Ein inverses Problem für die degeneriert parabolische Richardsgleichung

Dissertation zur Erlangung des Grades "Doktor der Naturwissenschaften"

am Fachbereich Mathematik und Informatik der Johannes Gutenberg-Universität in Mainz

Maren Geisel

geboren in Kaiserslautern

Mainz, 2003

Datum der mündlichen Prüfung: 3. April 2003

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung	1			
2	Physikalische und mathematische Modellierung 7					
	2.1	Das physikalische Modell	7			
		2.1.1 Poröse Medien	$\overline{7}$			
		2.1.2 Phasenanteile	8			
		2.1.3 Energiedichte des Wassers	9			
		2.1.4 Wasserfluß	11			
		2.1.5 Dynamik des Wasserflusses	11			
		2.1.6 Hydraulische Funktionen	13			
	2.2	Das mathematische Modell	15			
3	Das horizontale Eließexperiment					
	3.1	Das Vorwärtsproblem	19			
	3.2	Das inverse Problem	24			
4	Das vertikale Eließevneriment					
•	4 1 Das Vorwärtsproblem					
		4.1.1 Lösungstheorie zu (4.1)	26			
		4.1.2 Ein freies Anfangsrandwertproblem	37			
		4.1.3 Transformation auf ein Rechteckgebiet	39			
	4.2	Bestimmung der Diffusivität a	42			
		4.2.1 Das inverse Problem	43			
		4.2.2 Die Ableitung $F'(a)$	46			
		4.2.3 Die Adjungierte $F'(a)^*$	60			
	4.3	Weitere inverse Probleme	64			
		4.3.1 Bestimmung von b	64			
		4.3.2 Bestimmung von Ψ'_M	65			
		4.3.3 Bestimmung von K^{n}	66			
5	Nun	nerisches Rekonstruktionsverfahren	67			
	5.1 Numerische Auswertung von F					

	5.1.1	Numerische Lösung von (4.1)	67
	5.1.2	Numerische Lösung von (4.26)	68
	5.1.3	Vergleich der verschiedenen Methoden	73
5.2	Auswe	ertung der Richtungsableitung $F'(a)$	78
5.3	Iterati	ive Regularisierungsverfahren	83
5.4	Rekon	struktionsergebnisse	86

Literatur

101

1 Einleitung

In den unterschiedlichsten Anwendungsbereichen kommen heutzutage Vliesstoffe zum Einsatz: Sie dienen zum Beispiel als isolierende Materialien in Elektromotoren, als Filter in Atemschutzmasken und Staubsaugern oder auch als saugfähiges Material für Wundverbände und Babywindeln. Ein Vlies besteht aus aufeinander geschichteten Fasern, die nicht miteinander verwebt sind, sondern nach Durchlaufen von "Verfilzungs-" oder Verschmelzungsprozessen so stark aneinander haften, daß sie ein zusammenhängendes Textilgebilde ergeben. Durch diese Prozesse lassen sich unter anderem Vliese herstellen, die sehr gute hydraulische Fähigkeiten besitzen, d. h. sie sind in der Lage, schnell große Mengen an Flüssigkeit aufzunehmen, diese weiterzutransportieren oder zu speichern. Um die Produkte hinsichtlich dieser hydraulischen Eigenschaften optimieren zu können, sind genaue Kenntnisse über die stattfindenden physikalischen Prozesse in den vorliegenden Vliesstoffen erforderlich. Sie unterliegen in der Regel auch bekannten physikalischen Gesetzen, es fehlen jedoch häufig Informationen über bestimmte physikalische Parameter des Materials wie z. B. die hydraulische Leitfähigkeitsverteilung oder die Porosität. Deshalb mißt man während spezieller Experimente an Materialproben den Verlauf ausgewählter physikalischer Größen, mit dem Ziel, aus diesen Meßdaten mittels mathematischer Verfahren wie z. B. Output-Least-Squares-Methoden die unbekannten Parameter zu identifizieren. Dies ist auch Gegenstand der vorliegenden Arbeit; wir konzentrieren uns hierbei auf zwei spezielle Experimente, die am Fraunhofer Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik (ITWM) in Kaiserslautern im Zusammenhang mit einem Projekt zur Entwicklung waschbarer Windeln aus mehreren Vliesschichten durchgeführt wurden. Das vorliegende Bildmaterial über die Experimente wurde uns freundlicherweise zur Verfügung gestellt.

Im sogenannten vertikalen Fließexperiment wird das obere Ende einer trockenen Materialprobe des Windelvlies an einer Halterung über einem Behälter mit gefärbtem Wasser befestigt und anschließend die Halterung so weit abgesenkt, daß das untere Ende des Vlies gerade mit dem Wasser in Berührung tritt. Das trockene Material saugt nun langsam gegen die Gewichtskraft Wasser aus dem Behälter auf, was wir durch einen sich nach oben ausbreitenden gefärbten (unteren) Bereich erkennen können. Zu jedem Zeitpunkt wird der feuchte untere Bereich nach oben hin scharf von einem hellen Bereich getrennt; es läßt sich eine aufsteigende Trennlinie, die sogenannte Wasserfront, beobachten, vgl. hierzu Abbildung 1.1. Hier werden gleichzeitig zwei verschiedene Materialien verwendet, die nebeneinander in der Halterung hängen.



Abbildung 1.1: Das vertikale Fließexperiment

Das Ansteigen der Wasserfront, von der wir annehmen, daß sie den trockenen vom feuchten Bereich abgrenzt, ist zu Beginn des Experimentes sehr schnell, nimmt im Verlauf jedoch immer mehr ab. Mit fortgeschrittener Zeit wird die Trennlinie langsam unschärfer, was durch fortschreitende Verdunstung verursacht wird. In Abbildung 1.1 werden zwei Materialproben verwendet, deren unterschiedliche hydraulische Eigenschaften ein völlig unterschiedliches Ansteigen der Wasserfront verursachen. Im Verlaufe des Experimentes, so lange die Trennlinie scharf ist, halten wir die Wasserfront als Beobachtung fest, indem wir ihre Höhe über dem Wasserbehälter messen. Diese Meßdaten sollen nun dazu dienen, bestimmte hydraulische Eigenschaften des vorliegenden Materials zu identifizieren.

Beim zweiten Experiment, dem horizontalen Fließexperiment, wird die Materialprobe nun horizontal in einer Halterung befestigt, vgl. Abbildung 1.2. Links an der Halterung wird das Vlies dauerhaft mit Wasser in Berührung gebracht. Im Gegensatz zum ersten Experiment findet hier ein Wasserfluß in horizontaler Richtung statt, d. h. senkrecht zur Gewichtskraft, und die Wasserfront wandert nach rechts. Auch hier bestehen die Meßdaten aus den Abständen der Wasserfront zu der Wasseroberfläche im Behälter.

Zur Modellierung des Wasserflusses in den Vliesstoffen verwenden wir wie in [39] vorgeschlagen das physikalische Modell von ungesättigtem Wasserfluß in porösen Medien und erhalten als mathematisches Modell für die beiden



Abbildung 1.2: Das horizontale Fließexperiment

Fließexperimente ein Cauchy-Dirichlet-Problem für die Richardsgleichung in der Sättigungsformulierung

$$u_t = \left(K(u) \Psi_M(u)_z \right)_z + \left(K(u) \right)_z.$$

Diese Differentialgleichung für die Sättigung u ist aufgrund der Eigenschaft K(0) = 0 degeneriert parabolisch, und somit läßt sich die Wasserfront durch den sich bildenden freien Rand des Problems modellieren. Die nichtlinearen Koeffizienten der Differentialgleichung sind die unbekannten hydraulischen Parameter: die hydraulische Leitfähigkeitsverteilung K und die Wassercharakteristik Ψ_M . Das sogenannte *inverse Problem*, das wir in dieser Arbeit lösen wollen, besteht aus der Identifizierung einer dieser Koeffizienten oder des Produktes $K\Psi'_M$ aus der gemessenen Wasserfront, d. h. dem bekannten freien Rand. Im Gegensatz hierzu wird das Bestimmen des freien Randes aus dem Cauchy-Dirichlet-Problem für bekannte Koeffizienten als *direktes Problem* bezeichnet.

Bezüglich der Identifizierung der hydraulischen Parameter der Richardsgleichung gibt es eine Vielzahl an Arbeiten, hauptsächlich aus dem Bereich der geophysikalischen Wissenschaften, da z. B. die Versickerung von Wasser in den Boden ebenfalls mit der Richardsgleichung modelliert wird. Hier wird die Gleichung jedoch meistens in der sogenannten Druckformulierung verwendet, in der der Druck als Unbekannte der Differentialgleichung auftritt, wodurch die parabolische Gleichung in der Regel nicht mehr degeneriert. Ein hierbei häufig verwendetes Experiment für die Parameter-Identifikation besteht darin, aus einer vollgesättigten Bodensäule kontrolliert Wasser abfließen zu lassen und währenddessen z. B. die Geschwindigkeit oder Menge des ausfließenden Wassers zu messen. Dieses Experiment läßt sich durch ein Anfangsrandwertproblem für die Richardsgleichung beschreiben, und die Meßdaten entsprechen zusätzlichen Dirichlet- oder Neumannrandwerten. Aus diesem überbestimmten Problem werden die gesuchten physikalischen Parameter mit Hilfe von Output-Least-Squares-Methoden bestimmt. Die hydraulischen Koeffizienten werden hierbei häufig als parametrisierte Modellfunktionen angesetzt [12], [13].

In [4], [5], [11] wird das inverse Problem zur simultanen Rekonstruktion der beiden nichtlinearen Koeffizienten der Richardsgleichung in der Druckformulierung aus der simultanen Beobachtung von zwei verschiedenen Meßgrößen an den Enden der Bodensäule untersucht. DuChateau beweist in [11] unter anderem die Eindeutigkeit der Lösung dieses inversen Problems innerhalb einer gewissen Funktionenklasse. Für die numerische Rekonstruktion der Koeffizienten diskretisieren die Autoren von [4], [5] das direkte Problem durch ein numerisches Verfahren und definieren anschließend ein diskretes Output-Least-Squares-Funktional. Dieses Funktional wird mit einem Multi-Level-Algorithmus bezüglich einer Parametrisierung durch quadratische B-Splines minimiert. Diese Methode wurde bereits in [25] zur Identifizierung der nichtlinearen Sorptionsisotherme im Zusammenhang mit reaktivem Schadstofftransport angewendet.

In [33] behandelt Nabokov ein inverses Problem für die degeneriert parabolische Differentialgleichung

$$u_t = (a(u)u_z)_z$$
 in $(0,L) \times (0,T]$

mit Dirichlet-Randwerten. Aus Messungen der Funktion $u(x_0, t)$ für ein festes x_0 aus dem Intervall (0, L) soll der nichtlineare Diffusionskoeffizient aüber die Minimierung eines L^2 -Fehler-Funktionals rekonstruiert werden. Hierzu beweist der Autor die Fréchet-Differenzierbarkeit der Lösung u nach dem Koeffizienten a und leitet ein linear degeneriert parabolisches Anfangsrandwertproblem her, mit dessen Hilfe sich die Ableitung auswerten läßt. Ebenso wird die Adjungierte der Ableitung auf ein lineares Anfangsrandwertproblem zurückgeführt. Für die Minimierung des Fehlerfunktionals verwendet Nabokov die Konjugierte-Gradienten-Methode und rekonstruiert den Koeffizienten a basierend auf verschiedenen Parametrisierungen.

Den bisher in der Literatur behandelten, oben beschriebenen, inversen Problemen ist gemein, daß die unbekannten hydraulischen Parameter aus Werten der Lösung des zugrundeliegenden Anfangsrandwertproblems oder ihrer Ableitung identifiziert werden. Hingegen behandeln wir in der vorliegenden Arbeit die Identifizierung der gesuchten Parameter aus dem freien Rand des zugrundeliegenden Cauchy-Dirichlet-Problems, d. h. aus der Gestalt des Trägers der Lösung. Für das direkte Problem des horizontalen Fließexperiments, das sich durch ein Cauchy-Dirichlet-Problem für die oben vorgestellte Differentialgleichung aus [33] beschreiben läßt, zeigen wir, daß der freie Rand dieses Problems eine Wurzelfunktion ist und somit zu wenig Information für eine sinnvolle Rekonstruktion des Koeffizienten a enthält. Für das zum vertikalen Fließexperiment gehörende Cauchy-Dirichlet-Problem mit der Richardsgleichung, das inkompatible Anfangs- und Randwerte besitzt, beweisen wir eine Lösungstheorie, basierend auf dem schwachen Lösungsbegriff und den Beweistechniken aus [16] für Probleme mit kompatiblen Anfangs- und Randwerten. Unser Ansatz für das inverse Problem lehnt sich an die Vorgehensweise in [33] an. Wir formulieren das direkte Problem über einen nichtlinearen Operator F, der den Koeffizienten $a = K \Psi'_M$ auf den freien Rand abbildet, und stellen hiermit für das inverse Problem ein zu minimierendes L^2 -Fehler-Funktional auf. Zur Minimierung verwenden wir iterative Regularisierungsmethoden und leiten hierfür formal wie in [33] jeweils ein linear degeneriert parabolisches Randwertproblem für die Ableitung von F und für deren adjungierten Operator her. Hierbei haben wir zunächst die Gâteaux-Differenzierbarkeit von F vorausgesetzt, unsere anschließenden Überlegungen lassen jedoch vermuten, daß die formal berechnete Ableitung ein unbeschränkter Operator ist. Als numerisches Rekonstruktionsverfahren verwenden wir das Levenberg-Marquardt-Verfahren und die iterativ regularisierende Gauß-Newton-Methode (IRGN) basierend auf einer Parametrisierung der Koeffizienten durch quadratische B-Splines und der diesbezüglich diskretisierten Ableitung F' sowie deren Adjungierten.

Diese Arbeit ist folgendermaßen gegliedert: Im zweiten Kapitel erläutern wir das physikalische Modell des ungesättigten Wasserflusses in porösen Medien und leiten das die Experimente beschreibende mathematische Modell her. Gegenstand des dritten Kapitels ist das direkte und inverse Problem des horizontalen Experimentes. Das vierte Kapitel widmet sich den inversen Problemen für das vertikale Fließexperiment, wobei der Schwerpunkt auf der Bestimmung der hydraulischen Diffusivität $a = K\Psi'_M$ liegt. Zunächst beweisen wir Aussagen über die Lösbarkeit des direkten Problems und führen das Cauchy-Dirichlet-Problem in zwei alternative Anfangsrandwertprobleme über. Anschließend formulieren wir das direkte und inverse Problem mit Hilfe des nichtlinearen Operators F und stellen den Lösungsansatz über iterative Regularisierungsmethoden vor. Die hierfür benötigte Ableitung von F sowie ihr adjungierter Operator werden in den darauffolgenden Abschnitten untersucht. Am Ende dieses Kapitels geben wir eine kurze Zusammenfassung über analoge Ergebnisse für weitere inverse Probleme bezüglich des vertikalen Experimentes. Im abschließenden fünften Kapitel erläutern wir die numerische Umsetzung und Implementierung des vorgestellten Rekonstruktionsverfahrens und stellen Rekonstruktionsergebnisse vor.

1 Einleitung

2 Physikalische und mathematische Modellierung

In diesem Kapitel werden die physikalischen Vorgänge, die in den beiden bereits vorgestellten Fließexperimenten stattfinden, analysiert. Hierzu verwenden wir das Modell von ungesättigtem Wasserfluß in porösen Medien, das auf der Richardsgleichung basiert. Für diese Gleichung formulieren wir anschließend ein Cauchy-Dirichlet-Problem, durch das die Experimente mathematisch modelliert werden. Einführende Darstellungen des physikalischen Modells findet man unter anderem in [27], [37].

2.1 Das physikalische Modell

Wir konzentrieren uns zunächst auf die Situation des vertikalen Fließexperimentes. Die vorliegenden Vliesstoffe zeichnen sich dadurch aus, daß sie sehr leicht Wasser aufnehmen und weitertransportieren können. Diese Fähigkeiten variieren mit den verschiedenen Faserarten und ihren Durchmessern sowie der Dichte der Fasern. Allgemein gesprochen handelt es sich bei Vlies um ein poröses Material, und somit können wir unsere Experimente mit dem physikalischen Modell von ungesättigtem Wasserfluß in porösen Medien beschreiben, welches z. B. auch zur Simulation der Versickerung von Bodenwasser verwendet wird.

2.1.1 Poröse Medien

Das Vlies als poröses Medium besteht aus drei Phasen: dem Feststoffskelett, d. h. den Fasern des Vlies, sowie der Luft- und der Wasserphase, die beide zusammen die mit dem Begriff Porenraum bezeichneten Hohlräume ausfüllen. Wir gehen davon aus, daß der Porenraum zusammenhängend ist. Die Fasern seien starr, so daß sich die feste Phase zeitlich nicht verändert. Das Wasser bilde eine kontinuierliche Phase und sei als rein und inkompressibel vorausgesetzt. Weiterhin nehmen wir an, daß die Luft unbeschränkt beweglich ist und der Porenluftdruck gleich dem Atmosphärendruck ist. Zudem besitze die Luft



keinerlei Wechselwirkungen mit den anderen beiden Phasen, d. h. Vorgänge wie z. B. Verdunstung werden im folgenden nicht betrachtet.

Abbildung 2.1: Mikroskopischer Schnitt durch ein poröses Medium

Betrachtet man das Medium aus einer mikroskopischen Sicht (vgl. Abbildung 2.1), so handelt es sich bei dem Porenraum um ein äußerst kompliziertes und inhomogenes geometrisches Gebilde, das wir nicht genau beschreiben können. Zudem wollen wir bei der Modellierung der Wasserbewegung auch gar nicht auf Details wie z. B. die Geometrie der Wasserphase eingehen, sondern verwenden sogenannte effektive Größen wie den volumetrischen Wassergehalt, die das Verhalten eines hinreichend großen Volumens beschreiben. Diese makroskopischen Größen erhalten wir, indem wir an jedem Punkt innerhalb einer Materialprobe die mikroskopischen Größen über ein sogenanntes *repräsentatives Elementarvolumen (REV)* mitteln, welches immer aus Feststoff und Porenraum besteht ([26], [37]). Die Größe des REV ist sehr klein im Vergleich zum gesamten Volumen des vorhandenen Mediums, jedoch sehr groß, wenn wir es mit den einzelnen Fasern oder Poren vergleichen. Durch diese Mittelung erhält man aus den i. a. unstetigen mikroskopischen Größen stetige effektive Größen.

2.1.2 Phasenanteile

Um die Phasenanteile quantitativ zu beschreiben, führen wir im folgenden nun volumetrische hydraulische Größen ein. Hierzu wählen wir ein REV V_0 , das sich in unserem 3-Phasen Modell zusammensetzt aus den Volumina der Feststoffmatrix (V_M) , des Wassers (V_W) und der Luft (V_L) . Da der Porenraum vollständig mit Wasser und Luft gefüllt ist, ergibt sich der Anteil des Porenraums am Volumen V_0 , die *Porosität* ϕ , durch

$$\phi := \frac{V_W + V_L}{V_0}.$$

Der Anteil der Wasserphase läßt sich entsprechend definieren durch den volumetrischen Wassergehalt θ :

$$\theta := \frac{V_W}{V_0}.$$

Im folgenden verwenden wir statt θ jedoch die Größe

$$u := \frac{V_W}{V_W + V_L} = \frac{\theta}{\phi},$$

die mit Feuchte oder Sättigung bezeichnet wird. Sie gibt den Anteil der Wasserphase am Porenraum wider und nimmt demnach Werte aus [0, 1] an. Ist der Porenraum nicht vollständig mit Wasser gefüllt, so wird das Medium als ungesättigt bezeichnet. In der Realität erreicht der gesättigte Zustand aufgrund eingeschlossener Luft nicht den Wert u = 1, was wir jedoch hier nicht berücksichtigen wollen. Genauso vernachlässigen wir die Tatsache, daß sich auch im trockenen Zustand des Mediums ein dünner Wasserfilm auf der Matrix befindet, und beschreiben deshalb in unserem Modell den trockenen Zustand durch die Sättigung u = 0. Alle hier eingeführten Größen lassen sich in jedem Punkt einer Materialprobe definieren, indem jeweils zentriert um diesen Punkt ein Volumen V_0 betrachtet wird, und sind somit stetig vom Ort abhängig. Vereinfachend gehen wir von nun an davon aus, daß unser Vliesmaterial homogen porös ist, d. h. der Anteil des Porenraums ist im gesamten Material gleich groß und die Porosität ϕ somit konstant. Aus diesem Grund führen wir alle nun folgenden Größen, die eigentlich von θ abhängen, gleich als Funktionen von uein.

2.1.3 Energiedichte des Wassers

Die Wasserbewegung im Vlies wird angetrieben durch Energiegradienten, wobei wir von einer langsamen, isothermalen Bewegung ausgehen, so daß wir die kinetische Energie vernachlässigen können. Die Energie des Wassers läßt sich definieren als die Arbeit, die benötigt wird, um Wasser aus einem Referenzzustand in den gewünschten Zustand in die Vliesprobe zu bringen. Den Referenzzustand, dem die Energie Null zugeschrieben wird, definieren wir durch die Position bei z = 0 (außerhalb des Vlies) auf der in Abbildung 2.2 definierten, nach oben gerichteten z-Achse.



Abbildung 2.2: Definition des Referenzzustandes

Die Dichte der Gesamtenergie des Wassers bezeichnen wir mit Ψ_W . Da nur die Energiegradienten die Wasserbewegung verursachen, kann für die Energiedichte eine Bezugsgröße frei gewählt werden. Wir wählen hierfür die Gewichtskraft und erhalten eine Dichte der Einheit $\left[\frac{Nm}{N}\right] = [m]$. Die Gesamtenergiedichte ist die Summe aus dem Gravitationspotential Ψ_G und dem sogenannten Matrixpotential Ψ_M , wobei sich diese Teilpotentiale folgendermaßen ergeben:

Das Gravitationspotential Ψ_G von Wasser in der Höhe z ergibt sich aus der Lageenergie des Wassers geteilt durch seine Gewichtskraft zu:

$$\Psi_G = z.$$

Unter dem Matrixpotential verstehen wir die Energiedichte, die notwendig ist, um Wasser in die Poren des porösen Mediums zu bringen, d. h. in die Hohlräume der Feststoffmatrix. Dieses Teilpotential umfaßt alle Wechselwirkungen zwischen der Gestalt und Zusammensetzung des Feststoffes und den Eigenschaften des Wassers. In der feinen Porenstruktur des porösen Mediums ergeben diese Wechselwirkungen, daß sich Wasser innerhalb des porösen Mediums in einem Zustand niedrigerer Energie befindet als außerhalb. Aus diesem Grund wird das Wasser von den feinen ungesättigten Poren gewissermaßen aufgesaugt, vergleichbar mit dem Aufsteigen von Wasser in Kapillaren. Somit nimmt die Größe Ψ_M im ungesättigten Zustand negative Werte an.

Das Matrixpotential Ψ_M ist offensichtlich abhängig von der Geometrie der Wasserphase, die wir mit Hilfe der effektiven Größe u beschreiben. Diese Beziehung zwischen Wassergehalt und Energiedichte Ψ_M läßt sich durch eine Funktion $\Psi_M(u)$ beschreiben, die als Wassercharakteristik bezeichnet wird. Diese hydraulische Funktion ist charakteristisch für jedes poröse Material und in der Regel hysteretisch, d. h. dem Bewässerungs- und Entwässerungsverhalten eines porösen Mediums werden unterschiedliche Kurven zugeschrieben. In unserem Modell wollen wir die Hysterese vernachlässigen, da wir uns letztendlich nur mit Bewässerungsvorgängen beschäftigen. Auch die Energiedichte Ψ_M beziehen wir auf die Gewichtskraft des Wassers, und somit hat auch Ψ_M die Einheit [m]. Man bezeichnet Ψ_M in diesem Zusammenhang auch als *Druck- oder Steighöhe*. In Abschnitt 2.1.6 werden wir diese hydraulische Funktion noch genauer untersuchen.

Insgesamt ergibt sich die Energiedichte des Wassers also zu

$$\Psi_W = \Psi_M(u) + z. \tag{2.1}$$

2.1.4 Wasserfluß

Die Wasserbewegung in ungesättigten porösen Medien basiert auf dem verallgemeinerten Gesetz von *Darcy*, auch als *Buckingham-Darcy-Gesetz* bezeichnet, welches den Energiegradienten und die volumetrische Wasserflußdichte j_W in folgende Proportionalitätsbeziehung stellt:

$$j_W = -K(u)\frac{d}{dz}\Psi_W.$$
(2.2)

Die Flußdichte j_W gibt an, wieviel Volumen Wasser pro Querschnittsfläche und pro Zeiteinheit durch das Medium fließt und beschreibt somit die Geschwindigkeit des sich bewegenden Wassers. Die Größe K(u), hier mit der Einheit [m/s], wird als ungesättigte hydraulische Leitfähigkeit bezeichnet. Die Leitfähigkeit ist abhängig von Anzahl und Größe der Fließpfade sowie dem Fließwiderstand und ist somit auf der makroskopischen Skala eine Funktion der Feuchte u. Weitere Eigenschaften dieser zweiten hydraulischen Funktion erläutern wir in Abschnitt 2.1.6.

2.1.5 Dynamik des Wasserflusses

Da wir zeitlich variierenden Wasserfluß beschreiben wollen, gehen wir davon aus, daß die Feuchte u nicht nur eine ortsabhängige sondern auch zeitabhängige Funktion u = u(x, y, z, t) ist. Eine Formulierung für die Dynamik des Wasserflusses liefert uns das Gesetz der Massenerhaltung (ρ_W bezeichne hier die Massendichte des Wassers): Betrachtet man für ein sehr kleines Volumen die zeitliche Änderung der volumetrischen Dichte des Wassers $\frac{\partial}{\partial t}(\rho_W \phi u)$, so muß diese der räumlichen Änderung des Massenflusses $\frac{\partial}{\partial z}(\rho_W j_W)$, der Bilanz aus Zu- und Abfluß, plus Quellen oder Senken r_W entsprechen. Somit ergibt sich die Erhaltungsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_W \phi u) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho_W j_W) + r_W = 0.$$
(2.3)

11

Der Term r_W kann im folgenden vernachlässigt werden, da in unserer Vliesprobe weder Quellen noch Senken existieren. Da wir eine isothermale Bewegung betrachten, ist die Dichte ρ_W konstant, so daß wir sie aus (2.3) herausdividieren können. Nach Einsetzen von (2.2) und (2.1) ergibt sich (2.3) somit zu

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi u) = \frac{\partial}{\partial z} \Big(K(u) \frac{\partial}{\partial z} \big(\Psi_M(u) + z \big) \Big).$$
(2.4)

Gleichung (2.4) wird als *Richards-Gleichung* in Wassergehaltsform bezeichnet.

Da die Porosität ϕ ebenfalls konstant ist, dividieren wir sie aus (2.4) heraus, bezeichnen aber weiterhin die skalierte Funktion K/ϕ mit K. Ausdifferenzieren führt schließlich auf die Form

$$u_t = \left(K(u)\Psi'_M(u)u_z\right)_z + \left(K(u)\right)_z,\tag{2.5}$$

wobei wir für die partiellen Ableitungen Abkürzungen eingeführt haben. Führt man die hydraulische Diffusivität $D(\nu) := K(\nu)\Psi'_M(\nu)$ als weitere hydraulische Funktion ein, so läßt sich (2.5) äquivalent schreiben als

$$u_t = \left(D(u)u_z\right)_z + \left(K(u)\right)_z. \tag{2.6}$$

Die Richards-Gleichung wird heutzutage sehr häufig für die Beschreibung von Flußproblemen verwendet, vor allem zur Simulation von Wasserfluß im Boden. Betrachtet man Probleme mit vollgesättigten Zonen, so wird sie hierfür in der sogenannten Druckformulierung

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(\Psi_M) = \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\Psi_M) \frac{\partial}{\partial z} \Psi_M \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K(\Psi_M) \right)$$

mit der Druckhöhe Ψ_M als Unbekannte verwendet.

Die Differentialgleichungen (2.5) und (2.6) gelten allgemein für u = u(x, y, z, t). Da die x, y-Koordinaten jedoch nicht explizit in den Differentialgleichungen auftreten und wir von einem homogen porösen Material ausgehen, können wir die x, y-Koordinaten vernachlässigen und das Experiment im Eindimensionalen modellieren. Die Feuchte u ist also nur noch eine Funktion der Höhe und der Zeit, also u = u(z, t).

Betrachten wir nun das horizontale Fließexperiment, so ist die Flußrichtung senkrecht zur Gravitationskraft, also entspricht die z-Koordinate der um 90 Grad gedrehten z-Achse aus Abbildung 2.2. Die Wirkung der Gravitationskraft auf den Wasserfluß ist in diesem Fall so gering, daß wir sie vernachlässigen können. Somit entfällt in (2.1) das Gravitationspotential, und folglich verschwindet in der Differentialgleichung (2.6) der Term erster Ordnung. Wir erhalten für das horizontale Fließexperiment also die Modellgleichung

$$u_t = \left(D(u)u_z\right)_z.\tag{2.7}$$

Mit der Differentialgleichung (2.6) bzw. (2.7) lassen sich unsere Fließexperimente nun vollständig beschreiben, lediglich die Rand- und Anfangsbedingungen der Experimente müssen noch berücksichtigt werden. Zu Beginn des Experimentes zur Zeit t = 0 ist das Vlies trocken, d. h. u(z, 0) = 0 für alle z. Am unteren bzw. linken Rand bei z = 0 ist die Vliesprobe ständig im Wasser und somit vollgesättigt, also u(0,t) = 1. Unseren Beobachtungen zufolge ist das Vliesmaterial oberhalb der Wasserfront trocken, und wir gehen davon aus, daß die Wasserfront im Laufe des Experimentes den oberen bzw. rechten Rand der Vliesprobe nicht erreicht. Dies modellieren wir im folgenden durch eine unendlich lange Vliesprobe.

