

# Dreidimensionale geoelektrische FD-Modellrechnungen mittels vorkonditionierter konjugierter Gradienten

K. Spitzer (Hannover)

## 1 Einleitung

Die Diskretisierung der Differentialgleichung des elektrischen Potentials im leitenden Halbraum bei gegebener Quellkonfiguration, die Mundry (1981) unter Verwendung zentraler finiter Differenzen für zweidimensionale Modellrechnungen formuliert hat, ist auf die dreidimensionale Problematik übertragen worden. Das daraus resultierende Gleichungssystem wird mit verschiedenen numerischen Methoden gelöst. Prinzipiell entstehen durch die oben erwähnten zentralen Differenzen nicht-symmetrische, schwach besetzte Koeffizientenmatrizen, die mit dem Verfahren der Bikonjugierten Gradienten (Fletcher, 1976) und der Quadratischen Konjugierten Gradienten (Sonneveld, 1989) bearbeitet werden können. Bestimmte Verfahren der Vorkonditionierung der Koeffizientenmatrizen verbessern das Konvergenzverhalten des Gleichungslösers durch eine Verkleinerung der Konditionszahl erheblich. Nachdem es gelungen ist, die Koeffizientenmatrizen zu symmetrisieren, ist es möglich das Verfahrens der Konjugierten Gradienten (Hestenes & Stiefel, 1952) mit entsprechender Vorkonditionierung (Schwarz, 1991) auf diese Problematik anzuwenden, was erhebliche Laufzeitverbesserungen mit sich bringt.

Ein entscheidender Punkt in dieser Arbeit ist die Einführung einer sogenannten kompakten Speicherung der Koeffizientenmatrix des zu lösenden Gleichungssystems (Spitzer, 1993). In der Behandlung realistischer Modelle sind Gleichungssysteme, deren Koeffizientenmatrizen mehr als  $10 \cdot 10^9$  (10 Milliarden) Elemente besitzen, keine Seltenheit. Diese werden bei der Methode der Finiten Differenzen bereits durch Raumbitter mit einer Anzahl von  $60 \times 60 \times 30$  Gitterlinien (Breite  $\times$  Tiefe  $\times$  Höhe) erzeugt. Auch für die heutige, leistungsstarke Generation von Computern stellt die Speicherung solcher Arrays ein nicht zu bewältigendes Problem dar. Bei der Methode der kompakten Speicherung müssen beim obigen Beispiel „nur noch“ 0.0065% oder 65 ppm der Koeffizienten im Arbeitsspeicher gehalten werden, was etwa der Anzahl von 750 000 Koeffizienten entspricht. Überflüssige Rechenoperationen werden dadurch weitestgehend vermieden, und in Kombination mit schnellen numerischen Verfahren können moderate Laufzeiten erzielt werden, die die Anwendung solcher Modellrechnungen für praktische Zwecke ermöglichen könnten.

## 2 Mathematische Grundlagen

Aus der Kontinuitätsgleichung ergibt sich die Differentialgleichung des elektrischen Potentials bei beliebiger Verteilung der elektrischen Leitfähigkeit im Halbraum  $z > 0$  ( $x, y, z$  rechtshändige kartesische Koordinaten,  $z$  senkrecht nach unten):

$$\operatorname{div}(\sigma \cdot \operatorname{grad} V) = Q \quad (1)$$

mit  $Q$  als Quellterm, der nur am Ort der Stromquellen ungleich Null ist ( $Q = I \cdot \delta(x - x_q) \cdot \delta(y - y_q) \cdot \delta(z - z_q)$ ,  $I$  Quellstromstärke,  $\delta$  Dirac'sche Deltafunktion),  $V$  als elektrischem Potential und  $\sigma$  als elektrischer Leitfähigkeit. Da  $\sigma$  hier eine skalare Funktion des Ortes ist, ergibt sich:

$$\sigma \cdot \left( \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial \sigma}{\partial x} \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial \sigma}{\partial y} \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial \sigma}{\partial z} \frac{\partial V}{\partial z} = -I \cdot \delta(x - x_q) \cdot \delta(y - y_q) \cdot \delta(z - z_q) \quad (2)$$

