$$\lim_{n \to \infty} \|y_n - y^{\delta}\|_Y = 0,$$

hat jede zugehörige Folge von Minimierern $\{x_n\}$ des Extremproblems

$$\frac{1}{p} \|F(x) - y_n\|^p + \alpha \Omega(x) \text{ mit } x \in \mathcal{D}(F) \subseteq X$$

eine Teilfolge $\{x_{n_k}\}$, die in der schwachen Topologie von X konvergiert, und der schwache Grenzwert \tilde{x} jeder solchen Teilfolge ist ein Minimierer x_{α}^{δ} von (2.9). Außerdem gilt für jede solche schwach konvergente Teilfolge

$$\lim_{k \to \infty} \Omega(x_{n_k}) = \Omega(x_{\alpha}^{\delta}).$$

Außerdem ist die Konvergenz des Verfahrens wünschenswert, das heißt die Näherungslösungen sollten zu exakten Lösungen der betrachteten schlecht gestellten Operatorgleichung konvergieren. Im Folgenden bezeichnet in einem Banachraum \rightarrow stets die Konvergenz in der starken (Norm-)Topologie und \rightarrow die Konvergenz in der schwachen Topologie.

Satz 2.7. Sei $\{y_n := y^{\delta_n}\} \subset Y$ eine Folge von gestörten Daten zur exakten rechten Seite $y \in F(\mathcal{D}(F))$ der Operatorgleichung (2.8) und sei $||y - y_n|| \leq \delta_n$ für eine Folge $\{\delta_n > 0\}$, die monoton gegen Null konvergiert. Außerdem betrachten wir eine Folge $\{\alpha_n > 0\}$ von Regularisierungsparametern und eine zugehörige Folge $\{x_n := x_{\alpha_n}^{\delta_n}\}$ von regularisierten Lösungen, die Minimierer von

$$\frac{1}{p} \|F(x) - y_n\|^p + \alpha_n \Omega(x) \text{ mit } x \in \mathcal{D}(F) \subseteq X$$

sind. Unter den Bedingungen

$$\limsup_{n \to \infty} \Omega(x_n) \le \Omega(x_0) \text{ für alle } x_0 \in \{x \in \mathcal{D} := \mathcal{D}(F) \cap \mathcal{D}(\Omega) : F(x) = y\}$$

und

$$\lim_{n \to \infty} \|F(x_n) - y_n\| = 0$$

hat die Folge $\{x_n\}$ eine schwach konvergente Teilfolge, wobei jeder schwache Grenzwert einer solchen Teilfolge eine Ω -minimierende Lösung $x^+ \in \mathcal{D}$ der Operatorgleichung ist. Wenn außerdem die Ω -minimierende Lösung $x^+ \in \mathcal{D}$ eindeutig ist, erhalten wir die schwache Konvergenz $x_n \rightarrow x^+$ in X.

Dabei haben wir den Begriff der Ω -minimierenden Lösung verwendet, der wie folgt definiert ist (vergleiche [31]):

Definition 2.8. Wir sagen, dass $x^+ \in \mathcal{D}(F) \subseteq X$ eine Ω -minimierende Lösung der Operatorgleichung (2.8) ist, wenn

$$F(x^+) = y$$
 und $\Omega(x^+) = \inf\{\Omega(\tilde{x}) : \tilde{x} \in \mathcal{D}(F), F(\tilde{x}) = y\}.$

Um diese Ergebnisse nutzen zu können, brauchen wir die folgenden zwei Annahmenblöcke. Der erste macht Annahmen über die Banachräume X und Y, als auch über den Operator Fund dessen Definitionsmenge $\mathcal{D}(F)$.

Annahme 2.9.

- (a) X und Y sind unendlich dimensionale reflexive Banachräume
- (b) $\mathcal{D}(F)$ ist eine abgeschlossene und konvexe Teilmenge von X

(c) Für $x_n \to x_0$ in $X, x_n \in \mathcal{D}(F), n \in \mathbb{N}, x_0 \in \mathcal{D}(F)$ folgt $F(x_n) \to F(x_0)$ in Y (F: $\mathcal{D}(F) \subseteq X \to Y$ ist schwach folgenstetig).

Wenn diese Annahmen erfüllt sind, kann man zeigen, dass die nichtlineare Operatorgleichung (2.8) eine \bar{x} -Minimum-Norm-Lösung besitzt, das heißt es existiert ein $x^+ \in \mathcal{D}(F) \subseteq X$, sodass

$$F(x^+) = y$$
 und $||x^+ - \bar{x}|| = \inf\{||x - \bar{x} : x \in \mathcal{D}(F), F(x) = y\}$

Des Weiteren ist durch diese Annahmen auch die Existenz einer Ω -minimierenden Lösung abgedeckt, vorausgesetzt es handelt sich bei Ω um ein konvexes stabilisierendes Funktional. Was dies im Detail bedeutet erläutern wir noch im Verlauf dieses Kapitels. Zum Beweis dieser Folgerung verweisen wir auf [64, S.53] oder [48, S.251].

Die nächsten Annahmen, die wir treffen, um Existenz, Stabilität und Konvergenz unseres Verfahrens zu garantieren, beziehen sich auf den Strafterm $\Omega(x)$ des Tikhonov-Funktionals $T_{\alpha}(x)$ und die Lösung der Operatorgleichung.

Annahme 2.10.

- (a) Für den Exponenten in (2.9) gilt: 1 .
- (b) Ω ist ein echtes konvexes und unterhalbstetiges Funktional, wobei echt bedeutet, dass der Definitionsbereich von Ω nicht leer ist. Außerdem gilt

$$\mathcal{D} := \mathcal{D}(F) \cap \mathcal{D}(\Omega) \neq \emptyset.$$

(c) Es wird angenommen, dass Ω ein stabilisierendes Funktional in dem Sinne ist, dass die Teilmengen

$$\mathcal{M}_{\Omega}(c) := \{ x \in X : \Omega(x) \le c \}$$

in X für alle $c \ge 0$ schwach folgen-präkompakt sind.

(d) Es gibt eine Ω -minimierende Lösung x^+ der Gleichung (2.8), die zum sogenannten Bregman-Bereich

$$\mathcal{D}_B(\Omega) := \{ x \in \mathcal{D} \subseteq X : \partial \Omega(x) \neq \emptyset \},\$$

gehört, wobei $\partial \Omega(x) \subseteq X^*$ das Subdifferential von Ω im Punkt x bezeichnet.

Häufig wird die Koerzivität von Ω anstelle der Annahme 2.10(c) gefordert, das heißt aus $||x|| \to \infty$ folgt $\Omega(x) \to \infty$. Diese Annahme wird allerdings nur genutzt, um zusammen mit Annahme 2.9(a) (X ist reflexiv) die schwache Präkompaktheit der Untermengen $\mathcal{M}_{\Omega}(c)$ zu folgern. Daher zielt unsere Annahme direkt auf diese wesentliche Eigenschaft ab.

Strafterme der Form

$$\Omega(x) := \frac{1}{q} \|x\|_X^q, \qquad 1 \le q < \infty$$
(2.10)

sind immer stabilisierende Funktionale, wenn X ein reflexiver Banachraum ist. Da dies eine unserer Annahmen 2.9(a) ist, ist somit die Annahme 2.10(c) obsolet, solange Ω die Form (2.10) besitzt. Der Beweis zu diesem Zusammenhang kann in [64, S.62] oder [48, S.251] nachgelesen werden.

Wir haben in 2.10(d) den Begriff des Subdifferentials verwendet, den wir im Folgenden kurz einmal wiederholen möchten. Dazu zuerst die Definition des Subgradients:

Definition 2.11. Sei $f : X \to \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ ein konvexes Funktional. Dann ist $x^* \in X^*$ ein *Subgradient* von f in x, wenn

$$f(z) \ge f(x) + \langle x^*, z - x \rangle \ \forall z \in X.$$

Für einen gegebenen Banachraum X wird X^{*} als *Dualraum* bezeichnet. Dieser beinhaltet alle beschränkten (stetigen) linearen Funktionale $x^* : X \to \mathbb{R}$ versehen mit der Norm

$$||x^*||_{X^*} := \sup_{||x||=1} ||x^*(x)||.$$

Die Menge $\partial f(x)$ aller Subgradienten von f in x wird Subdifferential genannt. Häufig werden sowohl der Subgradient als auch das Subdifferential als Subgradient bezeichnet, wenn der Kontext es klar vorgibt, um was es sich handelt. Dies gilt vor allen Dingen für Subdifferentiale mit einem einzelnen Element.

Somit haben wir alle relevanten Annahmen zusammen. Wenn die Annahmenblöcke 2.9 und 2.10 erfüllt sind, so erhalten wir auch die Existenz 2.5 einer regularisierten Lösung, die Stabilität gegenüber den Daten 2.6 und die Konvergenz 2.7 des Tikhonov-Verfahrens.

2.4 Konvergenz und Regularisierung des Bayes-Verfahrens

In diesem Abschnitt werden wir nun die bekannte Theorie des Tikhonov-Verfahrens auf das Bayes-Verfahren übertragen. Dieses ist natürlich etwas komplexer als ein reines Tikhonov-Verfahren, da wir uns der statistischen Inversionstheorie bedient haben, um unser inverses Problem zu lösen. Dennoch können wir uns der klassischen Theorie bedienen.

Zur Erinnerung wiederholen wir hier den Vorwärtsoperator

$$F: \mathcal{D}(F) \subset \mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N}) \to Y, \qquad (n, x) \mapsto F(n, x),$$

mitsamt der Definitionsmenge $\mathcal{D}(F)$

$$\mathcal{D}(F) = \{ (n, x) \in I \times \ell^2(\mathbb{N}) : I \subset \mathbb{N} \text{ endlich}; \\ x := \{ x_m \}_{m \in \mathbb{N}}, \ x_m \in \mathbb{R}_0^+, \ m \in \mathbb{N}; \\ x_m = 0, \ m > 2n + 1; \\ x_{2i+1} > \gamma, \ i = 1, \dots, n, \ \gamma > 0 \text{ beliebig klein, aber fest} \}$$

Dabei steht I für eine physikalisch sinnvolle, endliche Teilmenge der natürlichen Zahlen, welche die mögliche Anzahl an Maxwell-Elementen in der Modellierung umfasst. Der Vorwärtsoperator bildet (n, x) ab auf

$$\sigma(t) = \begin{cases} x_1 \dot{\varepsilon}t + \sum_{j=1}^n \frac{x_{2j} x_{2j+1} \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}}t\right) \right), & 0 \le t \le \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} \\ x_1 \bar{\varepsilon} - \sum_{j=1}^n \frac{x_{2j} x_{2j+1} \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1} \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}}t\right), & \frac{\bar{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}} < t \le T \end{cases}$$

mit $\bar{\varepsilon}, \dot{\varepsilon} > 0.$

Mit $F_n : \mathcal{D}(F_n) \subset \ell^2(\mathbb{N}) \to L^2([0,T])$ wird der Vorwärtsoperator für festes $n \in \mathbb{N}$ bezeichnet, das heißt $F_n(x) = F(n,x)$. Dabei ist entsprechend

$$\mathcal{D}(F_n) = \{x := \{x_m\}_{m \in \mathbb{N}} \in \ell^2(\mathbb{N}) : x_m \in \mathbb{R}^+_0, \ m \in \mathbb{N}; \\ x_m = 0, \ m > 2n + 1; \\ x_{2i+1} \ge \gamma, \ i = 1, \dots, n, \ \gamma > 0 \text{ beliebig klein, aber fest} \}$$

2.4.1 Lokale Schlechtgestelltheit

Der Vorwärtsoperator F bildet somit von einem kartesischen Produkt zweier Räume $X := \mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N})$ auf einen Hilbertraum $Y := L^2([0,T])$ ab. Um im ersten Schritt die lokale Schlechtgestelltheit zu beweisen, müssen wir definieren, wie wir diese auf einem kartesischen Produkt zweier Räume betrachten können. Da es sich bei einer der Variablen um eine natürliche Zahl handelt, liegt es nahe, dass wir diese gesondert betrachten.

Um dies zu tun, schauen wir uns zuerst den mathematischen Raum an, auf dem unser Vorwärtsoperator arbeitet.

Wir betrachten den Produktraum $\mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N})$ mitsamt den Produkttopologien (τ_d, τ_0) bzw.

 (τ_d, τ_w) . Dabei steht τ_0 für die starke Topologie auf $\ell^2(\mathbb{N})$ induziert durch die ℓ^2 -Norm

$$\|x\|_{\ell^2(\mathbb{N})} := \left(\sum_{n=1}^{\infty} x_n^2\right)^{\frac{1}{2}} \quad \text{ für } x \in \ell^2(\mathbb{N})$$

und τ_w für die schwache Topologie auf $\ell^2(\mathbb{N})$. Die Bezeichnung τ_d meint die diskrete Topologie induziert durch die diskrete Metrik [75]

$$d(x,y) := \begin{cases} 0, & x = y \\ 1, & x \neq y \end{cases} \quad \text{ für } x, y \in \mathbb{N}.$$

Eine Folge $\{(n_m, x_m)\}$ in $\mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N})$ konvergiert genau dann, wenn $\{n_m\}$ in \mathbb{N} und $\{x_m\}$ in $\ell^2(\mathbb{N})$ konvergiert. Eine Folge $\{n_m\}$ in \mathbb{N} konvergiert bzgl. der diskreten Metrik genau dann, wenn sie ab einem bestimmten Folgenglied konstant ist.

Für $m, l \in \mathbb{N}_0$ bezeichnen wir mit

$$\mathcal{U}(n) := \{n - m, \dots, n + l\} \cap \mathbb{N}$$

eine Umgebung um $n \in \mathbb{N}$ in den natürlichen Zahlen.

Definition 2.12. $F(n, x) = \sigma$ heißt **lokal gut gestellt** in $(n^+, x^+) \in \mathcal{D}(F)$, falls $F_n(x) = \sigma$ lokal gut gestellt ist für alle $n \in \mathcal{U}(n^+) \cap I$ und alle Umgebungen $\mathcal{U}(n^+)$ von n^+ .

 $F(n,x) = \sigma$ heißt **lokal schlecht gestellt** in $(n^+, x^+) \in \mathcal{D}(F)$, falls eine Umgebung $\mathcal{U}(n^+)$ existiert, sodass $F_n(x) = \sigma$ lokal schlecht gestellt für ein $n \in \mathcal{U}(n^+) \cap I$ entsprechend Definition 2.3 ist.

Bemerkung 2.13. Um die bekannte Definition der lokalen Schlechtgestelltheit 2.3 auf unser Problem anwenden zu können, haben wir die Variable $n \in \mathbb{N}$ separiert und betrachten in einer lokalen Umgebung von n^+ die lokale Schlechtgestelltheit von $F_n(x) = \sigma$.

Vergleichen wir dies mit der bekannten Definition 2.3, so haben wir diese auf unsere diskrete Variable erweitert. Wir bewegen uns in einer lokalen Umgebung um das exakte $n^+ \in \mathbb{N}$, verlangen aber nicht, dass für jedes beliebige n die Parameter x^+ rekonstruiert werden können.

Satz 2.14.

Es gibt eine Umgebung $\mathcal{U}(n^+)$ von n^+ , sodass $F_n(x) = \sigma$ lokal schlecht gestellt ist für ein $n \in \mathcal{U}(n^+) \cap I$.

Beweis:

Sei r > 0 und

$$x^{+} = \left(\mu^{+}, \mu_{1}^{+}, \tau_{1}^{+}, \dots, \mu_{n^{+}}^{+}, \tau_{n^{+}}^{+}, 0, 0, \dots\right)$$

fest.