2.1.6 Hydraulische Funktionen

Wie wir aus Abschnitt 2.1.3 bereits wissen, nimmt die Druckhöhe im ungesättigten Medium negative Werte an. Im gesättigten Zustand u = 1 ist der Wert der Druckhöhe $\Psi_M(1) = 0$. Für den trockenen Zustand gilt die Grenzbeziehung $\lim_{\nu\to 0} \Psi_M(\nu) = -\infty$. Mit zunehmender Sättigung nimmt betragsmäßig die Druckhöhe ab, Ψ_M ist eine monoton steigende Funktion.

Man geht davon aus, daß sich bei der Infiltration die kleineren Poren vor den größeren mit Wasser füllen, da in den kleinen Poren die größten Kapillarkräfte wirken. Deshalb wird angenommen, daß die Druckhöhe bei niedriger Sättigung sehr viel stärker wächst als bei großer Sättigung. Somit ist $\Psi'_M(\nu)$ für kleine ν sehr groß.

Im nichttrockenen Zustand ist die Leitfähigkeit eines Mediums stets positiv, im Zustand u = 0 jedoch gleich Null, da keine Fließpfade vorhanden sind, also K(0) = 0 und $K(\nu) > 0$ für $0 < \nu \leq 1$. Mit zunehmendem Wassergehalt wächst auch die Anzahl der Fließpfade und der Fließwiderstand sinkt, so daß die Leitfähigkeit monoton wächst. Generell nimmt die Leitfähigkeit mit zunehmender Sättigung immer stärker zu, da die größeren Poren die besseren Leiter sind und zunehmend immer mehr Fließpfade entstehen. Deshalb wird K als konvexe Funktion vorausgesetzt.

Für Ψ_M und K gibt es besonders in der Bodenphysik eine Vielzahl an Modellen, unter anderem resultierend aus der Modellierung des Bodens als Kapillarbündel und aus experimentellen Beobachtungen. Eines der meist verwendeten ist die *Mualem-van Genuchten-Parametrisierung*, die für die Wassercharakteristik folgende Beziehung vorschreibt:

$$\Psi_M(\nu) = -\frac{1}{\alpha} [\nu^{-n/(n-1)} - 1]^{1/n}$$
(2.8)

mit Parametern $\alpha > 0$ und n > 1. Die zugehörige hydraulische Leitfähigkeit

dieses Modells ist

$$K(\nu) = K_s \nu^a (1 - (1 - \nu^{n/(n-1)})^{1-1/n})^2$$

mit demselben Parameter n wie in (2.8) und den Parametern a und K_s , wobei K_s die Leitfähigkeit im gesättigten Zustand bezeichnet.



Abbildung 2.3: Wassercharakteristik Ψ_M des Mualem-van Genuchten-Modells



Abbildung 2.4: Leitfähigkeit K des Mualem-van Genuchten-Modells



Abbildung 2.5: Diffusivitä
t ${\cal D}$ resultierend aus dem Mualem-van Genuchten-Modell

Da wir im folgenden hauptsächlich die Differentialgleichung (2.6) verwenden, gehen wir nun noch näher auf die hydraulische Diffusivität $D(\nu)$ ein. Man geht davon aus, daß die Singularität der Funktion Ψ'_M im Punkt s = 0 so schwach ist, daß die Diffusivität in diesem Punkt den Wert D(0) = 0 annimmt, eine Forderung, die z. B. auch vom Mualem-van Genuchten-Modell erfüllt wird. Ein Vorteil der Differentialgleichung (2.6) ist somit, daß beim Lösen Funktionsauswertungen von Ψ'_M im Punkt $\nu = 0$ vermieden werden. Ein unmittelbares Resultat aus den Eigenschaften von K und Ψ_M ist die Positivität von D. Eine weitere Forderung, die wir an D stellen, ist die Beschränktheit im gesättigten Zustand, d. h. $D(1) < \infty$. Die Diffusivität resultierend aus der Mualem-van Genuchten-Parametrisierung erfüllt diese Voraussetzung nicht, da die Druckhöhe unendlich steil in den gesättigten Zustand eintritt, d. h. $\Psi'_M(1) = \infty$. Da wir jedoch davon ausgehen, daß diese Eigenschaft physikalischen Modell vereinbar.

2.2 Das mathematische Modell

Nach der Herleitung in Abschnitt 2.1.5 genügt die Sättigungsverteilung u = u(z,t) während des vertikalen Fließexperimentes im Zeitintervall [0,T] nun

folgendem Cauchy-Dirichlet-Problem:

$$u_t = (K(u)\Psi'_M(u)u_z)_z + (K(u))_z \quad \text{in } H_T := (0,\infty) \times (0,T], \quad (2.9a)$$

$$u(z,0) = 0 \qquad \qquad \text{für } z \in [0,\infty), \tag{2.9b}$$

$$u(0,t) = 1$$
 für $t \in (0,T]$. (2.9c)

Die Koeffizienten K, Ψ_M und $D = K\Psi'_M$ seien hierbei hinreichend glatt und erfüllen folgende Eigenschaften (vgl. Abschnitt 2.1.6):

$$K > 0$$
 in $(0, 1], K(0) = 0, K$ monoton wachsend und konvex, (2.10)

$$\Psi_M < 0 \text{ in } [0,1), \ \Psi_M(1) = 0, \ \lim_{\nu \to 0} \Psi_M(\nu) = -\infty$$
(2.11)

und Ψ_M monoton wachsend,

$$D(\nu) > 0$$
 für $\nu \in (0, 1]$ und $D(0) = 0.$ (2.12)

Für das horizontale Experiment setzen wir in (2.9a) entsprechend den Term erster Ordnung zu Null.

Da wir während des Experimentes eine fortschreitende Wasserfront beobachten, die einen trockenen Bereich nach unten bzw. links begrenzt, und wir den Abstand der Front zum Wasserbehälter als Meßdaten verwenden wollen, stellt sich die Frage, ob diese für uns wichtige Beobachtung auch tatsächlich durch (2.9) beschrieben wird. Wir müssen deshalb untersuchen, ob die aus (2.9) resultierende Feuchteverteilung u zu jedem Zeitpunkt oberhalb einer gewissen Höhe z gleich Null ist, was gleich bedeutend damit ist, daß u einen kompakten Träger besitzt. Der obere Rand des Trägers entspricht dann unseren Meßdaten, also der Höhe des Wassers (bzw. des Abstandes zum Wasserbehälter). Dies ist in Abbildung 2.6 skizziert, wo die Höhe der Wasserfront als Funktion der Zeit s(t) aufgetragen ist. Die Existenz der Wasserfront, also des kompakten Trägers, beweisen wir für das horizontale Experiment in Abschnitt 3.1 und für das vertikale Experiment in Abschnitt 4.1, wo wir uns genauer mit den mathematischen Eigenschaften von (2.9) auseinandersetzen. Einen Überblick über mathematische Resultate bezüglich der Richardsgleichung (2.9a) und deren physikalische Interpretation gibt Gilding in [20].

Durch (2.9) haben wir unsere Fließexperimente also mathematisch modelliert und sind nun in der Lage, sie durch Bestimmen der Lösung u bzw. des kompakten Trägers zu simulieren. Hauptgegenstand dieser Arbeit ist jedoch nicht nur das Problem (2.9), das sogenannte direkte Problem oder auch Vorwärtsproblem, sondern vielmehr das dazugehörige inverse Problem, d. h. die Fragestellung, ob sich aus einer bekannten (gemessenen) Wasserfront sjeweils eine der hydraulischen Funktionen K, D oder Ψ'_M in (2.9) bestimmen läßt. Hierzu konzentrieren wir uns in den nachfolgenden Kapiteln auf das inverse Problem zur Rekonstruktion von D bei bekannter Leitfähigkeit K.



Abbildung 2.6: Skizze des Experimentes

2 Physikalische und mathematische Modellierung

3 Das horizontale Fließexperiment

Dieses Kapitel behandelt ausschließlich das horizontale Fließexperiment ohne Gravitationseinfluß. Zunächst beschäftigen wir uns mit der Lösbarkeit des direkten Problems, speziell mit der Existenz von Ähnlichkeitslösungen. Anschließend gehen wir noch auf das zugehörige inverse Problem ein.

3.1 Das Vorwärtsproblem

Beim horizontalen Fließexperiment läßt sich das Vorwärtsproblem gemäß Abschnitt 2.2 folgendermaßen formulieren: Gesucht ist eine Lösung u = u(z, t)mit kompaktem Träger des Cauchy-Dirichlet-Problems

$$u_t = (a(u)u_z)_z$$
 in $H_T := (0, \infty) \times (0, T],$ (3.1a)

$$u(z,0) = 0$$
 für $z \in [0,\infty)$, (3.1b)

$$u(0,t) = 1$$
 für $t \in (0,T]$. (3.1c)

An den Diffusionskoeffizienten a (a entspricht der Diffusivitätsfunktion $D = K\Psi'_M$ in (2.9)) stellen wir die Voraussetzungen

$$a \in C([0,\infty))$$
 $a > 0$ in $(0,\infty)$, $a(0) = 0.$ (3.2)

Die Differentialgleichung (3.1a), die sich mit A' = a auch als

$$u_t = \left(A(u)\right)_{zz}$$

schreiben läßt, ist in der Literatur bekannt unter dem Namen Poröse Medien-Gleichung. Am häufigsten besitzt der Koeffizient A hierbei die spezielle Gestalt

$$A(\nu) = \nu^m.$$

Über die Existenz und Regularität von Lösungen dieser Differentialgleichung gibt es eine Reihe von grundlegenden Aussagen unter anderem in [1], [34], [28].

Bei der quasilinearen Differentialgleichung (3.1a) handelt es sich um eine degeneriert parabolische Gleichung: Der Differentialoperator $(a(u)u_z)_z$ ist nur

in Punkten (z, t) mit u(z, t) > 0 elliptisch und degeneriert wegen a(0) = 0, falls u(z, t) = 0 ist. Aus diesem Grund läßt sich für (3.1) keine Standardtheorie über Existenz und Regularität von Lösungen parabolischer Differentialgleichungen wie z. B. in [30] anwenden.

Die Unterschiede zwischen regulär parabolischen und degeneriert parabolischen Gleichungen lassen sich allgemein etwa folgendermaßen beschreiben: Regulär parabolische Differentialgleichungen besitzen eine unendliche Ausbreitungsgeschwindigkeit, d. h. lokale Störungen der Lösung beeinflussen die Lösung für alle darauffolgenden Zeiten und in allen Punkten des zugrundeliegenden Gebietes. Es existieren sogenannte klassische Lösungen, die in Abhängigkeit von der Glattheit der Koeffizienten und Randwerte ebenfalls glatt sind, z. B. aus den Räumen $C^{2+\alpha,1+\alpha}$, $0 < \alpha < 1$. Im degenerierten Fall existiert dieses Verhalten nur noch innerhalb von Teilgebieten, die durch sogenannte freie Ränder voneinander getrennt werden. Diese freien Ränder besitzen eine endliche Ausbreitungsgeschwindigkeit und sind in der Regel zusammen mit der Lösung der Differentialgleichung zu bestimmen. Es existieren im allgemeinen keine klassischen Lösungen, egal wie glatt die Koeffizienten und Randwerte sind, da am Übergang zwischen den Teilgebieten, d. h. auf den freien Rändern, die Lösungen degenerierter Gleichungen häufig nicht glatt sind.

In der oben genannten Literatur wird für verschiedene Randwertprobleme mit der Differentialgleichung (3.1a) ein schwacher Lösungsbegriff eingeführt, und es werden Existenz und Eindeutigkeit von schwachen Lösungen untersucht. Darüber hinaus zeigt zum Beispiel Knerr [28], daß die Lösung des Cauchy-Problems bei Anfangswerten mit kompaktem Träger für alle Zeiten einen kompakten Träger besitzt, der durch freie Ränder von dem Gebiet, in dem $u \equiv 0$ ist, getrennt wird. Weiterhin wird die Glattheit der Lösungen im Inneren des Trägers bewiesen sowie Aussagen über Regularität und Monotonie der freien Ränder.

Diese Theorie läßt sich jedoch nicht auf das Problem (3.1) anwenden, da jeweils kompatible Rand- und Anfangswerte vorausgesetzt werden. In (3.1) jedoch sind die Rand- und Anfangswerte im Punkt (0,0) unstetig und verletzen somit die Kompatibilitätsbedingung erster Ordnung $\lim_{t\to 0} u(0,t) =$ $\lim_{z\to 0} u(z,0)$. In Abschnitt 4.1.1 definieren wir für das Cauchy-Dirichlet-Problem (4.1) des vertikalen Fließexperimentes den schwachen Lösungsbegriff und beweisen die Existenz und Eindeutigkeit einer schwachen Lösung, die einen kompakten Träger besitzt und im Inneren des Trägers glatt ist. Diese Aussagen gelten ebenfalls für das Problem (3.1), da die Differentialgleichung (3.1a) ein Spezialfall ($b \equiv 0$) von (4.1a) ist. Im folgenden werden wir jedoch zeigen, daß (3.1) Lösungen einer ganz speziellen Gestalt besitzt, so daß wir zu diesem Zeitpunkt aus Abschnitt 4.1.1 lediglich den Satz 4.1.5 über die Eindeutigkeit der Lösung benötigen. In [3] leitet Barenblatt für die Poröse Medien-Gleichung mit dem Koeffizienten $A(\nu) = \nu^m$ explizite Ähnlichkeitslösungen her. So ist zum Beispiel für m > 1 die Funktion

$$u(z,t) = C(t+1)^{-\frac{1}{m+1}} \left(\left[1 - \left(\frac{Cz}{(t+1)^{\frac{1}{m+1}}} \right)^2 \right]_+ \right)^{\frac{1}{m-1}}$$
(3.3)

mit $C = \left(\frac{m-1}{2m(m+1)}\right)^{\frac{1}{m+1}}$ und $[x]_+ := \max(x, 0)$ eine Lösung des Cauchyproblems

$$u_t = (u^m)_{zz} \qquad \text{in } (-\infty, \infty) \times (0, T], \\ u(z, 0) = C([1 - (Cz)^2]_+)^{\frac{1}{m-1}} \qquad \text{für } z \in (-\infty, \infty).$$
 (3.4)

Die freien Ränder ergeben sich hier zu

$$s(t) = \pm \frac{1}{C} (t+1)^{\frac{1}{m+1}}$$

Wir wollen nun für das Problem (3.1) ebenfalls die Existenz von Ähnlichkeitslösungen untersuchen. Über die *Boltzmann-Transformation*

$$\eta := \frac{z}{\sqrt{t}} \tag{3.5}$$

machen wir für die Lösung u von (3.1) den speziellen Ansatz

$$u(z,t) := f(z/\sqrt{t}) = f(\eta).$$
 (3.6)

Eine Lösung *u* dieser Form besitzt Höhenlinien der Gestalt $z = \eta \sqrt{t}$ für $\eta \ge 0$.

Einsetzen von (3.6) in (3.1) führt uns auf folgendes gewöhnliches Randwertproblem für die Funktion f:

$$(a(f)f')'(\eta) + \frac{1}{2}\eta f'(\eta) = 0$$
 für $0 < \eta < \infty$, (3.7a)

$$f(0) = 1,$$
 (3.7b)

$$\lim_{\eta \to \infty} f(\eta) = 0. \tag{3.7c}$$

Im folgenden sei stets $A(\nu) := \int_0^{\nu} a(\mu) \, d\mu$.

Eine schwache Lösung f von (3.7a) definieren wir durch die Bedingungen

- (i) f ist beschränkt, stetig und nicht-negativ in $[0, \infty)$,
- (ii) $A(f(\eta))$ besitzt eine stetige Ableitung,

(iii) f genügt der Integralidentität

$$\int_0^\infty \left(A(f)' + \frac{1}{2}\eta f \right) \varphi' \, d\eta + \frac{1}{2} \int_0^\infty f \varphi \, d\eta = 0$$

für alle $\varphi \in C_0^1(0,\infty)$.

Eine Aussage über die Existenz einer schwachen Lösung f von (3.7) und somit einer Lösung von (3.1) der speziellen Gestalt (3.6) liefert uns der folgende Satz von Atkinson und Peletier [2]:

Satz 3.1.1

Sei $a \in C([0,\infty))$ mit a(0) = 0 und $a(\nu) > 0$ für $\nu > 0$. Genau dann, wenn

$$\frac{a(\nu)}{\nu} \in L^1(0,1), \tag{3.8}$$

besitzt die Differentialgleichung (3.7a) in $[0, \infty)$ eine eindeutige schwache Lösung f mit kompaktem Träger, die (3.7b) genügt. Zudem ist f in supp[f]monoton fallend.

Beweis: siehe [2]

Somit besitzt (3.7) also für jeden Koeffizienten a gemäß (3.2), der zusätzlich die Bedingung (3.8) erfüllt, eine eindeutige schwache Lösung f mit kompaktem Träger, d. h. es existiert ein c > 0, so daß

$$f(\eta) > 0$$
 für $\eta \in [0, c)$ und $f \equiv 0$ in $[c, \infty)$.

Folglich ist die Funktion $u(z,t) = f(z/\sqrt{t})$ eine Ähnlichkeitslösung von (3.1) mit der Eigenschaft

$$u(z,t) > 0$$
 für $0 \le \frac{z}{\sqrt{t}} < c$ und $u(z,t) \equiv 0$ für $\frac{z}{\sqrt{t}} \ge c$,

vgl. Abbildung 3.1. Also besitzt \boldsymbol{u} einen kompakten Träger und der freie Rand hat die Gestalt

$$s(t) = c\sqrt{t}.\tag{3.9}$$

Wir führen nun für (3.1) einen schwachen Lösungsbegriff ein:

Definition 3.1.2

u ist eine schwache Lösung von (3.1), wenn u folgenden Bedingungen genügt:

- (i) $u \in C(\overline{H}_T \setminus \{(0,0)\})$ und $u \ge 0$ in \overline{H}_T ,
- (ii) u(0,t) = 1 für $t \in (0,T]$,



Abbildung 3.1: Der zu (3.1) gehörende freie Rand

- (iii) A(u) besitzt in H_T eine schwache Ableitung $A(u)_z$ mit $A(u)_z \in L^2(R)$ für alle beschränkten und messbaren Teilmengen R von H_T und $A(u)_z$ ist beschränkt in $(\delta, \infty) \times (0, T]$ für alle $\delta > 0$,
- (iv) für alle Funktionen $\varphi \in \mathfrak{T} := \{\varphi \in H^1(H_T) \cap C(\overline{H}_T) \mid \varphi(z,t) = 0 \text{ für } z = 0, t = T \text{ und hinreichend große } z\}$ gilt

$$\iint_{H_T} \left\{ A(u)_z \varphi_z - u \varphi_t \right\} dz \, dt = 0.$$

Es läßt sich leicht nachweisen, daß die Ähnlichkeitslösung $u = f(z/\sqrt{t})$ mit f aus Satz 3.1.1 den Bedingungen (i)-(iv) genügt und somit eine schwache Lösung von (3.1) ist. Wir fassen dieses Ergebnis in folgendem Satz zusammen:

Satz 3.1.3

Unter den Voraussetzungen (3.2) und (3.8) besitzt das Problem (3.1) eine schwache Lösung u. Zudem existiert ein c > 0, so daß

$$supp[u] = \{(z,t) \mid 0 \le z \le c\sqrt{t}, \ 0 \le t \le T\}.$$

Bemerkung 3.1.4

Die schwache Lösung u aus diesem Satz ist eindeutig. Dies ergibt sich aus dem Eindeutigkeitssatz (Satz 4.1.5) in Abschnitt 4.1.1, da (3.1) ein Spezialfall $(b \equiv 0)$ des Cauchy-Dirichlet-Problems (4.1) des vertikalen Experimentes ist.

Durch Satz 3.1.3 ist nun auch nachträglich gesichert, daß die beobachtete Wasserfront durch unser Modellproblem (3.1) tatsächlich beschrieben wird und zwar durch den freien Rand s.

3.2 Das inverse Problem

Nachdem wir das direkte Problem genauer untersucht haben, können wir uns nun mit der Frage auseinandersetzen, inwieweit sich der Koeffizient a in (3.1) aus der Kenntnis des freien Randes s identifizieren läßt. Definieren wir den Raum

$$\mathcal{H} := \{ a \mid a \text{ genügt } (3.2) \text{ und } (3.8) \}, \tag{3.10}$$

so läßt sich das direkte Problem formal durch die nichtlineare Abbildung

$$F: \begin{cases} \mathcal{H} \to (0,\infty) \\ a \mapsto c = c(a) \end{cases}$$

ausdrücken, die einem Koeffizienten a über die Lösung von Problem (3.1) die zugehörige Konstante c = c(a) > 0 aus Satz 3.1.3 für den freien Rand zuordnet. Dies entspricht aufgrund der besonderen Gestalt (3.9) von s indirekt einer Abbildung von a auf den freien Rand s.

Somit muß beim inversen Problem die nichtlineare Gleichung

$$F(a) = c \in (0, \infty)$$

für $a \in \mathcal{H}$ gelöst werden. Es ist unschwer zu erkennen, daß die Dimension der rechten Seite für eine sinnvolle Identifizierung von a nicht ausreicht. Im freien Rand von (3.1) ist also nicht genügend Information über den Koeffizienten der Differentialgleichung enthalten. Wir müssen feststellen, daß das horizontale Fließexperiment, modelliert durch (3.1), nicht dazu geeignet ist, aus Messungen der Wasserfront s hydraulische Funktionen des Materials zu bestimmen.

4 Das vertikale Fließexperiment

Nachdem sich das horizontale Fließexperiment im vorherigen Kapitel als untauglich zur Identifizierung von hydraulischen Eigenschaften des Vliesstoffes herausgestellt hat, konzentrieren wir uns in den folgenden Kapiteln ausschließlich auf das vertikale Experiment. In diesem Kapitel stellen wir zunächst für das direkte Problem eine Lösungstheorie vor. Anschließend ergänzen wir die bewiesenen Aussagen durch eine Reihe von Annahmen, die wir für das weitere Vorgehen benötigen. Hauptsächlich als Vorbereitung für die im fünften Kapitel vorgestellten numerischen Verfahren leiten wir dann zwei Anfangsrandwertprobleme her, durch die sich das Vorwärtsproblem alternativ beschreiben läßt. Im darauffolgenden Abschnitt definieren wir das direkte Problem über einen nichtlinearen Operator, mit Hilfe dessen wir anschließend das zugehörige inverse Problem zur Bestimmung des Diffusionskoeffizienten über eine nichtlineare Gleichung formulieren. Als Lösungsansatz stellen wir iterative Regularisierungsverfahren zur Minimierung eines Output-Least-Squares-Funktionals vor. Hierfür leiten wir dann formal die Ableitung des nichtlinearen Operators sowie ihre Adjungierte her. Im letzten Abschnitt geben wir eine kurze Zusammenfassung über weitere inverse Probleme bezüglich unseres Modellproblems (2.9), die wir ganz analog untersucht haben.

4.1 Das Vorwärtsproblem

Setzen wir in (2.9a) $a = K\Psi'_M$ und b = K, so erhalten wir für das Vorwärtsproblem des vertikalen Fließexperimentes das Cauchy-Dirichlet-Problem

$$u_t = \left(a(u)u_z\right)_z + \left(b(u)\right)_z \quad \text{in } H_T, \tag{4.1a}$$

$$u(z,0) = 0$$
 für $z \in [0,\infty)$, (4.1b)

$$u(0,t) = 1$$
 für $t \in (0,T]$. (4.1c)

Wir suchen auch hier wieder eine Lösung u mit kompaktem Träger, damit über $s(t) := \sup\{z \in [0, \infty) | u(z, t) > 0\}$ die Existenz des freien Randes gesichert ist. Hierzu stellen wir folgende Voraussetzungen an die Koeffizienten a und b:

$$a \in C([0,\infty)), \quad a(\nu) > 0 \text{ für } \nu > 0, \quad a(0) = 0$$
 (4.2a)

und

$$b \in C^1([0,\infty)), \quad b(\nu) \ge 0 \text{ für } \nu > 0, \quad b(0) = 0.$$
 (4.2b)

Im weiteren verwenden wir wieder $A(\nu) := \int_0^{\nu} a(\mu) \, d\mu$.

4.1.1 Lösungstheorie zu (4.1)

Genau wie die Differentialgleichung (3.1a) ist auch (4.1a) von degeneriert parabolischem Typ und läßt sich deshalb genauso charakteristisch umschreiben wie (3.1a) in Abschnitt 3.1. Zudem besitzt auch (4.1) inkompatible (unstetige) Rand- und Anfangswerte.

Probleme mit kompatiblen Vorgaben wurden bezüglich der Existenz, Eindeutigkeit und Regularität von Lösungen zunächst für die speziellen Koeffizienten $a(\nu) = \nu^m$, $b(\nu) = \nu^n$ in [10] und [17] (Cauchy-Problem) untersucht. In [16] entwickelt Gilding eine Theorie für allgemeine Koeffizienten *a* und *b*, die gewissen Glattheitsvoraussetzungen wie z. B. (4.2) genügen. Neben Existenz und Eindeutigkeit von schwachen Lösungen weist er nach, daß die Lösungen einen kompakten Träger besitzen und in dessen Inneren klassische Lösungen sind. In [19] verallgemeinert Gilding die Ergebnisse, allerdings mit neuer Beweistechnik und einem anderen Begriff einer schwachen Lösung, auf Koeffizienten mit zum Teil schwächeren Voraussetzungen.

Für das Cauchy-Dirichlet-Problem (4.1) beweisen wir im folgenden eine Reihe von Aussagen, indem wir einen Teil der Ergebnisse aus [16] auf unsere inkompatiblen Rand- und Anfangswerte anpassen.

Hierzu führen wir zunächst für (4.1) analog zu Definition 3.1.2 einen schwachen Lösungsbegriff ein.

Definition 4.1.1

u ist eine schwache Lösung von (4.1), wenn u folgenden Bedingungen genügt:

- (i) $u \in C(\overline{H}_T \setminus \{(0,0)\})$ und $u \ge 0$ in \overline{H}_T ,
- (ii) u(0,t) = 1 für $t \in (0,T]$,
- (iii) A(u) besitzt in H_T eine schwache Ableitung $A(u)_z$ mit $A(u)_z \in L^2(R)$ für alle beschränkten und messbaren Teilmengen R von H_T und $A(u)_z$ ist beschränkt in $(\delta, \infty) \times (0, T]$ für alle $\delta > 0$,
- (iv) für alle Testfunktionen φ aus

$$\mathcal{T} := \{ \varphi \in H^1(H_T) \cap C(\overline{H}_T) \mid \varphi(z,t) = 0 \text{ für } z = 0, t = T$$

und hinreichend große z } (4.3)

gilt

$$\iint_{H_T} \left\{ [A(u)_z + b(u)]\varphi_z - u\varphi_t \right\} dz \, dt = 0.$$

Im nun folgenden Satz beweisen wir die Existenz solch einer schwachen Lösung.

Satz 4.1.2

Die Koeffizienten a und b genügen den Voraussetzungen (4.2), zudem existieren a' und b'' und sind lokal Hölder-stetig in $(0, \infty)$. Gilt des weiteren

$$\nu a'(\nu) \in L^1(0,1) \quad \text{und} \quad \nu b''(\nu) \in L^1(0,1),$$
(4.4)

so besitzt das Cauchy-Dirichlet-Problem (4.1) eine schwache Lösung u, und es gilt $0 \le u \le 1$ in \overline{H}_T .

Beweis: Der Beweis verknüpft die Techniken der Beweise von Theorem 4 und Theorem 5 für das zugehörige Cauchy-Problem bzw. Dirichlet-Problem in [16]; wir müssen wegen der Nichtkompatibilität der Randvorgaben lediglich den Punkt (0,0) genauer untersuchen.

Wir konstruieren zunächst eine Folge von regulär parabolischen Randwertproblemen, deren klassische Lösungen gegen die schwache Lösung von (4.1) konvergieren. Hierzu wählen wir Zahlenfolgen $(\varepsilon_k)_k$ und $(\alpha_k)_k$ sowie eine Funktionenfolge $(u_{0,k})_k$, die folgenden Bedingungen genügen:

- (1) $\varepsilon_k, \, \alpha_k \in (0,1]$ für alle $k \text{ mit } \varepsilon_k \downarrow 0$ für $k \to \infty$,
- (2) $u_{0,k} \in C^{2+\alpha_k}[0,\infty)$ mit $\varepsilon_k \leq u_{0,k} \leq 1$ in [0,k) für alle k und $u_{0,k}(x) = 1$ für $x \geq k$ und alle k,
- (3) $u_{0,k+1}(z) \leq u_{0,k}(z)$ für alle $z \in [0,\infty)$ und alle k,
- (4) $u_{0,k}(0) = 1, u'_{0,k}(0) = u''_{0,k}(0) = 0$ für alle k,
- (5) für jedes $\delta > 0$ existiert eine Konstante $K_0(\delta)$ mit $|A(u_{0,k})'(z)| \leq K_0(\delta)$ für alle $z \in (\delta, \infty)$ und alle k,
- (6) $u_{0,k}(z) \to 0$ für $k \to \infty$ für alle $z \in (0,\infty)$.

Wir wählen nun speziell die Folge

$$u_{0,k}(z) = \begin{cases} \varepsilon_k + (1 - \varepsilon_k) e^{1/(z^4/\varepsilon_k^4 - 1) + 1} & \text{für } z \in [0, \varepsilon_k), \\ \varepsilon_k & \text{für } z \in [\varepsilon_k, k - 1), \\ \varepsilon_k + (1 - \varepsilon_k) e^{1/((k - z)^4 - 1) + 1} & \text{für } z \in [k - 1, k], \\ 1 & \text{für } z > k. \end{cases}$$

PSfragIneplabeldungs 4.1 haben wir als Beispiel für $\varepsilon_k = (3/4)^k$ ein paar Folgeglieder dargestellt.



Abbildung 4.1: Anfangswerte $u_{0,k}$

Die Folge $(u_{0,k})_k$ genügt, wie man leicht nachprüft, für eine beliebige Folge $(\varepsilon_k)_k$ gemäß (1) und $\alpha_k \equiv 1$ stets den Bedingungen (2)-(6). Die Bedingung (5) ergibt sich wegen $A(u_{0,k})' = a(u_{0,k})u'_{0,k}$ daraus, daß $\max_{z \in [\varepsilon_k,\infty)} |u'_{0,k}(z)| \leq M$ für alle k und ein M > 0 gilt und daß $[0, \varepsilon_k]$ für hinreichend große k in $[0, \delta]$ enthalten ist.

