

# Geometry as a Design Variable in Optimum Experimental Design for Partial Differential Equations

Tommy Etling

March 10, 2014

Optimum Experimental Design (OED) is an established method to optimize the parameter identification by experiments. The identification problem is a parameter estimation, because the measurement errors are transmitted to the parameters. The goal is to maximize the confidence in the estimated parameters. This happens in the design stage by minimizing a functional on the approximated covariance matrix of the parameters. It is possible to involve cost terms in this functional to get economic and resource-efficient experiments for the parameter estimation.

OED is long established in different scientific disciplines, e. g. modeling of chemical processes, but the models are mainly based on ordinary differential equations and differential algebraic equations. There is not much literature about OED with partial differential equation. Geometry as design variable is just mentioned in a low-dimensional parametrized form in the context of Bingham-Fluids. That is the reason for looking at shape optimization methods, which can be used in the design stage of the OED problem. This shape optimization problem arises for instance when the shape of samples in mechanical experiments becomes a design variable in the OED.

We will show, that the combination of shape optimization methods with OED leads to a distinct improvement of the parameter estimation. We use adjoint shape calculus techniques for the shape optimization to get a representation of the shape gradient. With this representation we are able to use gradient-based optimization algorithms for the design problem and we are able to realize high-dimensional shape parametrizations. As proof of concept we show some numerical results achieved by an implementation using the FE library FEniCS.

*Optimum Experimental Design (OED) ist eine etablierte Methode um die Parameteridentifikation durch Experimente zu optimieren. Es handelt sich um eine Parameterschätzung, da sich Messfehler auf die Parameter übertragen. Das Ziel ist es, die Konfidenz in die geschätzten Parameter zu maximieren. Dies geschieht, indem in der Designphase ein Funktional auf der approximierten Kovarianzmatrix der Parameter minimiert wird. In dieses Funktional können auch Kostenterme einfließen, um ressourcenschonende und effiziente Experimente für die Parameterschätzung durchzuführen. In verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen, z. B. Modellierung chemischer Prozesse, ist diese Methode schon lange etabliert, jedoch beruhen die Modelle hauptsächlich auf ODEs und DAEs. Es gibt bisher nur wenig Literatur zu OED mit PDEs und die Geometrie wurde dabei nur in einer sehr niedrig-dimensionalen parametrisierten Form angeschaut. Daher betrachten wir Methoden der Formoptimierung, die im Designproblem der OED verwendet werden. Diese Aufgabenstellung entsteht, wenn man beispielsweise die Form von Probekörpern für mechanische Versuche als Designvariable im OED betrachtet. Es soll gezeigt werden, dass eine Kombination der Methoden der Formoptimierung mit der OED zu einer deutlichen Verbesserung der Parameterschätzung führt. Für die Formoptimierung verwenden wir adjoint shape calculus techniques, um eine Darstellung des Formgradienten zu erhalten. As proof of concept there are some numerical results achieved by FeniCS implementations.*