Wir wählen $\mathcal{U}(n^+)$ so
dass $n=n^++1\in\mathcal{U}(n^+)$ und wählen

$$x_k^r = \left(\mu, \mu_1^+, \tau_1^+, \dots, \mu_{n^+}^+, \tau_{n^+}^+, \frac{r}{2k}, \frac{r}{2}, 0, 0 \dots\right).$$

Dann ist $(n, x_k^r) \in \mathcal{D}(F)$ für alle $k \in \mathbb{N}$. Des Weiteren gilt

$$\|x_k^r - x^+\|_{\ell^2(\mathbb{N})}^2 = \frac{r^2}{4k^2} + \frac{r^2}{4} = \left(\frac{1}{4k^2} + \frac{1}{4}\right)r^2 < r^2 \text{ für alle } k \in \mathbb{N}.$$

Dadurch ergibt sich $\{x_k^r\}_{k\in\mathbb{N}}\subset B_r(x^+)$ und aus

$$\|x_k^r - x^+\|_{\ell^2(\mathbb{N})}^2 \xrightarrow{k \to \infty} \frac{r^2}{4}$$

folgt $x_k^r \nleftrightarrow x^+$ für $k \to \infty$. Außerdem gilt

$$\begin{split} \|F_n(x_k^r) - F_{n^+}(x^+)\|_{L^2([0,T])}^2 &= \\ \int_0^{\bar{\varepsilon}/\bar{\varepsilon}} \left[\mu^+ \dot{\varepsilon}t + \sum_{j=1}^n \frac{\mu_j^+ \tau_j^+ \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{\tau_j^+}t\right) \right) + \frac{\frac{r}{2k} \frac{r}{2} \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{\frac{r}{2}}t\right) \right) \right) \\ &- \mu^+ \dot{\varepsilon}t - \sum_{j=1}^n \frac{\mu_j^+ \tau_j^+ \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{\tau_j^+}t\right) \right) \right]^2 dt \\ &+ \int_{\bar{\varepsilon}/\bar{\varepsilon}}^T \left[\mu^+ \bar{\varepsilon} - \sum_{j=1}^n \frac{\mu_j^+ \tau_j^+ \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_j^+ \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2}{\tau_j^+}t\right) + \frac{\frac{r}{2k} \frac{r}{2} \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\frac{r}{2} \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2}{\frac{r}{2}}t\right) \\ &- \mu^+ \bar{\varepsilon} - \sum_{j=1}^n \frac{\mu_j^+ \tau_j^+ \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\tau_j^+ \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2}{\tau_j^+}t\right) \right]^2 dt \\ &= \int_0^{\bar{\varepsilon}/\bar{\varepsilon}} \left[\frac{r^2 \dot{\varepsilon}}{8k} \left(1 - \exp\left(-\frac{4}{r}t\right) \right) \right]^2 dt + \int_{\bar{\varepsilon}/\bar{\varepsilon}}^T \left[\frac{r^2 \dot{\varepsilon}}{8k} \left(1 - \exp\left(\frac{4\bar{\varepsilon}}{r\dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{4}{r}t\right) \right]^2 dt \\ &= \frac{1}{k^2} \left(\int_0^{\bar{\varepsilon}/\bar{\varepsilon}} \left[\frac{r^2 \dot{\varepsilon}}{8} \left(1 - \exp\left(-\frac{4}{r}t\right) \right) \right]^2 dt + \int_{\bar{\varepsilon}/\bar{\varepsilon}}^T \left[\frac{r^2 \dot{\varepsilon}}{8} \left(1 - \exp\left(\frac{4\bar{\varepsilon}}{r\dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{4}{r}t\right) \right]^2 dt \\ &\right]. \end{split}$$

Da sowohl $\left(1 - \exp\left(-\frac{4}{r}t\right)\right)^2$ als auch $\exp\left(-\frac{8}{r}t\right)$ stetig sind und die eingesetzten Werte für t beschränkt sind, sind auch beide Intervalle beschränkt und es folgt

$$||F_n(x_k^r) - F_{n^+}(x^+)||^2_{L^2([0,T])} \xrightarrow{k \to \infty} 0.$$

Damit konnten wir die lokale Schlechtgestelltheit zeigen.

Dieser Beweis zeigt etwas, was wir auch in Kapitel 3 in den numerischen Ergebnissen sehen werden. Für eine unbekannte Anzahl an Maxwell-Elementen n ist die Rekonstruktion von kleinen Relaxationszeiten sehr schwierig oder in anderen Worten schlecht gestellt.

2.4.2 Das Bayes-Verfahren als Regularisierungsverfahren

Zur Erinnerung, wir betrachten das Problem

$$F(n,x) = \sigma, \quad (n,x) \in \mathcal{D}(F) \subseteq \mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N}), \quad \sigma \in F(\mathcal{D}(F)) \subseteq L^2([0,T]), \tag{2.11}$$

mit $\mathcal{D}(F)$ der Definitionsmenge von F und

$$F(\mathcal{D}(F)) = \{ \tilde{\sigma} \in L^2([0,T]) : F(\tilde{n},\tilde{x}) = \tilde{\sigma} \text{ für ein } (\tilde{n},\tilde{x}) \in \mathcal{D}(F) \}$$

das Bild von F.

Wir lösen das Problem durch die Minimierung von

$$\min_{(n,x)\in\mathcal{D}(F)} T_{\alpha}(n,x) := \min_{(n,x)\in\mathcal{D}(F)} \left\{ \frac{1}{2} \|F(n,x) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \left[\Omega(x) - \log\left(\binom{M}{n} q^n (1-q)^{M-n}\right) \right] \right\}$$
(2.12)

mit 0 < q < 1der Erfolgswahrscheinlichkeit, Mder maximalen Anzahl an Maxwell-Elementen, α dem Regularisierungsparameter und Ω dem Strafterm für x.

Der Einfachheit halber definieren wir

$$\log g(n) := -\log\left(\binom{M}{n}q^n(1-q)^{M-n}\right).$$

Betrachten des Teilproblems

Wir werden im Folgenden für festes $n \in I$ das Teilproblem

$$F_n(x) = \sigma, \quad x \in \mathcal{D}(F_n) \subseteq \ell^2(\mathbb{N}), \quad \sigma \in F_n(\mathcal{D}(F_n)) \subseteq L^2([0,T]), \tag{2.13}$$

mit $\mathcal{D}(F_n)$ der Definitionsmenge von F_n und

$$F_n(\mathcal{D}(F_n)) = \{ \tilde{\sigma} \in L^2([0,T]) : F_n(\tilde{x}) = \tilde{\sigma} \text{ für ein } \tilde{x} \in \mathcal{D}(F_n) \}$$

das Bild von F_n betrachten. Dieses Teilproblem soll durch die Minimierung des Tikhonov-Funktionals

$$\min_{x \in \mathcal{D}(F_n)} T_{\alpha,n}(x) := \min_{x \in \mathcal{D}(F_n)} \left\{ \frac{1}{2} \|F(n,x) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \Omega(x) \right\}$$
(2.14)

gelöst werden. Für dieses Teilproblem werden wir die Annahmen 2.9 und 2.10 zeigen und damit beweisen, dass eine regularisierte Lösung x_{α}^{δ} existiert, diese stabil gegenüber den Daten ist und dass diese regularisierte Lösung unter gewissen Bedingungen konvergiert.

Nachdem wir diese Annahmen bewiesen haben, werden wir die Sätze 2.5, 2.6 und 2.7 nutzen, um auch für die Variable $n \in I$ und das Gesamtverfahren (2.12) diese Eigenschaften zu zeigen.

Beweis der Annahmenblöcke

Wir möchten als Erstes die Annahmen 2.9 für $F_n : \mathcal{D}(F_n) \subset \ell^2(\mathbb{N}) \to L^2([0,T])$, das heißt für festes $n \in I$ zeigen:

- (a) $X = \ell^2(\mathbb{N}), \ Y = L^2([0,T])$ sind unendlich dimensionale Hilberträume und als solche auch reflexiv.
- (b) Wir möchten zeigen, dass die Definitionsmenge

$$\mathcal{D}(F_n) = \{x := \{x_m\} \in \ell^2(\mathbb{N}) : x_m \in \mathbb{R}^+_0, \ m \in \mathbb{N}; \\ x_m = 0, \ m > 2n + 1; \\ x_{2i+1} \ge \gamma, \ i = 1, \dots, n, \ \gamma > 0 \text{ beliebig klein, aber fest} \}$$

abgeschlossen und konvex ist.

Sei $\{x^{(k)}\}_{k\in\mathbb{N}}$ eine Folge in $\mathcal{D}(F_n) \subset \ell^2(\mathbb{N})$. Das heißt $x^{(k)} := \{x_m\}_{m\in\mathbb{N}}^{(k)}$ für $k \in \mathbb{N}$. Außerdem sei $x^{(k)} \xrightarrow{k \to \infty} x^*$ mit $x^* \in \ell^2(\mathbb{N})$.

Um zu zeigen, dass $\mathcal{D}(F_n)$ abgeschlossen ist, müssen wir nun zeigen, dass $x^* \in \mathcal{D}(F_n)$. Aus $x^{(k)} \xrightarrow{k \to \infty} x^*$ folgt, dass für alle $\varepsilon > 0$ ein $K \in \mathbb{N}$ existiert, sodass für alle $k \ge K$ gilt

$$||x^{(k)} - x^*||^2_{\ell^2(\mathbb{N})} < \varepsilon.$$

Da $x^{(k)} \in \mathcal{D}(F_n)$ ist $x_m^{(k)} = 0$ für alle $k \in \mathbb{N}$ und m > 2n + 1 und somit

$$\|x^{(k)} - x^*\|_{\ell^2(\mathbb{N})}^2 = \sum_{m=1}^{2n+1} |x_m^{(k)} - x_m^*|^2 + \sum_{m=2n+2}^{\infty} x_m^{*2} < \varepsilon.$$

Die einzelnen Summanden bestehen aus nichtnegativen Termen und somit folgt $x_m^* = 0$ für m > 2n + 1, sowie

$$|x_m^{(k)} - x_m^*|^2 < \varepsilon$$

für $m = 1, \ldots, 2n+1$. Es gilt $x_m^{(k)} \ge 0$ für $m = 1, \ldots, 2n+1$, sowie $x_{2i+1}^{(k)} \ge \gamma$ für $i = 1, \ldots, n$ und für alle $k \in \mathbb{N}$. Damit folgt $x_{2i+1}^* \ge \gamma$ für $i = 1, \ldots, n$ und $x_m^* \ge 0$ für $m = 1, \ldots, 2n+1$ und somit ist $x^* \in \mathcal{D}(F_n)$.

Als Nächstes wollen wir uns dem Beweis widmen, dass $\mathcal{D}(F_n)$ konvex ist. Sei $\{a_m\}, \{b_m\} \in \mathcal{D}(F_n)$ und $\lambda \in [0, 1]$, dann müssen wir zeigen, dass

$$\{c_m\} := \lambda\{a_m\} + (1-\lambda)\{b_m\} \in \mathcal{D}(F_n).$$

Da $a_m = b_m = 0$ folgt direkt $c_m = 0$ für m > 2n + 1.

Bei Betrachtung von c_m für festes $m \le 2n+1$ als Funktion von λ ergibt sich $\frac{dc_m}{d\lambda} = a_m - b_m$. Für $a_m \ge b_m$ ist der kleinste Wert für $\lambda = 0$ zu finden mit $c_m = b_m$. Für $a_m < b_m$ ist das Minimum $c_m = a_m$ bei $\lambda = 1$. In beiden Fällen gilt $c_m \ge 0$ für alle $m \le 2n + 1$ und $c_{2i+1} \ge \gamma$ für alle $i = 1, \ldots, n$. Damit ist $(c_m)_{m \in \mathbb{N}} \in \mathcal{D}(F_n)$.

(c) Wir wollen zeigen, dass F_n schwach folgenstetig ist. Sei dazu $\{x^{(k)}\}$ eine Folge in $\mathcal{D}(F_n)$ mit $x^{(k)} \rightharpoonup x^*$ in $\ell^2(\mathbb{N})$ und $x^* \in \mathcal{D}(F)$. Nun wollen wir die Konvergenz

$$F_n(x^{(k)}) =: \sigma^{(k)} \rightharpoonup F_n(x^*) := \sigma^*$$

in $L^2([0,T])$ zeigen.

Nach dem Prinzip der gleichmäßigen Beschränktheit ist jede schwach konvergente Folge beschränkt. Außerdem gilt in $\ell^2(\mathbb{N})$, dass eine Folge genau dann schwach konvergent ist, wenn sie beschränkt ist und komponentenweise konvergiert. In $L^2([0,T])$ konvergiert eine Folge schwach, genau dann, wenn sie beschränkt ist und punktweise konvergiert. Dieses Wissen nutzen wir in den folgenden Beweisschritten aus:

- 1. Wir zeigen, dass unser Vorwärtsoperator F_n eine beschränkte Folge $\{x^{(k)}\} \subset \mathcal{D}(F_n) \subset \ell^2(\mathbb{N})$ auf eine beschränkte Folge abbildet.
- 2. Wir zeigen, dass aus der schwachen Konvergenz und damit der Beschränktheit und komponentenweisen Konvergenz von $x^{(k)} \rightarrow x^*$ in $\ell^2(\mathbb{N})$ die punktweise Konvergenz von $\sigma^{(k)} \xrightarrow{pktw.} \sigma^*$ in $L^2([0,T])$ folgt.

Aus diesen beiden Punkten folgt direkt die schwache Konvergenz $\sigma^{(k)} \rightharpoonup \sigma^*$.

Beweis:

1. Wir haben $x^{(k)} = \{x_m^{(k)}\}_{m \in \mathbb{N}}$ für alle $k \in \mathbb{N}$. Außerdem ist $\{x^{(k)}\}$ als schwach konvergente Folge beschränkt, das heißt es existiert $S \in \mathbb{R}$, sodass

$$||x^{(k)}||_{\ell^2 \mathbb{N}} = \left(\sum_{m=1}^{\infty} |x_m^{(k)}|^2\right)^{\frac{1}{2}} \le S$$

für alle $k \in \mathbb{N}$. Da $x^{(k)} \in \mathcal{D}(F_n)$ ist $x_m^{(k)} = 0$ für m > 2n+1 und $x_m^{(k)} \ge 0$ für $m \le 2n+1$. Daraus folgt $x_m^{(k)} < S$ für alle $m, k \in \mathbb{N}$.

Sei $k \in \mathbb{N}$. Dann ist

$$\begin{split} \|\sigma^{(k)}\|_{L^{2}([0,T])}^{2} &= \int_{0}^{\frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}}} \left[x_{1}^{(k)} \dot{\varepsilon}t + \sum_{j=1}^{n} \frac{x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{(k)}} t\right) \right) \right]^{2} dt \\ &+ \int_{\frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}}}^{T} \left[x_{1}^{(k)} \bar{\varepsilon} - \sum_{j=1}^{n} \frac{x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{(k)}} t\right) \right]^{2} dt \end{split}$$

$$\leq \int_{0}^{T} \left[x_{1}^{(k)} \bar{\varepsilon} + \sum_{j=1}^{n} \frac{x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp\left(-\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}}\right) \right) \right]^{2} dt$$
$$\leq T \left[x_{1}^{(k)} \bar{\varepsilon} + \sum_{j=1}^{n} \frac{x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}}{2} \right]^{2}$$
$$\leq T \left[S \bar{\varepsilon} + \frac{nS^{2} \dot{\varepsilon}}{2} \right]^{2} < \infty.$$

Damit ist $\sigma^{(k)}$ für alle $k \in \mathbb{N}$ beschränkt und somit ist auch die Folge $\{F_n(x^{(k)})\}$ beschränkt.

2. Es gilt $x_m^{(k)} \xrightarrow{k} x_m^*$ für alle $m \in \mathbb{N}$, das heißt $\forall m \in \mathbb{N} \ \forall \zeta > 0 \ \exists K(m) \in \mathbb{N}$, sodass $\forall k \geq K(m)$ gilt $|x_m^{(k)} - x_m^*| < \zeta$. Da $x^{(k)} \in \mathcal{D}(F_n)$, $k \in \mathbb{N}$, $x^* \in \mathcal{D}(F)$ und somit $x_m^{(k)} = x_m^* = 0$ für m > 2n + 1, $k \in \mathbb{N}$, können wir $K := \max\{K(m) : m = 1, ..., 2n + 1\}$ wählen, sodass $\forall \zeta > 0 \ \exists K \in \mathbb{N}$, sodass $\forall m \in \mathbb{N}, \ \forall k \geq K$ gilt $|x_m^{(k)} - x_m^*| < \zeta$. Nun wollen wir zeigen, dass $\sigma^{(k)} \xrightarrow{pktw.} \sigma^*$, das heißt $\forall t \in [0, T], \ \forall \zeta > 0 \ \exists M \in \mathbb{N}$, sodass $\forall k \geq M$ gilt $|\sigma^{(k)}(t) - \sigma^*(t)| < \zeta$. Sei $t \in [0, \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{\epsilon}}]$ und $k \geq K$, dann gilt

$$\begin{aligned} &|\sigma^{(k)}(t) - \sigma^*(t)| \\ &= \left| \left(x_1^{(k)} - x_1^* \right) \dot{\varepsilon}t + \frac{\dot{\varepsilon}}{2} \sum_{j=1}^n \left[x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{(k)}} t\right) \right) - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}} t\right) \right) \right] \\ &< \zeta \dot{\varepsilon}t + \frac{\dot{\varepsilon}}{2} \sum_{j=1}^n \left| x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{(k)}} t\right) \right) - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}} t\right) \right) \right|. \end{aligned}$$

Dann folgt für festes $j \in \{1, \ldots, n\}$

$$\begin{aligned} \left| x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{(k)}}t\right) \right) - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}}t\right) \right) \right| \\ &= \left| x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{(k)}}t\right) \right) - x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}}t\right) \right) \right| \\ &+ x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}}t\right) \right) - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}}t\right) \right) \right| \\ &\leq \left| x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(\exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}}t\right) - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{(k)}}t\right) \right) \right| \\ &+ \left| \left(x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \right) \left(1 - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}}t\right) \right) \right| \\ &\leq S^2 \left| \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{*}}t\right) - \exp\left(-\frac{2}{x_{2j+1}^{(k)}}t\right) \right| \\ &+ \left| x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \right|. \end{aligned}$$

Wir betrachten die beiden Summanden getrennt, beginnend mit dem zweiten:

$$\begin{aligned} & \left| x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \right| \\ & = \left| x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^* + x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^* - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \right| \\ & \leq x_{2j}^{(k)} \left| x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j+1}^* \right| + x_{2j+1}^* \left| x_{2j}^{(k)} - x_{2j}^* \right| \\ & \leq 2S\zeta. \end{aligned}$$

Um die Abschätzung für $\left| \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}}\right) - \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{*}}\right) \right|$ zu zeigen, nutzen wir aus, dass die Exponentialfunktion stetig ist und wir diese auf dem kompakten Intervall $J_1 := \left[-\frac{2T}{\gamma}, 0\right]$ betrachten. Nach dem Satz von Heine ist $\exp(\cdot)$ damit auch gleichmäßig stetig in J_1 . Wir finden also zu jedem beliebigen $\eta \in \delta = \delta(\eta)$, sodass für zwei beliebige Stellen $x^{(1)}$ und $x^{(2)}$ aus J_1 mit $|x^{(1)} - x^{(2)}| < \delta$ folgt $\left|\exp(x^{(1)}) - \exp(x^{(2)})\right| < \eta$. Hier haben wir

$$|x^{(1)} - x^{(2)}| = \left|\frac{2t}{x_{2j+1}^*} - \frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}}\right| = \frac{2t\left|x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j+1}^*\right|}{x_{2j+1}^{(k)}x_{2j+1}^*} < \frac{2T}{\gamma^2}\zeta.$$

Somit sind die Voraussetzungen für die gleichmäßige Stetigkeit erfüllt und wir können

$$\left| \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}}\right) - \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^*}\right) \right| < \eta$$

für alle $\eta > 0$ schlussfolgern. Damit folgt

$$|\sigma^{(k)}(t) - \sigma^*(t)| \le \zeta \dot{\varepsilon} t + \frac{\dot{\varepsilon}}{2} \sum_{j=1}^n \left(S^2 \eta + 2S\zeta \right)$$

und wir haben die punktweise Konvergen
z $\sigma^{(k)} \xrightarrow{pktw.} \sigma^*$ für $t \in [0, \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}}]$ gezeigt.