Wir betrachten nun für jedes k das Randwertproblem

$u_t = \left(a(u)u_z\right)_z + \left(b(u)\right)_z$	in $Q_k := (0, k+1) \times (0, T],$	(4.5a)
$u(z,0) = u_{0,k}(z)$	für $z \in [0, k+1],$	(4.5b)
u(0,t) = 1	für $t \in (0,T]$,	(4.5c)
u(k+1,t) = 1	für $t \in (0, T]$.	(4.5d)

Für die nun folgenden Beweisschritte benötigen wir spezielle Aussagen über Lösungen von (4.5), die in [16] bewiesen werden und die wir in nachfolgendem Lemma zusammengefaßt haben.

Lemma 4.1.3

Es seien $\varepsilon_k, \alpha \in (0,1]$. Für $u_{0,k} \in C^{2+\alpha}[0,k+1]$ gelte

$$\varepsilon_k \le u_{0,k} \le 1$$
 in $[0, k+1], \quad u_{0,k}(0) = u_{0,k}(k+1) = 1$

sowie

$$A(u_{0,k})''(0) + b(u_{0,k})'(0) = A(u_{0,k})''(k+1) + b(u_{0,k})'(k+1) = 0.$$

- (a) Genügen a und b den Voraussetzungen von Satz 4.1.2, dann existiert eine eindeutige Lösung $u_k \in C^{2,1}(\overline{Q}_k)$ von (4.5) mit $A(u_k)_z \in C^{2,1}(Q_k)$ und $\varepsilon_k \leq u_k \leq 1$ in Q_k .
- (b) Existiert weiterhin zu $\delta \in (0, (k+1)/2)$ ein $K_0 = K_0(\delta) > 0$ mit

$$|A(u_{0,k}(z))'| \le K_0 \quad \text{ für } z \in [\delta, (k+1) - \delta],$$

so existiert eine Konstante $K = K(K_0, \delta)$, die nur von K_0 und δ abhängt, mit

$$\begin{aligned} |A(u_k(z_1, t_1)) - A(u_k(z_2, t_2))| &\leq K \big(|z_1 - z_2|^2 + |t_1 - t_2| \big)^{1/2} \\ & \text{für alle } (z_1, t_1), \, (z_2, t_2) \in \overline{R}_{\delta} \end{aligned}$$
(4.6)

mit $R_{\delta} := (2\delta, (k+1) - 2\delta) \times (0, T].$

(c) Zudem existiert eine Konstante $C = C(K_0, T, \delta)$, die nur von K_0, T und δ abhängig ist, mit

$$\iint_{Q_k \setminus R_\delta} \left(A(u_k)_z \right)^2 dz \, dt \le C.$$

Beweis: Beweis von Lemma 3-5 in [16].

Aufgrund der Bedingungen (1)-(6) und den Voraussetzungen an die Koeffizienten existiert nun nach Lemma 4.1.3 (a) für jedes k eine eindeutige Lösung $u_k \in C^{2,1}(\overline{Q}_k)$ von (4.5) mit $A(u_k)_z \in C^{2,1}(Q_k)$ und $\varepsilon_k \leq u_k \leq 1$. Aus $0 \leq u_{0,k+1} \leq u_{0,k} \leq 1$ erhalten wir, daß

$$0 \le u_{k+1}(z,t) \le u_k(z,t) \le 1$$
 für alle $(z,t) \in \overline{Q}_k \setminus Q_k$ und alle k.

Da für die klassischen Lösungen u_k das Maximumprinzip gilt [34], folgt hieraus, daß

$$0 \le u_{k+1}(z,t) \le u_k(z,t) \le 1$$
 für alle $(z,t) \in \overline{Q}_k$ und alle k.

Somit können wir die Funktion u als punktweisen Grenzwert definieren:

$$u(z,t) := \lim_{k \to \infty} u_k(z,t) \quad \text{ für } (z,t) \in \overline{H}_T,$$
(4.7)

und wir erhalten zudem

$$0 \le u \le 1.$$

Nun zeigen wir, daß diese Grenzfunktion eine schwache Lösung von (4.1) ist. Hierzu folgern wir zunächst aus Lemma 4.1.3 (b), das wir wegen (5) anwenden dürfen, daß für $\delta > 0$ eine Konstante $K = K(K_0(\delta), \delta)$ existiert, so daß für alle k gilt:

$$|A(u_k(z_1, t_1)) - A(u_k(z_2, t_2))| \le K (|z_1 - z_2|^2 + |t_1 - t_2|)^{1/2}$$

für alle $(z_1, t_1), (z_2, t_2) \in \overline{R}_{\delta}.$ (4.8)

Lassen wir $k \to \infty$ gehen, so erhalten wir hieraus, daß

$$|A(u(z_1, t_1)) - A(u(z_2, t_2))| \le K (|z_1 - z_2|^2 + |t_1 - t_2|)^{1/2}$$

für alle $(z_1, t_1), (z_2, t_2) \in [2\delta, \infty) \times [0, T].$ (4.9)

Aus der strengen Monotonie von A können wir somit auf die Stetigkeit von u in $(0, \infty) \times [0, T]$ schließen. Des weiteren folgt aus (4.9), daß A(u) in H_T eine schwache Ableitung nach z besitzt, die für jedes $\delta > 0$ in $(2\delta, \infty) \times (0, T]$ beschränkt ist.

Im folgenden sei φ eine beliebige Testfunktion aus T. Dann existiert ein $m \ge 1$, so daß supp $\varphi \subset \overline{Q}_m$.

Wählen wir nun speziell $\delta = 1/4$, so existiert aufgrund von Lemma 4.1.3 (c) eine Konstante $C = C(K_0(1/4), T)$, so daß für alle k

$$\iint_{Q_k \setminus R_{\frac{1}{4}}} (A(u_k)_z)^2 \, dz \, dt = \int_0^{\frac{1}{2}} \int_0^T (A(u_k)_z)^2 \, dt \, dz \\ + \int_{k+\frac{1}{2}}^{k+1} \int_0^T (A(u_k)_z)^2 \, dt \, dz \le C,$$

also insbesondere

$$\int_{0}^{\frac{1}{2}} \int_{0}^{T} \left(A(u_k)_z \right)^2 dt \, dz \le C \tag{4.10}$$

gilt. In $[\frac{1}{2},m+1]\times(0,T]$ erhalten wir aus (4.8), daß für k>m

$$|A(u_k)_z| \le C_0$$

gilt mit einer Konstanten C_0 , die nur von $K_0(1/4)$ abhängt. Mit Hilfe von (4.10) ergibt sich hieraus

$$A(u_k)_z \in L^2(Q_m)$$

und

$$||A(u_k)_z||^2_{L^2(Q_m)} \le C + TC_0^2(m+1/2) =: C_1$$

30

für alle k > m. Also besitzt die Folge $(A(u_k)_z)_k$ eine in $L^2(Q_m)$ schwach konvergente Teilfolge. Sei o. B. d. A. $(A(u_k)_z)_k$ selbst diese Folge und v der schwache Grenzwert. Wir zeigen nun, daß $v = A(u)_z$: Wegen $u_k \in C^{2,1}(\overline{Q}_m)$ für alle k > m gilt für alle Funktionen $\xi \in C^1(\overline{Q}_m)$ mit $\xi|_{\partial Q_m} = 0$, daß

$$0 = \iint_{Q_m} A(u_k)_z \xi \, dz \, dt + \iint_{Q_m} A(u_k) \xi_z \, dz \, dt,$$

und Grenzübergang $k \to \infty$ führt schließlich auf

$$0 = \iint_{Q_m} v\xi \, dz \, dt + \iint_{Q_m} A(u)\xi_z \, dz \, dt$$

Also erhalten wir $v = A(u)_z$ und somit $A(u)_z \in L^2(Q_m)$. Wir haben hiermit Bedingung (iii) aus Definition 4.1.1 nachgewiesen. Anschließend zeigen wir, daß u auch Bedingung (iv) erfüllt. Die Funktionen u_k sind klassische Lösungen von (4.5a) und erfüllen somit für die Testfunktion φ und alle k > m die Gleichung

$$\iint_{Q_m} \left\{ [A(u_k)_z + b(u_k)]\varphi_z - u_k\varphi_t \right\} dz \, dt = \int_0^{m+1} u_{0,k}(z)\varphi(z,0) \, dz.$$
(4.11)

Da $0 \le u_{0,k} \le 1$ und $u_{0,k} \equiv \varepsilon_k$ in $[\varepsilon_k, m+1]$ für alle k > m+1, erhalten wir

Aus der monotonen Konvergenz der u_k gegen die in \overline{H}_T beschränkte Funktion u aus $C((0,\infty)\times[0,T])$ sowie der schwachen Konvergenz von $A(u_k)_z$ in $L^2(Q_m)$ folgt somit durch Grenzübergang $k \to \infty$ in (4.11)

$$\iint_{H_T} \left\{ [A(u)_z + b(u)]\varphi_z - u\varphi_t \right\} dz \, dt = \iint_{Q_m} \left\{ [A(u)_z + b(u)]\varphi_z - u\varphi_t \right\} dz \, dt = 0,$$
(4.12)

also die Bedingung (iv) aus Definition 4.1.1, da $\varphi \in \mathcal{T}$ beliebig war.

Für den Beweis, daß u der Bedingung (ii) in Definition 4.1.1 genügt, verweisen wir auf den Nachweis von Abschätzung (35) und (36) in [16], der hier völlig analog verläuft, da der Fall $t_0 = 0$, den wir ausnehmen müssen, dort gesondert behandelt wird.

Über die Regularität der Lösung im Inneren von H_T gilt folgender Satz:

Satz 4.1.4

Es seien die Voraussetzungen von Satz 4.1.2 erfüllt und u eine schwache Lösung von (4.1). Dann ist u in einer Umgebung jedes Punktes $(z_0, t_0) \in H_T$, in dem $u(z_0, t_0) > 0$ gilt, eine klassische Lösung der Differentialgleichung (4.1a).

Beweis: Dieser Satz entspricht Proposition 2 aus [16] mit den Voraussetzungen von Satz 4.1.2 anstelle von Theorem 5 in [16]. Der Beweis von Proposition 2 ist in [16] nicht angegeben, verläuft jedoch völlig analog zum Beweis von Proposition 1 in [16]. Er läßt sich uneingeschränkt auf unseren Fall übertragen, da nur Punkte aus H_T betrachtet werden und die Funktion u aus Satz 4.1.2 in H_T dieselben Eigenschaften besitzt wie die Lösung aus Theorem 5 in [16]. Zudem werden Eigenschaften der approximierenden Folge u_k ausgenutzt, die in unserem Fall ebenfalls gelten.

Genauso können wir auch den Eindeutigkeitssatz aus [16] auf unser Problem übertragen:

Satz 4.1.5

Die Koeffizienten a und b genügen den Voraussetzungen (4.2). Gilt zudem

$$b'(\nu)^2 = O(a(\nu)) \quad \text{für } \nu \to 0+,$$
 (4.13)

so besitzt das Cauchy-Dirichlet-Problem (4.1) höchstens eine schwache Lösung.

Beweis: Die Aussage läßt sich mit einer Kombination der Techniken aus den Beweisen von Theorem 1 und Theorem 2 in [16] beweisen, die Unstetigkeitsstelle (0,0) ändert nichts an der Beweisführung.

Dieser Satz stellt durch (4.13) eine zusätzliche gemeinsame Forderung an die Koeffizienten a und b, die sich im Gegensatz zu den bisherigen Voraussetzungen als sehr einschränkend herausstellt: Wegen a(0) = 0 sind nur noch Funktionen b mit b'(0) = 0 zugelassen. Zudem ist das Verhalten der beiden Funktionen $a(\nu)$ und $b'(\nu)$ für $\nu \to 0$ aneinander gekoppelt. Diese Bedingung resultiert jedoch allein aus der Beweistechnik und ist vermutlich nicht notwendig für die Eindeutigkeit. So wird (4.13) zum Beispiel in [19] aufgrund einer anderen Beweisführung nicht mehr benötigt. Die Eindeutigkeitsaussage aus [19] können wir jedoch nicht ohne weiteres auf unser Problem übertragen, da sie auf einer anderen Definition der schwachen Lösung basiert. Gegen Ende des Abschnittes 4.1.2 kommen wir noch mal auf diese Bedingung zurück, da dort eine Einschränkung an a'(0) gemacht wird.
Abschließend beweisen wir noch die für uns so wichtige Existenz eines kompakten Trägers:

Satz 4.1.6

Die Koeffizienten a und b genügen den Voraussetzungen von Satz 4.1.2 sowie der Bedingung (4.13). Gilt zudem

$$\frac{a(\nu)}{\nu} \in L^1(0,1), \tag{4.14}$$

so hat die Lösung u von (4.1) in \overline{H}_T einen kompakten Träger.

Beweis: Wir verfolgen die Beweisidee von Lemma 6 in [16] und geben eine Beweisskizze: Es sei zunächst c > 0 fest gewählt. Den Koeffizienten a ersetzen wir durch eine nichtnegative Funktion $\tilde{a} \in C([0,\infty)) \cap C^1(0,\infty)$, wobei \tilde{a}' lokal Hölder-stetig in $(0,\infty)$ ist und $\tilde{a} \equiv a$ in [0,1] gilt. Die Funktion \tilde{a} in $(1,\infty)$ wird dabei so gewählt, daß

$$\lambda_2 := \int_0^\infty \frac{\tilde{a}(\nu)}{c\nu + b(\nu)} \, d\nu > \int_0^1 \frac{a(\nu)}{c\nu + b(\nu)} \, d\nu + cT.$$

Anschließend bestimmen wir $\gamma > 0$ aus der Bedingung

$$\int_{0}^{1} \frac{a(\nu)}{c\nu + b(\nu)} \, d\nu < \gamma < \lambda_2 - cT.$$

Definieren wir nun

$$U(z,t) := \begin{cases} f(\gamma + ct - z) & \text{für } 0 \le z < \gamma + ct, \\ 0 & \text{für } z \ge \gamma + ct, \end{cases}$$
(4.15)

wobe
i $f:[0,\lambda_2)\to [0,\infty)$ durch

$$\xi = \int_{0}^{f(\xi)} \frac{\tilde{a}(\nu)}{c\nu + b(\nu)} \, d\nu$$

gegeben ist, so ist die Funktion U eine schwache Lösung (gemäß Definition III in [16]) der Differentialgleichung

$$u_t = \left(\tilde{a}(u)u_z\right)_z + \left(b(u)\right)_z \quad \text{in } H_T \tag{4.16}$$

mit den Randwerten

$$u(0,t) = f(\gamma + ct)$$
 für $t \in (0,T]$

und den Anfangswerten

$$u(z,0) = \begin{cases} f(\gamma-z) & \text{für } 0 \leq z < \gamma, \\ 0 & \text{für } z \geq \gamma. \end{cases}$$

Die Funktion U ist nach Theorem 3 und Theorem 6 in [16] die eindeutige schwache Lösung von (4.16) mit obigen Rand- und Anfangswerten, und es läßt sich analog zum Beweis von Satz 4.1.2 eine Folge parabolischer Randwertprobleme in Q_k konstruieren, deren klassische Lösungen $(U_k)_k$ punktweise monoton gegen U konvergieren.

Wegen $0 \le u \le 1$ ist u in H_T auch eine schwache Lösung der Differentialgleichung (4.16). Für die Rand- bzw. Anfangswerte von u und U gilt:

$$U(0,t) \ge f(\gamma) > 1 = u(0,t)$$
 für $t \in (0,T]$ (4.17a)

und

$$U(z,0) \ge u(z,0) = 0$$
 für $z \in [0,\infty),$ (4.17b)

da $U(0,0) = f(\gamma) > 1$.

Wegen (4.17) lassen sich im Beweis von Theorem 6 in [16] die Folgen von Rand- und Anfangswerten $(U_k(0,t))_k$, $(U_k(k+1,t))_k$ und $(U_{k,0})_k$ von U_k gemäß der dortigen Bedingungen so konstruieren, daß für alle k gilt:

$$U_k(z,t) \ge u_k(z,t) \quad \text{für } (z,t) \in Q_k \setminus Q_k,$$

wobei $(u_k)_k$ die approximierende Folge zu u aus dem Beweis von Satz 4.1.2 ist. Da u_k und U_k in Q_k klassische Lösungen der Differentialgleichung (4.16) sind, folgt somit aus dem Maximumprinzip, daß für alle k

$$U_k \ge u_k \quad \text{in } \overline{Q}_k$$

gilt. Also erhalten wir durch Grenzübergang $k \to \infty$, daß

$$U(z,t) \ge u(z,t)$$
 für $(z,t) \in \overline{H}_T$.

Aus U(z,t) = 0 für $z \ge \gamma + ct$ und $u \ge 0$ folgt nun

$$u(z,t) = 0 \quad \text{für } z \ge \gamma + ct, \tag{4.18}$$

also die Behauptung.

Der Bedingung (4.14) sind wir bereits in Satz 3.1.1 für das direkte Problem des horizontalen Experimentes begegnet. Auch dort ist (4.14) hinreichend (und sogar notwendig) für den kompakten Träger der Lösung.

Vergleichen wir in den vorangegangenen Sätzen die zusätzlich getroffenen Voraussetzungen an a und b, so stellt sich z. B. die Frage nach einer Funktion a, die die Voraussetzung (4.14), nicht aber (4.4) erfüllt. In [16] wird hierzu die Funktion

$$a(\nu) = \begin{cases} \nu \left(2 + \sin \frac{1}{\nu^2} \right) & \text{für } \nu > 0, \\ 0 & \text{für } \nu = 0, \end{cases}$$

angegeben. Da wir später für den Funktionenraum, der dem Koeffizienten a zugrunde liegt, eine Hilbertraumstruktur benötigen, setzen wir im weiteren $a \in H^2(0,1)$ voraus. Der Raum $H^1(0,1)$ reicht für unsere Zwecke nicht aus, da z. B. in Satz 4.1.2 die lokale Hölder-Stetigkeit von a' gefordert wird. Insgesamt ersetzen wir die Bedingungen aus Satz 4.1.2 und 4.1.6 durch folgende gemeinsame Voraussetzung:

$$a \in H^{2}(0,1), \quad a(\nu) > 0 \text{ für } \nu > 0, \quad a(0) = 0,$$

$$b \in C^{2+\alpha}([0,1]) \text{ für ein } \alpha \in (0,1], \quad b(\nu) \ge 0 \text{ für } \nu > 0, \quad b(0) = b'(0) = 0,$$

$$a, b \text{ genügen } (4.13).$$
(4.19)

Hierbei haben wir das Resultat $0 \le u \le 1$ in \overline{H}_T aus Satz 4.1.2 ausgenutzt.

Wir haben hiermit also gezeigt, daß das Problem (4.1) unter diesen Voraussetzungen einen freien Rand s besitzt. Leider ist es uns nicht gelungen, Aussagen über die Eigenschaften von s(t) wie z. B. Stetigkeit oder Monotonie herzuleiten, die wir jedoch im folgenden weiter benötigen. Aus diesem Grund listen wir hier als Motivation einige Resultate auf, die Gilding in [18] basierend auf der Lösungstheorie aus [19] für das Cauchy-Problem zu (4.1a) in $(-\infty, \infty) \times (0, T]$ für den oberen freien Rand $s_1(t) := \sup\{z \in \mathbb{R} \mid u(z, t) > 0\}$ (beim Cauchyproblem wird der Träger der Lösung durch zwei freie Ränder begrenzt) bewiesen hat.

- (a) Gilt b'(0) = 0, so ist $s_1(t)$ monoton wachsend.
- (b) s_1 ist stetig in $[0, \infty)$.
- (c) Unter gewissen zusätzlichen Voraussetzungen an a, b und u_0 gilt:
 - (i) $v := -\frac{A(u)_z + b(u)}{u}$ ist beschränkt in $(-\infty, \infty) \times [0, T]$ im Sinne von Distributionen.

(ii) Mit
$$P(t) := \{z \in \mathbb{R} : u(z,t) > 0\}$$
 gilt:
Zu jedem $t_1 \in (0,\infty)$ und $\varepsilon > 0$ existiert $t_2 \in (t_1,\infty)$ mit
 $\left(\lim_{\substack{z \uparrow s_1(t_1)\\z \in P(t_1)}} v(z,t_1) - \varepsilon\right)(t-t_1) \le s_1(t) - s_1(t_1) \le \left(\lim_{\substack{z \uparrow s_1(t_1)\\z \in P(t_1)}} v(z,t_1) + \varepsilon\right)(t-t_1)$

für alle $t \in (t_1, t_2]$.

Für den Fall $b \equiv 0$ hat Knerr [28] zuvor bereits ähnliche Aussagen bewiesen. Das Ergebnis (c) sei erstmal so dahingestellt, wir werden später wieder darauf zurückkommen.

Im folgenden sei nun stets

$$P_T := \{ (z,t) \mid 0 < z < s(t), \ 0 < t \le T \},$$
$$\Gamma := \{ (s(t),t) \mid 0 < t \le T \}$$

und

$$G_T := H_T \setminus \{P_T \cup \Gamma\}.$$

Im weiteren werden wir der Einfachheit halber sowohl Γ als auch s als freien Rand bezeichnen. Zudem verwenden wir für beliebige Funktionen f die Abkürzung

$$f\big|_{\Gamma} = f(s(t), t) := \lim_{z \uparrow s(t)} f(z, t).$$

Die oben aufgeführten Aussagen (a)-(c) sollen zum Teil motivieren, daß wir von jetzt ab für die Lösung u und den freien Rand s von (4.1) stets folgendes voraussetzen:

- (V1) $s \in H^1([0,T])$
- (V2) s ist streng monoton wachsend.
- (V3) $u_z < 0$ in P_T und $-\infty < u_z |_{\Gamma} < 0$ für alle t > 0.
- (V4) $\left(a(u)u_{zz}\right)\Big|_{\Gamma} = 0.$

Die Voraussetzungen (V2) und (V3) entsprechen unseren numerischen Beobachtungen und zudem auch physikalischen Überlegungen.

Durch die Stetigkeit und Monotonie von s nimmt das Gebiet P_T also immer eine Gestalt an, wie sie in Abbildung 4.2 skizziert ist. Durch die homogenen Anfangsvorgaben ergibt sich

$$s(0) = 0,$$
 (4.20)

also beginnt die Kurve s zur Zeit t = 0 stets im Nullpunkt.



Abbildung 4.2: Der Träger der Lösung von (4.1)

Mit (V3) setzen wir automatisch voraus, daß u_z auf dem freien Rand nicht stetig ist, also u nur in P_T glatt ist. Aus (V3) ergibt sich noch eine weitere wichtige Folgerung: Da u_z in P_T als klassische Lösung stetig ist, gilt $A(u)_z = a(u)u_z$ in P_T und somit wegen (iii) aus Definition 4.1.1, daß $a(u)u_z \in L^2(P_T)$. Aufgrund von (V3) und der Beschränktheit von a erhalten wir hieraus

$$u_z \in L^2(P_T). \tag{4.21}$$

Bedingung (V4) ist eine rein technische Voraussetzung für den nächsten Abschnitt.

4.1.2 Ein freies Anfangsrandwertproblem

Da s die Meßgröße des Experimentes darstellt, ist es für die Simulation des Experimentes notwendig, neben u auch s zu berechnen. In der Formulierung von (4.1) ist der freie Rand nicht explizit enthalten, da das Cauchy-Dirichlet-Problem auf dem festen Gebiet H_T definiert ist. Jedoch läßt sich s(t) über die Beziehung

$$s(t) = \sup\{z \in [0, \infty) : u(z, t) > 0\}$$
(4.22)

aus der Lösung u von (4.1) bestimmen. Im folgenden wollen wir jedoch den freien Rand explizit in das Problem mit aufnehmen, um unter anderem numerische Schwierigkeiten beim Verwenden von (4.22) zu umgehen. Hierzu formulieren wir (4.1) als freies Anfangsrandwertproblem in P_T um, in dem s(t)zusätzlich als unbekannte Größe auftritt. Neben der Gleichung

$$u|_{\Gamma} = u(s(t), t) = 0 \quad \text{für } t \ge 0$$
 (4.23)

benötigen wir noch eine weitere Bedingung an s. Leitet man (4.23) für t > 0 formal nach der Zeit ab, so erhält man

$$0 = u_z \big|_{\Gamma} s'(t) + u_t \big|_{\Gamma},$$

und Einsetzen der Differentialgleichung (4.1a) liefert wegen (V4)

$$0 = u_{z}|_{\Gamma}s'(t) + \left(\left(a(u)u_{z} \right)_{z} + b(u)_{z} \right) |_{\Gamma} = u_{z}|_{\Gamma}s'(t) + a'(0) u_{z}^{2}|_{\Gamma} + \left(a(u)u_{zz} \right) |_{\Gamma} + b'(0)u_{z}|_{\Gamma} = u_{z}|_{\Gamma} \left(s'(t) + a'(0) u_{z}|_{\Gamma} + b'(0) \right) \quad \text{für } t > 0.$$

$$(4.24)$$

Mit Hilfe von (V3) erhalten wir aus (4.24) unsere zusätzliche Bedingung an den freien Rand s:

$$s'(t) = -(a'(0)u_z|_{\Gamma} + b'(0)) \quad \text{für } t > 0.$$
(4.25)

Diese formal hergeleitete Bedingung hat auch eine physikalische Bedeutung: Der Ausdruck $-(a(u)u_z + b(u))$ ist die volumetrische Wasserflußdichte j_W (vgl. (2.2)) und beschreibt die Flußgeschwindigkeit des Wassers. Der Quotient $\frac{-(a(u)u_z + b(u))}{u}(z,t)$ entspricht somit der Geschwindigkeit der einzelnen Wasserpartikel im Punkt (z,t). Die rechte Seite in (4.25) ergibt sich nun also als Grenzwert der Geschwindigkeit gegen den freien Rand. Folglich bedeutet (4.25), daß die Geschwindigkeit der Wasserpartikel an der Wasserfront so groß ist wie die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Front selbst. Aus physikalischer Sicht läßt sich (4.25) also rechtfertigen. An dieser Stelle greifen wir auf die Aussagen in (c) auf Seite 35 für das Cauchy-Problem zurück. Die Ungleichung in (ii) für die volumetrische Wasserflußdichte v stellt, wenn auch in äußerst schwacher Form, ebenfalls die Beziehung (4.25) dar.

Insgesamt können wir das Experiment nun alternativ durch das folgende freie Anfangsrandwertproblem beschreiben:

$$\begin{array}{ccc}
 u_t = (a(u)u_z)_z + (b(u))_z & \text{in } P_T, \\
 u(0,t) = 1 & \text{für } 0 < t \le T, \\
 u(s(t),t) = 0 & \text{für } 0 \le t \le T, \\
 s'(t) = -(a'(0)u_z|_{\Gamma} + b'(0)) & \text{für } 0 < t \le T.
\end{array} \right\}$$
(4.26)

In dieser Formulierung besteht die Lösung von (4.26) nun aus u und s.

Da wir (V2) und (V3) voraussetzen, ergibt sich aus (4.25) notwendigerweise die Forderung

$$a'(0) > 0.$$
 (4.27)

Diese Einschränkung an a'(0) müssen wir in Kauf nehmen, da wir den freien Rand bzw. die Lösung u später numerisch über das freie Anfangsrandwertproblem (4.26) bestimmen werden. An dieser Stelle wollen wir kurz noch einmal die Voraussetzung (4.13) von Satz 4.1.5 aufgreifen. Durch die zusätzliche Forderung (4.27) an $a \in H^2(0,1)$ ergibt sich wegen $a(\nu) = O(\nu)$ für $\nu \to 0+$ aus (4.13), daß $b'(\nu)^2 = O(\nu)$ für $\nu \to 0+$ gelten muß. Durch Aufintegrieren folgt die Bedingung $b(\nu) = O(\nu^{3/2})$ für $\nu \to 0+$. Aus der in (4.19) vorausgesetzten Glattheit an b erhalten wir schließlich

$$b'(0) = 0.$$

Somit reduziert sich die Kopplung der Koeffizienten b und a durch (4.13) auf diese Bedingung an b'(0).