Alle Terme, die in dieser Differentialgleichung auftreten, werden durch Terme finiter Differenzen ersetzt. **Abb. 1** zeigt die Struktur des Raumbitters schematisch und legt die Bezeichnungsweise

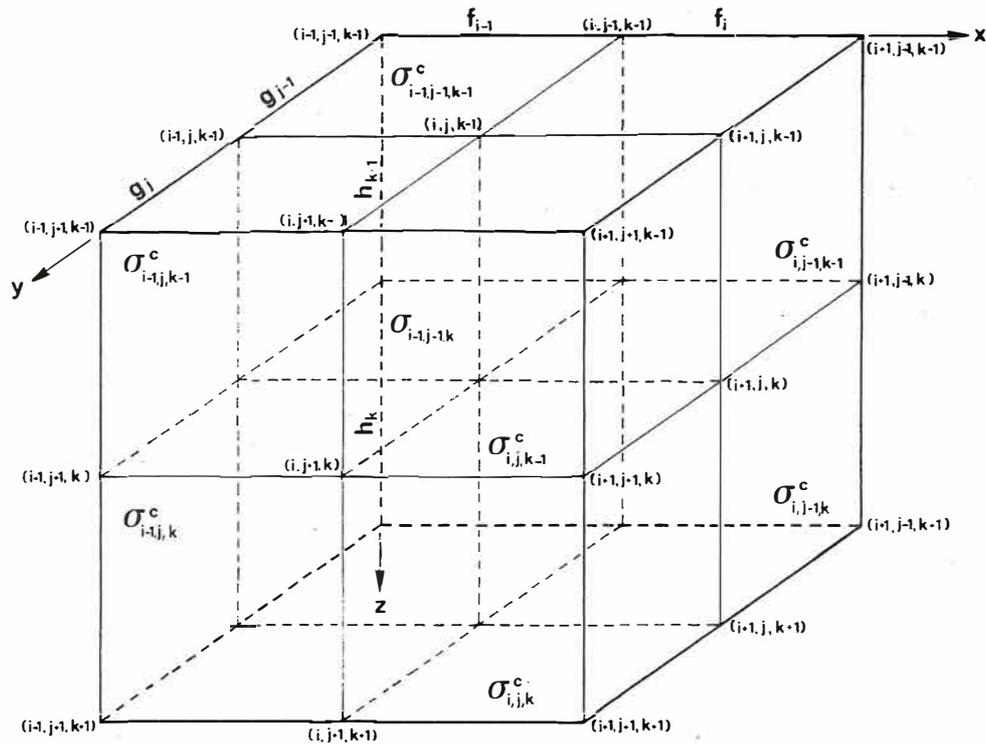


Abb. 1: Schema des dreidimensionalen Finite-Differenzen-Gitters mit Indexkodierung und Bezeichnung der Leitfähigkeiten und Gitterabstände  $f_i$ ,  $g_j$  und  $h_k$ .

der Knotenindizes, der Leitfähigkeiten und der Gitterabstände  $f_i$ ,  $g_j$  und  $h_k$  fest. Im einzelnen ergibt sich das Folgende:

1. Taylorentwicklung des Potentials im Punkt  $(i, j, k)$  und Separation von  $\text{grad } V$  und  $\Delta V$
2. Diskretisierung von  $\sigma$  an den Gitterpunkten durch mit der Zellgröße bewichtete Mittelung über benachbarte Zellenleitfähigkeiten  $\sigma^c$  (nach Brewitt-Taylor & Weaver, 1976)
3. Diskretisierung des Leitfähigkeitsgradienten  $\text{grad } \sigma$  und des Quellterms  $Q$
4. Aufstellung der Differenzgleichung mit 1) bis 3)
5. Behandlung der Ränder:

$$\text{Oberfläche:} \quad \frac{\partial V}{\partial z} = 0 \quad \text{Neumann'sche Randbedingung}$$

$$\text{alle anderen Ränder:} \quad V = 0 \quad \text{Dirichlet'sche Randbedingung}$$