Nun zeigen wir die punktweise Konvergenz im Interval
l $[\bar{\underline{\varepsilon}},T].$ Sei dazu $k\geq K$ und $t\in[\bar{\underline{\varepsilon}},T]$ und

$$\begin{aligned} |\sigma^{(k)}(t) - \sigma^{*}(t)| \\ = \left| \left(x_{1}^{(k)} - x_{1}^{*} \right) \bar{\varepsilon} + \frac{\dot{\varepsilon}}{2} \sum_{j=1}^{n} \left[x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}}\right) \right. \\ \left. \left. - x_{2j}^{*} x_{2j+1}^{*} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{*} \dot{\varepsilon}}\right) \right) \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{*}}\right) \right] \right|. \end{aligned}$$

Dann gilt $\left| \left(x_1^{(k)} - x_1^* \right) \bar{\varepsilon} \right| \leq \zeta \bar{\varepsilon}$ und für festes $j \in \{1, \dots, n\}$ können wir folgende Ab-

schätzung für die einzelnen Summanden zeigen:

$$\begin{split} & \left| \left[x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}} \right) \right. \\ & \left. - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}} \right) \right] \right| \\ & = \left| x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}} \right) \\ & \left. - x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right] \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}} \right) \\ & \left. - x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right] \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}} \right) \\ & \left. - x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right] \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}} \right) \\ & \left. - x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right] \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}} \right) \\ & \left. + \left| \left[x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \left(1 - \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right| \\ & \left. + \left| \left[x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \left(1 - \exp\left(-\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right| \\ & \left. + \left| \left(x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \right) \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right| \\ & \left. + \left| \left(x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \right) \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right| \\ & \left. + \left| x_{2j}^* x_{2j+1}^* \left(\exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^* \dot{\varepsilon}} \right) - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right) \right) \right| \right|. \end{aligned} \right|$$

Wir haben bereits gezeigt, dass

$$\left| \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^{(k)}} \right) - \exp\left(-\frac{2t}{x_{2j+1}^*} \right) \right| < \eta$$

für $J_1 := [-\frac{2T}{\gamma}, 0]$ gilt. Auch für die Abschätzung des zweiten Summanden nutzen wir das Wissen aus dem bisherigen Beweis und folgern

$$\left| \left(x_{2j}^{(k)} x_{2j+1}^{(k)} - x_{2j}^* x_{2j+1}^* \right) \left(1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)}\bar{\varepsilon}}\right) \right) \right|$$

$$\leq 2S \left| 1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)}\bar{\varepsilon}}\right) \right| \zeta$$

$$\leq 2S \left| 1 - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\gamma\bar{\varepsilon}}\right) \right| \zeta$$

$$\leq 2S \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\gamma\dot{\varepsilon}}\right)\zeta$$

Analog zu der Abschätzung des ersten Summanden nutzen wir die gleichmäßige Konvergenz der Exponentialfunktion auf dem kompakten Intervall $J_2 := \left[-\frac{2\bar{\varepsilon}}{\gamma \dot{\varepsilon}}, 0\right]$ aus. Mit der gleichen Notation können wir auch hier

$$|x^{(1)} - x^{(2)}| = \left| \frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^* \dot{\varepsilon}} - \frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)} \dot{\varepsilon}} \right| < \frac{2\bar{\varepsilon}}{\gamma^2 \dot{\varepsilon}} \zeta$$

zeigen, woraus

$$\left| \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^*\dot{\varepsilon}}\right) - \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2j+1}^{(k)}\dot{\varepsilon}}\right) \right| < \eta$$

für alle $\eta > 0$ folgt. Damit gilt schließlich

$$|\sigma^{(k)}(t) - \sigma^*(t)| \le \zeta \bar{\varepsilon} + \frac{\dot{\varepsilon}}{2} \sum_{j=1}^n \left(S^2 \eta + 2S \exp\left(\frac{2\bar{\varepsilon}}{\gamma \dot{\varepsilon}}\right) \zeta + S^2 \eta \right).$$

Damit ist auch die punktweise Konvergenz $\sigma^{(k)} \xrightarrow{pktw.} \sigma^*$ für $t \in [\frac{\overline{\varepsilon}}{\overline{\varepsilon}}, T]$ gezeigt und somit für $t \in [0, T]$.

Damit konnten wir den ersten Annahmenblock 2.9 beweisen.

Der zweite Annahmenblock 2.10 ist schneller abgearbeitet. Das Bayes-Verfahren besitzt den Exponenten p = 2 und somit ist 2.10(a) offensichtlich erfüllt.

Teil (b) und (c) sind Voraussetzungen, die wir mit der Wahl des Strafterms $\Omega(x)$ erfüllen können. In Kapitel 3.7 werden die folgenden beiden Strafterme verwendet:

$$\Omega_1(x) = \frac{1}{2} ||x||^2$$
 und $\Omega_2(x) = \frac{1}{2}x_3^2$

für $x \in \ell^2(\mathbb{N})$ und $0 < \gamma \leq x_3 \in \mathbb{R}$. Die beiden Strafterme haben offensichtlich eine nichtleere Definitionsmenge und es gilt $\mathcal{D} := \mathcal{D}(F) \cap \mathcal{D}(\Omega_i) \neq \emptyset$ für i = 1, 2. Beide Funktionale sind konvex und es handelt sich um stetige Funktionale, wodurch ebenfalls die Unterhalbstetigkeit gegeben ist. Damit ist die Annahme 2.10(b) für unsere gewählten Strafterme erfüllt. Wie bereits unter dem Annahmenblock 2.10 erwähnt, ist die Annahme (c) obsolet, wenn wir einen Strafterm der Form

$$\Omega(x) := \frac{1}{q} \|x\|_X^q$$

für $1 \leq q < \infty$ betrachten. Für q = 2 entspricht Ω_1 genau dieser Form. Da Ω_2 ebenfalls diese Form für eine Relaxationszeit x_3 besitzt, können wir auch hier davon ausgehen, dass es sich um ein stabilisierendes Funktional handelt und der Strafterm erfüllt alle Bedingungen des zweiten Annahmenblocks 2.10. Wir fordern, dass es zu dem Problem (2.13) eine Ω -minimierende Lösung x^+ gibt, die zum Bregman-Bereich $\mathcal{D}_B(\Omega)$ gehört und somit 2.10(d) erfüllt ist.

Damit sind alle Annahmen erfüllt und die Sätze 2.5 - 2.7 können für festes $n \in I$ auf das Unterproblem (2.13) und die zugehörige Regularisierung (2.14) angewandt werden.

Je nach Kontext wird noch eine weitere Annahme eingeführt, die die Existenz einer Gâteaux-Ableitung fordert. In weiterführenden Literaturen wie zum Beispiel [64, Seite 98ff] oder [18, Proposition 12.10] wird diese genutzt um Konvergenzraten bezüglich der Bregman-Distanz zu beweisen. Des Weiteren kann diese Ableitung verwendet werden, um Landweber- oder Newton-Verfahren zu implementieren [38, 64]. Für unsere Zwecke ist diese Annahme nicht notwendig, dennoch wollen wir der Vollständigkeit halber die Ableitung von F_n für festes $n \in \mathbb{N}$ hier aufführen.

Wir können

$$\nabla_x \sigma(t) = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial x_1}, \frac{\partial \sigma}{\partial x_2}, \frac{\partial \sigma}{\partial x_3}, \dots\right)(t) \in \ell^2(\mathbb{N})$$
(2.15)

berechnen für alle $t \in [0, T]$. Wir betrachten die partielle Ableitung für die Teilintervalle $I_1 = (0, \frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}})$ und $I_2 = (\frac{\bar{\varepsilon}}{\bar{\varepsilon}}, T)$. Für i = 1 gilt

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x_1} = \begin{cases} \dot{\varepsilon}t, & t \in I_1, \\ \bar{\varepsilon}, & t \in I_2. \end{cases}$$
(2.16)

Für $i = 1, \ldots, n$ folgt

$$\frac{\partial\sigma}{\partial x_{2i}} = \begin{cases} \frac{x_{2m+1}\dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp(-\frac{2}{x_{2m+1}}t)\right), & t \in I_1, \\ -\frac{x_{2m+1}\dot{\varepsilon}}{2} \left(1 - \exp(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2m+1}\dot{\varepsilon}})\right) \exp(-\frac{2}{x_{2m+1}}t), & t \in I_2, \end{cases}$$
(2.17)

und

$$\frac{\partial\sigma}{\partial x_{2i+1}} = \begin{cases} \frac{x_{2m}\dot{\varepsilon}}{2} - \frac{x_{2m}\dot{\varepsilon}}{2} \exp(-\frac{2}{x_{2m+1}}t) \left(1 + \frac{2}{x_{2m+1}}t\right), & t \in I_1 \\ \frac{x_{2m}\dot{\varepsilon}}{2} \exp(-\frac{2}{x_{2m+1}}t) \left(-\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2m+1}\dot{\varepsilon}} \exp(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2m+1}\dot{\varepsilon}}) - \left(1 - \exp(\frac{2\bar{\varepsilon}}{x_{2m+1}\dot{\varepsilon}})\right) \left(1 + \frac{2}{x_{2m+1}}t\right)\right), & t \in I_2 \end{cases}$$

$$(2.18)$$

Für i > 2n + 1 gilt

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x_i} = 0. \tag{2.19}$$

Dann ist $\frac{\partial \sigma}{\partial x_1}$ die partielle Ableitung der Gesamtspannung nach der Grundsteifigkeit, während $\frac{\partial \sigma}{\partial x_{2i}}$ und $\frac{\partial \sigma}{\partial x_{2i+1}}$ der partiellen Ableitung nach der Steifigkeit und der Relaxationszeit des *i*-ten Maxwell-Elements entsprechen. Offensichtlich gilt auch

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x_i} \in L^{\infty}([0,T]) \subset L^2([0,T])$$
(2.20)

für alle $i \in \mathbb{N}.$ Wir können also einen beschränkten und linearen Operator

$$A_x: \ell^2(\mathbb{N}) \to L^2([0,T]) \tag{2.21}$$

$$h \mapsto \sigma_h$$
 (2.22)

konstruieren, womit die Richtungsänderung der Gesamtspannung in Bezug auf die Richtung $h \in \ell^2(\mathbb{N})$ durch

$$A_x h = \sigma_h = \sum_{i=1}^{2n+1} \frac{\partial \sigma}{\partial x_i}(t) h_i \in L^2([0,T])$$
(2.23)

gegeben ist.

Anwendung auf das Gesamtverfahren

Wir wollen im Folgenden die Definition eines Regularisierungsverfahrens unter Berücksichtigung des diskreten Definitionsbereichs und der entsprechenden Topologie auf \mathbb{N} auf unser Problem übertragen.

Definition 2.15. Eine Abbildung, die jedes Paar $(\sigma^{\delta}, \alpha) \in L^2([0, T]) \times (0, \bar{\alpha})$ mit $0 < \bar{\alpha} \leq +\infty$ in die wohldefinierten Elemente $(n_{\alpha}^{\delta}, x_{\alpha}^{\delta}) \in \mathcal{D}(F)$ transformiert, heißt *Regularisierung* (Regularisierungsverfahren) für die Operatorgleichung (2.11), wenn es eine geeignete Wahl $\alpha = \alpha(\sigma^{\delta}, \delta)$ des Regularisierungsparameters gibt , sodass für jede Folge $\{\sigma_m\}_{m=1}^{\infty} \subset L^2([0,T])$ mit

$$\|\sigma_m - \sigma\| \le \delta_m$$

und $\delta_m \to 0$ für $m \to \infty$, die entsprechenden regularisierten Lösungen $(n_{\alpha(y_m,\delta_m)}^{\delta_m}, x_{\alpha(y_m,\delta_m)}^{\delta_m})$ in einem wohldefinierten Sinn gegen die Lösung (n^+, x^+) der Gleichung (2.11) konvergieren. Da diese nicht eindeutig ist, müssen regularisierte Lösungen zu logg $-\Omega$ -minimierenden Lösungen der Gleichung (2.11) konvergieren. Im Falle der Nicht-Eindeutigkeit können verschiedene Teilfolgen von regularisierten Lösungen zu verschiedenen logg $-\Omega$ -minimierenden Lösungen der Operatorgleichung konvergieren.

Bei der Konvergenz betrachten wir in erster Linie die Produkttopologien (τ_d, τ_0) und (τ_d, τ_w) .

Bei der Definition eines Regularisierungsverfahrens in unserem Setting haben wir den Begriff der logg $-\Omega$ -minimierenden Lösung verwendet, den wir im Folgenden definieren wollen. Dieser ist angelehnt an die bekannte Definition einer Ω -minimierenden Lösung (vergleiche Definition 2.8). **Definition 2.16.** Wir sagen, dass $(n^+, x^+) \in \mathcal{D}(F) \subseteq \mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N})$ eine logg $-\Omega$ -minimierende Lösung der Operatorgleichung (2.11) ist, wenn

$$F(n^+, x^+) = \sigma$$

und

$$\log_{\tilde{v}}(n^{+}) + \Omega(x^{+}) = \inf\{\log_{\tilde{v}}(\tilde{n}) + \Omega(\tilde{x}) : (\tilde{n}, \tilde{x}) \in \mathcal{D}(F), F(\tilde{n}, \tilde{x}) = \sigma\}$$

gilt.

Existenz

Wir haben gezeigt, dass für alle $\alpha > 0$, $n \in I$ und $\sigma^{\delta} \in L^{2}([0, T])$ eine regularisierte Lösung $x_{\alpha}^{\delta} \in \mathcal{D}(F_{n})$ existiert, die das Funktional $T_{\alpha,n}(x)$ in (2.14) über alle $x \in \mathcal{D}(F_{n})$ minimiert. Da I endlich ist, muss es also auch eine Lösung $(n_{\alpha}^{\delta}, x_{\alpha}^{\delta})$ geben, die das Funktional $T_{\alpha}(n, x)$ in (2.12) über alle $(n, x) \in \mathcal{D}(F)$ minimiert.

Stabilität

Satz 2.17. Für alle $\alpha > 0$ sind die Minimierer von (2.12) stabil gegenüber den Daten σ^{δ} : Sei eine Datenfolge $\{\sigma_m\}$ mit $\lim_{n\to\infty} \|\sigma_m - \sigma^{\delta}\|_{L^2([0,T])} = 0$ und die zugehörige Folge von Minimierern $\{(n_m, x_m)\}$ des Minimierungsproblems

$$\min\left\{\frac{1}{2}\|F(n,x) - \sigma_m\|^2 + \alpha \left[\log(n) + \Omega(x)\right]\right\} \ mit \ (n,x) \in \mathcal{D}(F)$$

gegeben, dann besitzt $\{(n_m, x_m)\}$ eine (τ_d, τ_w) -konvergente Teilfolge $\{(n_{m_k}, x_{m_k})\}$. Der Grenzwert jeder solcher Teilfolgen ist ein Minimierer $(n_{\alpha}^{\delta}, x_{\alpha}^{\delta})$ von (2.12). Außerdem gilt für jede solche (τ_d, τ_w) -konvergente Teilfolge

$$\lim_{k \to \infty} \left(\log(n_{m_k}) + \Omega(x_{m_k}) \right) = \log(n_{\alpha}^{\delta}) + \Omega(x_{\alpha}^{\delta}).$$

Beweis:

Da $\{n_m\} \subset I$ gilt und I eine endliche Menge ist, muss es eine τ_d -konvergente Teilfolge $\{n_{m_k}\}$ geben, sodass ein $k_0 \in \mathbb{N}$ existiert, sodass für alle $k \geq k_0$ gilt $n_{m_k} = \tilde{n}$. Für $k \geq k_0$, kann x_{m_k} als Minimierer des Teilproblems

$$\frac{1}{2} \|F_{\tilde{n}}(x) - \sigma_m\|^2 + \alpha \Omega(x)$$

für festes \tilde{n} gesehen werden. Nach Satz 2.6 existiert dann eine Teilfolge $\{x_{m_k}\}$ mit $x_{m_k} \rightharpoonup \tilde{x}$, wobei \tilde{x} ein Minimierer von

$$T_{\alpha,\tilde{n}}(x) = \frac{1}{2} \|F_{\tilde{n}}(x) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \Omega(x)$$

ist und

$$\lim_{k \to \infty} \Omega(x_{m_k}) = \Omega(x_{\alpha}^{\delta})$$

gilt.