4.1.3 Transformation auf ein Rechteckgebiet

Wir haben bisher noch nicht näher untersucht, welche Auswirkungen die Unstetigkeitsstelle (0,0) auf die Lösung u hat. Aufgrund der Voraussetzung (V3) und den Randwerten fällt u zu jedem Zeitpunkt t streng monoton in z-Richtung vom Wert Eins bei z = 0 auf den Wert Null bei z = s(t) und nimmt also zu jedem Zeitpunkt alle Werte aus dem Intervall [0,1] an. Somit münden alle Niveaulinien von u (der freie Rand ist die Niveaulinie zum Wert Null und z = 0 diejenige zum Wert Eins) in den Punkt (0,0) ein. Dies bewirkt, daß alle Werte aus [0,1] Häufungspunkte von u(z,t) für $(z,t) \to (0,0)$ sind. Für die Ableitungen u_z , u_{zz} und u_t bedeutet dies, daß sie in (0,0) unbeschränkt sind. Um diesen Schwierigkeiten gerade im Hinblick auf ein numerisches Verfahren zur Lösung von (4.26) aus dem Weg zu gehen, führen wir nun die Variablentransformation

$$x = \frac{z}{s(t)} \quad \text{für } t > 0 \tag{4.28}$$

ein. Sie führt das Gebiet P_T in das Rechteck $R_T := (0, 1) \times (0, T]$ über (vgl. Abbildung 4.3). Aus der Differentialgleichung (4.1a) können wir nun eine Differentialgleichung für die Funktion

$$\bar{u}(x,t) := u(xs(t),t)$$

herleiten. Für die partiellen Ableitungen von \bar{u} gilt

$$ar{u}_x = u_z s, \ ar{u}_{xx} = u_{zz} s^2, \ ar{u}_t = u_z x s' + u_t,$$



Abbildung 4.3: Transformation auf das Rechteckgebiet R_T

so daß wir hiermit aus (4.1a)

$$\bar{u}_t = \frac{1}{s^2} \left(a(\bar{u})\bar{u}_x \right)_x + \frac{1}{s} \left(b(\bar{u})_x + xs'(t)\bar{u}_x \right) \quad \text{in } R_T \tag{4.29}$$

erhalten. Die Transformation der Randwerte für uaus (4.26) führt zudem auf die Bedingungen

$$\bar{u}(0,t) = 1$$
 für $t \in (0,T],$ (4.30)

$$\bar{u}(1,t) = 0$$
 für $t \in (0,T]$. (4.31)

Für die Punkte (x, 0) gibt es keine Vorgaben an \bar{u} , da alle diese Punkte von der Rücktransformation z = xs(t) auf die Unstetigkeitsstelle (0, 0) von u abgebildet werden. Betrachten wir für ein festes x die Funktion $\bar{u}(x,t) =$ u(xs(t),t), so mag diese für $t \to 0$ einen Grenzwert besitzen, den wir mit $\bar{u}_0(x)$ bezeichnen. Durch die Randvorgaben (4.30) und (4.31) sind für die Funktion \bar{u}_0 die Randwerte $\bar{u}_0(0) = 1$ und $\bar{u}_0(1) = 0$ vorgegeben. Um $\bar{u}_0(x)$ für $x \in (0,1)$ zu bestimmen, multiplizieren wir zunächst die Differentialgleichung (4.29) mit $s^2(t)$. In der resultierenden Gleichung

$$s^{2}(t)\bar{u}_{t} = \left(a(\bar{u})\bar{u}_{x}\right)_{x} + s(t)\left(b'(\bar{u}) + xs'(t)\right)\bar{u}_{x} \quad \text{in } R_{T}$$
(4.32)

untersuchen wir nun den Grenzübergang $t \to 0$. Hierzu setzen wir im folgenden voraus, daß sich \bar{u}_x und \bar{u}_{xx} für alle x aus [0,1] bzw. aus (0,1) für $t \to 0$ stetig fortsetzen lassen und daß

$$\lim_{t \to 0} s^2(t)\bar{u}_t(x,t) = 0 \quad \text{für } x \in (0,1)$$
(4.33)

gilt. Formulieren wir die Bedingung (4.25) mit Hilfe der neuen Variable x, so gilt

$$s'(t) = -a'(0)u_z\big|_{\Gamma} - b'(0) = -a'(0)\frac{\bar{u}_x(1,t)}{s(t)} - b'(0),$$

und wir erhalten somit wegen s(0) = 0 den Grenzwert

$$s(t)s'(t) = -a'(0)\bar{u}_x(1,t) - s(t)b'(0) \xrightarrow[t \to 0]{} -a'(0)\bar{u}_x(1,0).$$
(4.34)

Lassen wir hiermit in (4.32) t gegen 0 gehen, so führt dies auf die Differentialgleichung

$$0 = (a(\bar{u})\bar{u}_x)_x - a'(0)\bar{u}_x(1,0)x\bar{u}_x \quad \text{in } (0,1) \times \{0\}.$$
(4.35)

Falls \bar{u} und die Ableitungen \bar{u}_x und \bar{u}_{xx} für $t \to 0$ einen endlichen Grenzwert besitzen und (4.33) erfüllt ist, so muß also die Fortsetzung \bar{u}_0 von \bar{u} der Differentialgleichung (4.35) genügen. Zusammen mit den Randwerten $\bar{u}_0(0) = 1$ und $\bar{u}_0(1) = 0$ ergibt sich folgendes Problem:

$$\left(a(\bar{u}_0)\bar{u}_0'\right)' - a'(0)\bar{u}_0'(1)x\bar{u}_0' = 0 \quad \text{in } (0,1), \tag{4.36a}$$

$$\bar{u}_0(0) = 1,$$
 (4.36b)

$$\bar{u}_0(1) = 0.$$
 (4.36c)

Man beachte, daß in der Differentialgleichung (4.36a) der Neumann-Randwert $\bar{u}'_0(1)$ der gesuchten Lösung \bar{u}_0 auftritt. Um dieses Problem numerisch zu lösen, ersetzen wir in Abschnitt 5.1.2.1 in der Differentialgleichung $\bar{u}'_0(1)$ durch eine Variable f'_0 und führen $\bar{u}'_0(1) = f'_0$ als zusätzliche Gleichung.

An dieser Stelle betrachten wir noch einmal das gewöhnliche Randwertproblem (3.7) aus dem dritten Kapitel. Nach Satz 3.1.1 besitzt die eindeutige schwache Lösung f einen kompakten Träger [0, c] für ein c > 0, und wir können (3.7) als Randwertproblem in [0, c] auffassen, indem wir (3.7c) durch die Randbedingung f(c) = 0 ersetzen. Unter den Voraussetzungen $\lim_{\eta\to c} (a(f)f'')(\eta) = 0$ und $f'(c) \neq 0$ (vgl. die Voraussetzungen (V4) und (V3) an u) läßt sich aus der Differentialgleichung (3.7a) die Bedingung c = -2a'(0)f'(c) herleiten. Mit Hilfe der Transformation $x = \eta/c$ können wir nun (3.7) in das Randwertproblem (4.36) überführen und erhalten somit $\bar{u}_0(x) = f(cx)$. Diese Transformation entspricht (4.28) und auch die Bedingung an c ist das Analogon zu (4.25) für den vorliegenden eindimensionalen Fall. Umgekehrt läßt sich natürlich auch f durch die Rücktransformation aus der Lösung \bar{u}_0 berechnen. Hierbei ergibt sich $c = \sqrt{-2a'(0)\bar{u}_0'(1)}$. Mit dieser Methode werden wir in Abschnitt 5.1.3 die numerische Lösung von (3.7) und somit auch die von (3.1) berechnen.

Vorausgesetzt, daß die obigen Grenzwerte alle existieren, haben wir das freie Anfangsrandwertproblem (4.26) also auf folgendes Anfangsrandwertproblem im Gebiet R_T transformiert

$$\bar{u}_t = \frac{1}{s^2} \left(a(\bar{u})\bar{u}_x \right)_x + \frac{1}{s} \left(b(\bar{u})_x + xs'(t)\bar{u}_x \right) \quad \text{in } R_T$$
(4.37a)

$$\bar{u}(x,0) = \bar{u}_0(x)$$
 für $x \in [0,1],$ (4.37b)

$$\bar{u}(0,t) = 1$$
 für $t \in (0,T]$, (4.37c)

$$\bar{u}(1,t) = 0$$
 für $t \in (0,T]$, (4.37d)

mit der zusätzlichen Bedingung

$$s'(t) = -a'(0)\frac{\bar{u}_x(1,t)}{s(t)} - b'(0).$$
(4.37e)

Die Funktion \bar{u}_0 ist hierbei die Lösung von (4.36).

Aufgrund unserer Annahme $|\bar{u}_x(1,0)| < \infty$ ergibt sich aus dem Grenzübergang (4.34) die Bedingung

$$0 \le \lim_{t \to 0} s(t) s'(t) < \infty.$$

Wegen $ss' = (\frac{1}{2}s^2)'$ erhalten wir durch Hoch
integrieren in dieser Ungleichung, daß für hinreichend klein
et

$$c_1\sqrt{t} \le s(t) \le c_2\sqrt{t} \tag{4.38}$$

mit $c_2 > c_1 \ge 0$ gilt. Da $c_1 = 0$ nicht ausgenommen ist (wir können den Randwert $\bar{u}'_0(1) = 0$ nicht ausschließen), bedeutet (4.38) lediglich, daß *s* für kleine *t* nach oben durch eine Wurzelfunktion beschränkt ist. In unseren numerischen Beispielen war jedoch $\bar{u}'_0(1)$ stets von Null verschieden.

4.2 Bestimmung der Diffusivität a

Das bisher betrachtete direkte Problem besteht darin, für bekannte Koeffizienten a und b das Problem (4.1) für u zu lösen und somit den freien Rand szu berechnen. Unsere eigentliche Fragestellung ist jedoch das inverse Problem, d. h. die Frage, ob sich aus bekanntem freien Rand s eine der Funktionen aoder b in (4.1) bestimmen läßt. Hierzu konzentrieren wir uns zunächst auf den Koeffizienten a und versuchen, diesen bei bekannter Funktion b aus einem vorgegebenem freien Rand s zu rekonstruieren. In Abschnitt 4.3 werden wir dann anschließend noch kurz auf andere inverse Probleme z. B. die Bestimmung von b eingehen. Wir setzen also in diesem Abschnitt stets voraus, daß b eine fest gewählte Funktion ist, die folgenden Voraussetzungen genügt:

$$b \in C^{2+\alpha}([0,1]) \quad \text{für ein } \alpha \in (0,1], \quad b(0) = b'(0) = 0, b(\nu) \ge 0 \text{ für } \nu > 0.$$
(4.39)

Somit ist zumindest bezüglich der Eigenschaften von b das direkte Problem wohldefiniert.

4.2.1 Das inverse Problem

Definieren wir den Raum

$$\mathcal{H}_a := \{ a \in H^2(0,1) : a(0) = 0 \}, \tag{4.40}$$

so läßt sich das direkte Problem formal durch den nichtlinearen Operator

$$F: \begin{cases} \mathcal{D}(F) \subset \mathcal{H}_a \to L^2(0,T) \\ a \mapsto s(\,\cdot\,) = s(\,\cdot\,;a) \end{cases}$$
(4.41)

ausdrücken, der einem Koeffizienten a über die Lösung von Problem (4.1) den freien Rand zuordnet. Damit F wohldefiniert ist, müssen wir $\mathcal{D}(F)$ so wählen, daß jeder Koeffizient a aus $\mathcal{D}(F)$ die Voraussetzungen des vorherigen Abschnittes erfüllt, und das Cauchy-Dirichlet-Problem (4.1) somit eine eindeutige schwache Lösung u mit kompaktem Träger besitzt bzw. einen eindeutigen freien Rand s. Aufgrund der Annahme (V1) liegt s dann in $L^2(0,T)$. Wir definieren also die Menge $\mathcal{D}(F)$ der zulässigen Funktionen a durch

$$a \in \mathcal{D}(F) :\iff a \in H^2(0,1), \quad a(0) = 0, \quad a'(0) > 0,$$

 $a(\nu) > 0 \text{ für } \nu > 0.$ (4.42)

Damit das direkte Problem in $\mathcal{D}(F)$ gut gestellt ist, benötigen wir noch die Stetigkeit von F, d. h. die stetige Abhängigkeit des freien Randes von dem Koeffizienten a. Hierzu ist zunächst einmal die stetige Abhängigkeit der Lösung u des Problems (4.1) von a erforderlich. Entsprechende Resultate sind uns in der Literatur allerdings lediglich für das Cauchyproblem für degeneriert parabolische Gleichungen der Gestalt (4.1a) bekannt ([14, 8]). Wir gehen im folgenden deshalb davon aus, daß F eine stetige Abbildung von $\mathcal{D}(F)$ nach $L^2(0,T)$ ist.

Setzt man nun umgekehrt ein $\tilde{s} \in L^2(0,T)$ als bekannt voraus, so läßt sich das inverse Problem, die Identifizierung von a, formal schreiben als nichtlineare Gleichung für a

$$F(a) = \tilde{s}.\tag{4.43}$$

Hierbei liegen in der Regel gestörte Daten vor, d. h. \tilde{s} liegt nicht notwendigerweise im Bildraum $\mathcal{R}(F)$ von F, sondern

$$\|\tilde{s} - s\|_{L^2(0,T)} \le \delta$$

für ein $s \in \mathcal{R}(F)$. Somit ist (4.43) i. a. in $\mathcal{D}(F)$ nicht lösbar. Aus diesem Grund stellt sich uns folgendes Minimierungsproblem:

$$\|\tilde{s} - F(a)\|_{L^2(0,T)}^2 \xrightarrow[a \in \mathcal{D}(F)]{} \min.$$

$$(4.44)$$

Da wir nicht davon ausgehen können, daß F in $\mathcal{D}(F)$ injektiv ist, und wir numerische Instabilitäten beobachtet haben, verwenden wir im folgenden Regularisierungsmethoden, um eine stabile Näherungslösung für (4.44) zu erhalten. Die wohl bekannteste dieser Methoden, bei der zur Regularisierung ein Strafterm hinzuaddiert wird, ist die *Tikhonov-Regularisierung*. In unserem Fall ist hierbei folgendes Minimierungsproblem zu lösen:

$$\|\tilde{s} - F(a)\|_{L^2(0,T)}^2 + \alpha \|a - a_0\|_{H^2(0,1)}^2 \xrightarrow[a \in \mathcal{D}(F)]{} \min A$$

Hierbei ist a_0 eine a-priori-Schätzung an die Lösung und $\alpha > 0$ ein geeignet zu wählender Regularisierungsparameter. Diese oft sehr komplexe Minimierungsaufgabe wird in der Anwendung in der Regel mit Hilfe von iterativen Methoden gelöst. Alternativ bieten sich deshalb gleich sogenannte *iterative Regularisierungsmethoden* an. Hierzu gehören Newton-artige Verfahren, bei denen zu einer vorgegebenen Näherung a_k der nichtlineare Operator F um a_k linearisiert wird, was auf das *Gauß-Newton*-Verfahren führt:

$$a_{k+1} = a_k + h \tag{4.45a}$$

mit der Lösung h von

$$\|\tilde{s} - \left(F(a_k) + F'(a_k)h\right)\|_{L^2(0,T)}^2 \xrightarrow[h \in \mathcal{H}_a]{\min}.$$

$$(4.45b)$$

 $F'(a_k)h$ bezeichne die Richtungsableitung des Operators F im Punkt a_k in Richtung der Funktion h. Da wir, wie sich später noch herausstellen wird, nicht davon ausgehen können, daß F Gâteaux-differenzierbar ist, verstehen wir im folgenden F'(a) für $a \in \mathcal{D}(F)$ als linearen Operator

$$F'(a): \mathcal{D}(F'(a)) \subset \mathcal{H}_a \to L^2(0,T),$$

der die Richtung $h \in \mathcal{D}(F'(a))$ auf die Richtungsableitung (das Gâteaux-Differential) F'(a)h abbildet. Da in der Regel auch dieses linearisierte Problem schlecht gestellt ist, muß man in (4.45) den Newton-Schritt regularisieren. In diesem Zusammenhang verwendet man häufig das Levenberg-Marquardt-Verfahren oder auch die IRGN-Methode, die wir beide im folgenden kurz vorstellen. Das Levenberg-Marquardt-Verfahren besteht aus der impliziten Iteration

$$a_{k+1} = a_k - \left(F'(a_k)^* F'(a_k) + \alpha_k I\right)^{-1} F'(a_k)^* \left(F(a_k) - \tilde{s}\right), \tag{4.46}$$

wobei

$$F'(a)^*: L^2(0,T) \to \mathcal{H}_a \tag{4.47}$$

die Adjungierte des linearen Operators F'(a) ist. Da $\mathcal{D}(F)$ nicht abgeschlossen ist, sind die Iterationen (4.45) und (4.46) nur dann wohldefiniert, wenn a_{k+1} wieder in $\mathcal{D}(F)$ liegt. Sonst muß die Iteration abgebrochen werden. Das Verfahren (4.46) ist äquivalent zur Bestimmung der Iterierten a_{k+1} als Lösung des Minimierungsproblems

$$\|\tilde{s} - (F(a_k) + F'(a_k)(a - a_k))\|_{L^2(0,T)}^2 + \alpha_k \|a - a_k\|_{H^2(0,1)}^2 \xrightarrow[a \in \mathcal{H}_a]{} \min$$

für $\alpha_k > 0$. Ein hierzu sehr ähnliches Verfahren ist die *iterativ regularisierende* Gauß-Newton-Methode, kurz IRGN-Methode, die durch

$$a_{k+1} = a_k - \left(F'(a_k)^* F'(a_k) + \alpha_k I\right)^{-1} F'(a_k)^* \left(F(a_k) - \tilde{s} + \alpha_k(a_k - a_0)\right)$$
(4.48)

definiert ist. Hierzu ist

$$\|\tilde{s} - \left(F(a_k) + F'(a_k)(a - a_k)\right)\|_{L^2(0,T)}^2 + \alpha_k \|a - a_0\|_{H^2(0,1)}^2 \xrightarrow[a \in \mathcal{H}_a]{} \min$$

das äquivalente Minimierungsproblem. Der Unterschied zwischen den beiden Verfahren besteht also lediglich in der Wahl des Strafterms. Bei der IRGN-Methode wird während der gesamten Iteration die Startnäherung a_0 festgehalten, was in der Regel zu einer Verbesserung der Stabilität während der Iteration führt.

Eine Schwierigkeit bei diesen beiden Newton-artigen Verfahren liegt darin, eine geeignete Strategie für die optimale Wahl des Parameters α_k zu finden. Hierauf wollen wir jedoch an dieser Stelle nicht näher eingehen.

Ein weiteres iteratives Regularisierungsverfahren ist die Landweber-Iteration, die definiert ist durch

$$a_{k+1} = a_k - \omega F'(a_k)^* (F(a_k) - \tilde{s}).$$
(4.49)

Hierbei ist ω ein geeignet zu wählender Dämpfungsfaktor. Im Vergleich zu den Newton-artigen Methoden benötigt diese Iteration lediglich die Adjungierte

des Operators F'(a), und besitzt deshalb in den Fällen, in denen diese effizient berechnet werden kann, in der Regel einen geringeren Aufwand.

Bei allen drei Verfahren ist es grundlegend wichtig, daß die Iteration rechtzeitig abgebrochen wird, bevor der Datenfehler das Ergebnis verfälscht. Die Wahl des Stop-Index \tilde{k} basiert hierbei häufig auf dem sogenannten *Diskrepanz-Prinzip*, bei dem die Iteration gestoppt wird, sobald das Residuum der Iterierten in der Größenordung des Datenfehlers liegt:

$$\|F(a_{\tilde{k}}) - \tilde{s}\|_{L^2(0,T)} \le \tau \delta < \|F(a_k) - \tilde{s}\|_{L^2(0,T)}, \quad \text{für alle } 0 \le k < \tilde{k}, \quad (4.50)$$

wobei $\tau > 1$ vor Beginn der Iteration fest gewählt wird.

Da wir über den nichtlinearen Operator F viel zu wenige Aussagen machen können wie z. B. Stetigkeit oder Differenzierbarkeit, wollen wir hier gar nicht weiter auf die Konvergenztheorie dieser Verfahren eingehen, sondern verweisen auf weitergehende Literatur wie z. B. [21] für das Levenberg-Marquardt-Verfahren, [6] für die IRGN-Methode und [22] für die Landweber-Iteration jeweils für nichtlineare schlecht gestellte Probleme. In Abschnitt 5.3 wenden wir uns dann konkret der Anwendung dieser Methoden auf unser Problem zu.

Da für diese Iterationsverfahren die Abbildungen $F'(\cdot)$ und $F'(\cdot)^*$ ausgewertet werden müssen, werden diese nun im folgenden berechnet.

4.2.2 Die Ableitung F'(a)

Da nicht nur der freie Rand s eine Funktion des Koeffizienten a ist, sondern auch die Lösung u von (4.1), definieren wir zur Vereinfachung den Lösungsoperator

$$U: \begin{cases} \mathcal{D}(F) \to C(\overline{H}_T \setminus \{(0,0)\}) \\ a \mapsto u(\cdot, \cdot) = u(\cdot, \cdot; a) \end{cases},$$

der einer zulässigen Funktion a die schwache Lösung u des Cauchy-Dirichlet-Problems (4.1) mit a als Koeffizienten zuweist.

Im nun folgenden Abschnitt wenden wir uns der Herleitung der Ableitung von F zu, indem wir formal das Gâteaux-Differential F'(a)h berechnen.

4.2.2.1 Die formale Berechnung

Es sei nun nachfolgend stets $a \in \mathcal{D}(F)$ und $h \in \mathcal{H}_a$ fest und derart gewählt, daß $\tilde{a} = \tilde{a}_{\varepsilon} := a + \varepsilon h \in \mathcal{D}(F)$ für hinreichend kleine $\varepsilon > 0$. Ferner sei u = U(a)und $\tilde{u} = \tilde{u}_{\varepsilon} = u + \varepsilon v_{\varepsilon} := U(\tilde{a})$ sowie s = F(a) und $\tilde{s} = \tilde{s}_{\varepsilon} = s + \varepsilon \sigma_{\varepsilon} := F(\tilde{a})$. Weiterhin definieren wir $\tilde{P}_T := \{(z,t) \mid 0 < z < \tilde{s}(t), 0 < t \leq T\}, \tilde{\Gamma} := \{(\tilde{s}(t),t) \mid 0 < t \leq T\}$ sowie $\tilde{G}_T := H_T \setminus \{\tilde{P}_T \cup \tilde{\Gamma}\}.$ Im weiteren machen wir vereinfachend die Annahme, daß $\tilde{s}(t) - s(t) \ge 0$ für alle t > 0 gilt, so daß sich die oben definierten Gebiete in etwa so ergeben wie in Abbildung 4.4 dargestellt.



Abbildung 4.4: Gebiete P_T und \tilde{P}_T

In Abbildung 4.5 haben wir grob den Verlauf der beiden Lösungen u und \tilde{u} zu einem festen Zeitpunkt $t_0 > 0$ skizziert. Hierbei ist die Differenz $\varepsilon v_{\varepsilon} = \tilde{u} - u$ fett eingezeichnet.



Abbildung 4.5: Die Lösungen u und \tilde{u} zu einem festen Zeitpunkt t_0

Die Funktion $v_{\varepsilon}(z, t_0) = (\tilde{u}(z, t_0) - u(z, t_0))/\varepsilon$ ist in den Intervallen $(0, s(t_0))$ und $(s(t_0), \tilde{s}(t_0))$ jeweils glatt, in $s(t_0)$ und $\tilde{s}(t_0)$ besitzt $v_{\varepsilon,z}$ jedoch wegen der Annahme (V3) (Seite 36) Sprungstellen. Da u in $(s(t_0), \tilde{s}(t_0))$ verschwindet, nimmt v_{ε} dort den monotonen Verlauf von \tilde{u} an. Genauso wie u und \tilde{u} ist v_{ε} also aus $C(\overline{H}_T \setminus \{(0,0)\})$ und für $(z,t) \to (0,0)$ beschränkt, aber nicht stetig.

Für die vereinfachte Situation aus Abbildung 4.4 stellen wir nun exemplarisch Voraussetzungen auf, unter denen wir im anschließenden Satz formal die Richtungsableitung F'(a)h berechnen. Für den allgemeinen, jedoch weitaus komplizierteren Fall, daß sich die Kurven *s* und \tilde{s} schneiden, erhält man unter leicht modifizierten Voraussetzungen analog das gleiche Resultat.

Wir schreiben im folgenden kurz v für v_{ε} und σ für σ_{ε} , behalten dabei jedoch stets die Abhängigkeit von ε in Erinnerung.

Es gelte:

(A1)
$$\tilde{s}(t) - s(t) = \varepsilon \sigma(t) = O(\varepsilon)$$
 für $\varepsilon \to 0$ für alle $t \in (0, T]$,

(A2)
$$v(z,t) = \frac{\overline{u} - u}{\varepsilon}(z,t) \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} w(z,t)$$
 gleichmäßig in \overline{P}_T ,

(A3) w besitzt in P_T eine schwache Ableitung w_z mit

$$||a(\tilde{u})v_z - a(u)w_z||_{L^2(P_T)} \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} 0,$$

(A4)
$$\varepsilon \|h(\tilde{u})v_z\|_{L^2(P_T)} \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} 0,$$

(A5)
$$\tilde{u}_z|_{\Gamma} \to u_z|_{\Gamma}$$
 für $\varepsilon \to 0$

(A6)
$$0 = \tilde{u}|_{\tilde{\Gamma}} = \tilde{u}|_{\Gamma} + \tilde{u}_z|_{\Gamma} (\tilde{s}(t) - s(t)) + o(\varepsilon)$$
 für $\varepsilon \to 0$ und alle $t \in (0, T]$.

Diese Annahmen sind stärker als die Differenzierbarkeit von U und F an der Stelle a in Richtung h. Die Grenzfunktion w entspricht der Richtungsableitung von U und σ der Ableitung F'(a)h. Die Funktion w ist aufgrund der gleichmäßigen Konvergenz aus $C(\overline{P}_T \setminus \{(0,0)\})$ und in \overline{P}_T beschränkt.

Mit den oben eingeführten Bezeichnungen formulieren wir nun folgenden Satz über die Richtungsableitung F'(a)h:

Satz 4.2.1

Sei $a \in \mathcal{D}(F)$ und $h \in \mathcal{H}_a$ mit u = U(a) und s = F(a). Unter den Voraussetzungen (A1)-(A6) und (V1)-(V4) von Seite 36 ergibt sich die Ableitung F'(a)h für $t \in (0,T]$ zu

$$\left(F'(a)h\right)(t) = -\frac{w}{u_z}\big|_{\Gamma},\tag{4.51}$$

wobei die Funktion w für alle Testfunktionen $\varphi \in \mathcal{T}$ (vgl. (4.3)) der Bedingung

$$\iint_{P_T} w\varphi_t \, dz \, dt = \iint_{P_T} \left\{ a(u)w_z + a'(u)u_zw + b'(u)w + h(u)u_z \right\} \varphi_z \, dz \, dt \quad (4.52a)$$

genügt und zudem die Randwerte

$$w(0,t) = 0$$
 für $t \in (0,T]$ (4.52b)

besitzt.

Beweis: 1. Wir zeigen zunächst (4.51): Aus (A6) ergibt sich

$$\begin{split} 0 &= \tilde{u}\big|_{\tilde{\Gamma}} = \tilde{u}\big|_{\Gamma} + \tilde{u}_z\big|_{\Gamma} \big(\tilde{s}(t) - s(t)\big) + o(\varepsilon) \\ &= \varepsilon v\big|_{\Gamma} + (u_z\big|_{\Gamma} + \varepsilon v_z\big|_{\Gamma})\varepsilon\sigma(t) + o(\varepsilon) \quad \text{ für } \varepsilon \to 0, \end{split}$$

und anschließende Division durch ε führt auf

$$0 = v \big|_{\Gamma} + (u_z \big|_{\Gamma} + \varepsilon v_z \big|_{\Gamma}) \sigma(t) + o(1) \quad (\varepsilon \to 0).$$

$$(4.53)$$

Aus (A5) folgt, daß

$$\varepsilon v_z \big|_{\Gamma} = (\tilde{u}_z - u_z) \big|_{\Gamma} = o(1) \quad \text{für } \varepsilon \to 0.$$

Lassen wir hiermit in (4.53) ε gegen Null gehen, so ergibt sich aufgrund der Annahmen (A1) und (A2)

$$0 = w \big|_{\Gamma} + u_z \big|_{\Gamma} \lim_{\varepsilon \to 0} \sigma(t).$$
(4.54)

Hieraus erhalten wir wegen der Voraussetzung (V3) für die Richtungsableitung $F^\prime(a)h$ die Beziehung

$$\left(F'(a)h\right)(t) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\tilde{s}(t) - s(t)}{\varepsilon} = \lim_{\varepsilon \to 0} \sigma(t) = -\frac{w}{u_z}\Big|_{\Gamma}.$$
(4.55)

2. Im folgenden zeigen wir nun, daß w der Bedingung (4.52a) genügt. Hierzu beweisen wir vorab zwei wichtige Aussagen:

(i) Da v für festes t in $[s(t), \tilde{s}(t)]$ monoton fallend ist (vgl. Abbildung 4.5) und zudem aufgrund der gleichmäßigen Konvergenz gleichmäßig beschränkt in \overline{P}_T ist, folgt

$$0 \le v(z,t) \le v \big|_{\Gamma} \le C \quad \text{ für alle } (z,t) \in \{\tilde{P}_T \cup \tilde{\Gamma}\} \setminus P_T \text{ und } \varepsilon > 0 \quad (4.56)$$

für ein C > 0. Also ist v wegen $v \equiv 0$ in $\overline{\tilde{G}}_T$ gleichmäßig beschränkt in \overline{H}_T für $\varepsilon \to 0$.

(ii) Als nächstes betrachten wir die Taylorentwicklung des Koeffizienten aaus $\mathcal{D}(F)\subset H^2(0,1)$

$$a(\nu) = a(\nu_0) + a'(\nu_0)(\nu - \nu_0) + O((\nu - \nu_0)^{3/2}) \quad (\nu \to \nu_0)$$

mit $\nu, \nu_0 \in [0,1]$ und $\nu \neq \nu_0$. Sei $(z,t) \in \overline{H}_T$ fest und $\nu = \tilde{u}(z,t)$ sowie $\nu_0 = u(z,t)$. Wie in (i) bewiesen gilt v(z,t) = O(1) gleichmäßig in \overline{H}_T für $\varepsilon \to 0$, und wir erhalten ebenfalls gleichmäßig in \overline{H}_T

$$a(\tilde{u}(z,t)) = a(u(z,t)) + a'(u(z,t))(\tilde{u}-u)(z,t) + O((\tilde{u}-u)^{3/2}(z,t))$$

$$= a(u(z,t)) + a'(u(z,t))\varepsilon v(z,t) + O(\varepsilon^{3/2}) \quad \text{für } \varepsilon \to 0.$$
(4.57)

Analog läßt sich der Koeffizient *b* für jedes $(z,t) \in \overline{H}_T$ durch

$$b\big(\tilde{u}(z,t)\big) = b\big(u(z,t)\big) + b'\big(u(z,t)\big)\varepsilon v(z,t) + O(\varepsilon^2) \quad \text{für } \varepsilon \to 0 \tag{4.58}$$

darstellen, wobei auch hier der Fehlerterm $O(\varepsilon^2)$ gleichmäßig in \overline{H}_T ist.