## 2.1 Die ersten und zweiten Ableitungen des Potentials

Aus der Taylorentwicklung des Potentials lassen sich für jede Dimension die Ableitungen des Potentials an den Punkten  $(i, j, k)$  separieren (hier der Kürze wegen nur für  $x$ ):

$$\left. \frac{\partial V}{\partial x} \right|_{i,j,k} = \frac{f_{i-1}^2 V_{i+1,j,k} + (f_i^2 - f_{i-1}^2) V_{i,j,k} - f_i^2 V_{i-1,j,k}}{f_{i-1} f_i (f_{i-1} + f_i)} \quad (3)$$

Ebenso werden die zweiten Ableitungen separiert:

$$\left. \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} \right|_{i,j,k} = 2 \cdot \frac{f_{i-1} V_{i+1,j,k} - (f_{i-1} + f_i) V_{i,j,k} + f_i V_{i-1,j,k}}{f_{i-1} f_i (f_{i-1} + f_i)} \quad (4)$$

Diese Gleichungen ersetzen die Ableitungen des Potentials in den Punkten  $(i, j, k)$  durch Differenzen benachbarter Potentiale.

## 2.2 Die Leitfähigkeit an den Gitterpunkten

Die Diskretisierung der Leitfähigkeiten wurde folgendermaßen vorgenommen: Jede Zelle mit den Eckpunkten  $(i, j, k)$ ,  $(i+1, j, k)$ ,  $(i, j+1, k)$ ,  $(i, j, k+1)$ ,  $(i+1, j+1, k)$ ,  $(i+1, j, k+1)$ ,  $(i, j+1, k+1)$  und  $(i+1, j+1, k+1)$  ist, wie eingangs erwähnt wurde, mit einer bestimmten Leitfähigkeit  $\sigma_{i,j,k}^c$  belegt. Aus diesen Zellenleitfähigkeiten werden Hilfwerte berechnet

$$S_{i,j,k} = f_i \cdot g_j \cdot h_k \cdot \sigma_{i,j,k}^c, \quad (5)$$

die sich zur Leitfähigkeit  $\sigma_{i,j,k}$  am Gitterpunkt  $(i, j, k)$  zusammensetzen:

$$\sigma_{i,j,k} = \frac{S_{i,j,k} + S_{i-1,j,k} + S_{i,j-1,k} + S_{i,j,k-1} + S_{i-1,j-1,k} + S_{i-1,j,k-1} + S_{i,j-1,k-1} + S_{i-1,j-1,k-1}}{(f_{i-1} + f_i)(g_{j-1} + g_j)(h_{k-1} + h_k)} \quad (6)$$

Dies entspricht einer arithmetischen Mittelung über die zum Punkt  $(i, j, k)$  benachbarten mit dem jeweiligen Volumen der Zelle gewichteten Zellenwiderstände.

## 2.3 Die Leitfähigkeitsgradienten

Mit den Hilfwerten  $S_{i,j,k}$  (Gl. 5) lassen sich ebenso die Leitfähigkeitsgradienten im Punkt  $(i, j, k)$  bestimmen. Für  $x$  lauten sie folgendermaßen:

$$\left. \frac{\partial \sigma}{\partial x} \right|_{i,j,k} = \alpha \cdot \left( \frac{S_{i,j,k} + S_{i,j,k-1} + S_{i,j-1,k} + S_{i,j-1,k-1}}{f_i} - \frac{S_{i-1,j,k} + S_{i-1,j,k-1} + S_{i-1,j-1,k} + S_{i-1,j-1,k-1}}{f_{i-1}} \right) \quad (7)$$

$$\text{mit } \alpha = \frac{2}{(f_{i-1} + f_i)(g_{j-1} + g_j)(h_{k-1} + h_k)}$$

## 2.4 Die Quellterme

Der Quellterm  $Q$  ist definiert als

$$Q = I \cdot \delta(x - x_q) \cdot \delta(y - y_q) \cdot \delta(z - z_q) \approx \frac{I}{\tau}, \quad (8)$$

wobei  $I$  die Quellstromstärke und  $\tau$  das endlich ausgedehnte Quellvolumenelement darstellen. Betrachtet man eine Stromquelle an der Erdoberfläche, so ergibt sich

$$\tau = \frac{(f_{i_q-1} + f_{i_q})(g_{j_q-1} + g_{j_q})h_1}{8}$$

und

$$Q = \frac{8 \cdot I}{(f_{i_q-1} + f_{i_q})(g_{j_q-1} + g_{j_q})h_1} \quad (9)$$

$I$  wird im weiteren ohne Einschränkung der Allgemeinheit mit der Stromstärke 1 A belegt.