Außerdem gilt $F(n_{m_k}, x_{m_k}) = F_{\tilde{n}}(x_{m_k}) \xrightarrow{k} F_{\tilde{n}}(\tilde{x})$ für $k \ge k_0$, da $F_{\tilde{n}}$ schwach folgenstetig ist und damit folgt auch $F(n_{m_k}, x_{m_k}) - \sigma_{m_k} \rightharpoonup F(\tilde{n}, \tilde{x}) - \sigma^{\delta}$. Da die Norm und Ω schwach unterhalbstetige Funktionale sind, können wir schreiben

$$\frac{1}{2} \|F(\tilde{n}, \tilde{x}) - \sigma^{\delta}\|^2 \le \liminf_{k \to \infty} \frac{1}{2} \|F(n_{m_k}, x_{m_k}) - \sigma_{m_k}\|^2,$$
$$\Omega(\tilde{x}) \le \liminf_{k \to \infty} \Omega(x_{m_k}).$$

Da für $k \ge k_0 \log(n_{m_k}) = \log(\tilde{n})$ gilt, folgt auch $\log(\tilde{n}) \le \liminf_{k \to \infty} \log(n_{m_k})$ und damit

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \|F(\tilde{n},\tilde{x}) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \left[\log(\tilde{n}) + \Omega(\tilde{x})\right] &\leq \liminf_{k \to \infty} \left(\frac{1}{2} \|F(n_{m_k}, x_{m_k}) - \sigma_{m_k}\|^2 + \alpha \left[\log(n_{m_k}) + \Omega(x_{m_k})\right]\right) \\ &\leq \lim_{k \to \infty} \frac{1}{2} \|F(n, x) - \sigma_{m_k}\|^2 + \alpha \left[\log(n) + \Omega(x)\right], \quad x \in \mathcal{D}, n \in I \\ &= \frac{1}{2} \|F(n, x) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \left[\log(n) + \Omega(x)\right]. \end{aligned}$$

Daraus folgt, dass (\tilde{n}, \tilde{x}) ein Minimierer von (2.12) ist. Wenn wir $x = \tilde{x}$ und $n = \tilde{n}$ auf der rechten Seite wählen, folgt

$$\frac{1}{2} \|F(\tilde{n}, \tilde{x}) - \sigma^{\delta}\|^{2} + \alpha \left[\log(\tilde{n}) + \Omega(\tilde{x})\right] = \lim_{k \to \infty} \left(\frac{1}{2} \|F(n_{m_{k}}, x_{m_{k}}) - \sigma_{m_{k}}\|^{2} + \alpha \left[\log(n_{m_{k}}) + \Omega(x_{m_{k}})\right]\right).$$

Außerdem gilt $\lim_{k\to\infty} \Omega(x_{m_k}) = \Omega(x_{\alpha}^{\delta})$ und $\lim_{k\to\infty} \log(n_{m_k}) = \log(n_{\alpha}^{\delta})$. Damit folgt direkt

$$\lim_{k \to \infty} \left(\log(n_{m_k}) + \Omega(x_{m_k}) \right) = \log(n_{\alpha}^{\delta}) + \Omega(x_{\alpha}^{\delta}).$$

Konvergenz:

Satz 2.18. Sei $\{\sigma_m := \sigma^{\delta_m}\} \subset L^2([0,T])$ eine Folge von gestörten Daten zur exakten rechten Seite $\sigma \in F(\mathcal{D}(F))$ der Operatorgleichung (1.9) und sei $\|\sigma - \sigma_m\| \leq \delta_m$ für eine Folge $\{\delta_m > 0\}$ von Noise Leveln, die monoton gegen Null konvergiert. Außerdem betrachten wir eine Folge $\{\alpha_m > 0\}$ von Regularisierungsparametern und eine zugehörige Folge $\{(n_m := n_{\alpha_m}^{\delta_m}, x_m := x_{\alpha_m}^{\delta_m})\}$ von regularisierten Lösungen, die Minimierer von

$$\frac{1}{2} \|F(n,x) - \sigma_m\|^2 + \alpha_m \left[\log(n) + \Omega(x)\right] \quad mit \ (n,x) \in \mathcal{D}(F)$$

sind. Unter den Bedingungen

$$\limsup_{m \to \infty} \left(\log (n_m) + \Omega(x_m) \right) \le \log (n_0) + \Omega(x_0)$$

für alle $(n_0, x_0) \in \{ n \in I, x \in \mathcal{D} := \mathcal{D}(F_n) \cap \mathcal{D}(\Omega) : F(n, x) = \sigma \},$ (2.24)

und

$$\lim_{m \to \infty} \|F(n_m, x_m) - \sigma_m\| = 0$$
(2.25)

hat die Folge $\{(n_m, x_m)\}$ eine (τ_d, τ_w) -konvergente Teilfolge, wobei jeder Grenzwert eine logg $-\Omega$ -minimierende Lösung $(n^+, x^+) \in \mathcal{D}(F)$ der Operatorgleichung ist. Ist zusätzlich die logg $-\Omega$ -minimierende Lösung (n^+, x^+) eindeutig, so erhalten wir (τ_d, τ_w) -Konvergenz

$$(n_m, x_m) \to (n^+, x^+)$$
 in $\mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N})$.

Beweis:

Wie bereits im Beweis der Stabilität können wir auch hier für die Folge $\{n_m\}$ schließen, dass diese eine konvergente Teilfolge $\{n_{m_k}\}$ besitzt mit $n_{m_k} \to \tilde{n}$. Das heißt, es existiert ein $k_0 \in \mathbb{N}$, sodass für alle $k \ge k_0$ gilt $n_{m_k} = \tilde{n}$. Aus (2.25) folgt mit $\delta_m \to 0$ für $m \to 0$, dass

$$\lim_{m \to \infty} \|F(n_m, x_m) - \sigma\| \le \lim_{m \to \infty} \|F(n_m, x_m) - \sigma_m\| + \|\sigma_m - \sigma\| = 0.$$
(2.26)

Außerdem gilt

$$||F(n_m, x_m)|| \le ||\sigma_m|| + ||F(n_m, x_m) - \sigma_m||$$

für alle $m \in \mathbb{N}$. Da $\lim_{m \to \infty} \sigma_m = \sigma$ und $\lim_{m \to \infty} ||F(n_m, x_m) - \sigma_m|| = 0$ nach (2.25), ist sowohl $||\sigma_m||$ als auch $||F(n_m, x_m) - \sigma_m||$ beschränkt. Damit ist $\{F(n_m, x_m)\}$ beschränkt und es existiert eine in $L^2([0, T])$ schwach konvergente Teilfolge $\{F(n_{m_k}, x_{m_k})\}$. Dann können wir uns eine Teilfolge $\{(n_{m_k}, x_{m_k})\}$ wählen, sodass $n_{m_k} = \tilde{n}$ für alle $k \in \mathbb{N}$ konstant ist, das heißt

$$\{F(n_{m_k}, x_{m_k})\} = \{F(\tilde{n}, x_{m_k})\}.$$

Dann existiert nach Satz 2.7 eine Teilfolge $\{x_{m_k}\}$ mit $x_{m_k} \rightharpoonup \tilde{x}$ und mit (2.26) folgt

$$F(\tilde{n}, \tilde{x}) = \sigma.$$

Dann gilt mit Bedingung (2.24)

$$\log(\tilde{n}) + \Omega(\tilde{x}) \le \liminf_{k \to \infty} \left(\log(n_{m_k}) + \Omega(x_{m_k})\right) \le \limsup_{k \to \infty} \left(\log(n_{m_k}) + \Omega(x_{m_k})\right)$$
$$\le \log(n^+) + \Omega(x^+) \le \log(n_0) + \Omega(x_0)$$

für alle $n_0 \in I, x_0 \in \mathcal{D}$ mit $F(n_0, x_0) = \sigma$. Setzen wir $(n_0, x_0) = (\tilde{n}, \tilde{x})$ führt dies zu

$$\log(\tilde{n}) + \Omega(\tilde{x}) = \log(n^{+}) + \Omega(x^{+})$$

und somit ist (\tilde{n}, \tilde{x}) eine logg – Ω -minimierende Lösung. Außerdem folgt

$$\lim_{m \to \infty} \left(\log(n_m) + \Omega(x_m) \right) = \log(n^+) + \Omega(x^+).$$

Ist (n^+, x^+) eindeutig, so (τ_d, τ_w) -konvergiert jede Teilfolge von (n_m, x_m) zu (n^+, x^+) und somit (τ_d, τ_w) -konvergiert auch

$$(n_m, x_m) \rightharpoonup (n^+, x^+).$$

Kapitel 3

Numerische Evaluation

Es gibt einige Arbeiten, die sich mit der Identifikation viskoelastischer Materialparameter befassen. Diese unterscheiden sich allerdings von der vorliegenden Arbeit durch verschiedene Merkmale. In [14, 69] etwa werden ebenfalls viskoelastische Strukturen betrachtet und deren Materialparameter identifiziert, jedoch anstelle des verallgemeinerten Maxwell-Modells andere Modellierungen verwendet. Ein vergleichbares Modell wird in [13] benutzt. Dort werden jedoch nur die Steifigkeiten eines viskoelastischen Materials rekonstruiert. Die Relaxationszeiten sowie die Anzahl der Maxwell-Elemente werden als bekannt vorausgesetzt. Relaxationsexperimente in Kombination mit zyklischen Versuchen werden in [62] genutzt, um die Grundsteifigkeit und die Materialparameter von vier Maxwell-Elementen zu bestimmen. Hier ist die Anzahl der Maxwell-Elemente bekannt. Dies gilt auch für die Arbeiten der Autorinnen und Autoren in [17, 53, 68]. Babaei et al. schlagen in [1] zwei Methoden vor, um das vorliegende inverse Problem zu lösen. Die sogenannte ad hoc Methode rät zuerst die Anzahl der Maxwell-Elemente, um dann die Materialparameter zu rekonstruieren. Logischerweise kann man mit dieser Methode nur optimale Rekonstruktionen erhalten, wenn die richtige Anzahl an Maxwell-Elementen erraten wird. Der zweite Ansatz (discrete spectral approach) verteilt etwa 1000 Relaxationszeiten äquidistant im logarithmischen Raum über das Intervall $[10^{-1}, 10^3]$. Dadurch wird die Rekonstruktion drastisch vereinfacht und es muss lediglich ein System linearer Gleichungen gelöst werden, um die Steifigkeiten zu berechnen. Danach werden die "dominanten" Parameter identifiziert und die korrekte Anzahl an Maxwell-Elementen gefunden, wobei dieser Prozess und der Umgang mit den restlichen Parametern nicht genauer beschrieben wird. Leider führt eine hohe Anzahl an Parametern oft dazu, einen verrauschten Datenterm überanzupassen und so Rauschen in die Parameter einzuarbeiten.

In diesem Kapitel werden wir verschiedene Versuche durchführen, um das Bayes-Verfahren zu testen. Um die Ergebnisse des Bayes-Verfahrens beurteilen zu können, werden wir ihn mit einem alternativen Cluster-Algorithmus vergleichen, der ebenfalls erst vor wenigen Jahren von uns entwickelt und in [60] veröffentlicht wurde. Nachdem wir die Algorithmen mit exakten Daten überprüft haben, gehen wir danach zu gestörten Daten über. Dabei werden wir die Auswirkung der Erfolgswahrscheinlichkeit q des Priors auf die Ergebnisse der Rekonstruktion betrachten. Anschließend werden wir eine Analyse verschiedener Verschiebungsraten durchführen und sehen, wie diese sich auf die Ergebnisse der Algorithmen auswirken. Im letzten

Unterkapitel gehen wir noch kurz auf die Möglichkeit weiterer Regularisierungstechniken in Form eines zusätzlichen Strafterms bezüglich der Materialparameter ein.

3.1 Der Cluster-Algorithmus

Im folgenden Abschnitt leiten wir den erwähnten Cluster-Algorithmus her. Dazu schauen wir uns zuerst eine Besonderheit unseres inversen Problems an. Der Vorwärtsoperator ist nicht injektiv, das heißt man kann verschiedene Materialparameter finden, die alle auf die gleiche Spannungskurve abbilden. Dies ist im folgenden Beispiel veranschaulicht.

Beispiel 3.1. Für ein Material, das durch zwei Maxwell-Elemente mit Relaxationszeiten $\tau_1 = \tau_2$ und Steifigkeiten μ_1, μ_2 beschrieben wird, gilt $\varepsilon_1^i = \varepsilon_2^i$. Das heißt die inelastischen Spannungen der beiden Maxwell-Elemente sind gleich, da diese lediglich von der Relaxationszeit, jedoch nicht von der Steifigkeit abhängen. Betrachten wir nun ein weiteres Material, das durch die gleiche Grundsteifigkeit, aber nur ein Maxwell-Element mit Relaxationszeit $\tilde{\tau}_1 = \tau_1 = \tau_2$ und Steifigkeit $\tilde{\mu}_1$, beschrieben wird. Wenn zusätzlich $\tilde{\mu}_1 = \mu_1 + \mu_2$ gilt, gibt es keine Möglichkeit, diese beiden Materialien anhand der gegebenen Spannungsdaten zu unterscheiden. Die beiden Spannungs-Zeit-Kurven sind exakt gleich und die Parameter können nicht eindeutig rekonstruiert werden.

Dies zeigt anschaulich, wie man verschiedene Parameter (n_1, x_1) und (n_2, x_2) mit $(n_1, x_1) \neq (n_2, x_2)$ konstruieren kann, sodass

$$F\left(n_1, x_1\right) = F(n_2, x_2)$$

gilt.

Aus diesem Grund werden in diesem Unterkapitel weitere Anforderungen gestellt. Eine gängige Annahme ist, dass die auftretenden Relaxationszeiten in verschiedenen Dekaden liegen [20]. Wenn beispielsweise $\tau_l \in [10, 100]$ für ein $l \in \{1, \ldots, n\}$ liegt, dann muss $\tau_j \notin [10, 100]$ für alle $j \in \{1, \ldots, l-1, l+1, \ldots, n\}$ gelten. Diese Information wird uns helfen, einen Cluster-Algorithmus zu konstruieren. Natürlich können je nach Anwendung auch andere Intervalle anstelle von Dekaden gewählt werden.

Wir legen eine maximale Anzahl von Maxwell-Elementen $N \in \mathbb{N}$ fest, sodass die unbekannte Anzahl von Maxwell-Elementen n^* kleiner oder gleich N ist. Dadurch ist die Menge der möglichen Anzahlen an Maxwell-Elementen automatisch vorgegeben durch $I := \{1, \ldots, N\}$. Dann rekonstruieren wir die Materialparameter

 $x = (\mu, \mu_1, \tau_1, \dots, \mu_N, \tau_N, 0, 0, \dots)$ mit einem Minimierungsalgorithmus und erhalten den Steifigkeitsparameter für die einzelne Feder sowie die Steifigkeiten und Relaxationszeiten für N Maxwell-Elemente.

Da wir die exakte Anzahl an Maxwell-Elementen n^* nicht kennen, kann es sein, dass $n^* < N$ gilt und wir an dieser Stelle zu viele Materialparameter rekonstruiert haben. Dennoch können wir diese Werte nutzen, um mit dem folgenden Algorithmus gute Rekonstruktionen zu erhalten. Die rekonstruierten Materialparameter erfüllen noch nicht die oben eingeführte Anforderung, dass sich die Relaxationszeiten in verschiedenen Dekaden befinden. Daher wenden wir einen Algorithmus auf diese Parameter an, der sie entsprechend dieser Bedingung clustert. Das heißt, unsere Rekonstruktion besteht aus zwei Teilen:

- Minimierungsalgorithmus mit N Maxwell-Elementen,
- Cluster-Algorithmus, der N Maxwell-Elemente auf $n \leq N$ Elemente reduziert.