(iii) Wir wählen nun zunächst $\varphi \in \mathfrak{T} \cap C^1(\overline{\tilde{P}}_T)$ beliebig. Die Funktion u ist eine schwache Lösung von (4.1) und erfüllt somit gemäß Definition 4.1.1 (iv) die Gleichung

$$\iint_{H_T} u\varphi_t \, dz \, dt = \iint_{H_T} \{A(u)_z + b(u)\}\varphi_z \, dz \, dt.$$
(4.59)

Analog gilt für \tilde{u} mit $\tilde{A}(\tilde{u}) := \int_0^{\tilde{u}} \tilde{a}(\nu) d\nu$

$$\iint_{H_T} \tilde{u}\varphi_t \, dz \, dt = \iint_{H_T} \{\tilde{A}(\tilde{u})_z + b(\tilde{u})\}\varphi_z \, dz \, dt.$$
(4.60)

Subtrahieren wir die Gleichungen (4.59) und (4.60) voneinander, so ergibt sich

$$\iint_{H_T} \varepsilon v \varphi_t \, dz \, dt = \iint_{H_T} \big\{ \tilde{A}(\tilde{u})_z - A(u)_z + b(\tilde{u}) - b(u) \big\} \varphi_z \, dz \, dt.$$

Die schwachen Lösungen u und \tilde{u} besitzen nach Satz 4.1.6 jeweils einen kompakten Träger und sind also nur in P_T bzw. \tilde{P}_T von Null verschieden. Somit verschwindet v in $\overline{\tilde{G}}_T$. Gleichzeitig sind u und \tilde{u} im Inneren ihres Trägers klassische Lösungen, also gilt $A(u)_z = a(u)u_z$ in P_T und $\tilde{A}(\tilde{u})_z = \tilde{a}(\tilde{u})\tilde{u}_z$ in $\tilde{P}_T.$ Nutzen wir diese Eigenschaften aus und schreiben die Terme des zweiten Integranden etwas um, so erhalten wir

$$\iint_{\tilde{P}_T} \varepsilon v \varphi_t \, dz \, dt = \iint_{P_T} \big(a(\tilde{u}) - a(u) \big) u_z \varphi_z \, dz \, dt + \iint_{\tilde{P}_T} \big\{ a(\tilde{u}) \big(\tilde{u}_z - u_z \big) + \varepsilon h(\tilde{u}) \tilde{u}_z + b(\tilde{u}) - b(u) \big\} \varphi_z \, dz \, dt.$$

Durch Einsetzen der Taylorentwicklungen (4.57) und (4.58) ergibt sich hieraus für $\varepsilon \to 0$

$$\iint_{\tilde{P}_{T}} \varepsilon v \varphi_{t} dz dt = \iint_{P_{T}} \{a'(u)\varepsilon v u_{z} + O(\varepsilon^{3/2})u_{z}\}\varphi_{z} dz dt + \iint_{\tilde{P}_{T}} \{a(\tilde{u})\varepsilon v_{z} + \varepsilon h(\tilde{u})\tilde{u}_{z} + b'(u)\varepsilon v + O(\varepsilon^{2})\}\varphi_{z} dz dt.$$

Dividieren wir anschließend noch durch ε , so führt dies auf die Gleichung

$$\iint_{\tilde{P}_{T}} v\varphi_{t} dz dt = \iint_{P_{T}} \{a'(u)vu_{z} + O(\sqrt{\varepsilon})u_{z}\}\varphi_{z} dz dt + \iint_{\tilde{P}_{T}} \{a(\tilde{u})v_{z} + h(\tilde{u})\tilde{u}_{z} + b'(u)v + O(\varepsilon)\}\varphi_{z} dz dt,$$

$$(4.61)$$

für die wir im folgenden den Grenzwert für $\varepsilon \to 0$ untersuchen wollen. Zunächst betrachten wir das Integral auf der linken Seite des Gleichheitszeichens. Wegen der gleichmäßigen Konvergenz von v in \overline{P}_T ((A2)) erhalten wir mit Hilfe von [23, Satz 104.4], daß

$$\iint_{P_T} v\varphi_t \, dz \, dt \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} \iint_{P_T} w\varphi_t \, dz \, dt.$$

Wegen (4.56) ist v in $\{\tilde{P}_T \cup \tilde{\Gamma}\} \setminus P_T$ gleichmäßig beschränkt und

$$\iint_{\tilde{P}_T \setminus P_T} v \varphi_t \, dz \, dt \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} 0,$$

da die Fläche des Integrationsgebietes für $\varepsilon \to 0$ verschwindet. Ganz analog erhalten wir, daß

$$\iint_{\tilde{P}_T} \left(b'(u)v + O(\varepsilon) \right) \varphi_z \, dz \, dt \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} \iint_{P_T} b'(u) w \varphi_z \, dz \, dt.$$

Für das erste Integral auf der rechten Seite des Gleichheitszeichens in (4.61) verwenden wir zusätzlich noch das Argument $u_z \in L^2(P_T)$ ((4.21)) und folgern

$$\iint_{P_T} \{a'(u)vu_z + O(\sqrt{\varepsilon})u_z\}\varphi_z \, dz \, dt \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} \iint_{P_T} a'(u)wu_z\varphi_z \, dz \, dt.$$

Wir betrachten nun als nächstes

$$\iint_{\tilde{P}_{T}} a(\tilde{u}) v_{z} \varphi_{z} \, dz \, dt = \underbrace{\iint_{P_{T}} a(\tilde{u}) v_{z} \varphi_{z} \, dz \, dt}_{:=\mathrm{I1}} + \underbrace{\iint_{\tilde{P}_{T} \setminus P_{T}} a(\tilde{u}) v_{z} \varphi_{z} \, dz \, dt}_{:=\mathrm{I2}} .$$

Aufgrund der Annahme (A3) ergibt sich unmittelbar

I1
$$\xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} \iint_{P_T} a(u) w_z \varphi_z \, dz \, dt.$$

Das Integral I2 läßt sich folgendermaßen abschätzen:

$$|I2| \leq \iint_{\tilde{P}_T \setminus P_T} |a(\tilde{u}) v_z \varphi_z| \, dz \, dt \leq \max_{\overline{\tilde{P}_T \setminus P_T}} |a(\tilde{u}) \varphi_z| \iint_{\tilde{P}_T \setminus P_T} |v_z| \, dz \, dt.$$
(4.62)

Wegen $\tilde{u}_z \in L^2(\tilde{P}_T)$ ((4.21)) ist v_z aus $L^2(\tilde{P}_T \setminus P_T)$, allerdings ist $||v_z||_{L^2(\tilde{P}_T \setminus P_T)}$ für $\varepsilon \to 0$ nicht unbedingt beschränkt. Wir verwenden deshalb, daß aus (V3) $v_z < 0$ in $\tilde{P}_T \setminus \overline{P}_T$ folgt, und erhalten schließlich aus (4.56)

$$\iint_{\tilde{P}_T \setminus P_T} |v_z| \, dz \, dt = -\iint_{\tilde{P}_T \setminus P_T} v_z \, dz \, dt = -\int_0^T \int_{s(t)}^{\tilde{s}(t)} v_z \, dz \, dt = -\int_0^T v \Big|_{s(t)}^{\tilde{s}(t)} dt$$

$$= \int_0^T v \Big|_{\Gamma} \, dt = O(1) \quad \text{für } \varepsilon \to 0.$$
(4.63)

Wegen Voraussetzung (V3) gilt

$$\max_{\overline{\tilde{P}}_T \backslash P_T} |a(\tilde{u})| = \max_{t \in [0,T]} \max_{\nu \in [0,\tilde{u}(s(t),t)]} |a(\nu)|,$$

woraus sich mit der Stetigkeit von a in $[0, \tilde{u}|_{\Gamma}]$ und der gleichmäßigen Konvergenz $\tilde{u}|_{\Gamma} \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} 0$ folgern läßt, daß

$$\max_{\overline{\tilde{P}}_T \setminus P_T} |a(\tilde{u})| \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} a(0) = 0.$$
(4.64)

Wir haben also durch (4.62)-(4.64) nachgewiesen, daß das Integral I2 für $\varepsilon \to 0$ gegen Null konvergiert.

Schließlich muß noch das Integral über $h(\tilde{u})\tilde{u}_z\varphi_z$ untersucht werden. In $\tilde{P}_T \setminus \overline{P}_T$ ist $h(\tilde{u})\tilde{u}_z = \varepsilon h(\varepsilon v)v_z$ und somit ergibt sich aus (4.63) und der Beschränktheit von h und φ , daß

$$\iint_{\tilde{P}_T \setminus P_T} h(\tilde{u}) \tilde{u}_z \varphi_z \, dz \, dt \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} 0.$$

Für das Integral über P_T erhalten wir schließlich aus (A4) und der gleichmäßigen Konvergenz von \tilde{u} gegen u in P_T

$$\iint_{P_T} h(\tilde{u})(u_z + \varepsilon v_z)\varphi_z \, dz \, dt \xrightarrow[\varepsilon \to 0]{} \iint_{P_T} h(u)u_z\varphi_z \, dz \, dt.$$

Insgesamt haben wir somit gezeigt, daß (4.61) für $\varepsilon \to 0$ in die Gleichung

$$\iint_{P_T} w\varphi_t \, dz \, dt = \iint_{P_T} \left\{ a'(u)u_z w + a(u)w_z + b'(u)w + h(u)u_z \right\} \varphi_z \, dz \, dt \quad (4.65)$$

übergeht. Da die Integranden aufgrund der Voraussetzungen aus $L^2(P_T)$ bzw. in \overline{P}_T beschränkt sind, und $C^1(\overline{P}_T)$ dicht in $H^1(P_T)$ liegt, gilt (4.65) auch für beliebige $\varphi \in \mathcal{T}$, womit Bedingung (4.52a) erfüllt ist.

3. Da für all
e $\varepsilon>0$

$$v(0,t) = \frac{\tilde{u}(0,t) - u(0,t)}{\varepsilon} = 0 \quad \text{ für } 0 < t \le T$$

gilt, erhalten wir für w die Vorgaben (4.52b).

Wir haben somit die Richtungsableitung
$$F'(a)h$$
 auf Bedingung (4.52)
zurückgeführt. Im folgenden zeigen wir, daß (4.52) eine Variationsformulie-
rung eines Randwertproblems für w ist. Da φ eine beliebige Testfunktion aus
 \Im ist, gilt (4.65) insbesondere auch für $\varphi \in \Im$ mit kompaktem Träger in P_T .
Für ein solches φ und unter der Annahme, daß w hinreichend glatt ist, führt
partielle Integration auf beiden Seiten in (4.65) zu

$$\iint_{P_{T}} w_{t}\varphi \, dz \, dt = \iint_{P_{T}} \{a'(u)u_{z}w + a(u)w_{z} + b'(u)w + h(u)u_{z}\}_{z}\varphi \, dz \, dt$$

$$= \iint_{P_{T}} \{(a(u)w)_{zz} + (b'(u)w)_{z} + (h(u)u_{z})_{z}\}\varphi \, dz \, dt.$$
(4.66)

53

Wir folgern hieraus, daß w fast überall in P_T der Differentialgleichung

$$w_t = (a(u)w)_{zz} + (b'(u)w)_z + (h(u)u_z)_z$$
(4.67)

genügt.

Abschließend untersuchen wir, ob sich mit Hilfe von (4.52a) weitere Randbedingungen an w herleiten lassen. Hierzu wählen wir wieder eine beliebige Testfunktion $\varphi \in \mathcal{T}$ und führen in beiden Integralen in (4.65) partielle Integration durch. Das erste Integral ergibt sich aufgrund der Annahme (V2), daß s streng monoton wachsend und somit invertierbar ist, zu

$$\iint_{P_T} w\varphi_t \, dz \, dt = \int_0^{s(T)} \int_{s^{-1}(z)}^T w\varphi_t \, dt \, dz$$

$$= -\iint_{P_T} w_t \varphi \, dz \, dt + \int_0^{s(T)} w\varphi \Big|_{s^{-1}(z)}^T dz,$$
(4.68)

und für das zweite Integral in (4.65) erhalten wir

$$\iint_{P_{T}} \{a'(u)u_{z}w + a(u)w_{z} + b'(u)w + h(u)u_{z}\}\varphi_{z} dz dt$$

$$= -\iint_{P_{T}} \{(a(u)w)_{z} + b'(u)w + h(u)u_{z}\}_{z}\varphi dz dt$$

$$+ \int_{0}^{T} \{a'(u)u_{z}w + a(u)w_{z} + b'(u)w + h(u)u_{z}\}\varphi\Big|_{0}^{s(t)^{-}} dt.$$
(4.69)

Mit Hilfe von (4.68) und (4.69) folgt nun aus der Differentialgleichung (4.67), den Randwerten von φ und $h(u)u_z|_{\Gamma} = 0$, daß

$$-\int_{0}^{s(T)} (w\varphi)(z, s^{-1}(z)) dz = \int_{0}^{T} \left\{ \left(a'(u)u_{z} + b'(u) \right) w\varphi + a(u)w_{z}\varphi \right\} \Big|_{\Gamma} dt.$$
(4.70)

Das Integral auf der linken Seite des Gleichheitszeichens formen wir mit der Substitution $t = s^{-1}(z)$, die wir wegen (V1) und (V2) auf Seite 36 anwenden dürfen, um zu

$$-\int_{0}^{s(T)} (w\varphi)(z, s^{-1}(z)) dz = -\int_{0}^{T} (w\varphi) \big|_{\Gamma} s'(t) dt.$$
(4.71)

Für die Terme im zweiten Integral in (4.70) erinnern wir uns an die Beziehung (4.25) für den freien Rand

$$s'(t) = -(a'(0)u_z|_{\Gamma} + b'(0)) = -(a'(u)u_z + b'(u))|_{\Gamma}$$

und setzen diese zusammen mit (4.71) in (4.70) ein. Das erste Integral in (4.70) hebt sich somit auf, und es resultiert die Forderung

$$0 = \int_0^T \left(a(u) w_z \varphi \right) \Big|_{\Gamma} dt.$$
(4.72)

Da φ beliebig gewählt war und somit auf Γ beliebige Werte annehmen kann, folgt schließlich aus (4.72)

$$(a(u)w_z)|_{\Gamma} = 0$$
 fast überall in $(0,T]$. (4.73)

Also ergeben sich wegen $a(u)|_{\Gamma} = 0$ keine weiteren Randvorgaben an w.

Bedingung (4.52) ist also eine Variationsformulierung des folgenden Randwertproblems

$$w_t = (a(u)w)_{zz} + (b'(u)w)_z + (h(u)u_z)_z$$
 in P_T , (4.74a)

$$w(0,t) = 0$$
 für $t \in (0,T]$. (4.74b)

Um F'(a) auszuwerten, müssen zunächst die Lösung u und der freie Rand s aus dem direkten Problem bestimmt werden und anschließend hiermit die Lösung w von (4.74). Der Wert der Richtungsableitung ergibt sich dann aus (4.51). Gehen wir davon aus, daß w in \overline{P}_T beschränkt ist, so gilt automatisch wegen $u_z|_{\Gamma} \xrightarrow[t \to 0]{} -\infty$, daß

$$\left(F'(a)h\right)(t) \xrightarrow[t\to 0]{} 0.$$
 (4.75)

Wir haben bisher nachgewiesen, daß die Funktion w, falls sie, grob gesprochen, als Grenzfunktion existiert und beschränkt ist, dem Problem (4.74) genügt. Umgekehrt müssen wir uns nun die Frage stellen, ob (4.74) unter den gegebenen Voraussetzungen in der Tat eine beschränkte Lösung besitzt. Wir werden uns im folgenden deshalb genauer mit dem Randwertproblem (4.74) auseinandersetzen.

4.2.2.2 Das Randwertproblem (4.74)

Die lineare Differentialgleichung (4.74a) ist in P_T parabolisch, degeneriert aber auf dem Rand Γ , da dort der Diffusionskoeffizient a(u) verschwindet. Gleichzeitig besitzt das Problem (4.74) auf Γ keine Randvorgaben, da sich aus (4.73)

keine echte Randbedingung an w bzw. w_z ergibt, sondern lediglich eine "obere Schranke" an eine mögliche Singularität von w_z auf Γ . Im Vergleich zu Randwertproblemen für regulär parabolische Differentialgleichungen sind also weniger Randwerte vorgeschrieben. Die Differentialgleichung (4.74a) läßt sich aufgrund ihrer Degeneriertheit in die Differentialgleichungen mit nichtnegativer charakteristischer Form einordnen, über die Olejnik und Radkevic in [35] eine umfangreiche Theorie entwickelt haben. Das Randwertproblem (4.74) entspricht in der Struktur genau dem dort definierten ersten Randwertproblem, bei dem nur auf speziell ausgewählten Komponenten des Randes des zugrundeliegenden Gebietes Randwerte vorgeschrieben werden. Dieses sogenannte Fichera-Problem wird auf Fichera ([15]) zurückgeführt. Differenziert man die Terme in (4.67) aus, so sind die entstehenden Koeffizienten aufgrund der entsprechenden Eigenschaften von u unstetig in (0,0) bzw. sogar unbeschränkt. Da hierdurch Voraussetzungen an die Koeffizienten in [35] verletzt sind, läßt sich diese Lösungstheorie nicht anwenden. Auch ähnliche Resultate in [29] oder [32] sind für unser Problem nicht gültig. Wir wollen jedoch trotzdem den der oben erwähnten Literatur zugrundeliegenden Lösungsbegriff vorstellen und anhand dessen die Existenz einer beschränkten Lösung diskutieren. Hierzu verwenden wir zunächst in (4.52a) die Substitution x = z/s(t), diese entspricht der Transformation (4.28) aus Abschnitt 4.1.3, und erhalten für die Functionen $\bar{w}(x,t) := w(xs(t),t)$ und $\bar{\varphi}(x,t) := \varphi(xs(t),t)$ die Formulierung

$$\iint_{R_T} s\bar{w}\bar{\varphi}_t \, dx \, dt = \iint_{R_T} \left\{ \frac{a(\bar{u})}{s} \bar{w}_x + \left(\frac{a'(\bar{u})}{s} \bar{u}_x + b'(\bar{u}) + xs'\right) \bar{w} + \frac{h(\bar{u})}{s} \bar{u}_x \right\} \bar{\varphi}_x \, dx \, dt.$$

$$(4.76)$$

Hierbei ist \bar{u} die Lösung von (4.37). Wir definieren nun entsprechend zu [29] oder [15] das Innenprodukt

$$\langle \varphi, \chi \rangle_{\mathcal{W}} := \iint_{R_T} \left\{ \frac{a(\bar{u})}{s} \varphi_x \chi_x + \varphi \chi \right\} dx dt$$

über dem Raum $\mathcal{V}:=\{\varphi\in C^1(R_T)\,|\,\varphi\big|_{x=0}\equiv 0\}$ und bilden mit der zugehörigen Norm

$$\|\varphi\|_{\mathcal{W}} = \langle \varphi, \varphi \rangle_{\mathcal{W}}^{1/2} = \left(\|\sqrt{a(\bar{u})/s} \,\varphi_x\|_{L^2(R_T)}^2 + \|\varphi\|_{L^2(R_T)}^2 \right)^{1/2}$$

den Abschluß $\mathcal{W}:=\overline{\mathcal{V}}^{\|\cdot\|_{\mathcal{W}}}.$

Des weiteren definieren wir $\mathcal{U} := \{\psi \in C^1(R_T) \,|\, \psi \big|_{x=0} \equiv 0, \psi \big|_{t=T} \equiv 0\}$ und über \mathcal{U} das Innenprodukt

$$\langle \varphi, \chi \rangle_{\mathcal{Z}} := \iint_{R_T} \left\{ \frac{a(\bar{u})}{s} \varphi_x \chi_x + \varphi \chi + s^2 \varphi_t \chi_t \right\} dx dt.$$

Mit \mathcal{Z} werde der Abschluß $\mathcal{Z} = \overline{\mathcal{U}}^{\|\cdot\|_{\mathcal{Z}}}$ in der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{Z}} = \langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{Z}}^{1/2}$ bezeichnet. Mit Hilfe von (4.76) läßt sich eine Lösung $\overline{w} \in \mathcal{W}$ von (4.74) definieren durch das Variationsproblem

$$B(\bar{w},\chi) = -\iint_{R_T} \frac{h(\bar{u})}{s} \bar{u}_x \chi_x \, dx \, dt \quad \text{für alle } \chi \in \mathcal{Z} \subset \mathcal{W}$$
(4.77)

mit der Bilinearform

$$B(\bar{w},\chi) := \iint_{R_T} \left\{ \frac{a(\bar{u})}{s} \bar{w}_x \chi_x + \left(\frac{a'(\bar{u})}{s} \bar{u}_x + b'(\bar{u}) + xs' \right) \bar{w} \chi_x - s \bar{w} \chi_t \right\} dx \, dt.$$

Betrachtet man für ein festes $t \in (0,T]$ den Term $a'(\bar{u})\bar{u}_x/s + b'(\bar{u}) + xs'$ im Integranden von $B(\cdot, \cdot)$, so ist dieser wegen

$$\lim_{x \to 1} a'(\bar{u})\bar{u}_x/s + b'(\bar{u}) + xs' = a'(0)\bar{u}_x(1,t)/s + b'(0) + s' \stackrel{(4.37e)}{=} 0$$

in [0, 1] beschränkt. Wäre die Funktion 1/s(t) für $t \to 0$ beschränkt, so ließe sich z. B. analog zur Vorgehensweise in [15] die Existenz einer Lösung in \mathcal{W} zeigen. In unserem Fall bleibt jedoch die Existenz einer Lösung $\bar{w} \in \mathcal{W}$ ein offenes Problem.

Wir wollen nun untersuchen, welche Funktionen in dem Raum \mathcal{W} enthalten sind, insbesondere ob diese in R_T beschränkt sind. Setzen wir voraus, daß

$$a(\bar{u}(x,t)) = a(0) + a'(0)\bar{u}_x(1,t)(x-1) + o(|x-1|)$$

= $a'(0)\bar{u}_x(1,t)(x-1) + o(|x-1|)$ für $x \to 1$ (4.78)

gilt, so ergibt sich, daß $\|\cdot\|_{\mathcal{W}}$ äquivalent zur Norm

$$\|\chi\|_{1-x} := \left(\iint_{R_T} \left\{\frac{1-x}{s}\chi_x^2 + \chi^2\right\} dx \, dt\right)^{1/2} \quad \text{für } \chi \in \mathcal{W}$$

ist. Somit sind Funktionen mit einer logarithmischen Singularität bei x = 1wie z. B. $\varphi(x,t) = \sqrt{s(t)} \log (1-x)$ in \mathcal{W} ausgeschlossen. Hingegen ist in \mathcal{W} z. B. die Funktion $\varphi(x,t) = \sqrt{s(t)} \log (1 - \log (1-x))$ enthalten, die ebenfalls bei x = 1 eine Singularität besitzt.

Diese Ergebnisse lassen nun sehr stark vermuten, daß im allgemeinen auch die Lösung von (4.74) auf Γ nicht quadratisch integrierbar ist. Falls dies der Fall ist, so läßt sich F'(a)h gemäß (4.51) aus Satz 4.2.1 nicht auswerten, zudem sind bereits die Voraussetzungen dieses Satzes nicht mehr erfüllt. Wir können also davon ausgehen, daß die formal berechnete Ableitung F' ein unbeschränkter Operator ist, die Abbildung F also nicht Gâteaux-differenzierbar

ist. Für unser numerisches Rekonstruktionsverfahren verwenden wir trotz allem die formal berechnete Ableitung aus Satz 4.2.1, indem wir (4.74) numerisch lösen. Die guten Rekonstruktionsergebnisse in Abschnitt 5.4 rechtfertigen unsere Vorgehensweise.

4.2.2.3 Transformation auf ein Rechteckgebiet

Im Hinblick auf das numerische Verfahren, das wir in Abschnitt 5.2 vorstellen, werden wir nun das Randwertproblem (4.74) geeignet transformieren. Hierbei setzen wir jeweils die erforderliche Glattheit von w in \overline{P}_T voraus. Von der Lösung u von (4.1) erbt die Funktion w auch die Eigenschaft, daß sie im Nullpunkt nicht stetig ist und verschiedene Grenzwerte für $(z,t) \rightarrow (0,0)$ besitzt. Aus diesem Grund verwenden wir auch hier analog zu Abschnitt 4.1.3 die Transformation (4.28) und führen (4.74) in ein Randwertproblem für die Funktion $\overline{w}(x,t) := w(xs(t),t)$ im Gebiet R_T über. Analog zur Herleitung von (4.29) erhalten wir

$$\bar{w}_t = \frac{1}{s^2} \left(a(\bar{u})\bar{w} \right)_{xx} + \frac{1}{s} \left(b'(\bar{u})\bar{w} \right)_x + \frac{1}{s} x s' \bar{w}_x + \frac{1}{s^2} \left(h(\bar{u})\bar{u}_x \right)_x \quad \text{in } R_T \quad (4.79a)$$

mit den Randwerten

$$\bar{w}(0,t) = 0$$
 für $t \in (0,T],$ (4.79b)

wobei \bar{u} die Lösung von (4.37) ist.

Wieder wollen wir annehmen, daß sich $\bar{w}(x,t) = w(xs(t),t)$ für $t \to 0$ stetig fortsetzen läßt; die Grenzfunktion werde mit \bar{w}_0 bezeichnet. Um formal eine (4.35) entsprechende Differentialgleichung für \bar{w}_0 herzuleiten, multiplizieren wir (4.79a) mit s^2 und erhalten

$$s^{2}(t)\bar{w}_{t} = (a(\bar{u})\bar{w})_{xx} + s(t)(b'(\bar{u})\bar{w})_{x} + s(t)xs'(t)\bar{w}_{x} + (h(\bar{u})\bar{u}_{x})_{x} \quad \text{in } R_{T}.$$

Vorausgesetzt, daß alle nötigen Grenzwerte existieren, folgt hieraus für $t \to 0,$ daß

$$0 = \left(a(\bar{u})\bar{w}\right)_{xx} - a'(0)\bar{u}_x(1,0)x\bar{w}_x + \left(h(\bar{u})\bar{u}_x\right)_x \quad \text{für } (0,1) \times \{0\}.$$

Wir haben hierzu wieder die Beziehung (4.34) verwendet.

Wegen der transformierten Randwerte $\bar{w}(0,t) = 0$ für $t \in (0,T]$ ergibt sich für \bar{w}_0 also folgendes Problem:

$$\left(a(\bar{u}_0)\bar{w}_0\right)'' - a'(0)\bar{u}_0'(1)x\bar{w}_0' + \left(h(\bar{u}_0)\bar{u}_0'\right)' = 0 \quad \text{in } (0,1) \tag{4.80a}$$

mit

$$\bar{w}_0(0) = 0.$$
 (4.80b)

Hierbei bezeichnet \bar{u}_0 die Fortsetzung von \bar{u} für $t \to 0$ aus Abschnitt 4.1.3.

Wie in (4.79) fehlt auch in diesem Problem der Randwert bei x = 1. Wenn wir (4.79) oder (4.80) numerisch z. B. mit einem Drei-Punkt-Schema in Ortsrichtung lösen wollen, benötigen wir eine zusätzliche Gleichung für die unbekannten Werte auf dem Rand x = 1. Hierzu leiten wir uns im folgenden künstlich eine Randbedingung aus der Differentialgleichung (4.79a) her. Differenziert man in (4.79a) die Terme zweiter Ordnung aus, so führt dies auf

$$\bar{w}_t = \frac{1}{s^2} \Big\{ a(\bar{u})\bar{w}_{xx} + a(\bar{u})_x\bar{w}_x + \big(a(\bar{u})_x\bar{w} + sb'(\bar{u})\bar{w}\big)_x + sxs'\bar{w}_x \\ + h(\bar{u})\bar{u}_{xx} + h(\bar{u})_x\bar{u}_x \Big\}.$$

Bei x = 1 ist $\overline{u} = 0$, und dies führt wegen a(0) = h(0) = 0 auf

$$\bar{w}_t\big|_{x=1} = \frac{1}{s^2} \Big\{ a(\bar{u})_x \bar{w}_x + \big(a(\bar{u})_x \bar{w} + sb'(\bar{u})\bar{w} + ss'\bar{w} \big)_x + h(\bar{u})_x \bar{u}_x \Big\} \big|_{x=1}.$$
(4.81)

Diese Bedingung können wir im folgenden als zusätzliche Gleichung für die Werte von \bar{w} bei x = 1 verwenden.

Diese "künstliche" Randbedingung wird unter anderem in [31] verwendet, wo für degeneriert parabolische Randwertprobleme, die in das Schema des Fichera-Problems passen, finite Differenzen-Verfahren vorgestellt und auf ihre Konvergenz untersucht werden. Implizit ist sie auch in dem finite Differenzen-Schema in [24] enthalten, das dort für eine allgemeinere Klasse von Fichera-Problemen vorgestellt wird.

Ganz analog läßt sich auch das gewöhnliche Randwertproblem (4.80) für \bar{w}_0 behandeln. Wir erhalten bei x = 1 die künstliche Randbedingung

$$0 = (a(\bar{u}_0)'\bar{w}_0)'(1) + a'(0)\bar{u}_0'(1)\bar{w}_0'(1) - a'(0)\bar{u}_0'(1)\bar{w}_0'(1) + h'(0)(\bar{u}_0'(1))^2 = (a(\bar{u}_0)'\bar{w}_0)'(1) + h'(0)(\bar{u}_0'(1))^2,$$

also eine Randbedingung gemischten Typs.

Insgesamt haben wir folgendes Problem für \bar{w} hergeleitet:

$$\bar{w}_t = \frac{1}{s^2} \left(a(\bar{u})\bar{w} \right)_{xx} + \frac{1}{s} \left(b'(\bar{u})\bar{w} \right)_x + \frac{1}{s} xs'\bar{w}_x + \frac{1}{s^2} \left(h(\bar{u})\bar{u}_x \right)_x \quad \text{in } R_T, \quad (4.82a)$$

$$\bar{w}(x,0) = \bar{w}_0(x)$$
 für $x \in [0,1],$ (4.82b)

$$\bar{w}(0,t) = 0$$
 für $t \in (0,T]$, (4.82c)

$$\bar{w}_t \Big|_{x=1} = \frac{1}{s^2} \Big\{ a(\bar{u})_x \bar{w}_x + \big(a(\bar{u})_x \bar{w} + sb'(\bar{u})\bar{w} + ss'\bar{w} \big)_x \\ + h(\bar{u})_x \bar{u}_x \Big\} \Big|_{x=1} \quad \text{für } t \in (0,T],$$

$$(4.82d)$$

wobei \bar{w}_0 folgendes Randwertproblem löst:

$$\left(a(\bar{u}_0)\bar{w}_0\right)'' - a'(0)\bar{u}_0'(1)x\bar{w}_0' + \left(h(\bar{u}_0)\bar{u}_0'\right)' = 0 \quad \text{in } (0,1), \tag{4.83a}$$

$$\bar{w}_0(0) = 0,$$
 (4.83b)

$$(a(\bar{u}_0)'\bar{w}_0)'(1) = -h'(0)(\bar{u}'_0(1))^2.$$
(4.83c)

4.2.3 Die Adjungierte $F'(a)^*$

Der Vollständigkeit halber wollen wir in diesem Abschnitt auch die formale Herleitung der Adjungierten des Operators F'(a) vorstellen. Hierzu nehmen wir an, daß die Ableitung F'(a) existiert und daß Satz 4.2.1 gültig ist. Wir setzen im folgenden also voraus, daß die Lösungen des Variationsproblems (4.77) für $h \in \mathcal{H}_a$ alle in dem Raum $\tilde{\mathcal{W}} := \{ \bar{w} \in \mathcal{W} | \bar{w} |_{x=1} \in L^2(0,T) \}$ enthalten sind. Unter diesen Voraussetzungen leiten wir nun formal die adjungierte Abbildung

$$F'(a)^*: L^2(0,T) \to \mathcal{H}_a$$

bezüglich der Innenprodukte in $L^2(0,T)$ und $H^2(0,1)$ her. Hierbei verwenden wir die Bezeichnungen aus Abschnitt 4.2.2.2.

Satz 4.2.2

Es sei $a \in \mathcal{D}(F)$ sowie u = U(a) und s = F(a). Weiterhin sei $\phi \in L^2(0,T)$ und $\bar{\psi} \in \mathcal{Z}$ eine Lösung des Variationsproblems

$$B(\chi,\bar{\psi}) = -\int_0^T s(t) \frac{\phi(t)}{\bar{u}_x(1,t)} \chi(1,t) \, dt \quad \text{ für alle } \chi \in \tilde{\mathcal{W}}.$$
(4.84)

Dann ist $g = F'(a)^* \phi$ eine Lösung des Randwertproblems

$$\begin{array}{c}
g^{(4)} - g'' + g = f \quad in \ (0,1), \\
g(0) = 0, \quad g''(0) = 0, \quad g''(1) = 0, \quad g'''(1) - g'(1) = 0,
\end{array} \right\}$$
(4.85)

wobei die rechte Seite f durch

$$f(\nu) = \int_0^T \frac{1}{s} \bar{\psi}_x(q(\nu, t), t) dt \quad \text{für } \nu \in (0, 1]$$
(4.86)

gegeben ist. Hierbei sei $x = q(\nu, t)$ die Höhenlinie von \bar{u} zum Wert ν , d. h. $\bar{u}(q(\nu, t), t) = \nu$.

Beweis: Es sei $h \in \mathcal{H}_a$ beliebig und \bar{w} eine zugehörige Lösung von (4.77). Die Funktion $\bar{\psi}$ genügt gemäß der Variationsformulierung (4.77) der Gleichung

$$B(\bar{w}, \bar{\psi}) = -\iint_{R_T} \frac{1}{s} h(\bar{u}) \bar{u}_x \bar{\psi}_x \, dx \, dt.$$
(4.87)

Wir betrachten nun das Integral auf der rechten Seite des Gleichheitszeichens. Unter der Annahme (V3) (Seite 36) sind die Höhenlinien von u und somit auch von \bar{u} wohldefiniert, d. h. aufgrund des Satzes über implizite Funktionen existiert eine Funktion

$$x = q(\nu, t) \quad \text{ mit } \quad \bar{u}(q(\nu, t), t) = \nu \quad \text{ für } 0 \le \nu \le 1, \, 0 \le t \le T.$$

Substituieren wir x für festes t durch die Funktion q, so folgt mit $d\nu = \bar{u}_x dx$

$$\int_{0}^{T} \int_{0}^{1} \frac{1}{s} h(\bar{u}) \bar{u}_{x} \bar{\psi}_{x} \, dx \, dt = \int_{0}^{T} \int_{1}^{0} h(\nu) \frac{1}{s} \bar{\psi}_{x}(q(\nu, t), t) d\nu \, dt$$
$$= -\int_{0}^{1} h(\nu) \Big(\int_{0}^{T} \frac{1}{s} \bar{\psi}_{x}(q(\nu, t), t) \, dt \Big) \, d\nu \qquad (4.88)$$
$$= -\int_{0}^{1} h(\nu) f(\nu) \, d\nu.$$

Da $\bar{\psi}$ eine Lösung von (4.84) ist, gilt

$$B(\bar{w}, \bar{\psi}) = -\int_0^T s(t) \frac{\phi(t)}{\bar{u}_x(1, t)} \bar{w}(1, t) \, dt,$$

und zusammen mit (4.88) und (4.87) ergibt sich hieraus, daß

$$\int_{0}^{T} s \frac{\bar{w}}{\bar{u}_{x}} \big|_{x=1} \phi(t) \, dt = -\int_{0}^{1} h(\nu) f(\nu) \, d\nu. \tag{4.89}$$

Betrachten wir eine Lösung g von (4.85), so erhalten wir aus (4.89), daß

$$\begin{split} \langle h,g \rangle_{H^{2}(0,1)} &= \int_{0}^{1} hg \, d\nu + \int_{0}^{1} h'g' \, d\nu + \int_{0}^{1} h''g'' \, d\nu \\ &= \int_{0}^{1} h\left(g^{(4)} - g'' + g\right) d\nu + hg' \Big|_{0}^{1} + h'g'' \Big|_{0}^{1} - hg''' \Big|_{0}^{1} \\ &= \int_{0}^{1} hf \, d\nu \\ &= -\int_{0}^{T} s \frac{\bar{w}}{\bar{u}_{x}} \Big|_{x=1} \phi(t) \, dt \\ &= \int_{0}^{T} - \frac{w}{u_{z}} \Big|_{\Gamma} \phi(t) \, dt \\ &= \langle F'(a)h, \phi \rangle_{L^{2}(0,T)}. \end{split}$$

Da $h \in \mathcal{H}_a$ und $\phi \in L^2(0,T)$ beliebig gewählt waren, folgt unmittelbar

$$g = F'(a)^*\phi,$$

also die Behauptung.

Wir haben die Auswertung der Adjungierten also formal auf eine Lösung des Variationsproblems (4.84) zurückgeführt, unter der Bedingung, daß sich die Ableitung F'(a) gemäß Satz 4.2.1 auswerten läßt. Die Variationsformulierung (4.84) gehört zu einem Randwertproblem für $\bar{\psi}$, das wir nun herleiten wollen. Hierzu nehmen wir an, daß $\bar{\psi}$ hinreichend glatt ist. Schreibt man (4.84) um zu

$$\iint_{R_T} \left\{ \frac{1}{s} \left(a(\bar{u})\chi \right)_x \bar{\psi}_x + \left(b'(\bar{u}) + xs' \right) \chi \bar{\psi}_x - s\chi \bar{\psi}_t \right\} dx \, dt = -\int_0^T s \frac{\chi}{\bar{u}_x} \Big|_{x=1} \phi(t) \, dt$$

und integriert anschließend den ersten Term partiell nach x, so führt dies auf

$$\iint_{R_T} \left\{ -\frac{1}{s} a(\bar{u}) \bar{\psi}_{xx} + \left(b'(\bar{u}) + xs' \right) \bar{\psi}_x - s \bar{\psi}_t \right\} \chi \, dx \, dt + \int_0^T \frac{1}{s} a(\bar{u}) \bar{\psi}_x \chi |_0^1 \, dt$$
$$= -\int_0^T s(t) \frac{\phi(t)}{\bar{u}_x(1,t)} \chi(1,t) \, dt.$$

Da diese Gleichung für alle $\chi \in \tilde{\mathcal{W}}$ erfüllt sein muß, folgt hieraus wegen $\chi(0,t) = 0$, daß $\bar{\psi}$ in R_T der Differentialgleichung

$$-\frac{1}{s}a(\bar{u})\bar{\psi}_{xx} + (b'(\bar{u}) + xs')\bar{\psi}_x - s\bar{\psi}_t = 0$$

genügt und daß $\bar{\psi}_x(0,t)/s < \infty$ und $\lim_{x\to 1} a(\bar{u})\bar{\psi}_x/s = -s\phi/\bar{u}_x(1,t)$ für t > 0gelten muß. Des weiteren erhalten wir wegen $\bar{\psi} \in \mathbb{Z}$ die homogenen Randvorgaben $\bar{\psi}(0,t) = 0$ und $\bar{\psi}(x,T) = 0$. Führt man für die Differentialgleichung und die Randwerte die Transformation z = xs(t) durch, so ergibt sich für die Funktion $\psi(z,t) := \bar{\psi}(z/s(t),t)$ folgendes Randwertproblem in P_T :

$$\psi_t = -a(u)\psi_{zz} + b'(u)\psi_z \quad \text{in } P_T, \tag{4.90a}$$

$$\psi(z,T) = 0$$
 für $z \in [0, s(T)],$ (4.90b)

$$\psi(0,t) = 0$$
 für $t \in (0,T]$, (4.90c)

$$-(a(u)u_z\psi_z)|_{\Gamma} = \phi(t) \qquad \qquad \text{für } t \in (0,T].$$

$$(4.90d)$$

Dieses Randwertproblem ist rückwärts in der Zeit gestellt und läßt sich mit Hilfe der Transformation $\tau = T - t$ in ein parabolisches Anfangsrandwertproblem überführen. Die Differentialgleichung (4.90a) ist wieder von degeneriert parabolischem Typ, da der Diffusionskoeffizient a(u) auf dem Rand Γ verschwindet. Wir wollen nun die Neumann-Randwerte (4.90d) genauer untersuchen und betrachten hierzu Funktionen $\phi \in C([0,T]), \phi \neq 0$. Wegen $a(u)|_{\Gamma} \equiv 0$ folgt aus (4.90d), daß ψ_z auf dem Rand Γ – zumindest in den Punkten, in denen $\phi \neq 0$ ist – unbeschränkt sein muß. Aus diesem Grund werden wir im folgenden die auf dem Rand vorliegende Singularität genauer untersuchen. Hierzu setzen wir wie in (4.78) voraus, daß sich der Koeffizient a(u(z,t)) in der Nähe von Γ durch

$$a(u(z,t)) = a'(0)u_z|_{\Gamma}(z-s(t)) + o(|z-s(t)|) \quad \text{für } z \to s(t)\text{-}$$

approximieren läßt. Aus der Randbedingung (4.90d) und der Beschränktheit von $u_z|_{\Gamma}$ (vgl. (V3)) ergibt sich somit die Forderung

$$\lim_{z \to s(t)^{-}} - \left(a'(0)u_{z}^{2}(z,t) \left(z - s(t) \right) + o(|z - s(t)|) \right) \psi_{z}(z,t) = \phi(t).$$

Da $0<|a'(0)u_z\big|_{\Gamma}|<\infty$ vorausgesetzt ist (vgl. (4.27) und (V3) auf Seite 36), folgt also

$$\psi_z(z,t) \sim \frac{\phi(t)}{s(t)-z}$$
 für $z \to s(t)$ -

und somit – zumindest wenn $\phi(t) \neq 0$ ist –

$$\psi(z,t) \sim \log(s(t)-z)$$
 für $z \to s(t)$ -.

Dieses Ergebnis ist plausibel, wenn man sich vor Augen führt, daß die Differentialgleichung (4.90a) unter Vernachlässigung der Zeitabhängigkeit vom Typ her einer schwach singulären gewöhnlichen Differentialgleichung entspricht. Differentialgleichungen dieses Typs können bekanntlich auch Lösungen mit einer logarithmischen Singularität besitzen.

Wir haben hiermit also gezeigt, daß starke Lösungen ψ von (4.90) für $\phi \neq 0$ eine logarithmische Singularität auf dem Rand Γ besitzen. Da jede starke Lösung ψ , zurücktransformiert auf $\bar{\psi}(x,t) = \psi(xs,t)$, auch das zugehörige Variationsproblem (4.84) lösen muß, folgt unmittelbar, daß $\bar{\psi} \in \mathbb{Z} \subset \mathcal{W}$. Gerade die Funktionen mit einer logarithmischen Singularität auf dem Rand x = 1, also auf Γ , sind jedoch nicht in \mathcal{W} enthalten, was wir in Abschnitt 4.2.2.2 bereits gezeigt haben. Diesen Widerspruch interpretieren wir als weitere Bestätigung dafür, daß die formal berechnete Ableitung ein unbeschränkter Operator ist und sich im allgemeinen nicht mit Hilfe von (4.51) auswerten läßt, da \bar{w} bei x = 1 nicht definiert ist.

Für unser numerisches Rekonstruktionsverfahren können wir also nicht auf einen adjungierten Operator der Ableitung zurückgreifen. Statt dessen werden wir eine geeignete Projektion der Adjungierten auf einen endlichdimensionalen Teilraum von \mathcal{H}_a verwenden.

4.3 Weitere inverse Probleme

Wie schon in Abschnitt 2.2 erwähnt, lassen sich bezüglich des Cauchy-Dirichlet-Problems (2.9) weitere inverse Probleme, z. B. zur Bestimmung der hydraulischen Funktion K, formulieren. Im folgenden fassen wir diese weiteren Möglichkeiten kurz zusammen.

4.3.1 Bestimmung von b

Zunächst betrachten wir das Problem (4.1) mit einem fest gewählten Koeffizienten $a \in \mathcal{D}(F)$. Aus bekanntem freien Rand *s* soll nun die Leitfähigkeitsfunktion *b* bestimmt werden. Das zugehörige direkte Problem läßt sich wieder als nichtlineare Abbildung

$$F_2: \begin{cases} \mathcal{D}(F_2) \subset \mathcal{H}_a \to L^2(0,T) \\ b \mapsto s(\,\cdot\,) = s(\,\cdot\,;b) \end{cases}$$

schreiben, die einer Leitfähigkeit b über das Cauchy-Dirichlet-Problem (4.1) den freien Rand s zuweist. Die Menge $\mathcal{D}(F_2)$ ist hierbei so gewählt, daß das direkte Problem wohldefiniert ist, d. h. daß b den Voraussetzungen aus Abschnitt 4.1.1 für die Lösungstheorie von (4.1) genügt.

Die formale Ableitung $F'_2(b) : \mathcal{D}(F'_2(b)) \subset \mathcal{H}_a \to L^2(0,T)$ läßt sich analog zu Abschnitt 4.2.2 herleiten zu

$$\left(F_2'(b)h\right)(t) = -\frac{w_2}{u_z}\Big|_{\Gamma}$$

für $t \in (0, T]$ und $h \in \mathcal{H}_a$, wobei w_2 das Randwertproblem

$$w_{2,t} = (a(u)w_2)_{zz} + (b'(u)w_2)_z + (h(u))_z \quad \text{in } P_T, \\ w_2(0,t) = 0 \quad \text{für } t \in (0,T]$$

$$(4.91)$$

löst und u die zugehörige schwache Lösung von (4.1) ist. Das Problem (4.91) entspricht bis auf den Quellterm dem Randwertproblem (4.74), so daß wir uns eine Diskussion der Eigenschaften und Lösbarkeit ersparen können.

Auch die formale Berechnung der Adjungierten $F'_2(b)^* : L^2(0,T) \to \mathcal{H}_a$ führt analog auf folgendes Ergebnis (wir verwenden die Bezeichnungen von Satz 4.2.2): Für $\phi \in L^2(0,T)$ ist $F'_2(b)^*\phi$ eine Lösung des Randwertproblems (4.85) mit der rechten Seite

$$f_2(
u) = \int_0^T \frac{\bar{\psi}_x}{u_x} (q(
u, t), t) dt, \quad
u \in (0, 1].$$

Hierbei sei $\bar{\psi}$ die Lösung aus Satz 4.2.2. Auch bei der Adjungierten ist das Ergebnis im Vergleich zu $F'(a)^*$ nahezu gleich, lediglich die rechte Seite von (4.85), speziell der Integrand in (4.86), hat sich geändert.

4.3.2 Bestimmung von Ψ'_M

Betrachten wir nun statt (4.1) das Problem (2.9) und setzen K als bekannt voraus, so läßt sich wieder ein nichtlinearer Operator definieren:

$$F_3: \begin{cases} \mathcal{D}(F_3) \subset H^2(0,1) \to L^2(0,T) \\ p = \Psi'_M \mapsto s(\,\cdot\,) = s(\,\cdot\,;p) \end{cases}$$

 F_3 bildet die Ableitung der Wassercharakteristik $p = \Psi'_M$ auf den zugehörigen freien Rand s von (2.9) ab. Die Leitfähigkeitsfunktion K sei hierbei so gewählt, daß sie den Voraussetzungen an b aus Abschnitt 4.1.1 für die Lösbarkeit von (2.9) genügt. Die Menge $\mathcal{D}(F_3)$ sei so definiert, daß $Kp \in \mathcal{D}(F)$ für alle $p \in$ $\mathcal{D}(F_3)$ gilt. Man beachte, daß p aus dem Raum $H^2(0, 1)$ und nicht aus \mathcal{H}_a ist. Das inverse Problem besteht nun wieder darin, zu gegebenen Daten \tilde{s} eine Lösung der nichtlinearen Gleichung

$$F_3(p) = \tilde{s}$$

zu bestimmen. Die formale Ableitung $F'_3(p): \mathcal{D}(F'_3(p)) \subset H^2(0,1) \to L^2(0,T)$ ausgewertet an $h \in H^2(0,1)$ ergibt sich analog zu Abschnitt 4.2.2 zu

$$\left(F_3'(p)h\right)(t) = -\frac{w_3}{u_z}\big|_{\Gamma} \quad \text{ für } t \in (0,T],$$

wobei w_3 eine Lösung des folgenden Randwertproblems ist:

$$\begin{aligned} w_{3,t} &= \left(K(u)p(u)w_3 \right)_{zz} + \left(K'(u)w_3 \right)_z + \left(K(u)h(u)u_z \right)_z & \text{in } P_T, \\ w_3(0,t) &= 0 & \text{für } t \in (0,T]. \end{aligned}$$

$$(4.92)$$

Dieses Randwertproblem entspricht dem Problem (4.74) mit a = Kp und b = K, da die Funktion K(u)h(u) bzw. h(u) in (4.74) im Quellterm jeweils aus \mathcal{H}_a sind.

Auch hier läßt sich wie im Beweis von Satz 4.2.2 formal die Adjungierte $F'_3(p)^* : L^2(0,T) \to H^2(0,1)$ berechnen. Für $\phi \in L^2(0,T)$ erhalten wir $F'_3(p)^* \phi$ als Lösung des Randwertproblems

$$g^{(4)} - g'' + g = f_3 \quad \text{in } (0, 1),
 g''(0) = 0, \quad g''(1) = 0,
 g'''(0) - g'(0) = 0, \quad g'''(1) - g'(1) = 0
 \end{cases}$$
(4.93)

 mit

$$f_3(\nu) = K(\nu) \int_0^T \frac{1}{s} \bar{\psi}_x(q(\nu, t), t) dt \quad \text{für } \nu \in (0, 1].$$

Hier ist $\bar{\psi}$ wieder die Lösung von (4.84) aus Satz 4.2.2 mit a = Kp und b = K. Da wir in diesem Fall den Raum $H^2(0, 1)$ zugrunde gelegt haben, ergibt sich nun in (4.93) statt g(0) = 0 wie in (4.85) eine gemischte Randvorgabe an die dritte und erste Ableitung von g bei $\nu = 0$.

4.3.3 Bestimmung von K

Ein weiteres inverses Problem für das Cauchy-Dirichlet-Problem (2.9) ist die Bestimmung der Leitfähigkeit K aus dem freien Rand s bei bekannter Wassercharakteristik Ψ_M . Für das zugehörige Vorwärtsproblem betrachten wir die Abbildung

$$F_4: \begin{cases} \mathcal{D}(F_4) \subset \mathcal{H}_a \to L^2(0,T) \\ K \mapsto s(\,\cdot\,) = s(\,\cdot\,;K) \end{cases}$$

die jedem $K \in \mathcal{D}(F_4)$ über das Problem (2.9) den freien Rand *s* zuordnet. Hierbei sei $\mathcal{D}(F_4) = \mathcal{D}(F_2)$ und Ψ'_M so gewählt, daß $K\Psi'_M \in \mathcal{D}(F)$ für alle $K \in \mathcal{D}(F_4)$ gilt.

Die Ableitung $F'_4(K) : \mathcal{D}(F'_4(K)) \subset \mathcal{H}_a \to L^2(0,T)$ berechnet sich formal für $h \in \mathcal{H}_a$ zu

$$\left(F_4'(K)h\right)(t) = -\frac{w_4}{u_z}\Big|_{\Gamma} \quad \text{ für } t \in (0,T],$$

wobei w_4 in P_T der Differentialgleichung

$$w_{4,t} = \left(K(u)\Psi'_M(u)w_4\right)_{zz} + \left(K'(u)w_4\right)_z + \left(h(u)\Psi'_M(u)u_z\right)_z + \left(h(u)\right)_z \quad (4.94a)$$

mit den Randwerten

$$w_4(0,t) = 0$$
 für $t \in (0,T]$ (4.94b)

genügt. In (4.94a) sind nun beide bereits aufgetretenen Quellterme gemeinsam enthalten, da der Koeffizient K in der Differentialgleichung (2.9a) auch in zwei Termen verschiedener Ordnung auftaucht.

Für den zu $F'_4(K)$ adjungierten Operator $F'_4(K)^* : L^2(0,T) \to \mathcal{H}_a$ erhält man formal folgendes Ergebnis: Für $\phi \in L^2(0,T)$ löst $F'_4(K)^* \phi$ das Randwertproblem (4.85) mit der rechten Seite

$$f_4(\nu) = \int_0^T \frac{\bar{\psi}_x}{u_x} (q(\nu, t), t) \, dt + K(\nu) \int_0^T \frac{1}{s} \bar{\psi}_x (q(\nu, t), t) \, dt \quad \text{für } \nu \in (0, 1].$$

Hierbei ist $\bar{\psi}$ wieder die Lösung aus Satz 4.2.2 mit $a = K\Psi'_M$ und b = K. Auch die rechte Seite f_4 ergibt sich hier als eine Kombination aus den vorherigen rechten Seiten f_2 und f_3 .

5 Numerisches Rekonstruktionsverfahren

In diesem letzten Kapitel erläutern wir die Umsetzung der im vorangegangenen Kapitel vorgestellten Methoden in ein numerisches Verfahren zur Rekonstruktion der hydraulischen Diffusivitätsfunktion aus Beobachtungen der Wasserfront. Hierzu demonstrieren wir zunächst, wie wir das direkte Problem numerisch lösen, und geben dann ein numerisches Verfahren zur Lösung des zur Richtungsableitung gehörenden Randwertproblems an. Danach widmen wir uns der Implementierung der iterativen Regularisierungsmethoden und stellen schließlich im letzten Abschnitt an ausgewählten Beispielen mit synthetischen Daten Ergebnisse unseres Rekonstruktionsverfahrens vor. Alle nachfolgend eingeführten numerischen Methoden haben wir in der Interpretersprache MATLAB implementiert.

5.1 Numerische Auswertung von F

Um den Operator F an einem Koeffizienten a auszuwerten, also das direkte Problem zu lösen, benötigen wir ein numerisches Verfahren für das Cauchy-Dirichlet-Problem (4.1) oder das freie Anfangsrandwertproblem (4.26) bzw. das transformierte Problem (4.37). Wir werden hierfür im folgenden verschiedene Methoden vorstellen und anschließend die Ergebnisse anhand von Beispielen miteinander vergleichen.

5.1.1 Numerische Lösung von (4.1)

Zur Bestimmung einer Näherungslösung des Cauchy-Dirichlet-Problems (4.1) verwenden wir die (vertikale) Linienmethode zusammen mit einem Differenzenverfahren über einem äquidistanten Ortsgitter $\{z_i = i\Delta z, i = 0, ..., n\}$. Hierbei wählen wir den Intervallendpunkt z_n in Abhängigkeit von der Experimentdauer T so groß, daß $s(T) < z_n$ gilt. Somit können wir $u(z_n, t) = 0$ als obere Randbedingung in (4.1) verwenden. Für die Diskretisierung in z-Richtung verwenden wir die Balance-Methode [38] für den Diffusionsterm sowie zentrale Differenzen für den Term erster Ordnung (vgl. auch [39],[7]). Dies führt auf folgendes System gewöhnlicher Differentialgleichungen für die Funktionen $u_i(t) \approx u(z_i, t), i = 1, ..., n - 1$:

$$u_i'(t) = \left(a_{i+1/2}\frac{u_{i+1} - u_i}{(\Delta z)^2} - a_{i-1/2}\frac{u_i - u_{i-1}}{(\Delta z)^2}\right) + \frac{b(u_{i+1}) - b(u_{i-1})}{2\Delta z}$$
(5.1)

mit

$$u_0(t) = 1, \quad u_n(t) = 0 \quad \text{für } t \in (0, T],$$

 $u_i(0) = 0, \quad i = 0, \dots, n,$

sowie $a_{i\pm 1/2} := a((u_{i\pm 1} + u_i)/2)$. Dieses ODE-System lösen wir mittels der in MATLAB vorgegebenen ODE-Routine ode23s. In dieser Funktion ist ein Rosenbrock-Verfahren zweiter Ordnung mit automatischer Schrittweitensteuerung implementiert, das zudem A-stabil ist, falls in jedem Zeitschritt die exakte Jacobi-Matrix der rechten Seite verwendet wird. Hierzu haben wir die Jacobi-Matrix formal berechnet. Anschließend erhalten wir den freien Rand der Lösung durch die MATLAB-Routine contour, mit der wir die Höhenlinie von u zum Wert der Maschinengenauigkeit eps interpolieren.

Die obige Methode ist, wie wir später noch sehen werden, zur genaueren Approximation des freien Randes nicht geeignet. Denn auch unter Verwendung eines sehr feinen Ortsgitters liegt der freie Rand in der Regel zwischen zwei Gitterpunkten. Alternativ verwendet man deshalb sogenannte *Front-Tracking*-Methoden (vgl. [9]), die zusätzlich zur Lösung u auch explizit den freien Rand bestimmen. Hierzu wird z. B. das Ortsgitter in jedem Zeitschritt an die Position des Randes angepaßt.

Des weiteren ist das obige Verfahren auch deshalb ungenau, weil die Ableitung u_z auf dem freien Rand nicht stetig ist. Diesbezüglich gibt es eine Vielzahl an sogenannten Regularisierungsmethoden für degeneriert parabolische Gleichungen, die speziell auf die mangelnde Glattheit der Lösungen am freien Rand zugeschnitten sind. Einen Überblick über diese Methoden gibt z. B. [36]. Diese Verfahren liefern den freien Rand allerdings ebenfalls nur implizit mit der Lösung.

5.1.2 Numerische Lösung von (4.26)

In Abschnitt 4.1.2 haben wir das Cauchy-Dirichlet-Problem (4.1) in das freie Anfangsrandwertproblem (4.26) überführt, welches den freien Rand nun explizit enthält. Es wird sich herausstellen, daß wir dadurch den freien Rand numerisch genauer und einfacher approximieren können. Im folgenden stellen wir nun hierzu zwei numerische Verfahren vor.
5.1.2.1 Front-Fixing-Methode

Zunächst betrachten wir das Problem (4.37), das durch die Transformation x = z/s(t) aus (4.26) hervorgegangen ist. Durch diese Transformation wird der freie Rand auf einen festen Rand abgebildet. Numerische Verfahren, die solche Koordinatentransformationen verwenden, findet man unter anderem in [9] als sogenannte *Front-Fixing*-Methoden. In dem resultierenden Rechteckgebiet R_T können wir nun für unsere numerischen Approximationen mit den üblichen Ort×Zeit-Gittern arbeiten.

Wir verwenden auch hier wieder die Linienmethode über einem äquidistanten Ortsgitter

$$\Delta_x := \{ x_i = i \Delta x = i/n, \, i = 0, \dots, n \}$$

$$(5.2)$$

und diskretisieren die Ortsableitungen wie in (5.1). Es ergibt sich somit folgendes System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Funktionen $u_i(t) \approx \bar{u}(x_i, t), i = 1, ..., n - 1$, und s(t):

$$u_{i}^{\prime} = \frac{1}{s^{2}} \left(a_{i+1/2} \frac{u_{i+1} - u_{i}}{(\Delta x)^{2}} - a_{i-1/2} \frac{u_{i} - u_{i-1}}{(\Delta x)^{2}} \right) + \frac{b(u_{i+1}) - b(u_{i-1})}{s \, 2\Delta x} + \frac{x_{i} \, s^{\prime}}{s} \frac{u_{i+1} - u_{i-1}}{2\Delta x} \quad \text{für } i = 1, \dots, n-1, \\ s^{\prime} = -\left(a^{\prime}(0) \frac{-u_{n-1}}{s\Delta x} + b^{\prime}(0) \right),$$

$$(5.3)$$

wobei

$$u_0 \equiv 1, \quad u_n \equiv 0 \quad \text{und} \quad a_{i\pm 1/2} := a((u_{i\pm 1} + u_i)/2).$$

Die Ableitung s' in der rechten Seite der Differentialgleichung für u_i steht dort als Abkürzung für die rechte Seite der Differentialgleichung für s. Das System (5.3) lösen wir auch wieder mit der ODE-Routine ode23s aus MATLAB mit exakter Jacobi-Matrix der rechten Seite. Es ergeben sich Näherungen an die Funktionen $u_i(t)$ bzw. s(t) über einem durch die automatische Schrittweitensteuerung generierten Zeitgitter. Durch Vorgabe eines äquidistanten Zeitgitters

$$\Delta_t := \{ t_j = j \,\Delta t, \, j = 0, \dots, m \}, \quad \Delta t = T/m, \tag{5.4}$$

liefert uns die Routine interpolierte Näherungen u_i^j , s^j an $u_i(t_j)$ bzw. $s(t_j)$.