Im Folgenden beschreiben wir diesen Prozess genauer, beginnend mit dem Minimierungsalgorithmus. Dieser minimiert die Restspannung

$$R = \|F_N(x) - \sigma\|_2^2$$
(3.1)

mit $x = (\mu, \mu_1, \tau_1, \dots, \mu_N, \tau_N, 0, 0, \dots)$. Dieser Minimierungsprozess wird unter der Annahme durchgeführt, dass N Maxwell-Elemente vorhanden sind. Wie auch bei der Minimierung im Bayes-Algorithmus verwenden wir die Funktionen *lsqnonlin* und *MultiStart* aus der MAT-LAB Optimization Toolbox [47], um somit einen Trust-Region-Reflective-Algorithmus mit mehreren Startwerten zu nutzen. Auf diese Weise wird das Residuum

$$R^{(k)} = \|F_N(x^{(k)}) - \sigma\|_2^2$$
(3.2)

mit dem Iterationsindex $k = 0, 1, \ldots, K$ in jedem Schritt neu berechnet, was uns erlaubt, die Änderungen der Parameter zu bewerten. Als Abbruchbedingung kann wiederum das Diskrepanzprinzip von Morozov genutzt werden [50]. Wie auch in Kapitel 2.2.2 definieren wir uns mit $R : I \subset \mathbb{N} \to \mathcal{D}(F_n) \subset \ell^2(\mathbb{N}), n \mapsto x$ das soeben Minimierungsverfahren, welches für eine gegebene Anzahl an Maxwell-Elementen n die Materialparameter x bestimmt.

Als Nächstes betrachten wir den Cluster-Algorithmus. Für eine Dekade $[10^k, 10^{k+1}]$ mit einem beliebigen $k \in \mathbb{N}_0$ ordnen wir die Maxwell-Elemente in folgende Indexmengen

$$J_k := \{ j \in \{1, \dots, N\} : \tau_j \in [10^k, 10^{k+1}] \},\$$

wobei $k \in \mathbb{N}_0$ die Dekade bestimmt, in der die Relaxationszeit eingeordnet wird. Für die Wahl der Dekaden ist es sinnvoll, die physikalischen Bedingungen des Experiments und des betrachteten Materials zu berücksichtigen. Die maximale Anzahl an Maxwell-Elemente Nsollte auch nicht höher sein als die Anzahl der zur Verfügung stehenden Dekaden. Dementsprechend werden wir in Zukunft diese beiden Werte gleichsetzen. Das heißt sowohl die maximale Anzahl an Maxwell-Elementen, als auch die Anzahl der Dekaden ist durch N gegeben.

Alle Paare $(\mu_j, \tau_j), j \in J_k$, müssen nun einem Maxwell-Element zugeordnet werden. Fasst man die Relaxationszeiten und damit die Maxwell-Elemente in Indexmengen zusammen, so ergibt die Anzahl der nichtleeren Indexmengen die tatsächliche Anzahl n der Maxwell-Elemente im Material. Um mehrere Maxwell-Elemente auf ein einziges zu reduzieren, benutzen wir die folgende Näherungsrechnung für die neuen Materialparameter ($\tilde{\mu}_k, \tilde{\tau}_k$) mit $\tilde{\tau}_k \in [10^k, 10^{k+1}]$ aus den bereits rekonstruierten Materialparametern:

$$\tilde{\mu}_k := \sum_{j \in J_k} \mu_j, \qquad \tilde{\tau}_k := \sum_{j \in J_k} \frac{\mu_j}{\tilde{\mu}_k} \tau_j.$$
(3.3)

Der Nachteil dieser Berechnung ist, dass es keine analytische Möglichkeit gibt, die Parameter so zu kombinieren, dass man durch Anwendung des Vorwärtsoperators genau die gleiche Spannungskurve erhält. Da es sich jedoch um eine numerische Annäherung der Parameter handelt, kann die Berechnung der neuen Parameter aus bereits rekonstruierten Parametern auch zu einer zufälligen Verbesserung führen. Alternativ könnte man auch mit der durch den Cluster-Algorithmus bestimmten Anzahl an Maxwell-Elementen n einen neuen Minimierungsprozess starten. Dies hat den Nachteil, dass ein weiteres aufwendiges Minimierungsverfahren notwendig ist.

Um die Berechnung der neuen Materialparameter (3.3) besser zu verstehen, schauen wir uns die beiden folgenden Beispiele an.

Beispiel 3.2.

1. Sei $J_k = \{1, 3, 5 \in \{1, ..., N\} : \tau_j \in [10^k, 10^{k+1}]\}$ mit $\tau_1 = \tau_3 = \tau_5$ und N = 6. Es ist offensichtlich, dass die Parameter $(\mu_1, \tau_1), (\mu_3, \tau_3)$ und (μ_5, τ_5) einem einzigen Maxwell-Element angehören sollten. Da ε_j^i nur von der Relaxationszeit τ_j abhängig ist, jedoch nicht von der Steifigkeit μ_j , gilt $\varepsilon_1^i = \varepsilon_3^i = \varepsilon_5^i$. Aus der Darstellung der Spannung

$$\sigma(t) = \mu \,\varepsilon(t) + \sum_{j=1}^{N} \,\mu_j \big(\varepsilon(t) - \varepsilon_j^i(t)\big)$$

folgt direkt

$$\sigma(t) = \mu \varepsilon(t) + (\mu_1 + \mu_3 + \mu_5)(\varepsilon(t) - \varepsilon_1^i(t)) + \sum_{j=2,4,6} \mu_j(\varepsilon(t) - \varepsilon_j^i(t)).$$

Daher ist es sinnvoll die neuen Werte als

$$(\tilde{\mu}_k, \tilde{\tau}_k) = (\mu_1 + \mu_3 + \mu_5, \tau_1)$$

zu wählen. Dies wird durch den Cluster-Algorithmus wie folgt erreicht

$$\tilde{\mu}_k = \sum_{j \in J_k} \mu_j = \mu_1 + \mu_3 + \mu_5,$$

$$\tilde{\tau}_k = \sum_{j \in J_k} \frac{\mu_j}{\tilde{\mu}_k} \tau_j = \frac{\mu_1 + \mu_3 + \mu_5}{\mu_1 + \mu_3 + \mu_5} \tau_1 = \tau_1$$

Dies ist ein einfaches Beispiel für die Berechnung der Steifigkeiten.

2. Im nächsten Beispiel wollen wir die Berechnung der Relaxationszeiten im Cluster-Algorithmus betrachten. Es sei $J_k = \{1,3,5 \in \{1,\ldots,6\} : \tau_j \in [10^k, 10^{k+1}]\}$ mit $(\mu_1, \tau_1) = (7, 4), (\mu_3, \tau_3) = (1, 4.5)$ und $(\mu_5, \tau_5) = (2, 3.75)$, das heißt $\tau_1 \approx \tau_3 \approx \tau_5$. Dann dienen die Steifigkeitswerte als Gewichtung der Relaxationszeiten. Es gilt

$$\max_{t \in [0,T]} \left(\varepsilon_3^i(t) - \varepsilon_5^i(t) \right) = 1.2889$$

und

$$\varepsilon_1^i(t) - \varepsilon_5^i(t) < \varepsilon_1^i(t) - \varepsilon_3^i(t) < \varepsilon_3^i(t) - \varepsilon_5^i(t).$$

Diese Werte sind für eine Verschiebungsrate von $\dot{\varepsilon}_u = 10 \text{ mm/s}$ berechnet. Für kleinere Verschiebungsraten sind die entsprechenden Differenzen noch geringer. Da außerdem die anderen Relaxationszeiten in verschiedenen Dekaden liegen, können wir annehmen, dass $\varepsilon_1^i \approx \varepsilon_3^i \approx \varepsilon_5^i$ gilt und wir sehen, dass der größte Beitrag dieser drei zur Gesamtspannung vom Maxwell-Element (μ_1, τ_1) geliefert wird, da $\mu_1 \gg \mu_5 > \mu_3$. Daher können wir annehmen, dass $\tau_1 = 4$ eine gute Annäherung an die tatsächliche Relaxationszeit darstellt. Um diese Gewichtung auch in komplizierteren Beispielen zu berücksichtigen, berechnet der Cluster-Algorithmus $\tilde{\tau}_k$ wie folgt

$$\tilde{\mu}_k = \sum_{j \in J_k} \mu_j = \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 = 10,$$

$$\tilde{\tau}_k = \sum_{j \in J_k} \frac{\mu_j}{\tilde{\mu}_k} \tau_j = \frac{7}{10} \cdot 4 + \frac{1}{10} \cdot 4.5 + \frac{2}{10} \cdot 3.75. = 4.$$

Dies verspricht bessere Ergebnisse anstatt lediglich den Mittelwert aller Relaxationszeiten zu berechnen.

Fassen wir den beschriebenen Prozess zusammen, so erhalten wir den folgenden Algorithmus: Algorithmus 3.3.

Input: $N \in \mathbb{N}, \sigma \in L^2([0,T]).$

- 1) Berechne x durch das Minimierungsverfahren R(N) = x.
- 2) Bestimme die Indexmengen $J_k \neq \emptyset$ für $k \in \mathbb{N}_0$ mit $J_k := \{j \in \{1, \dots, N\} : \tau_j \in [10^k, 10^{k+1}]\}$ und setze \tilde{n} als die Anzahl der nichtleeren Indexmengen.
- 3) Für jedes $k \in \mathbb{N}_0$ mit $J_k \neq \emptyset$ berechne

$$\widetilde{\mu}_k := \sum_{j \in J_k} \mu_j, \qquad \widetilde{\tau}_k := \sum_{j \in J_k} \frac{\mu_j}{\widetilde{\mu}_k} \tau_j$$

und setze $\tilde{x} := (\mu, \tilde{\mu}_1, \tilde{\tau}_1, \dots, \tilde{\mu}_{\tilde{n}}, \tilde{\tau}_{\tilde{n}}, 0, 0, \dots).$

Output: (\tilde{n}, \tilde{x})

Dieser wird uns als Vergleichsgrundlage für das Bayes-Verfahren dienen. Bereits jetzt sind einige Nachteile gegenüber dem Bayes-Verfahren ersichtlich. Die Menge der möglichen Anzahlen an Maxwell-Elementen ist beim Cluster-Algorithmus automatisch durch die maximale Anzahl N festgelegt und dann vorgegeben durch $I := \{1, \ldots, N\}$.

Der Bayes-Algorithmus hingegen kann diese Menge freier wählen durch $I := \{n_1, \ldots, n_m\}$ und erlaubt so eine spezifische Wahl angepasst auf das gegebene Experiment. Des Weiteren benötigt der Cluster-Algorithmus die Einordnung der Relaxationszeiten in Dekaden. Diese Annahme ist für den Bayes-Algorithmus nicht notwendig. Der Bayes-Algorithmus erlaubt hingegen eine einfache Steuerung der bevorzugten Anzahl an Maxwell-Elementen über die Erfolgswahrscheinlichkeit q im Prior. Damit hat der Bayes-Algorithmus auch bereits eine höhere regularisierende Wirkung, da er über die statistische Inversionstheorie einen physikalisch sinnvollen Strafterm gewonnen hat. Dieser höhere Regularisierungsgrad wird auch in den folgenden Abschnitten anhand der Qualität der Rekonstruktionen bei gestörten Daten ersichtlich.

3.2 Datensimulation

Wir simulieren ein Relaxationsexperiment, bei dem eine Dehnung auf ein Material ausgeübt wird. Diese Dehnung wird vollständig durch die Parameter $\dot{\varepsilon}_u$ (Verschiebungsrate), l_0 (Probenlänge) und $\bar{\varepsilon}$ (maximale Dehnung) bestimmt. Da alle Proben gleich lang sind, wird im Folgenden die Verschiebungsrate $\dot{\varepsilon}_u$ anstelle der Dehnrate $\dot{\varepsilon}$ verwendet, da $\dot{\varepsilon} = \frac{\dot{\varepsilon}_u}{l_0}$. Wenn wir also die oben genannten drei Parameter und eine Zeitspanne [0,T] definieren, ist die Dehnung mit Hilfe der Darstellung (1.1) vollständig bestimmt. Diese Funktion kann dann für alle $t \in [0,T]$ als bekannt vorausgesetzt werden. In Abbildung 3.1 sind die Dehnungen für drei verschiedene Verschiebungsraten $\dot{\varepsilon}_u$ und die maximale Dehnung $\bar{\varepsilon} = 20\%$ dargestellt. Die schnellste Verschiebungsrate beträgt 10 mm/s, wobei die maximale Dehnung nach 2 Sekunden erreicht wird. Bei der langsamsten Verschiebungsrate von 1 mm/s wird die Dehnung von 20% erst nach 20 Sekunden erreicht. Dabei ist T = 100 Sekunden.



Abbildung 3.1: Dehnungs-Zeit-Kurven für verschiedene Verschiebungsraten $\dot{\varepsilon}_u$

Für die Simulation der Spannungsfunktion werden die Anzahl der Maxwell-Elemente n und die Materialparameter $(\mu, \mu_1, \ldots, \mu_n, \tau_1, \ldots, \tau_n)$ gewählt. So kann das Vorwärtsproblem mit Gleichung (1.7) gelöst werden. In Abbildung 3.2 sehen wir die Spannungsfunktionen σ , die den Dehnungen mit verschiedenen Verschiebungsraten $\dot{\varepsilon}_u$ der Abbildung 3.1 entsprechen. Wir haben hier eine Feder und drei Maxwell-Elemente mit den Materialparametern $\mu = 10$, $(\mu_1, \tau_1) = (4, 0.2), (\mu_2, \tau_2) = (7, 3.7)$ und $(\mu_3, \tau_3) = (1, 25)$ gewählt. Die Steifigkeiten μ und μ_j haben die Einheit MPa und die Einheit der Relaxationszeiten der verschiedenen Dämpfer sind Sekunden. Die Relaxationszeiten wurden in drei verschiedenen Dekaden gewählt, um ein Relaxationszeitspektrum zu simulieren, während die Steifigkeit für jedes der Elemente zufällig gewählt wurde, um eine Korrelation zwischen der Relaxationszeit und der Steifigkeit auszuschließen. Da die Maxwell-Elemente im rheologischen Modell parallel geschaltet sind, wie in Abbildung 1.3 gezeigt, ist die Reihenfolge der Maxwell-Elemente irrelevant. Dies wird auch im Vorwärtsmodell (1.7) deutlich, da wir lediglich die Summe der Spannungsbeiträge der einzelnen Maxwell-Elemente und der einzelnen Feder haben. Wir halten uns also an die bereits erwähnte Konvention, sie immer in der Reihenfolge der zunehmenden Relaxationszeiten zu sortieren.



Abbildung 3.2: Synthetische Spannungs-Zeit-Daten, die von einem Modell erzeugt werden, das aus einer Feder in Kombination mit drei Maxwell-Elementen für drei verschiedene Verschiebungsraten besteht

Für die Berechnung der Spannung σ müssen wir eine zeitliche Diskretisierung vornehmen. Wir wählen Δt als die Schrittgröße und m + 1 als Anzahl der Zeitschritte $t_i = i \cdot \Delta t = i \cdot \frac{T}{m}$ für $i = 0, \ldots, m$ im Intervall [0, T] und haben damit auch eine diskretisierte Darstellung der Spannungsfunktion mit $(\sigma(t_0), \ldots, \sigma(t_m)) \in \mathbb{R}^{m+1}$. Um ein "inverse crime" zu vermeiden, muss man im Allgemeinen unterschiedliche Diskretisierungen für das direkte und das inverse Problem wählen. Da wir aber das Vorwärtsproblem in Abhängigkeit von der Anzahl der Maxwell-Elemente n analytisch berechnen können, ist diese Maßnahme hier irrelevant. Im weiteren Verlauf dieses Kapitels diskutieren wir Ergebnisse von Experimenten und zeigen verschiedene Szenarien, die zu Rekonstruktionen mit unterschiedlicher Approximationsqualität der Materialparameter führen. Bei jedem schlecht gestellten inversen Problem ist die Rekonstruktion im Falle von verrauschten Daten σ^{δ} wesentlich schwieriger. Diesbezüglich werden wir auch in Kapitel 3 unterschiedliche Ergebnisse sehen. Wir simulieren Rauschen, indem wir auf den diskretisierten Spannungsvektor skalierte standardnormalverteilte Zufallszahlen addieren, sodass $\|\sigma - \sigma^{\delta}\|_{L^2([0,T])} < \delta$ mit einem Rauschpegel $\delta > 0$ gilt. Ein Rauschpegel $\delta = 0$ entspricht ungestörten (exakten) Daten.