Für die Funktionen $u_i(t)$ benötigen wir noch Anfangsvorgaben, die durch die Lösung \bar{u}_0 von Problem (4.36) gegeben sind. Dieses Problem lösen wir numerisch folgendermaßen: Wir ersetzen $\bar{u}'_0(1)$ in der Differentialgleichung (4.36a) durch eine Variable f'_0 und verwenden zusätzlich die Gleichung $\bar{u}'_0(1) = f'_0$. Schließlich approximieren wir die Differentialgleichung (4.36a) über dem Ortsgitter Δ_x durch finite Differenzen, speziell verwenden wir wieder das Schema aus (5.3). Die Randbedingung $\bar{u}'_0(1) = f'_0$ ersetzen wir durch einen linksseitigen Differenzenquotient. Schließlich berechnen wir Näherungen f_i , i = 1, ..., n-1, an die Funktionswerte $\bar{u}_0(x_i)$ sowie eine Näherung f'_0 an die Ableitung $\bar{u}'_0(1)$, indem wir mit Hilfe des Newton-Verfahrens näherungsweise eine Nullstelle der Funktion $G = (G_1, G_2, ..., G_n)^T : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ mit

$$G_{i}(f_{1},\ldots,f_{n-1},f_{0}') = a_{i+1/2}(f_{i+1}-f_{i}) - a_{i-1/2}(f_{i}-f_{i-1}) - \Delta x a'(0) f_{0}' x_{i} \frac{f_{i+1}-f_{i-1}}{2}$$
(5.5a)

für i = 1, ..., n - 1 und

$$G_n(f_1, \dots, f_{n-1}, f'_0) = f_n - f_{n-1} - f'_0 \Delta x = -f_{n-1} - f'_0 \Delta x$$
 (5.5b)

bestimmen. Hierbei ist wegen (4.36b) und (4.36c) $f_0 = 1$ bzw. $f_n = 0$, und $a_{i\pm 1/2}$ bezeichne hier $a((f_{i\pm 1} + f_i)/2)$. Für das Newton-Verfahren verwenden wir jeweils die exakte Jacobi-Matrix von G, die wir formal berechnet haben.

Abschließend möchten wir noch erwähnen, daß sich die Ergebnisse dieser Methode nicht wesentlich ändern, wenn man in (5.3) statt der zentralen Differenzenquotienten für die Terme erster Ordnung rechtsseitige Differenzen verwendet, die wegen der Positivität der zugehörigen Koeffizienten mit upwind-Differenzen identisch sind.

5.1.2.2 Isothermenmethode

Ursprünglich motiviert durch die Ergebnisse aus Satz 4.2.2, wonach $\bar{\psi}_x$ über die Höhenlinien von \bar{u} integriert werden muß, vgl. (4.86), haben wir ein weiteres numerisches Verfahren für das direkte Problem implementiert, das direkt auf den Höhenlinien basiert.

Hierzu betrachten wir Problem (4.37) und bezeichnen im folgenden zur Vereinfachung die Lösung $\bar{u} = \bar{u}(x,t)$ stets mit u = u(x,t). Wir führen nun in (4.37) u selbst als neue Koordinate ein, d. h. wir definieren die abhängige Ortsvariable x = x(u,t) durch

$$u(x(\nu, t), t) = \nu$$
 für $0 \le \nu \le 1$, $0 \le t \le T$. (5.6)

Zu jedem Wert $\nu \in [0, 1]$ ist also $x(\nu, t)$ die entsprechende Höhenlinie von u wie in Abbildung 5.1 dargestellt.

Diese Koordinatentransformation bezeichnen wir als *Isothermenmethode*, sie wird in [9] als *isotherm migration method*, kurz *IMM*, vorgestellt. Der Name resultiert aus der Betrachtung von Problemen, in denen u die Wärmeverteilung innerhalb eines Mediums darstellt, so daß durch die Größe $x(\nu, t)$ angegeben wird, wie die Temperatur ν mit der Zeit durch das Medium "wandert".



Abbildung 5.1: Höhenlinien von \boldsymbol{u}

Differenzieren wir nun (5.6) nach der Zeit, so folgt

$$0 = \frac{d}{dt}u(x(u,t),t) = u_x(x(u,t),t)x_t(u,t) + u_t(x(u,t),t),$$

und wir erhalten

$$u_t = -u_x x_t. (5.7)$$

Aus

$$u_x(x,t) = x_u(u,t)^{-1}$$
(5.8)

berechnet sich u_{xx} zu

$$u_{xx}(x,t) = -x_u(u,t)^{-2}x_{uu}(u,t)u_x(x,t) = -\frac{x_{uu}}{x_u^3}.$$
(5.9)

Setzen wir die Ableitungen (5.7)-(5.9) in die Differentialgleichung (4.37a) ein, so ergibt sich

$$-\frac{x_t}{x_u} = \frac{1}{s^2} \left(a'(u) x_u^{-2} - a(u) \frac{x_{uu}}{x_u^3} \right) + \frac{1}{s} \left(b'(u) x_u^{-1} + xs' x_u^{-1} \right)$$

Anschließend multiplizieren wir diese Gleichung mit $-\boldsymbol{x}_u$ und vereinfachen sie zu

$$x_t = -\frac{1}{s^2} \left(\frac{a(u)}{x_u} \right)_u - \frac{1}{s} \left(b'(u) + xs' \right) \quad \text{in } R_T.$$
 (5.10a)

71

Die Transformation der Randbedingungen in (4.37) auf die neuen Variablen führt schließlich auf

$$x(u,0) = \hat{x}_0(u) \qquad \qquad \text{für } u \in [0,1], \qquad (5.10b)$$

$$x(0,t) = 1 \qquad \qquad \text{für } t \in (0,T], \qquad (5.10c)$$

$$x(1,t) = 0$$
 für $t \in (0,T]$, (5.10d)

$$s'(t) = -\frac{a'(0)}{s(t)x_u(0,t)} - b'(0) \quad \text{für } t \in (0,T],$$
(5.10e)

wobei die Funktion \hat{x}_0 das folgende gewöhnliche Randwertproblem für g löst:

$$\left(\frac{a(u)}{g'(u)}\right)' - \frac{a'(0)}{g'(0)}g(u) = 0 \quad \text{in } (0,1), \tag{5.11a}$$

$$g(0) = 1,$$
 (5.11b)

$$y(1) = 0.$$
 (5.11c)

Dieses Problem haben wir mit der Transformation $x = x(\bar{u}_0)$ aus dem Randwertproblem (4.36) hergeleitet.

Somit haben wir das Anfangsrandwertproblem (4.37) für u im Gebiet R_T in ein Anfangsrandwertproblem für x in R_T überführt. Das neue Problem (5.10) lösen wir nun durch die Linienmethode auf einem äquidistanten Gitter

$$\Delta_u := \{ u_i = i \Delta u, \, i = 0, \dots, n \}$$

$$(5.12)$$

mit $\Delta u = 1/n$. Durch zweimaliges Anwenden von zentralen Differenzenquotienten der Schrittweite $\Delta u/2$ erhalten wir das folgende System aus gewöhnlichen Differentialgleichungen für die Funktionen $x_i(t) \approx x(u_i, t)$, $i = 1, \ldots, n-1$, und s(t):

$$x_{i}' = -\frac{1}{s^{2}} \left(\frac{a_{i+1/2}}{x_{i+1} - x_{i}} - \frac{a_{i-1/2}}{x_{i} - x_{i-1}} \right) - \frac{1}{s} \left(b'(u_{i}) + x_{i}s' \right) \quad \text{für } i = 1, \dots, n-1,$$

$$s' = -\left(a'(0) \frac{\Delta u}{s(x_{1} - x_{0})} + b'(0) \right)$$
(5.13)

mit $x_0 \equiv 1, x_n \equiv 0$ und $a_{i\pm 1/2} := a((u_{i\pm 1} + u_i)/2)$. Als Anfangswerte für x_i , $i = 1, \ldots, n-1$, verwenden wir Näherungen g_i an $\hat{x}_0(u_i)$, die wir analog zur Vorgehensweise gegen Ende des vorherigen Abschnittes erhalten, indem wir auf $(H_1, H_2, \ldots, H_n)^T(g_1, \ldots, g_{n-1}, d) = 0$ das Newton-Verfahren anwenden mit

$$H_i(g_1, \dots, g_{n-1}, d) = \frac{a_{i+1/2}}{g_{i+1} - g_i} - \frac{a_{i-1/2}}{g_i - g_{i-1}} - g_i a'(0)d$$

für i = 1, ..., n - 1 und

$$H_n(g_1,\ldots,g_{n-1},d)=d-\frac{\Delta u}{g_1-g_0}.$$

Hierbei ist $g_0 = 1$ und $g_n = 0$. Für das Newton-Verfahren verwenden wir in jedem Schritt die exakte Jacobi-Matrix.

Das System (5.13) lösen wir wieder mit der Routine ode23s unter Vorgabe der exakten Jacobi-Matrix. Auch in (5.13) steht die Ableitung s' in der rechten Seite des Systems als Abkürzung für die rechte Seite der Differentialgleichung für s. Als Ergebnis erhalten wir Näherungen $x_i^j \approx x_i(t_j)$ und $s^j \approx s(t_j)$ über einem Zeitgitter Δ_t wie in (5.4).

5.1.3 Vergleich der verschiedenen Methoden

Nachdem wir nun unterschiedliche Vorwärtslöser vorgestellt haben, wollen wir diese hinsichtlich ihrer Genauigkeit miteinander vergleichen. Dies ist schwierig, da wir für unser Problem (4.1) keine exakte Lösung kennen. Deshalb testen wir die Methoden zunächst wie in [39], [7] an der exakten Barenblattlösung (3.3). Im folgenden verwenden wir die Abkürzungen IMM für die Isothermenmethode, CDL für die Linienmethode (5.1) für das Cauchy-Dirichlet-Problem und FFM für die Front-Fixing-Methode.

Beispiel 5.1.1 Wir betrachten also das Cauchy-Problem (3.4) und geben zusätzlich als Randwerte bei z = 0 die exakten Werte der Barenblattlösung vor. Aufgrund der Bedingung (4.27) für die Front-Fixing-Methode betrachten wir in (3.3) den Fall m = 2. Da die Barenblattlösung nicht zu jedem Zeitpunkt jeweils alle Werte aus [0, 1] annimmt, läßt sich die Isothermenmethode hier nicht anwenden. Abbildung 5.2 zeigt die Näherungen und die exakte Lösung zu verschiedenen Zeitpunkten. Es läßt sich mit dem bloßen Auge kein Unterschied feststellen. Im rechten Schaubild wurde deshalb ein Ausschnitt daraus vergrößert. Hier läßt sich die FFM-Näherung ebenfalls kaum von der exakten Lösung unterscheiden. Die CDL-Kurve hingegen approximiert den steilen Verlauf der exakten Kurve sehr schlecht. In Abbildung 5.3 sind zum Vergleich die freien Ränder der Lösungen eingezeichnet. Man erkennt zwei unterschiedliche Kurven: Die obere Kurve gehört zur CDL-Näherung, die FFM-Näherung verläuft zusammen mit der exakten Lösung in der unteren Kurve.

In Tabelle 5.1 haben wir für verschiedene Ortsgitter den maximalen Fehler an den Gitterpunkten zum Zeitpunkt T = 10 zwischen der Barenblattlösung und den FFM-Näherungen bzw. den CDL-Näherungen dargestellt. Das Zeitgitter wurde jeweils durch die automatische Schrittweitensteuerung bestimmt, wobei die in ode23s voreingestellten Toleranzen für den relativen und absoluten Fehler von 10^{-3} bzw. 10^{-6} vorgegeben waren. Die kleinste verwendete



Abbildung 5.2: Näherungen und Barenblattlösung zu verschiedenen Zeitpunkten (CDL (···), FFM (---), exakte Lösung (—))



Abbildung 5.3: Zeitlicher Verlauf des freien Randes (CDL (· · ·), FFM (---), exakte Lösung (—))

n	\mathbf{FFM}	CDL
50	0.00017640	0.0011203
100	0.00005061	0.0005133
200	0.00001777	0.0002010

Tabelle 5.1: Maximaler Fehler zwischen exakter Barenblattlösung und den Näherungen zum Zeitpunkt T = 10 für verschiedene Ortsgitter

Zeitschrittweite im Fall n = 200 war bei der CDL-Methode $\Delta t = 0.00125$ und bei der Front-Fixing-Methode $\Delta t = 0.0279$. Der Fehler der CDL-Methode beträgt in etwa das Zehnfache des Fehlers der FFM-Näherungen.

Um nun auch die speziellen unstetigen Anfangs- bzw. Randvorgaben in den Vergleich mit einzubeziehen, testen wir unsere Verfahren als nächstes an dem Cauchy-Dirichlet-Problem (3.1) des horizontalen Experimentes mit $b \equiv 0$. In diesem Fall kennen wir die Gestalt der Höhenlinien der Lösung und des freien Randes.

Beispiel 5.1.2 Wir setzen also zunächst $b \equiv 0$ und wählen die Diffusivität $a(\nu) = \nu^5 + 0.5\nu$. Des weiteren sei T = 1. In Abschnitt 4.1.3 haben wir bereits erläutert, daß sich die Lösung u und der freie Rand von (3.1) durch die Lösung \bar{u}_0 von (4.36) darstellen lassen: $u(z,t) = \bar{u}_0(\frac{z}{c\sqrt{t}})$ und $s(t) = c\sqrt{t}$ mit $c = \sqrt{-2a'(0)\bar{u}'_0(1)}$. Zum Vergleich haben wir deshalb über einem sehr feinen Ortsgitter näherungsweise die Lösung \bar{u}_0 berechnet, indem wir das Newton-Verfahren auf die Funktion in (5.5) angewendet haben.



Abbildung 5.4: Zeitlicher Verlauf des freien Randes (CDL (---), IMM (\cdots), FFM (—), Wurzelfunktion (\cdots -))

In Abbildung 5.4 ist links der freie Rand s zu den verschiedenen Methoden zusammen mit der Vergleichsfunktion über der t-Achse aufgetragen und auf der rechten Seite in die Nähe des Nullpunktes hineingezoomt. In der rechten Abbildung läßt sich selbst bei dieser Skalierung an den Gitterpunkten kein Unterschied zwischen dem freien Rand der FFM und der IMM sowie der Wurzelfunktion feststellen. Im Gegensatz dazu sehen wir, daß der freie Rand aus der Linienmethode für das Cauchy-Dirichlet-Problem einen sprunghaften Verlauf hat und die Vergleichsfunktion sehr schlecht approximiert.



Abbildung 5.5: Verlauf der Näherung u zum Zeitpunkt T (CDL (---), IMM (\cdots) , FFM (--), Vergleichslösung (\cdots))

Im linken Bild in Abbildung 5.5 haben wir für alle Verfahren die Näherungslösung u sowie die Vergleichslösung zum Zeitpunkt T geplottet. Vergrößert man das Bild in der Nähe des freien Randes (rechtes Bild), so erkennt man, daß die Lösungen am freien Rand ein unterschiedliches Verhalten aufweisen, so wie es aus Abbildung 5.4 zu vermuten war. Die CDL-Lösung geht deutlich glatter und weiter rechts in die Null ein als die Vergleichslösung. Hingegen wird der Verlauf der Vergleichslösung durch die IMM- und die FFM-Lösung (sie sind in dieser Darstellung nicht zu unterscheiden) gut approximiert.

Die nachfolgende Tabelle illustriert für verschiedene Ortsgitter Δ_x bzw. Δ_u und Zeitgitter Δ_t den Fehler in der $L^2(0,T)$ -Norm zwischen der Vergleichsfunktion $c\sqrt{t}$ und den verschiedenen Näherungen für den freien Rand s.

	Δt	1/100	1/200	1/400	1/800
FFM:	n = 100	0.002482	0.001297	0.0007505	0.0005376
	n = 200	0.002474	0.001283	0.0007254	0.0005022
IMM:	n = 100	0.002481	0.001292	0.0007395	0.0005223
	n = 200	0.002477	0.001283	0.0007240	0.0005000

Tabelle 5.2: $L^2(0,T)$ -Fehler zwischen $c\sqrt{t}$ und den Näherungen für s(t)

Durch die automatische Schrittweitensteuerung und die Interpolation der Näherungen auf das Gitter Δ_t lassen sich die Fehler hinsichtlich des Konvergenzverhaltens schwer miteinander vergleichen. Wir können jedoch ablesen, daß die Fehler der beiden Verfahren in derselben Größenordnung liegen.

Als letztes Beispiel betrachten wir nun wieder das vertikale Fließexperiment.

Beispiel 5.1.3 Wir wählen wieder $a(\nu) = \nu^5 + 0.5\nu$ sowie T = 1 und betrachten die Leitfähigkeitsfunktion $b(\nu) = \nu^3$.

In Abbildung 5.6 ist wieder der freie Rand als Funktion der Zeit für alle Methoden aufgetragen und im rechten Bild noch einmal vergrößert für kleine t dargestellt.



Abbildung 5.6: Zeitlicher Verlauf des freien Randes s(t) (CDL (---), IMM (...), FFM (...), Wurzelfunktion (...))

Wie schon im vorherigen Beispiel unterscheidet sich die CDL-Approximation deutlich von den beiden anderen Methoden. Da wir wegen (4.38) davon ausgehen, daß sich auch im vertikalen Fließexperiment der freie Rand für $t \rightarrow 0$ wie eine Wurzelfunktion verhält, haben wir auch für dieses Beispiel eine Wurzelfunktion zum Vergleich eingezeichnet. Auch in der vergrößerten Darstellung rechts läßt sich zwischen dieser Kurve und der FFM- und IMM-Kurve kaum ein Unterschied erkennen.

Anschließend haben wir in Abbildung 5.7 zu verschiedenen Zeitpunkten die Lösung u über der z-Achse geplottet. In der gezoomten Darstellung zum Zeitschritt t_{10} läßt sich wieder erkennen, daß die CDL-Lösung wesentlich glatter in die Null eingeht als die beiden anderen.

In Abbildung 5.8 ist die FFM-Näherung u für dieses Beispiel als Fläche über der (z, t)-Ebene dargestellt. Hieraus läßt sich z. B. die Monotonie von uin z-Richtung erkennen.

In den Beispielen hat sich gezeigt, daß die Resultate der Front-Fixing-Methode und der Isothermenmethode in etwa gleich gut sind. Wir werden im weiteren stets die Front-Fixing-Methode als Vorwärtslöser verwenden, da sie sich, wie wir im folgenden Abschnitt noch sehen werden, relativ einfach mit dem Löser für das Anfangsrandwertproblem der Richtungsableitung kombinieren läßt.



Abbildung 5.7: Verlauf der Näherungslösung u zu verschiedenen Zeitpunkten (CDL (---), IMM (···), FFM (—))



Abbildung 5.8: Verlauf der Näherungslösung u(z,t)

5.2 Auswertung der Richtungsableitung F'(a)

Um die Ableitung F'(a) auszuwerten, benötigen wir zusätzlich zur Lösung u des direkten Problems eine Näherungslösung des Randwertproblems (4.74) für

die Funktion w. Da die Koeffizienten der Differentialgleichung (4.74a) allesamt von u abhängen, sind wir bei der Wahl eines numerischen Verfahrens bzw. eines Gitters für (4.74) an das Gitter von u gebunden, da wir es vermeiden wollen, Näherungen u_i^j auf einem neuen Gitter zu interpolieren. Aus diesem Grund betrachten wir auch hier passend zur Front-Fixing-Methode für u das transformierte Problem (4.82) und wenden hierauf die Linienmethode an.

Wir betrachten nun wieder das Ortsgitter \triangle_x aus (5.2) und die Funktionen $w_i(t) \approx \bar{w}(x_i, t)$. Ersetzen wir die Ableitungen in der Differentialgleichung (4.82a) durch Differenzenapproximationen zweiter Ordnung bzw. verwenden für den Quellterm die Balance-Methode, so erhalten wir die nachfolgenden Differentialgleichungen für die Funktionen w_i , $i = 1, \ldots, n-1$:

$$w_{i}' = \frac{a(u_{i+1})w_{i+1} - 2a(u_{i})w_{i} + a(u_{i-1})w_{i-1}}{(s\Delta x)^{2}} + \frac{b'(u_{i+1})w_{i+1} - b'(u_{i-1})w_{i-1}}{s\,2\Delta x} + \frac{x_{i}s'}{s}\frac{w_{i+1} - w_{i-1}}{2\Delta x} + \frac{1}{s^{2}} \Big(h_{i+1/2}\frac{u_{i+1} - u_{i}}{(\Delta x)^{2}} - h_{i-1/2}\frac{u_{i} - u_{i-1}}{(\Delta x)^{2}}\Big), \quad i = 1, \dots, n-1,$$
(5.15a)

mit $w_0 \equiv 0$ und $h_{i\pm 1/2} = h((u_{i\pm 1}+u_i)/2)$. Hierbei seien $u_i(t)$ die bei der Front-Fixing-Methode in Abschnitt 5.1.2.1 eingeführten Näherungen an $\bar{u}(x_i, t)$. Approximieren wir schließlich (4.82d) mit Hilfe einseitiger Differenzen, so ergibt sich wegen $a(u_n) = a(0) = h(u_n) = 0$ folgende Differentialgleichung für w_n :

$$w_{n}' = \frac{1}{s^{2}} \left\{ \left(-\frac{a(u_{n-1})}{\Delta x} + ss' \right) \frac{w_{n} - w_{n-1}}{\Delta x} + \left(\frac{-a(u_{n-1})}{\Delta x} + sb'(u_{n}) \right) \frac{w_{n}}{\Delta x} - \left(\frac{a(u_{n-1}) - a(u_{n-2})}{\Delta x} + sb'(u_{n-1}) \right) \frac{w_{n-1}}{\Delta x} + \frac{h(u_{n-1})u_{n-1}}{(\Delta x)^{2}} \right\}.$$
(5.15b)

Das gesamte Schema (5.15) besitzt aufgrund der einseitigen Differenzen bei x = 1 trotz der Approximationen zweiter Ordnung in (5.15a) lediglich die Konsistenzordnung Eins.

Um die Anfangswerte für dieses ODE-System numerisch aus (4.83) zu bestimmen, verwenden wir ganz analog folgendes Differenzenschema für die Näherungen $g_i \approx \bar{w}_0(x_i), i = 1, ..., n$:

$$0 = \frac{a(f_{i+1})g_{i+1} - 2a(f_i)g_i + a(f_{i-1})g_{i-1}}{(\Delta x)^2} - a'(0)f'_0 x_i \frac{g_{i+1} - g_{i-1}}{2\Delta x} + h_{i+1/2}\frac{f_{i+1} - f_i}{(\Delta x)^2} - h_{i-1/2}\frac{f_i - f_{i-1}}{(\Delta x)^2}$$
(5.16a)

mit $g_0 = 0$ und

$$0 = \frac{a_n - a_{n-1}}{(\Delta x)^2} g_n - \frac{a_{n-1} - a_{n-2}}{(\Delta x)^2} g_{n-1} + h'(0) f_0'^2.$$
(5.16b)

Hierbei seien f_i und f'_0 die Näherungen an $\bar{u}_0(x_i)$ bzw. $\bar{u}'_0(1)$ aus dem Gleichungssystem (5.5) und $h_{i\pm 1/2} = h((f_{i\pm 1} + f_i)/2)$.

Beispiel 5.2.1 Da uns keine exakte Lösung von (4.82) bekannt ist, wollen wir unser Schema stattdessen an dem Anfangsrandwertproblem

$$v_t = ((1-x)v)_{xx} + v_x + 1 \quad \text{in } R_T,$$

$$v(x,0) = x/2 \qquad \qquad \text{für } x \in [0,1],$$

$$v(0,t) = t/2 \qquad \qquad \text{für } t \in (0,T]$$

testen, das die beschränkte Lösung v(x,t) = x/2+t/2 besitzt. Dieses Problem besitzt annähernd die Gestalt von (4.82), da bei x = 1 der Diffusionskoeffizient 1 - x verschwindet und für v dort keine Randwerte vorgegeben sind. Wir lösen das ODE-System (5.15) für dieses Beispiel mit Hilfe des impliziten Euler-Verfahrens über einem äquidistanten Zeitgitter. In Abbildung 5.9 ist die Näherungslösung zu einem äquidistanten 101 × 101-Gitter mit T = 0.5 aufgetragen sowie der absolute Fehler zwischen der Näherung und der exakten Lösung. Die exakte Lösung wird durch unser Verfahren sehr gut approximiert, der absolute Fehler an den Gitterpunkten beträgt lediglich maximal $6.5 \cdot 10^{-15}$. Es läßt sich außerdem erkennen, daß am Rand bei x = 1 der Fehler eher gering ist, anders als man es vielleicht aufgrund der künstlichen Randbedingung vermuten würde.

Da das Problem für w mit dem Vorwärtsproblem gekoppelt ist, liegt es nahe, die beiden ODE-Systeme (5.3) und (5.15) zu einem großen System

$$(u'_1, \dots, u'_{n-1}, s', w'_1, \dots, w'_n)^T = F(u_1, \dots, u_{n-1}, s, w_1, \dots, w_n)$$
(5.17)

zusammenzufassen. Entsprechend formulieren wir die Gleichungen (5.5) und (5.16) für die zugehörigen Anfangswerte zusammen als ein nichtlineares Gleichungssystem, das wir mit dem Newton-Verfahren lösen. Das Anfangswertproblem für (5.17) lösen wir nun mit den entsprechenden Randvorgaben und der exakten Jacobi-Matrix mittels der Routine ode23s. Hierbei wird die Ableitung s' in der rechten Seite des ODE-Systems wie in (5.3) durch die rechte Seite der Differentialgleichung für s ersetzt.



Abbildung 5.9: Näherungslösung für v und absoluter Fehler

Beispiel 5.2.2 Wir betrachten nun die Situation aus Beispiel 5.1.3 und wählen zusätzlich $h(\nu) = \nu$. In Abbildung 5.10 ist links die aus (5.17) erhaltene Näherungslösung \bar{w} zu verschiedenen Zeitpunkten über der *x*-Achse aufgetragen. Die Anfangswerte $\bar{w}(x,0)$, die näherungsweise die Gleichungen (5.16) lösen, sind ebenfalls eingezeichnet. Das rechte Schaubild in Abbildung 5.10 illustriert den Verlauf von \bar{w} bei x = 1, d. h. auf dem freien Rand. Diese Werte von \bar{w} benötigen wir, um die Richtungsableitung von F auszuwerten. Abbildung 5.11 zeigt vollständigkeitshalber noch einmal den gesamten Verlauf der Näherungslösung $w(z,t) = \bar{w}(x,t)$ über der (z,t)-Ebene.

Wir haben bei diesem Beispiel zudem versucht, das ODE-System (5.15) ohne die Kopplung an das Vorwärtsproblem numerisch zu lösen. Für verschieden feine Zeitgitter Δ_t haben wir jeweils die FFM-Näherung an \bar{u} berechnet und anschließend mit Hilfe des impliziten Euler-Verfahrens auf Δ_t das dazugehörige System (5.15) gelöst. In Abbildung 5.12 ist für drei verschiedene



Abbildung 5.10: Verlauf der Näherungslösung \bar{w} zu verschiedenen Zeitpunkten bzw. beix=1



Abbildung 5.11: Verlauf der Näherungslösung w(z,t)

Zeitschrittweiten Δt der Verlauf von \bar{w} auf dem Rand x = 1 als Funktion von t aufgetragen zusammen mit der Näherungslösung von (5.17) (rechts in einer vergrößerten Darstellung nahe bei t = 0). Zu beobachten ist, daß die Näherungen des impliziten Euler-Verfahrens in der Nähe von t = 0 mit abnehmender



Abbildung 5.12: Verlauf der Näherung \bar{w} bei x = 1 (Euler $\Delta t = 1/1000$ (—), Euler $\Delta t = 1/2000$ (---), Euler $\Delta t = 1/10000$ (···), Lösung von (5.17) (···-))

Zeitschrittweite Δt immer steiler werden. Jedoch springen sie unabhängig von Δt jeweils unstetig vom Wert am Gitterpunkt t_1 auf den Anfangswert bei t = 0. Auch mit veränderter Ortsschrittweite ergibt sich das gleiche Phänomen. Da wir gerade die Anfangswerte \bar{w}_0 als stetige Fortsetzung von \bar{w} für $t \to 0$ definiert haben, scheinen diese Näherungen wenig sinnvoll zu sein. Dies zeigt, daß es wichtig ist, die natürliche Kopplung der Probleme für \bar{u} und \bar{w} auch in dem numerischen Verfahren zu berücksichtigen.

Abschließend sei auch hier erwähnt, daß wir, wenn wir die beiden Verfahren mit den "stabileren" Diskretisierungen der Terme erster Ordnung durch upwind-Differenzenquotienten ausstatten, nahezu die gleichen Ergebnisse erzielen.

Mit der Lösung \bar{w} auf dem Rand x = 1 können wir nun auch die Ableitung F'(a)h auswerten. Abbildung 5.13 zeigt links die Ableitung für das Beispiel 5.2.2 zusammen mit dem Differenzenquotienten $(F(a+\varepsilon h)-F(a))/\varepsilon$ für $\varepsilon = 10^{-2}$. Für das rechte Schaubild haben wir zudem die Ableitung für $h(\nu) = \nu^2$ ausgewertet. Es zeigt sich, daß die Approximationsgüte unserer Näherung an die Ableitung F'(a)h in etwa der des Differenzenquotienten entspricht.

5.3 Iterative Regularisierungsverfahren

Im folgenden wollen wir nun kurz erläutern, wie wir die in Abschnitt 4.2.1 für die nichtlineare Gleichung (4.43) vorgestellten iterativen Regularisierungsme-



Abbildung 5.13: Vergleich zwischen Ableitung F'(a)h (—) und Differenzenquotient (---)

thoden numerisch für unser Problem umgesetzt haben.

Zur Diskretisierung des Raumes \mathcal{H}_a der zulässigen Koeffizienten wählen wir den Unterraum S^0_{2,\triangle_p} von \mathcal{H}_a bestehend aus den quadratischen Splines a über dem Gitter

$$\triangle_p := \{\nu_0 = 0 < \nu_1 < \dots < \nu_p = 1\}$$

mit a(0) = 0. Für die Wahl einer Basis von S_{2,\triangle_p}^0 betrachten wir die quadratischen B-Splines $\{A_0, A_1, \ldots, A_{p+1}\}$ zu den Knoten $\{\nu_{-2} = \nu_{-1} = \nu_0 = 0, \nu_1, \ldots, \nu_{p-1}, \nu_p = \nu_{p+1} = \nu_{p+2} = 1\}$. Wegen $A_i(0) = 0$ für $i = 1, \ldots, p+1$ und $A_0(0) \neq 0$ läßt sich somit jedes $a \in S_{2,\triangle_p}^0$ darstellen als

$$a(\nu) = \sum_{i=1}^{p+1} a_i A_i(\nu).$$

Da für Funktionen v(t) aus dem Bildraum des Operators F und seiner Ableitung F'(a) wegen (4.20) und (4.75) die Bedingung v(0) = 0 erfüllt ist, verwenden wir für den Raum der Meßdaten folgende Diskretisierung: Mit S_{1,\triangle_t}^0 werde der Raum der linearen Splines v über dem Gitter \triangle_t wie in (5.4) mit v(0) = 0bezeichnet, und $\{V_0, V_1, \ldots, V_m\}$ seien die Hutfunktionen über \triangle_t . Mit Hilfe der Näherungen $v_j, j = 0, \ldots, m$, über \triangle_t aus dem Vorwärtslöser oder aus der Routine für die Berechnung der Ableitung setzen wir v als linearen Spline aus S_{1,\triangle_t}^0 an:

$$v(t) = \sum_{j=1}^{m} v_j V_j(t).$$

Durch Berechnen einer Näherungslösung $F_k'A_i$ aus S^0_{1,\triangle_t} an die Ableitung $F'(a_k)A_i$

$$F'_k A_i = \sum_{j=1}^m v_j^{(i)} V_j(t)$$

für jedes i = 1, ..., p+1 erhalten wir eine diskretisierte Version der Ableitung $F'(a_k)$, dargestellt in der $m \times (p+1)$ -Newton-Matrix

$$F_k = \left(v_j^{(i)}\right)_{ji}.$$

Für die Diskretisierung der Adjungierten $F'(a_k)^*$ verwenden wir entsprechend die Projektion $F'_k V_j$ von $F'(a_k)^* V_j$ auf S^0_{2,Δ_n}

$$F_k'^* V_j = \sum_{i=1}^{p+1} a_i^{(j)} A_i(\nu)$$

und definieren eine diskretisierte Version durch

$$F_k^{\mathrm{adj}} = \left(a_i^{(j)}\right)_{ij} \in \mathbb{R}^{(p+1) \times m}$$

Die Matrix F_k^{adj} läßt sich nun sehr einfach mit Hilfe von F_k berechnen: Sei G_1 die Gramsche Matrix der Hutfunktionen V_j , $j = 1, \ldots, m$, bezüglich des $L^2(0,T)$ -Innenproduktes und G_2 die der quadratischen B-Splines A_i , $i = 1, \ldots, p + 1$, bezüglich des $H^2(0,1)$ -Innenproduktes. Aus der Definition der Adjungierten ergibt sich die Forderung

$$\langle F'(a_k)A_i, V_j \rangle_{L^2(0,T)} = \langle A_i, F'(a_k)^* V_j \rangle_{H^2(0,1)}$$
 für $i = 1, \dots, p+1,$
 $j = 1, \dots, m,$

und hiermit erhalten wir für die diskretisierten Versionen, daß

$$e_{i}^{T}F_{k}^{T}G_{1}\tilde{e}_{j} = \sum_{l=1}^{m} v_{l}^{(i)} \langle V_{l}, V_{j} \rangle_{L^{2}(0,T)}$$

$$= \langle F_{k}'A_{i}, V_{j} \rangle_{L^{2}(0,T)}$$

$$= \langle A_{i}, F_{k}'^{*}V_{j} \rangle_{H^{2}(0,1)}$$

$$= \sum_{l=1}^{p+1} a_{l}^{(j)} \langle A_{i}, A_{l} \rangle_{H^{2}(0,1)} = e_{i}^{T}G_{2}F_{k}^{\text{adj}}\tilde{e}_{j}$$
(5.18)

für i = 1, ..., p + 1 und j = 1, ..., m. Hierbei bezeichnen e_i und \tilde{e}_j die kartesischen Basisvektoren im \mathbb{R}^{p+1} bzw. \mathbb{R}^m . Wir erhalten also

$$F_k^{\mathrm{adj}} = G_2^{-1} F_k^T G_1.$$

85

Über diese beiden Matrizen läßt sich nun die neue Iterierte a_{k+1} des Levenberg-Marquardt-Verfahrens oder der IRGN-Methode einfach durch Lösen eines $(p+1) \times (p+1)$ -Gleichungssystems mit der Matrix $F_k^{\text{adj}}F_k + \alpha_k I$ berechnen. Allerdings darf hierbei nicht vergessen werden, daß das Aufstellen der Matrix F_k mit einem enormen Aufwand verbunden ist: Es muß (p+1)-mal das Anfangswertproblem des ODE-Systems (5.17) der Dimension 2n (n+1)ist die Anzahl der Gitterpunkte des Ortsgitters Δ_x) gelöst werden. Alternativ lassen sich alle p+1 Ableitungen auf einmal berechnen, indem man das System (5.17) durch die weiteren Differentialgleichungen gemäß Schema (5.15) auf ein (p+2)n-dimensionales ODE-System erweitert. Bei unseren numerischen Tests hat sich herausgestellt, daß das Lösen des erweiterten Systems schon für kleine p viel zeitintensiver ist als das (p+1)-fache Lösen des 2n-dimensionalen Systems. Wir haben uns trotzdem für diese Variante entschieden, da wir uns durch die **gemeinsame** Kopplung der p + 1 Systeme (5.15) an das System (5.3) des Vorwärtslösers eine höhere Genauigkeit erhoffen.

An dieser Stelle sei erwähnt, daß wir für die Auswertung der B-Splines und ihrer Ableitungen die Routinen der Spline-Toolbox von MATLAB verwenden. Die $H^2(0, 1)$ -Innenprodukte der quadratischen Splines berechnen wir in jedem Teilintervall mit der dreistufigen Gauß-Legendre-Quadraturformel.

Da wir die Adjungierte nur mit großem Aufwand über die Newton-Matrix F_k berechnen können und somit keinen Vorteil gegenüber den Newton-artigen Methoden sehen, wollen wir im folgenden gar nicht weiter auf die Anwendung der Landweber-Iteration auf unser Problem eingehen. Zudem haben erste Versuche angedeutet, daß die Methode eher schlechtere Rekonstruktionen liefert.

Bei der obigen numerischen Rekonstruktionsmethode haben wir für die Iterierten den Raum \mathcal{H}_a zugrunde gelegt. Der Operator F ist jedoch nur auf einem Teilraum $\mathcal{D}(F)$ von \mathcal{H}_a definiert, so daß wir nicht garantieren können, daß die Iterationen wohldefiniert sind. So brechen wir die Iteration z. B. ab, falls eine Iterierte a_k negative Werte annimmt. Dieser Fall ist in unseren numerischen Versuchen jedoch sehr selten eingetreten. Einen vorzeitigen Abbruch der Iteration beobachten wir häufig in Fällen, in denen die Iterierte a_k in der Umgebung eines lokalen Extremwertes sehr steil ist. Für solche a_k liefert unser Vorwärtslöser kein Ergebnis, da die ODE-Routine beim Lösen des Systems (5.3) bzw. des erweiterten Systems (5.17) versagt.

5.4 Rekonstruktionsergebnisse

Um unser Rekonstruktionsverfahren zu testen und die verschiedenen Iterationen zu vergleichen, haben wir uns durch numerische Simulation des Experimentes, also durch Lösen des direkten Problems, für ausgewählte Koeffizientenfunktionen künstliche Meßdaten erzeugt. Zur Vermeidung von sogenanntem "inverse crime" haben wir hierfür die Front-Fixing-Methode über einem anderen Orts- und Zeitgitter als bei der anschließenden Rekonstruktion verwendet bzw. bei einigen Beispielen die Isothermenmethode. In den folgenden Beispielen betrachten wir, wenn nicht anders erwähnt, jeweils die Leitfähigkeitsfunktion $b(\nu) = \nu^3$. Als Regularisierungsparameter α_k in der Iterationsvorschrift des Levenberg-Marquardt-Verfahrens (im folgenden auch mit LM-Verfahren abgekürzt) bzw. der IRGN-Methode verwenden wir jeweils ein konstantes α . Als Startnäherung wählen wir stets eine Gerade durch den Nullpunkt, dargestellt als quadratischer Spline über dem Gitter Δ_p .

Beispiel 5.4.1 Als erstes Beispiel versuchen wir die Diffusivitätsfunktion $a_{\text{exakt}} = \nu^5 + 0.5\nu$ über einem äquidistanten Gitter Δ_p zu rekonstruieren. Abbildung 5.14 zeigt zum Vergleich jeweils die vierte Iterierte des Levenberg-Marquardt-Verfahrens und der IRGN-Methode für p = 2, $\alpha = 10^{-6}$ und für die Experimentdauer T = 500. Als Startnäherung haben wir $a_0(\nu) = 0.1\nu$ verwendet.



Abbildung 5.14: Rekonstruktionen für p = 2

In Abbildung 5.15 sind die bei der Rekonstruktion auftretenden relativen Residuen $||F(a_k) - F(a_{\text{exakt}})||_{L^2(0,T)}/||F(a_{\text{exakt}})||_{L^2(0,T)}$ sowie der relative Fehler $||a_k - a_{\text{exakt}}||_{H^2(0,1)}/||a_{\text{exakt}}||_{H^2(0,1)}$ eingezeichnet. Die beiden Iterationen besitzen nahezu den gleichen Verlauf, so daß sich die Rekonstruktionen nur



Abbildung 5.15: Relative Residuen und Fehler zur Rekonstruktion mit p = 2 aus Abbildung 5.14

geringfügig unterscheiden. In Anbetracht der geringen Anzahl p + 1 = 3 verwendeter freier Parameter scheinen die erhaltenen Näherungen den exakten Koeffizienten a_{exakt} gut zu approximieren. Auffallend ist, daß die Approximation im Teilintervall [0, 0.4] besonders gut ist. Insbesondere wird die Steigung im Nullpunkt $a'_{\text{exakt}}(0)$ sehr gut angenähert, was wir auch bei den noch folgenden Beispielen beobachtet haben. Offenbar enthalten die Meßdaten, d. h. der freie Rand, sehr viel Information über diese Steigung. Der Informationsanteil über das Verhalten von a_{exakt} im zweiten Teilintervall [0.4, 1] scheint vergleichsweise geringer zu sein. Erinnern wir uns an die Bedingung (4.25) an den freien Rand, so scheinen unsere Beobachtungen auch nicht weiter verwunderlich, da hier die Steigung $a'_{\text{exakt}}(0)$ sogar explizit enthalten ist.

Durch Halbierung der Gitterweite wurde anschließend die Zahl der freien Parameter erhöht. Als Startnäherung für das verfeinerte Gitter haben wir jeweils aus der Rekonstruktion über dem gröberen Gitter die Iterierte mit dem kleinsten relativen Fehler verwendet, indem wir die zusätzlichen Knoten des neuen Gitters mittels Routinen der MATLAB-Spline-Toolbox in die zugehörige B-Spline-Darstellung eingefügt haben.

Die Abbildungen 5.16 und 5.17 zeigen das Ergebnis der Verfeinerung auf das Gitter \triangle_4 für das LM-Verfahren. Zusätzlich ist in Abbildung 5.16 auch die Iterierte mit dem kleinsten relativen Fehler der weiteren Verfeinerung auf \triangle_8 dargestellt. Der kleinste relative Fehler im Fall p = 4 von 0.273 läßt sich für p = 8 nur noch auf 0.265 reduzieren, allerdings ist die Iterierte für p = 8in Abbildung 5.16 in dieser Darstellung im Intervall [0, 0.5] kaum noch von der Funktion a_{exakt} zu unterscheiden. Für die Iterationen auf den verfeinerten



Abbildung 5.16: Rekonstruktionen aus dem LM-Verfahren über verfeinerten Gittern



aus Abbildung 5.16

Gittern mußten wir den Parameter α von 10^{-6} auf 10^{-5} (p = 4) und 10^{-4} (p = 8) vergrößern, um aufkommende Oszillationen aufgrund der größeren Anzahl freier Parameter zu unterdrücken. Durch weitere Verfeinerung läßt sich das Rekonstruktionsergebnis nicht mehr verbessern bzw. es wird durch Oszillationen um den Koeffizienten a_{exakt} sogar verschlechtert. Wir haben die

Rekonstruktion mit p = 4 auch direkt ausgehend von der Startgeraden $a_0(\nu) = 0.1\nu$ durchgeführt. Die resultierenden Näherungen sind etwas schlechter als die der Verfeinerung, der kleinste relative Fehler liegt in etwa bei 0.3071. Für eine noch größere Zahl an Parametern lassen sich mit den beiden Verfahren und der Startgeraden keine guten Resultate erzielen, die Iterationen werden zunehmend instabil.

Des weiteren haben wir den Einfluß der Experimentdauer T untersucht. In Abbildung 5.18 ist das Resultat der IRGN-Methode mit $\alpha = 10^{-6}$ für p = 2und verschiedene T abgebildet.



Abbildung 5.18: IRGN-Rekonstruktion für verschiedene T

Das Resultat für T = 500 haben wir bereits diskutiert. Für kleinere T, hier T = 1, erhält man eine sehr schlechte Approximation, die sich auch nicht durch eine andere Wahl von α entscheidend verbessern läßt. Wir vermuten einen Zusammenhang zu der Tatsache, daß sich s für kleine t generell wie eine Wurzelfunktion verhält (vgl. (4.38)), und deshalb der Einfluß des Koeffizienten a für kleine t gering ist. Somit enthält der Verlauf von s erst für größere t ausreichend spezifische Information über a. Für sehr große T wie T = 1000 beobachtet man generell eine geringfügige Verschlechterung der Rekonstruktionsresultate.

Beispiel 5.4.2 Wir haben unsere Tests anschließend auch mit dem Koeffizienten $b = \nu^4 + 0.1\nu$ durchgeführt, der im Nullpunkt eine positive Steigung besitzt und somit nicht den Voraussetzungen (4.39) genügt. Abbildung 5.19 zeigt

das Rekonstruktionsergebnis des LM-Verfahrens für T = 100 mit $\alpha = 0.0002$ für p = 2 bzw. mit $\alpha = 0.0004$ für p = 4. Für dieses Ergebnis haben wir als Start-Spline die Gerade mit Steigung eins verwendet. In Abbildung 5.20 ist der relative Fehler und die relativen Residuen zu den beiden Iterationen aufgetragen.



Abbildung 5.19: Rekonstruktion mit dem LM-Verfahren



dung 5.19

Im Vergleich zu Beispiel 5.4.1 ist es für dieses Beispiel viel schwieriger, einen geeigneten Parameter α zu finden, so daß die LM-Iterierten den Koeffizienten a_{exakt} gut approximieren. Bei der IRGN-Methode haben wir für p = 2 sogar Instabilitäten beobachtet, sie bricht in der Regel nach dem dritten Schritt ab. Dieses instabile Verhalten wird durch die Größe der Steigung von b im Nullpunkt beeinflußt, denn für geringere Steigungen scheinen die Verfahren stabiler zu funktionieren. Diese numerischen Beobachtungen hängen sicherlich eng mit Beziehung (4.25) zusammen, da b'(0) explizit den Verlauf von s beeinflußt.

Beispiel 5.4.3 Um das Rekonstruktionsverfahren auch an konkaven Funktionen zu testen, wurden für den Koeffizienten $a_{\text{exakt}} = 1 - e^{-2\nu}$ künstliche Meßdaten erzeugt. Genau wie in den vorherigen Beispielen haben wir die Qualität der Näherungen für unterschiedliche T untersucht und uns aufgrund dessen für T = 100 entschieden. Die Startgerade a_0 hat die Steigung 0.5. In Abbildung 5.21 ist die Iterierte des LM-Verfahrens bzw. der IRGN-Methode mit $\alpha = 8 \cdot 10^{-5}$ zum Gitter Δ_2 mit dem kleinsten relativen Fehler eingezeichnet.



Abbildung 5.21: LM- und IRGN-Rekonstruktion, p = 2

Abbildung 5.22 illustriert den Verlauf der relativen Residuen und Fehler der beiden Iterationen. Bei beiden Verfahren fallen die Fehler- und Residuenkurven in den ersten vier bis fünf Iterationsschritten ab und erreichen dabei in



Abbildung 5.22: Relative Residuen und Fehler zur Rekonstruktion aus Abbildung 5.21

etwa dieselbe Größenordnung. Auffallend ist der sehr starke Anstieg des relativen Fehlers der IRGN-Iterierten nach dem vierten Schritt.

Die Abbildungen 5.23 und 5.24 demonstrieren das Ergebnis aus beiden Verfahren für das Gitter \triangle_4 und $\alpha = 0.0002$.



Abbildung 5.23: LM- und IRGN-Rekonstruktion, p = 4

Es wird deutlich, daß die Iterierten zum feineren Gitter \triangle_4 den Verlauf von



Abbildung 5.24: Relative Residuen und Fehler zur Rekonstruktion aus Abbildung 5.23

 a_{exakt} im Teilintervall [0.4, 1] schlechter approximieren als in [0, 0.4]. Dies hatten wir bereits in Beispiel 5.4.1 beobachtet. Auch für andere α und Startgeraden bzw. noch feinere Gitter stellt sich nahezu die gleiche Situation ein. Verglichen mit den Näherungen aus S_{2,\triangle_2}^0 in Abbildung 5.21 sind die Iterierten über dem feineren Gitter \triangle_4 schlechtere Approximationen an a_{exakt} . Die Norm der IRGN-Iterierten nimmt bei dieser Rekonstruktion nach dem dritten Schritt aufgrund von Oszillationen "explosionsartig" zu, so daß nach drei weiteren Iterationsschritten der Vorwärtslöser die Iteration abbricht.

Neben den Versuchen mit den exakten künstlichen Daten haben wir auch Rekonstruktionen mit gestörten Daten durchgeführt. Hierzu haben wir auf die Meßdaten normalverteiltes Rauschen addiert.

Beispiel 5.4.4 Abbildung 5.25 zeigt die Meßdaten $s = F(a_{\text{exakt}})$ zu Beispiel 5.4.1 zusammen mit den verwendeten gestörten Daten \tilde{s}_{δ} , die einen Datenfehler $\|\tilde{s}_{\delta} - s\|_{L^2(0,T)} = \delta = 4$ besitzen. Dies entspricht einem relativen Datenfehler von etwa 2 %.

In Abbildung 5.26 haben wir das Rekonstruktionsresultat des Levenberg-Marquardt-Verfahrens mit $\alpha = 10^{-6}$ für das äquidistante Gitter \triangle_2 bzw. \triangle_4 dargestellt. Die Startgerade hatte die Steigung 0.1.

Abbildung 5.27 zeigt den Verlauf von $||F(a_k) - \tilde{s}_{\delta}||_{L^2(0,T)}/\delta$ sowie den relativen Fehler der Iterierten für p = 2. Als Abbruchkriterium für die Iteration haben wir das Diskrepanz-Prinzip (4.50) mit $\tau = 1.2$ angewendet. Bereits nach zwei Schritten wird die Iteration gestoppt, da die Kurve $||F(a_k) - \tilde{s}_{\delta}||_{L^2(0,T)}/\delta$ in Abbildung 5.27 die Grenze τ unterschritten hat. Trotz des Datenfehlers



Abbildung 5.25: Verrauschte Meßdaten ($\delta=4)$ zu Beispiel 5.4.1



Abbildung 5.26: LM-Rekonstruktion zu den verrauschten Meßdaten aus Abbildung 5.25



Abbildung 5.27: Residuen und Fehler zur Rekonstruktion mit p = 2 aus Abbildung 5.26

erhalten wir eine gute Approximation aus S_{2,Δ_2}^0 an den gesuchten Koeffizienten, vergleichbar mit der Rekonstruktion aus Abbildung 5.14. Für die IRGN-Methode erhält man nahezu das gleiche Resultat.

Abbildung 5.28 zeigt noch einmal die Meßdaten $s = F(a_{\text{exakt}})$ zu Beispiel 5.4.1 zusammen mit den verwendeten gestörten Daten \tilde{s}_{δ} , diesmal mit einem größeren Datenfehler $\|\tilde{s}_{\delta} - s\|_{L^2(0,T)} = \delta = 16$. Dies entspricht einem relativen Fehler von etwa 9 %.

In Abbildung 5.29 ist das zugehörige Rekonstruktionsresultat des Levenberg-Marquardt-Verfahrens mit $\alpha = 10^{-4}$ für das äquidistante Gitter Δ_2 abgebildet. Auch hier ist der Stop-Index gleich zwei. Die Rekonstruktion hat sich im Vergleich zu Abbildung 5.26 mit $\delta = 4$ trotz der Vervierfachung des Fehlers kaum verschlechtert. Unser Rekonstruktionsverfahren erweist sich also bei diesen Beispielen als äußerst robust gegenüber Datenfehlern. Dies ist vermutlich darauf zurückzuführen, daß wir den Koeffizientenraum \mathcal{H}_a durch die Projektion auf S_{2,Δ_2}^0 sehr grob diskretisiert haben, was regularisierend wirkt. Dagegen verliert das Verfahren mit zunehmender Anzahl freier Parameter deutlich an Stabilität.

Beispiel 5.4.5 Als letztes Beispiel zeigen wir Rekonstruktionsresultate für gestörte Daten zu Beispiel 5.4.3. In Abbildung 5.30 sind die verwendeten Meßdaten, deren Datenfehler $\delta = 4$ beträgt, dargestellt. Der relative Fehler liegt in diesem Fall bei etwas mehr als 4%.

Die Resultate der IRGN-Methode und des LM-Verfahrens mit konstantem $\alpha = 0.1$ über dem äquidistanten Gitter Δ_2 werden in Abbildung 5.31 und 5.32 illustriert. Der Verlauf der Fehler- und Residuenkurven beider Iteratio-



Abbildung 5.28: Verrauschte Meßdaten ($\delta=16)$ zu Beispiel 5.4.1



Abbildung 5.29: LM-Rekonstruktion zu den verrauschten Meßdaten aus Abbildung 5.28



Abbildung 5.30: Verrauschte Meßdaten ($\delta = 4$) zu Beispiel 5.4.3



Abbildung 5.31: Rekonstruktionen zu den verrauschten Meßdaten aus Abbildung 5.30



Abbildung 5.32: Relative Residuen und Fehler zu den Rekonstruktionen aus Abbildung 5.31

nen während der ersten zwei Schritte ist nahezu identisch, dann nimmt jedoch der relative Fehler der IRGN-Iterierten wieder sehr stark zu. Aufgrund des Diskrepanz-Prinzips brechen wir die Iteration nach dem zweiten Schritt ab. Auch bei diesem Beispiel approximieren die Rekonstruktionen beider Verfahren in Abbildung 5.31 den Verlauf von a_{exakt} im Teilintervall [0.4, 1] deutlich schlechter als in [0, 0.4].

Bei den bisher vorgestellten Rekonstruktionen haben wir während der Iteration einen konstanten Regularisierungsparameter α verwendet. Für Beispiel 5.4.3 bzw. 5.4.5 haben wir zudem untersucht, inwieweit sich die Ergebnisse durch iterationsabhängige Regularisierungsparameter verbessern lassen. Hierzu wurde die Iteration mit dem bisher verwendeten α nach ein oder zwei Schritten abgebrochen. Mit der letzten Iterierten als Startwert haben wir dann mit einem neuen Parameter $\tilde{\alpha}$ einen weiteren Iterationsschritt durchgeführt. Da es uns hierbei jedoch nicht gelungen ist, $\tilde{\alpha}$ so einzustellen, daß die Rekonstruktion wesentlich verbessert wird, wollen wir auf diese Untersuchungen nicht weiter eingehen.

Literaturverzeichnis

- D. G. Aronson, Regularity properties of flows through porous media: The interface, Arch. Rat. Mech. Anal. 37, 1–10, 1970.
- [2] F. V. Atkinson, L. A. Peletier, Similarity profiles of flows through porous media, Arch. Rat. Mech. Anal. 42, 369–379, 1971.
- [3] G. I. Barenblatt, On some unsteady motions of a liquid and a gas in a porous medium, Akad. Nauk SSR Prikl. Math. Meh. 16, 67–78, 1952.
- [4] S. Bitterlich, P. Knabner, Formfree and cascadic identification of material laws in (un)saturated fluid flow form column experiments, ZAMM, Z. Angew. Math. Mech. 81, Suppl. 1, 13–16, 2001.
- [5] S. Bitterlich, P. Knabner, An efficient method for solving an inverse problem for the Richards equation, J. Comput. Appl. Math. 147, 153–173, 2002.
- [6] B. Blaschke, A. Neubauer, O. Scherzer, On convergence rates for the iteratively regularized Gauss-Newton method, *IMA J. Numer. Anal.* 17, 421–436, 1997.
- [7] R. Ciegis, A. Zemitis, The mathematical simulation of the liquid transport in a multilayered nonwoven, in: R. Ciegis, Hrsg., *Mathematical modelling and complex analysis*, 9–34, Technika, Vilnius, Litauen, 1997.
- [8] B. Cockburn, G. Gripenberg, Continuous dependence on the nonlinearities of solutions of degenerate parabolic equations, J. Differ. Equations 151, 231–251, 1999.
- [9] J. Crank, Free and moving boundary problems. Clarendon Press, Oxford, 1984.
- [10] J. Diaz, R. Kersner, On a nonlinear degenerate parabolic equation in infiltration or evaporation through a porous medium, J. Differ. Equations 69, 368–403, 1987.

- [11] P. C. DuChateau, An inverse problem for the hydraulic properties of porous media, SIAM J. Math. Anal. 28, 611–632, 1997.
- [12] W. Durner, E. Priesack, H.-J. Vogel, T. Zurmühl, Determination of parameters of flexible hydraulic functions by inverse modeling, in: M. van Genuchten, F. Leij, L. Wu, Hrsg., Proc. Int. Workshop on Characterization and Measurement of the Hydraulic Properties of Unsaturated Porous Media, 817–829, University of California, Riverside, CA., 1999.
- [13] W. Durner, B. Schultze, T. Zurmühl, State-of-the-art in inverse modeling of inflow/outflow experiments, in: M. van Genuchten, F. Leij, L. Wu, Hrsg., Proc. Int. Workshop on Characterization and Measurement of the Hydraulic Properties of Unsaturated Porous Media, 661–681, University of California, Riverside, CA., 1999.
- [14] S. Evje, K. H. Karlsen, N. H. Risebro, A continuous dependence result for nonlinear degenerate parabolic equations with spatially dependent flux function, in: *Hyperbolic problems: theory, numerics, applications*, No. 140 in Internat. Series of Numerical Mathematics, 337–346, Birkhäuser, Basel, 2001.
- [15] G. Fichera, On a unified theory of boundary value problems for ellipticparabolic equations of second order, in: R. E. Langer, Hrsg., *Boundary* problems in differential equations, 97–120, University of Wisconsin Press, Madison, 1960.
- [16] B. H. Gilding, A nonlinear degenerate parabolic equation, Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci. (4) 4, 393–432, 1977.
- [17] B. H. Gilding, Properties of solutions of an equation in the theory of infiltration, Arch. Rat. Mech. Anal. 65, 203–225, 1977.
- [18] B. H. Gilding, The occurrence of interfaces in nonlinear diffusionadvection processes, Arch. Rat. Mech. Anal. 100, 243–263, 1988.
- [19] B. H. Gilding, Improved theory for a nonlinear degenerate parabolic equation, Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa Cl. Sci. (4) 16, 165–224, 1989.
- [20] B. H. Gilding, Qualitative mathematical analysis of the Richards equation, Transport in Porous Media 6, 651–666, 1991.
- [21] M. Hanke, A regularizing Levenberg-Marquardt scheme, with applications to inverse groundwater filtration problems, *Inverse Probl.* 13, 79–95, 1997.

- [22] M. Hanke, A. Neubauer, O. Scherzer, A convergence analysis of the Landweber iteration for nonlinear ill-posed problems, *Numer. Math.* 72, 21–37, 1995.
- [23] H. Heuser, Lehrbuch der Analysis, Teil 1. Teubner, Stuttgart, 1989.
- [24] C. D. Hill, On the numerical solution of degenerate elliptic-parabolic equations, SIAM J. Numer. Anal. 5, 717–724, 1968.
- [25] B. A. Igler, Identification of nonlinear coefficient functions in reactive transport through porous media, Doktorarbeit, Universität Erlangen-Nürnberg, 1997.
- [26] P. Knabner, Mathematische Modelle f
 ür Transport und Sorption gelöster Stoffe in porösen Medien. P. Lang, Frankfurt, 1991.
- [27] P. Knabner, L. Angermann, Numerik partieller Differentialgleichungen. Springer, Berlin, 2000.
- [28] B. F. Knerr, The porous medium equation in one dimension, Trans. Amer. Math. Soc. 234, 381–415, 1977.
- [29] J. J. Kohn, L. Nirenberg, Degenerate elliptic-parabolic equations of second order, Commun. Pure Appl. Math. 20, 797–872, 1967.
- [30] O. A. Ladyženskaja, V. A. Solonnikov, N. N. Ural'ceva, Linear and Quasilinear Equations of Parabolic Type. Amer. Math. Soc., Providence, 1968.
- [31] D. Li, Difference schemes of degenerate parabolic equations, J. Comput. Math. 1, 211–222, 1983.
- [32] C.-S. Lin, K. Tso, On regular solutions of second order degenerate ellipticparabolic equations, *Commun. Partial Differ. Equations* 15, 1329–1360, 1990.
- [33] R. Nabokov, An Inverse Problem for the Porous Medium Equation: Identification of the Permeability, Doktorarbeit, Universität Heidelberg, 1996.
- [34] O. A. Olejnik, A. S. Kalasnikov, C. Juj-lin, The Cauchy problem and boundary problems for equations of the type of nonstationary filtration, *Izv. Akad. Nauk SSR, Ser. Mat.* 22, 667–704, 1958.
- [35] O. A. Olejnik, E. V. Radkevic, Second order equations with nonnegative characteristic form. Plenum Press, New York-London, 1973.

- [36] I. S. Pop, Regularization methods in the numerical analysis of some degenerate parabolic equations, Doktorarbeit, Universität Cluj-Napoca (Rumänien), 1998.
- [37] K. Roth, Lecture Notes in Soil Physics, Universität Hohenheim, 1996.
- [38] A. Samarskij, Theorie der Differenzenverfahren. Geest & Portig, Leipzig, 1984.
- [39] A. Zemitis, Mathematical simulation of liquid transport in fleece, in: H. Neunzert, Hrsg., Progress in Industrial Mathematics at ECMI 94, Wiley-Teubner, 1996.