3.3 Exakte Daten

Wir erzeugen simulierte Daten für ausgewählte Materialparameter, wie in Abschnitt 3.2 beschrieben, die als Grundlage dienen. Für den ersten Versuch wählen wir ein Material, das durch eine Feder für die Grundelastizität und $n^* = 3$ Maxwell-Elemente und die Materialparameter x^* in Tabelle 3.1 beschrieben wird.

j	0	1	2	3
μ_j^* [MPa]	10	4	7	1
$ au_j^*$ [s]	-	0.2	3.7	25

Tabelle 3.1: Exakte Materialparameter x^* in Versuch 1 zur Simulation von Daten

Durch analytisches Lösen des Vorwärtsoperators (siehe Lemma 1.2) erhalten wir die Spannungs-Zeit-Kurve des Materials, die wir im Bereich [0, 100] Sekunden beobachten. Die Parameter aus Tabelle 3.1 sind in den weiteren Experimenten zu rekonstruieren. In allen Tabellen sind die Steifigkeiten in Megapascal [MPa] und die Relaxationszeiten in Sekunden [s] angegeben. Dies wird nicht mehr explizit wiederholt. Der Datensatz beschreibt die Spannung für eine Dauer von $t \in [0, 100]$ Sekunden, eine Verschiebungsrate von 10 mm/s und eine maximale Verschiebung von $\bar{\varepsilon} = 20\%$, siehe Abbildung 3.1. Die mögliche Anzahl an Maxwell-Elemente ist durch $I := \{1, \ldots, 5\}$ bestimmt. Die Relaxationszeiten sind größer oder gleich $\gamma = 0.01$. Tabelle 3.2 zeigt die Ergebnisse des Cluster-Algorithmus. Während der Minimierungsalgorithmus Steifigkeiten und Relaxationszeiten für die gegebene maximale Anzahl von Maxwell-Elementen (hier N = 5) bestimmt, kann der Cluster-Algorithmus diese entsprechend kombinieren und erhält so die tatsächliche Anzahl n = 3.

j =	0	1	2	3	4	5
Rekonstruierte Werte						
μ_j	10.000	4.000	3.685	1.621	1.694	1.000
$ au_j$	-	0.200	3.695	3.706	3.706	25.000
Nach dem Clustering						
μ_j	10.000	4.000	7.000	1.000		
$ au_j$	_	0.200	3.700	25.000		

Tabelle 3.2: Rekonstruierte Materialparameter vor und nach dem Clustering

Während es nach der Berechnung des Minimierungsalgorithmus nur ein Maxwell-Element mit $\tau \in [0, 1)$ und $\tau \in [10, 100)$ gibt, haben wir drei Maxwell-Elemente mit zugehörigen Relaxationszeiten in [1, 10). Der Cluster-Algorithmus fasst diese Elemente zusammen. Die Werte in der Tabelle sind auf drei Dezimalstellen gerundet. Nach Anwendung des Cluster-Algorithmus ist kein Unterschied mehr zu den genauen Parametern zu erkennen, siehe Tabelle 3.1. Dieses Beispiel veranschaulicht, was wir bereits im zweiten Teil von Beispiel 3.2 gesehen haben. Die Relaxationszeit $\tau_2 = 3.695$ kommt dem aktuellen Wert von 3.7 vor dem Clustering am nächsten und es gilt $\mu_2 \gg \mu_4 > \mu_3$. Durch die Gewichtung (3.3) des Cluster-Algorithmus erhalten

wir gute Ergebnisse.

Wie bereits in Kapitel 2.2 erwähnt, benutzen wir für den Bayes-Algorithmus nicht die Voraussetzung, dass die Relaxationszeiten in verschiedenen Dekaden liegen müssen. Ein gravierender Vorteil des Bayes-Algorithmus liegt darin, dass er ohne a priori-Informationen über die Dekaden der Relaxationszeiten auskommt. Dadurch kann er ein größeres Feld an Versuchen und Materialien beschreiben. Wir wählen q = 0.1 und die Menge I bestimmt $M := \max I = 5$. Dann können wir ähnlich zum Cluster-Algorithmus die Parameter sehr gut rekonstruieren und bei einer Rundung auf drei Nachkommastellen kann kein Unterschied zu den exakten Daten erkannt werden, siehe Tabelle 3.3.

j	0	1	2	3
μ_j	10.000	4.000	7.000	1.000
$ au_j$	-	0.200	3.700	25.000

Tabelle 3.3: Rekonstruierte Materialparameter durch den Bayes-Algorithmus
3.4 Gestörte Daten

Wir wenden uns nun den gestörten Daten zu. Wie bereits in Abschnitt 3.2 beschrieben, addieren wir skalierte normalverteilte Zufallszahlen zu dem diskretisierten Spannungsvektor σ , sodass $\|\sigma - \sigma^{\delta}\| < \delta$ gilt mit einem Noise Level $\delta > 0$. Da der Noise Level δ selbst nur im Verhältnis zum Spannungsvektor eine gute Aussagekraft über die Menge des Rauschens hat, werden wir im Folgenden den relativen Rauschpegel δ_{rel} angeben, der durch

$$\frac{\|\sigma - \sigma^{\delta}\|}{\|\sigma^{\delta}\|} < \delta_{rel}$$

bestimmt ist.



Abbildung 3.3: Dehnungs- und Spannungs-Zeit-Kurven mit und ohne Rauschen für Verschiebungsrate $\dot{\varepsilon}_u = 10$ mm/s

In den folgenden Experimenten skalieren wir die Zufallszahlen des addierten Rauschens derart, dass $\delta_{rel} \approx 1\%$ gilt. In Abbildung 3.3 ist sowohl die Dehnung als auch die Spannung in ungestörter sowie verrauschter Form zu sehen. Die rote Linie stellt die Dehnungskurve mit einer Verschiebungsrate von $\dot{\varepsilon}_u = 10 \text{ mm/s}$ und einer maximalen Dehnung von $\bar{\varepsilon} = 20\%$ dar. Die schwarze Linie ist die dazugehörige Spannung mit den Materialparametern aus Tabelle 3.1. Zur Rekonstruktion werden wir lediglich die gestörte Spannung, dargestellt durch die blaue Linie, nutzen.

j	0	1	2	3
μ_j	9.997	57.376	7.028	0.995
$ au_j$	-	0.013	3.703	25.356

Tabelle 3.4: Rekonstruierte Parameter durch den Cluster-Algorithmus für die Daten aus Abbildung 3.3

In Tabelle 3.4 sehen wir die durch den Cluster-Algorithmus rekonstruierten Materialparameter. Dabei minimiert der Minimierungsprozess das Funktional

$$R^{(k)} = \|\sigma^{\delta} - F_N(x^{(k)})\|_2^2$$

wie in Gleichung (3.2) beschrieben mit N = 5. Wir sehen, dass die Rekonstruktionsergebnisse erheblich von den exakten Werten abweichen. Es ist jedoch offensichtlich, dass die Rekonstruktionen von (μ_1, τ_1) die stärkste Fehleranfälligkeit aufweisen, während die anderen Parameter recht stabil berechnet werden. Dies bestätigt Überlegungen der Autoren in [13], wo nachgewiesen wurde, dass die Rekonstruktion von kleinen Relaxationszeiten äußerst schlecht konditioniert ist und sich dieser Umstand mit $\tau \to 0$ verschlechtert. Da Steifigkeit und Relaxationszeit immer paarweise zu betrachten sind, sehen wir Abweichungen in τ_1 auch in der entsprechenden Steifigkeit μ_1 . Da jedes Maxwell-Element einen bestimmten Anteil an der Gesamtspannung liefern muss, werden zu kleine Werte des einen Parameters durch höhere Werte des anderen Parameters kompensiert, um sich der Gesamtspannung anzunähern.

j	0	1	2	3
μ_j	9.9997	4.424	7.046	0.998
$ au_j$	-	0.162	3.693	25.307

Tabelle 3.5: Rekonstruierte Parameter durch den Bayes-Algorithmus für die Daten aus Abbildung 3.3

Mit derselben Prämisse betrachten wir in Tabelle 3.5 das Ergebnis des Bayes-Algorithmus. Hier wird das Funktional

$$\Phi(n|\sigma^{\delta}) = \|\sigma^{\delta} - F(n,x)\|^2 - \alpha \log\left(\binom{M}{n}q^n(1-q)^{M-n}\right)$$
(3.4)

minimiert mit q = 0.1. Wir können direkt erkennen, dass die Ergebnisse signifikant besser sind als die Rekonstruktion durch den Cluster-Algorithmus. Wie auch dort sind die Grundsteifigkeit und die Parameter des zweiten und dritten Maxwell-Elements gut rekonstruiert. Allerdings haben wir hier auch bei dem ersten Maxwell-Element eine gute Annäherung der exakten Parameter (4, 0.2) durch die Werte (4.4238, 0.1617).

Es drängt sich die Frage auf, ob dieses Ergebnis auch durch die bloße Minimierung des Residuums mit verschiedenen Anzahlen an Maxwell-Elementen erreicht werden kann. Um dies zu überprüfen, testen wir verschiedene Anzahlen an Maxwell-Elementen aus $I = \{n_1, \ldots, n_m\}$ aus und minimieren zu jeder Anzahl das Residuum

$$\|\sigma^{\delta} - F(n,x)\|^2, \tag{3.5}$$

um die Materialparameter x zu bestimmen. Wir wählen als Ergebnis (n, x) mit dem kleinsten Residuum. Damit sieht die Minimierung sehr ähnlich zu dem Cluster-Algorithmus aus, lediglich der durch den Prior gegebene Strafterm fällt weg und damit die gesamte statistische

j	0	1	2	3	4	5
μ_j	9.9997	4.366	0.100	0.876	7.030	0.996
$ au_j$	-	0.100	0.100	0.339	3.701	25.347

Inversionstheorie, die in die Lösung dieses Problems eingeht.

Tabelle 3.6: Rekonstruierte Parameter durch Minimierung des Residuums für die Daten aus Abbildung 3.3

Wie wir allerdings in Tabelle 3.6 sehen können, entspricht diese Rekonstruktion bei Weitem nicht den exakten Parametern. Wir erhalten die maximal mögliche Anzahl an Maxwell-Elementen, wobei jedoch $\tau_1 = \tau_2$ gilt. Dieser Algorithmus hat weder die zusätzliche Bedingung der verschiedenen Dekaden für die Relaxationszeiten mit der der Cluster-Algorithmus arbeitet, noch besitzt er Zusatzinformationen, die die Anzahlen der Maxwell-Elemente gewichtet, so wie es der Bayes-Algorithmus macht. Dies bestätigt die Wichtigkeit des Priors in diesen Berechnungen.

Wir wollen einen weiteren Versuch mit diesen drei Verfahren durchführen. Dazu verwenden wir dasselbe Setting mit einer maximalen Dehnung von $\bar{\varepsilon} = 20\%$, einer Verschiebungsrate von $\dot{\varepsilon}_u = 10$ mm/s und relativem Rauschpegel von $\delta_{rel} \approx 1\%$. Allerdings wählen wir andere Materialparameter, die in Tabelle 3.7 aufgelistet sind. Anstelle von drei besitzt das betrachtete Material nur noch zwei Maxwell-Elemente.

j	0	1	2
μ_j^* [MPa]	5	8	0.5
$ au_j^*$ [s]	-	0.8	50

Tabelle 3.7: Zweites Set an exakten Materialparametern x^* zur Simulation von Daten

Die Ergebnisse der verschiedenen Algorithmen sind in Tabelle 3.8 dargestellt. Wie auch bei dem letzten Versuch wird die Grundsteifigkeit, sowie die Parameter des Maxwell-Elements mit größerer Relaxationszeit von allen Algorithmen gut rekonstruiert. Allerdings erhält der Cluster-Algorithmus als auch die Minimierung des Residuums zu viele Maxwell-Elemente. Der Cluster-Algorithmus hat ein weiteres Maxwell-Element mit sehr großer Relaxationszeit, allerdings sehr geringer Steifigkeit gefunden, welches dank der geringen Steifigkeit wenig Einfluss auf die Gesamtspannung hat. Allerdings wird auch hier das erste Maxwell-Element $(\mu_1^*, \tau_1^*) = (8, 0.5)$ nicht gut rekonstruiert. Die Minimierung des Residuums sorgt dafür, dass vier Maxwell-Elemente den Platz des ersten Maxwell-Elementes einnehmen. Insgesamt werden damit fünf Elemente rekonstruiert. Nur dem Bayes-Algorithmus gelingt es eine geeignete Rekonstruktion der Parameter zu produzieren.

-	Cluster-Algorithmus										
-	j		0	1	-		2		e e	3	
-	μ_j	4.9	998	29.7	740	0	.502	8	.053 ·	· 10-	-10
-	$ au_j$		-	0.2	15	50	.309		576	.988	
-											
			В		es-A	lgo	rithn	nus			
			j	0		1	-	4	2		
			μ_j	4.9	98	7.9	23	0.5	602		
			$ au_j$	-		0.5	02	50.3	241		
	Residuum Minimierung (3.5)										
j		0	-	1	2		3		4		5
μ_j	4.9	998	0.1	30	0.1	30	4.16	31	3.69	8	0.502
$ au_j$		-	0.1	00	0.1	00	0.8	11	0.81	2 3	50.270

Tabelle 3.8: Rekonstruierte Parameter durch die drei Algorithmen zu den exakten Parametern aus Tabelle 3.7

Im nächsten Abschnitt werden wir uns die Auswirkung verschiedener Verschiebungsraten auf die Rekonstruktion anschauen. Dabei werden wir auch einen Blick auf die Spannungen der einzelnen Maxwell-Elemente werfen und so besser verstehen, weshalb gerade die Rekonstruktion des Maxwell-Elements mit der kleinsten Relaxationszeit so fehlerbehaftet ist.

3.5 Analyse verschiedener Verschiebungsraten $\dot{\varepsilon}_u$

Wie soeben erwähnt, betrachten wir nun verschiedene Verschiebungsraten und wie diese das Ergebnis der Rekonstruktion beeinflussen. Zu diesem Zweck kehren wir wieder zu unserem ersten Versuch mit den Materialparametern aus Tabelle 3.1 zurück. Der Versuchsaufbau bleibt gleich, die Probe wird auf maximal $\bar{\varepsilon} = 20\%$ gedehnt, das additive Rauschen hat einen relativen Noise Level von $\delta_{rel} = 1\%$. Das Ergebnis zu diesem Versuch für eine Verschiebungsrate von $\dot{\varepsilon}_u = 10$ mm/s kennen wir bereits aus Tabelle 3.5. In Tabelle 3.9 sind die rekonstruierten Parameter zu diesem Versuch für eine Verschiebungsrate von $\dot{\varepsilon}_u = 1$ mm/s zu sehen ebenfalls mit q = 0.1.

j	0	1	2
μ_j	9.997	7.450	1.007
$ au_j$	-	3.576	25.100

Tabelle 3.9: Rekonstruierte Parameter durch den Bayes-Algorithmus mit q=0.1 für $\dot{\varepsilon}_u=1 \mathrm{mm/s}$

Wie wir sehen, kann auch der Bayes-Algorithmus diesmal nicht alle Maxwell-Elemente rekonstruieren, denn das erste Maxwell-Element fehlt. Wir wollen nun testen, ob der Bayes-Algorithmus dieses Maxwell-Element findet, wenn wir die starke Gewichtung auf eine geringe Anzahl an Maxwell-Elementen abschwächen. Zu diesem Zweck ist in Tabelle 3.10 die Rekonstruktion des Bayes-Algorithmus mit q = 0.3 zu sehen.

j	0	1	2	3
μ_j	9.996	7.411	0.299	0.796
$ au_j$	-	3.500	15.369	27.100

Tabelle 3.10: Rekonstruierte Parameter durch den Bayes-Algorithmus mit q=0.3 für $\dot{\varepsilon}_u=1{\rm mm/s}$

Tatsächlich werden diesmal drei Maxwell-Elemente rekonstruiert, jedoch wird nicht das erste Maxwell-Element (μ_1^*, τ_1^*) = (4,0.2) gefunden. Stattdessen wird das dritte Maxwell-Element (μ_3^*, τ_3^*) = (1,25) in zwei Maxwell-Elemente (0.2988, 15.3686) und (0.7955, 27.1003) aufgeteilt.

Doch wieso ist die Rekonstruktion für das kleinste Maxwell-Element mit einer kleineren Verschiebungsrate wie $\dot{\varepsilon}_u = 1 \text{ mm/s}$ schwieriger als mit $\dot{\varepsilon}_u = 10 \text{ mm/s}$?

Wir betrachten dazu die unterschiedlichen Spannungs-Zeit-Kurven, die eine Verschiebungsrate von 1 mm/s (Abbildung 3.4) und 10 mm/s (Abbildung 3.4) erzeugen. Für jede der Kurven wird der Beitrag der einzelnen Elemente separat dargestellt. Das heißt σ_0 ist die Spannung, die von der einzelnen Feder erzeugt wird, während $\sigma_{1,2,3}$ die Spannung der drei Maxwell-Elemente ist. Die Summe dieser Einzelspannungen ergibt die Gesamtspannung (1.7). Die maximale Dehnung beträgt 20 %, die bei einer Verschiebungsrate von 1 mm/s bzw. 10 mm/s nach 20 Sekunden bzw. 2 Sekunden erreicht wird. Dies macht einen großen Unterschied für die einzelnen Spannungen der Maxwell-Elemente. In beiden Fällen wird die maximale



Abbildung 3.4: Einzelne Spannungskomponenten für eine Verschiebungsrate von 10 mm/s

Spannung der Einzelfeder bei 200 MPa erreicht, allerdings zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Die maximalen Spannungswerte der Maxwell-Elemente sind jedoch bei einer langsameren Verschiebungsrate von 1 mm/s viel geringer als bei einer schnelleren Verschiebungsrate. In beiden Fällen wird das Maximum bei $t = \bar{\varepsilon}/\dot{\varepsilon}$ erreicht. In der Tabelle 3.11 sind die verschiedenen Werte aufgeführt. Bei einer langsameren Verschiebungsrate sind die Spannungswerte der Maxwell-Elemente über einen längeren Zeitraum ungleich Null, erkennbar am zweiten Maxwell-Element in den Abbildungen 3.4 und 3.5. Da die Werte vor allen Dingen für das erste Maxwell-Element aber so viel kleiner sind als bei einer höheren Verschiebungsrate, werden diese kleinen Werte viel leichter vom Rauschen überdeckt. Daher ist es ratsam, höhere Verschiebungsraten zu verwenden. Aus diesem Grund beschränken wir uns in den kommenden Beispielen auf eine Verschiebungsrate von 10 mm/s.

		j = 1	j = 2	j = 3
$\dot{\varepsilon}_u = 1$	$\sigma_j(\bar{arepsilon}/\dot{arepsilon})$	0.4	12.94	9.9
$\dot{\varepsilon}_u = 10$	$\sigma_j(\bar{\varepsilon}/\dot{\varepsilon})$	4	85.57	18.48

Tabelle 3.11: Maximalwerte einzelner Spannungskomponenten mit langsamen und schnellen Verschiebungsraten, die im Zeitpunkt $t = \bar{\varepsilon}/\dot{\varepsilon}$ eintreten



Abbildung 3.5: Einzelne Spannungskomponenten für eine Verschiebungsrate von 1 mm/s

3.6 Auswirkung der Erfolgswahrscheinlichkeit q auf die Rekonstruktion

Wie wir in Tabelle 3.10 bereits gesehen haben, führt die Erhöhung von q dazu, dass der Algorithmus eine höhere Anzahl an Maxwell-Elementen bevorzugt, wie es durch den Prior gewollt ist (vergleiche Kapitel 2.2.1). Doch wie empfindlich ist der Algorithmus diesen Änderungen gegenüber? Dies werden wir in dem folgenden Unterkapitel herausfinden.

Wir betrachten wieder den zweiten Versuch, der bereits in Abschnitt 3.4 beschrieben wurde mit den Materialparametern aus Tabelle 3.7. Wir wissen bereits, dass der Bayes-Algorithmus für q = 0.1 diese Parameter sehr gut rekonstruieren konnte. Nun schauen wir uns das Ergebnis für q = 0.9 an. Bei einer maximalen Anzahl von M = 5 Maxwell-Elementen bevorzugt der Prior $\rho_0(n)$ somit eine höhere Anzahl, das heißt der Strafterm $\phi_0(n)$ ist monoton fallend und somit am größten für n = 1.

j	0	1	2	3	4	5
μ_j	4.998	0.130	0.130	4.161	3.698	0.502
τ_j	-	0.100	0.100	0.811	0.812	50.270

Tabelle 3.12: Rekonstruierte Parameter des 2. Versuchs durch den Bayes-Algorithmus mit
 $q=0.9\,$

In Tabelle 3.12 sind die rekonstruierten Materialparameter für diesen Versuch aufgelistet. Wie wir sehen können rekonstruiert der Bayes-Algorithmus anstatt zwei Maxwell-Elementen fünf Elemente. Dies entspricht der Vorgabe des Priors. Da es zusätzlich leichter ist das Residuum $\|\sigma^{\delta} - F(n, x)\|$ für eine höhere Anzahl an Parametern zu minimieren, ist eine kleine Anzahl an Maxwell-Elementen unplausibel.

Wenn wir verschiedene Werte für die Erfolgswahrscheinlichkeit mit Schrittweiten von 0.1 durchtesten, so sehen wir, dass erst ab einer Größe von q = 0.4 die korrekte Anzahl an Maxwell-Elementen wieder rekonstruiert wird, siehe Tabelle 3.13. Weitere Tests zeigen, dass für alle Werte $0 < q \leq 0.4$ die Materialparameter verlässlich rekonstruiert werden.

j	0	1	2
μ_j	4.998	7.923	0.502
$ au_j$	-	0.807	50.241

Tabelle 3.13: Rekonstruierte Parameter des 2. Versuchs durch den Bayes-Algorithmus mit
 $q=0.4\,$

Dies entspricht ebenfalls den Parametern, die wir für q = 0.1 in Tabelle 3.8 erhalten haben. Wir betrachten nun einen dritten Versuch in dem gleichen Setting mit $\bar{\varepsilon} = 20\%$, $\dot{\varepsilon}_u = 10$ mm/s und $\delta_{rel} \approx 1\%$. Wir ändern die Materialparameter ab, siehe Tabelle 3.14, sodass wir eine hohe Anzahl an Maxwell-Elementen vorgeben. Außerdem muss wegen der längsten Relaxationszeit die Dauer des Experiments verlängert werden auf T = 10000 Sekunden. Hierbei ist zu erwähnen, dass die bisherigen Versuche durch eine Schrittgröße von $\Delta t = 0.01$ Sekunden in der Zeit diskretisiert wurden. Das heißt, es gilt $t_i = i \cdot \Delta t$ für i = 0, ..., m. Für eine gesamte Zeitspanne von 0 bis T = 100 Sekunden, erhalten wir somit 10001 Datenpunkte. Für diesen Versuch müssen wir wie bereits erwähnt eine längere Zeitspanne mit T = 10000 Sekunden wählen, da die längste Relaxationszeit 1200 Sekunden beträgt. Wenn wir die gleiche Menge an Datenpunkten erhalten wollen, müssten wir hier also eine Schrittweite von $\Delta t = 1$ Sekunde wählen. Da allerdings der Einfluss des ersten Maxwell-Elements bereits nach zwei Sekunden zu Null tendiert, wäre diese Diskretisierung in jedem Fall unzureichend um alle Materialparameter bestimmen zu können. Daher wählen wir hier eine Diskretisierung von $\Delta t = 0.1$ mit 100.001 Datenpunkten und vergleichen anhand dieser Daten die Auswirkung der Erfolgswahrscheinlichkeit auf die Rekonstruktion.

j	0	1	2	3	4	5
μ_j^*	10	8	7	1	4	0.5
$ au_j^*$	-	0.8	3.7	25	500	1200

Tabelle 3.14: Exakte Parameter x^* zum 3. Versuch

Wir haben hier also einen Versuch mit vielen Maxwell-Elementen und wollen entgegen dieser Prämisse eine Erfolgswahrscheinlichkeit wählen, die eine geringe Anzahl bevorzugt behandelt. Daher wählen wir q = 0.1 und sehen in Tabelle 3.15 das Ergebnis dieser Rekonstruktion.

j	0	1	2	3	4	5
μ_j	10.000	8.427	7.011	0.893	4.077	0.419
$ au_j$	-	0.763	3.846	27.47	505.8	1282.5

Tabelle 3.15: Rekonstruierte Parameter des 3. Versuchs durch den Bayes-Algorithmus mit
 $q=0.1\,$

Obwohl der Algorithmus geringe Anzahlen an Maxwell-Elementen bevorzugt, werden alle Maxwell-Elemente und ihre Parameter gut rekonstruiert. Dies spricht wiederum dafür, dass es nicht möglich ist den Datenterm mit einer geringeren Anzahl an Maxwell-Elementen und somit Parametern zu beschreiben. Die verrauschte Spannungskurve lässt sich in jedem Fall leichter durch eine höhere Anzahl an Parametern annähern. Es ist also ratsam eine geringe Erfolgswahrscheinlichkeit q zu wählen, sodass der Algorithmus eine geringe Anzahl an Maxwell-Elementen bevorzugt. Auch Materialien mit einer hohen Anzahl an Maxwell-Elementen können damit rekonstruiert werden.

3.7 Regularisierung durch einen Strafterm bezüglich der Materialparameter

Wie bereits in Kapitel 2 erwähnt, werden häufig Strafterme in der Tikhonov-Philipps Regularisierung verwendet, um stabilisierend auf die Parameter zu wirken. Für den Cluster-Algorithmus war dies notwendig, damit dieser gute Rekonstruktionen bei verrauschten Daten hervorbrachte, vergleiche [60]. Durch die Herleitung des Bayes-Algorithmus über die statistische Inversionstheorie haben wir auf natürliche Weise bereits einen passenden Strafterm für die Anzahl der Maxwell-Elemente n gewonnen. Dadurch sehen wir auch eine erhebliche Verbesserung der Rekonstruktionen durch den Bayes-Algorithmus im Vergleich zum Cluster-Algorithmus.

Die einzigen Datensätze, aus denen auch der der Bayes-Algorithmus keine vollständige Rekonstruktion der Materialparameter erhalten hat, sind diejenigen mit einer Verschiebungsrate von $\dot{\varepsilon}_u = 1 \text{ mm/s}$. Dies lässt sich natürlich bei einem Versuchsaufbau leicht vermeiden. Nichtsdestotrotz wollen wir uns nun anschauen, ob wir einen zusätzlichen Strafterm bezüglich der Materialparameter finden, der einen positiven Einfluss auf die Rekonstruktion hat.

Wir nutzen als Strafterm einen typischen Ansatz im Bereich der inversen Probleme mit

$$\Omega_1(x) = \frac{1}{2} \|x\|^2, \tag{3.6}$$

wodurch wir für die Minimierung der Materialparameter bei fester Anzahl an Maxwell-Elementen eine Tikhonov-Philipps Regularisierung [16, 38, 51, 63] der Form

$$\min_{x \in \mathcal{D}(F_n)} T_{\alpha,n}(x) := \min_{x \in \mathcal{D}(F_n)} \left\{ \frac{1}{2} \|F_n(x) - \sigma^{\delta}\|^2 + \alpha \Omega_1(x) \right\}$$
(3.7)

durchführen. Der Parameter $\alpha > 0$ wirkt als Regularisierungsparameter und gleicht den Einfluss des Datenterms und des Strafterms auf den Minimierer aus.

j	0	1	2	3
μ_j	10.000	3.765	3.765	1.117
$ au_j$	-	3.376	3.376	23.238

Tabelle 3.16: Rekonstruierte Parameter des 1. Versuchs für eine Verschiebungsrate $\dot{\varepsilon}_u = 1$ mm/s durch den Bayes-Algorithmus mit zusätzlichem Strafterm (3.6) und $\alpha = 0.5$

In Tabelle 3.16 ist das Ergebnis des Bayes-Algorithmus mit dieser Regularisierung und einem Regularisierungparameter $\alpha = 0.5$ zu sehen. Wir sehen, dass der Algorithmus nun zwar drei Maxwell-Element rekonstruiert, allerdings sind die Werte des ersten und zweiten Maxwell-Elements gleich und das eigentliche erste Maxwell-Element (μ_1^*, τ_1^*) = (4, 0.2) wird nicht gefunden. Der Strafterm sorgt hier wie erwartet dafür, dass große Werte bestraft werden. Damit lässt sich auch die Verkleinerung des Wertes der Steifigkeit μ_3 erklären. Damit wir mehr Fokus auf das erste Maxwell-Element legen, testen wir noch einen weiteren Strafterm der Form

$$\Omega_2(x) = \frac{1}{2}\tau_1^2. \tag{3.8}$$

Dadurch sollen große Werte der ersten Relaxationszeit bestraft werden. Da der Wert des Strafterms hier auch viel kleiner ist als in (3.6), in dem die Norm der gesamten Materialparameter in Betracht gezogen wurde, erhöhen wir entsprechend den Regularisierungsparameter auf $\alpha = 100$.

j	0	1	2	3
μ_j	9.997	2.015	7.327	1.001
$ au_j$	-	0.100	3.621	25.190

Tabelle 3.17: Rekonstruierte Parameter des 1. Versuchs für eine Verschiebungs
rate $\dot{\varepsilon}_u = 1$ mm/s durch den Bayes-Algorithmus mit zusätzlichem Strafterm (3.8) und
 $\alpha = 100$

In Tabelle 3.17 können wir das Ergebnis zu diesem Versuch sehen. Wir können eine erhebliche Verbesserung gegenüber den Ergebnissen aus den Tabellen 3.9 und 3.16 sehen. Alle drei Maxwell-Elemente werden rekonstruiert und auch das dritte Maxwell-Element wird durch diesen neuen Strafterm nicht mehr negativ beeinflusst. Das erste Maxwell-Element zeigt immer noch eine gewisse Fehleranfälligkeit, auch wenn die Rekonstruktion bereits eine erhebliche Verbesserung darstellt.

Es lässt sich abschließend sagen, dass die Empfehlung eine höhere Verschiebungsrate wie $\dot{\varepsilon}_u = 10 \text{ mm/s}$ zu verwenden auch bei einem zusätzlichen Strafterm gilt. Der Bayes-Algorithmus ist auch ohne diese zusätzlichen Strafterme in Bezug auf die Materialparameter ein stabiles Lösungsverfahren. Während der Cluster-Algorithmus sehr fehleranfällig gegenüber verrauschten Daten ist, hat der Bayes-Algorithmus einen klaren Vorteil bei der Rekonstruktion der Parameter. Durch die statistische Inversionstheorie haben wir einen Prior konstruiert, der uns einen auf das Problem zugeschnittenen Strafterm liefert. Dadurch benötigt der Bayes-Algorithmus auch keine zusätzliche Bedingung an die Relaxationszeiten und wir können I flexibel wählen. Durch die Erfolgswahrscheinlichkeit q ist ein Parameter gegeben, der es ermöglicht die Rekonstruktion entsprechend den Vorinformationen auf verschiedenen Strukturen anzupassen. Dabei ist es im Allgemeinen ratsam einen kleinen Wert zu wählen, um so eine geringe Anzahl an Maxwell-Elementen bevorzugt zu behandeln. Auch eine höhere Anzahl kann somit bestimmt werden, wenn es die Daten vorgeben.

Fazit und Ausblick

In dieser Arbeit haben wir das inverse Problem der Identifizierung von Materialparametern in einer viskoelastischen Struktur betrachtet. Wir haben eine Einführung in die Rheologie und das verallgemeinerte Maxwell-Modell zur Beschreibung viskoelastischer Materialien gegeben. Eine große Herausforderung stellt die Tatsache dar, dass die Anzahl der Maxwell-Elemente im verallgemeinerten Maxwell-Modell und daher auch die Anzahl der Materialparameter nicht bekannt sind. Dies mussten wir als Teil des inversen Problems bestimmen. Daher haben wir den Vorwärtsoperator entsprechend auf einem kartesischen Produkt aus der Halbgruppe der natürlichen Zahlen N und dem Hilbertraum $\ell^2(\mathbb{N})$ konstruiert, um dieser Anforderung gerecht zu werden. Dieses ungewöhnliche Setting haben wir mithilfe der statistischen Inversionstheorie gelöst und damit ein Bayes-Verfahren hergeleitet, welches alternierend nach einer Lösung für die Anzahl der Maxwell-Elemente und die Materialparameter sucht. Diese Vorgehensweise entspricht der Minimierung eines Tikhonov-Funktionals mit einem speziellen Strafterm für die Anzahl der Maxwell-Elemente, welcher in Form des Priors aus dem Bayes-Theorem hervorgeht. Dadurch konnten wir die bekannte Theorie zur Minimierung von Tikhonov-Funktionalen nutzen, um diese auf die komplexe Konstellation des inversen Problems anzupassen. Das heißt, wir haben im ersten Schritt die lokale Schlechtgestelltheit und die Regularisierung neu definiert, sodass sich diese für den Vorwärtsoperator auf dem kartesischen Produkt $\mathbb{N} \times \ell^2(\mathbb{N})$ eignet. Danach konnten wir die lokale Schlechtgestelltheit, sowie die Existenz, Stabilität und Konvergenz einer regularisierten Lösung des Bayes-Verfahrens beweisen. Im Anschluss haben wir das neu entwickelte Verfahren an verschiedenen Datensätzen getestet und die hohe Qualität der Ergebnisse bestätigt.

Für zukünftige Forschung wäre der nächste Schritt, den Bayes-Algorithmus anhand von realen Messdaten zu testen. Eine Analyse verschiedener abgeschnittener Datensätze könnte interessante Schlussfolgerungen für die praktische Anwendung bringen. Dies ist motiviert durch die lange Dauer typischer Relaxationsexperimente bis die Grundelastizität mit herkömmlichen Auswerteverfahren bestimmt werden kann. Ebenso wäre es denkbar anstatt Relaxationsversuche auch zyklische Versuche zur Bestimmung der Materialparameter zu nutzen. Alternativ käme auch die DMA, also die dynamisch-mechanische Analyse in Frage. In beiden Fällen müsste die Spannungskurve neu berechnet werden, da die Lösung der Evolutionsgleichung zur Bestimmung der inelastischen Dehnungen der einzelnen Maxwell-Elemente die Dehnungskurve eines Relaxationsversuchs einbezieht.

Des Weiteren käme auch eine komplexere Modellierung in Frage, indem man anstelle von konstanten Relaxationszeiten nichtlineare Relaxationszeitfunktionen betrachtet, die abhängig von der Dehnung oder der Dehnrate sind.

Aus mathematischer Sicht wäre es denkbar, die Theorie auf eine allgemeine Form zu übertragen, sodass der Vorwärtsoperator auf den Räumen $\mathbb{N} \times X$ arbeitet, wobei X einen beliebigen Hilbertraum oder einen Banachraum beschreibt. Dadurch könnte man eine Vielzahl von Problemen mit der in dieser Arbeit vorgestellten Theorie abdecken.

Literatur

- B. Babaei u. a. "Efficient and optimized identification of generalized Maxwell viscoelastic relaxation spectra". In: *Journal of the mechanical behavior of biomedical materials* 55 (2016), S. 32–41.
- M. Baurngaertel u.a. "The relaxation time spectrum of nearly monodisperse polybutadiene melts". In: *Rheologica Acta* 31 (1 1992). ISSN: 00354511. DOI: 10.1007/ BF00396469.
- [3] G. C. Berry und T.G. Fox. *The viscosity of polymers and their concentrated solutions*. 2006. DOI: 10.1007/bfb0050985.
- [4] F. Binder, F. Schöpfer und T. Schuster. "Defect localization in fibre-reinforced composites by computing external volume forces from surface sensor measurements". In: *Inverse Problems* 31 (2 2015). ISSN: 13616420. DOI: 10.1088/0266-5611/31/2/025006.
- [5] A. Bonfanti u. a. Fractional viscoelastic models for power-law materials. 2020. DOI: 10. 1039/d0sm00354a.
- [6] Z. Chen u. a. "Macroindentation of a soft polymer: Identification of hyperelasticity and validation by uni/biaxial tensile tests". In: *Mechanics of Materials* 64 (2013). ISSN: 01676636. DOI: 10.1016/j.mechmat.2013.05.003.
- T. F. Coleman und Y. Li. "An interior trust region approach for nonlinear minimization subject to bounds". In: SIAM Journal on Optimization 6 (2 1996). ISSN: 10526234. DOI: 10.1137/0806023.
- [8] T. F. Coleman und Y. Li. "On the convergence of interior-reflective Newton methods for nonlinear minimization subject to bounds". In: *Mathematical Programming* 67 (1-3 1994). ISSN: 00255610. DOI: 10.1007/BF01582221.
- D. L. Colton und R. Kress. Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory. Bd. 93. Springer, 1998.
- [10] A. Corker u. a. "3D printing with 2D colloids: Designing rheology protocols to predict 'printability' of soft-materials". In: Soft Matter 15.6 (2019), S. 1444–1456.
- [11] L. R. Croft, P. W. Goodwill und S. M. Conolly. "Relaxation in X-space magnetic particle imaging". In: *IEEE Transactions on Medical Imaging* 31 (12 2012). ISSN: 02780062.
 DOI: 10.1109/TMI.2012.2217979.
- M. Dashti und A. M. Stuart. The bayesian approach to inverse problems. 2017. DOI: 10.1007/978-3-319-12385-1_7.

- S. Diebels u. a. "Identifying Elastic and Viscoelastic Material Parameters by Means of a Tikhonov Regularization". In: *Mathematical Problems in Engineering* 2018 (2018). ISSN: 15635147. DOI: 10.1155/2018/1895208.
- [14] I. Emri und N. W. Tschoegl. "An iterative computer algorithm for generating line spectra from linear viscoelastic response functions". In: International Journal of Polymeric Materials and Polymeric Biomaterials 40 (1-2 1998). ISSN: 03678369. DOI: 10.1080/ 00914039808050143.
- [15] H. W. Engl, M. Hanke und A. Neubauer. *Regularization of Inverse Problems*. 1996.
 DOI: 10.1007/978-94-009-1740-8.
- H. W. Engl, K. Kunisch und A. Neubauer. "Convergence rates for Tikhonov regularisation of non-linear ill-posed problems". In: *Inverse Problems* 5.4 (1989). ISSN: 02665611.
 DOI: 10.1088/0266-5611/5/4/007.
- M. Fernanda, P. Costa und C. Ribeiro. "Parameter estimation of viscoelastic materials: A test case with different optimization strategies". In: Bd. 1389. 2011. DOI: 10.1063/ 1.3636846.
- [18] J. Flemming. Generalized Tikhonov regularization and modern convergence rate theory in Banach spaces. Shaker-Verlag, 2012.
- [19] A. Gavrus, E. Massoni und J. L. Chenot. "An inverse analysis using a finite element model for identification of rheological parameters". In: *Journal of Materials Processing Technology* 60 (1-4 1996). ISSN: 09240136. DOI: 10.1016/0924-0136(96)02369-2.
- [20] F. Goldschmidt und S. Diebels. "Modeling the moisture and temperature dependent material behavior of adhesive bonds". In: *PAMM* 15 (1 2015). DOI: 10.1002/pamm. 201510138.
- [21] F. Goldschmidt und S. Diebels. "Modelling and numerical investigations of the mechanical behavior of polyurethane under the influence of moisture". In: Archive of Applied Mechanics 85 (8 2015). ISSN: 14320681. DOI: 10.1007/s00419-014-0943-x.
- [22] M. Hanke, A. Neubauer und O. Scherzer. "A convergence analysis of the Landweber iteration fornonlinear ill-posed problems". In: *Numerische Mathematik* 72.1 (1995). ISSN: 09453245. DOI: 10.1007/s002110050158.
- S. Hartmann. "Numerical studies on the identification of the material parameters of Rivlin's hyperelasticity using tension-torsion tests". In: Acta Mechanica 148 (1-4 2001). ISSN: 00015970. DOI: 10.1007/BF01183674.
- [24] S. Hartmann. "Parameter estimation of hyperelasticity relations of generalized polynomialtype with constraint conditions". In: International Journal of Solids and Structures 38 (44-45 2001). ISSN: 00207683. DOI: 10.1016/S0020-7683(01)00018-X.
- [25] S. Hartmann und P. Neff. "Polyconvexity of generalized polynomial-type hyperelastic strain energy functions for near-incompressibility". In: International Journal of Solids and Structures 40 (11 2003). ISSN: 00207683. DOI: 10.1016/S0020-7683(03)00086-6.

- [26] N. Hata, A.V. Tobolsky und A. Bondi. "Effect of plasticizers on the viscoelastic properties of poly (vinyl chloride)". In: *Journal of Applied Polymer Science* 12.12 (1968), S. 2597–2613.
- [27] S. Heinze u. a. Experimental and numerical investigation of single pores for identification of effective metal foams properties. 2018. DOI: 10.1002/zamm.201700045.
- [28] B. Hofmann. "Ill-posedness and local ill-posedness concepts in hilbert spaces". In: Optimization 48.2 (2000). ISSN: 02331934. DOI: 10.1080/02331930008844503.
- [29] B. Hofmann und O. Scherzer. "Factors influencing the ill-posedness of nonlinear problems". In: *Inverse Problems* 10.6 (1994). ISSN: 02665611. DOI: 10.1088/0266-5611/ 10/6/007.
- [30] B. Hofmann und O. Scherzer. "Local ill-posedness and source conditions of operator equations in Hilbert spaces". In: *Inverse Problems* 14.5 (1998). ISSN: 02665611. DOI: 10.1088/0266-5611/14/5/007.
- B. Hofmann u. a. "A convergence rates result for Tikhonov regularization in Banach spaces with non-smooth operators". In: *Inverse Problems* 23.3 (2007). ISSN: 02665611.
 DOI: 10.1088/0266-5611/23/3/009.
- [32] K. Ito und B. Jin. Inverse problems: Tikhonov theory and algorithms. Bd. 22. 2015.
- [33] D. Jalocha. "Payne effect: A Constitutive model based on a dynamic strain amplitude dependent spectrum of relaxation time". In: *Mechanics of Materials* 148 (2020). ISSN: 01676636. DOI: 10.1016/j.mechmat.2020.103526.
- [34] M. Johlitz und A. Lion. "Chemo-thermomechanical ageing of elastomers based on multiphase continuum mechanics". In: *Continuum Mechanics and Thermodynamics* 25 (5 2013). ISSN: 09351175. DOI: 10.1007/s00161-012-0255-8.
- [35] M. Johlitz u. a. "Experimental and theoretical investigation of nonlinear viscoelastic polyurethane systems". In: Bd. 42. 2007. DOI: 10.1007/s10853-006-1479-4.
- [36] J. P. Kaipio und E. Somersalo. Statistical and computational inverse problems. Bd. 160. 2005. DOI: 10.1007/b138659.
- [37] B. Kaltenbacher. "Some Newton-type methods for the regularization of nonlinear ill-posed problems". In: *Inverse Problems* 13.3 (1997). ISSN: 02665611. DOI: 10.1088/0266-5611/13/3/012.
- [38] B. Kaltenbacher, A. Neubauer und O. Scherzer. Iterative Regularization Methods for Nonlinear Ill-Posed Problems. 2008. DOI: 10.1515/9783110208276.
- [39] B. Kaltenbacher, F. Schöpfer und T. Schuster. "Iterative methods for nonlinear ill-posed problems in Banach spaces: Convergence and applications to parameter identification problems". In: *Inverse Problems* 25.6 (2009). ISSN: 02665611. DOI: 10.1088/0266-5611/25/6/065003.
- [40] A. Kirsch. An introduction to the mathematical theory of inverse problems. Bd. 120. 2011.

- [41] R. Klein, T. Schuster und A. Wald. Sequential Subspace Optimization for Recovering Stored Energy Functions in Hyperelastic Materials from Time-Dependent Data. 2021.
 DOI: 10.1007/978-3-030-57784-1_6.
- [42] A. Lazaridou u. a. "Effects of hydrocolloids on dough rheology and bread quality parameters in gluten-free formulations". In: *Journal of food engineering* 79.3 (2007), S. 1033– 1047.
- [43] A. K Louis. Inverse und schlecht gestellte Probleme. 1989. DOI: 10.1007/978-3-322-84808-6.
- [44] A. K. Louis. "Approximate inverse for linear and some nonlinear problems". In: *Inverse Problems* 11.6 (1995). ISSN: 02665611. DOI: 10.1088/0266-5611/11/6/006.
- [45] M. E. Mackay. "The importance of rheological behavior in the additive manufacturing technique material extrusion". In: *Journal of Rheology* 62.6 (2018), S. 1549–1561.
- [46] R. Mahnken und E. Stein. "A unified approach for parameter identification of inelastic material models in the frame of the finite element method". In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 136 (3-4 1996). ISSN: 00457825. DOI: 10.1016/ 0045-7825(96)00991-7.
- [47] Mathworks. MATLAB Mathworks MATLAB & Simulink. 2016.
- [48] R. E. Megginson. An introduction to Banach space theory. Bd. 183. 1998.
- [49] H. Meinhard. "Rheologische Untersuchungen zu Härteeindruckexperimenten im Nanometerbereich". In: Diss., Halle-Wittenberg: Martin-Luther Universität (1999).
- [50] V. A. Morozov. Methods for Solving Incorrectly Posed Problems. 1984. DOI: 10.1007/ 978-1-4612-5280-1.
- [51] A. Neubauer. "Tikhonov Regularization of Nonlinear III-Posed Problems in Hilbert Scales". In: Applicable Analysis 46.1-2 (1992). ISSN: 1563504X. DOI: 10.1080/00036819208840111.
- [52] M. Pahl u. a. Praktische Rheologie der Kunststoffe und Elastomere. VDI-Verlag Düsseldorf, 1991.
- [53] S.W. Park und R.A. Schapery. "Methods of interconversion between linear viscoelastic material functions. Part I-a numerical method based on Prony series". In: International Journal of Solids and Structures 36 (11 1999).
- [54] S. W. Provencher. "CONTIN: A general purpose constrained regularization program for inverting noisy linear algebraic and integral equations". In: *Computer Physics Communications* 27 (3 1982). ISSN: 00104655. DOI: 10.1016/0010-4655(82)90174-6.
- [55] S. Reese und S. Govindjee. "A theory of finite viscoelasticity and numerical aspects". In: International Journal of Solids and Structures 35 (26-27 1998). ISSN: 00207683. DOI: 10.1016/s0020-7683(97)00217-5.
- [56] S. Reese und S. Govindjee. "A theory of finite viscoelasticity and numerical aspects". In: International Journal of Solids and Structures 35 (26-27 1998). ISSN: 00207683. DOI: 10.1016/s0020-7683(97)00217-5.

- [57] A. Rieder. Keine Probleme mit Inversen Problemen. 2003. DOI: 10.1007/978-3-322-80234-7.
- [58] D. Rothermel und T. Schuster. "Solving an inverse heat convection problem with an implicit forward operator by using a projected quasi-Newton method". In: *Inverse Problems* 37 (4 2021). ISSN: 13616420. DOI: 10.1088/1361-6420/abe4a8.
- [59] D. Rothermel u. a. "Parameter estimation of temperature dependent material parameters in the cooling process of TMCP steel plates". In: *Hindawi, Mathematical Problems* in Engineering (2021). DOI: 10.1155/2021/6653388.
- [60] R. Rothermel u. a. "A method for determining the parameters in a rheological model for viscoelastic materials by minimizing Tikhonov functionals". In: Applied Mathematics in Science and Engineering 30 (1 2022). DOI: 10.1080/17415977.2022.2026943.
- [61] E. van Ruymbeke u. a. "Decoding the viscoelastic response of polydisperse star/linear polymer blends". In: *Journal of Rheology* 54.3 (2010), S. 507–538.
- [62] T. Scheffer, H. Seibert und S. Diebels. "Optimisation of a pretreatment method to reach the basic elasticity of filled rubber materials". In: Archive of Applied Mechanics 83 (11 2013). ISSN: 09391533. DOI: 10.1007/s00419-013-0771-4.
- [63] O. Scherzer. "The use of Morozov's discrepancy principle for Tikhonov regularization for solving nonlinear ill-posed problems". In: *Computing* 51.1 (1993). ISSN: 0010485X. DOI: 10.1007/BF02243828.
- [64] T. Schuster u. a. Regularization methods in Banach spaces. 2012. DOI: 10.1515/9783110255720.
- [65] T. I. Seidman und C. R. Vogel. "Well posedness and convergence of some regularisation methods for non-linear ill posed problems". In: *Inverse Problems* 5.2 (1989). ISSN: 02665611. DOI: 10.1088/0266-5611/5/2/008.
- [66] J. Seydel und T. Schuster. "Identifying the stored energy of a hyperelastic structure by using an attenuated Landweber method". In: *Inverse Problems* 33 (12 2017). ISSN: 13616420. DOI: 10.1088/1361-6420/aa8d91.
- [67] J. Seydel und T. Schuster. "On the linearization of identifying the stored energy function of a hyperelastic material from full knowledge of the displacement field". In: *Mathematical Methods in the Applied Sciences* 40 (1 2017). ISSN: 10991476. DOI: 10.1002/mma. 3979.
- [68] P. Sharma u.a. "Moisture transport in PA6 and its influence on the mechanical properties". In: Continuum Mechanics and Thermodynamics 32 (2 2020). ISSN: 14320959.
 DOI: 10.1007/s00161-019-00815-w.
- [69] K. Shukla, J. Chan und M. V. de Hoop. "A high order discontinuous Galerkin method for the symmetric form of the anisotropic viscoelastic wave equation[Formula presented]". In: Computers and Mathematics with Applications 99 (2021). ISSN: 08981221. DOI: 10.1016/j.camwa.2021.08.003.
- [70] R. I. Tanner, F. Qi und S.-C. Dai. "Bread dough rheology and recoil: I. Rheology". In: Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics 148.1-3 (2008), S. 33–40.

- [71] N. W. Tschoegl. The Phenomenological Theory of Linear Viscoelastic Behavior. 1989.
 DOI: 10.1007/978-3-642-73602-5.
- [72] A. Wald. "A fast subspace optimization method for nonlinear inverse problems in Banach spaces with an application in parameter identification". In: *Inverse Problems* 34 (8 2018). ISSN: 13616420. DOI: 10.1088/1361-6420/aac8f3.
- [73] A. Wald und T. Schuster. "Sequential subspace optimization for nonlinear inverse problems". In: Journal of Inverse and Ill-Posed Problems 25 (1 2017). ISSN: 09280219. DOI: 10.1515/jiip-2016-0014.
- [74] A. Wald und T. Schuster. "Tomographic Terahertz Imaging Using Sequential Subspace Optimization". In: 2018. DOI: 10.1007/978-3-319-70824-9_14.
- [75] H. Weinert. "Cigler, J./Reichel, H.-C., Topologie. Eine Grundvorlesung. B. I. Hochschultaschenbücher Band 121. Mannheim-Wien-Zürich, B. I.-Wissenschaftsverlag 1978.
 XIII, 244 S., ISBN 3-411-00 121-6". In: ZAMM - Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik 60 (2 1980). ISSN: 00442267. DOI: 10.1002/zamm.19800600234.
- [76] A. S. Wineman und K. R. Rajagopal. *Mechanical Response of Polymers*. 2000.
- [77] A. Wöstehoff und T. Schuster. "Uniqueness and stability result for Cauchy's equation of motion for a certain class of hyperelastic materials". In: *Applicable Analysis* 94 (8 2015). ISSN: 1563504X. DOI: 10.1080/00036811.2014.940519.