Setzt man alle Differenzterme in die Gleichung (2) ein und sortiert die Ausdrücke nach den Potentialen  $V_{i,j,k}$  und deren Nachbarn, so erhält man die folgende lineare Gleichung für den inneren Punkt  $(i, j, k)$ :

$$C1_{i,j,k}V_{i-1,j,k} + C2_{i,j,k}V_{i+1,j,k} + C3_{i,j,k}V_{i,j-1,k} + C4_{i,j,k}V_{i,j+1,k} + C5_{i,j,k}V_{i,j,k-1} + C6_{i,j,k}V_{i,j,k+1} = C0_{i,j,k}V_{i,j,k} - Q \quad (10)$$

mit

$$Q = \begin{cases} 0 & \text{für } (i, j, k) \neq \text{Quellpunkt} \\ I/\tau & \text{für } (i, j, k) = \text{Quellpunkt, } \tau \text{ Quellvolumen} \end{cases}$$

Die Ausdrücke  $C0$  bis  $C6$  nennt man Kopplungskoeffizienten. Sie sind die Koeffizienten des linearen Gleichungssystems (13). Für innere Punkte und die  $x$ -Richtung lauten sie im einzelnen:

$$C1_{i,j,k} = \frac{2\sigma_{i,j,k} - \frac{\partial\sigma_{i,j,k}}{\partial x} f_i}{f_{i-1}(f_{i-1} + f_i)} \quad C2_{i,j,k} = \frac{2\sigma_{i,j,k} + \frac{\partial\sigma_{i,j,k}}{\partial x} f_{i-1}}{f_i(f_{i-1} + f_i)} \quad (11)$$

Der Selbstkopplungskoeffizient  $C0_{i,j,k}$  ist wie folgt definiert:

$$C0_{i,j,k} = - \sum_{l=1}^6 C l_{i,j,k}$$

An den Rändern werden diese Koeffizienten durch die entsprechenden Randbedingungen modifiziert, was im folgenden Abschnitt kurz skizziert werden soll.

### 3 Die Randbedingungen

Die bisherigen Betrachtungen beziehen sich auf innere Gitterpunkte, also Punkte, die von Nachbarn umgeben sind. An den Rändern eines dreidimensionalen Raumgitters fehlen jedoch Nachbarpunkte mindestens in einer Raumrichtung. An den Kanten des Quaders fehlen zwei und an den Ecken sogar drei Nachbarpunkte. Man begegnet dieser Tatsache, indem man einen sogenannten inneren und einen äußeren Rand einführt, d.h. man erweitert den ursprünglichen Quader um eine weitere Außenschicht, die das Volumen vollends umschließt. Dadurch ergeben sich die folgenden Indizierungen:  $i = 0, \dots, i_m + 1$ ,  $j = 0, \dots, j_m + 1$  und  $k = 0, \dots, k_m + 1$ . Diese zusätzliche Schicht ergibt an ihrer Außenfläche den äußeren Rand  $(0, j, k)$ ,  $(i_m + 1, j, k)$ ,  $(i, 0, k)$ ,  $(i, j_m + 1, k)$ ,  $(i, j, 0)$  und  $(i, j, k_m + 1)$ , für  $i = 0, \dots, i_m + 1$ ,  $j = 0, \dots, j_m + 1$ ,  $k = 0, \dots, k_m + 1$ , die Außenfläche des ursprünglichen Quaders nennt man den inneren Rand  $(1, j, k)$ ,  $(i_m, j, k)$ ,  $(i, 1, k)$ ,  $(i, j_m, k)$ ,  $(i, j, 1)$  und  $(i, j, k_m)$ , für  $i = 1, \dots, i_m$ ,  $j = 1, \dots, j_m$ ,  $k = 1, \dots, k_m$ . Leitfähigkeiten und Gitterabstände werden von der Außenschicht des inneren Quaders übernommen.

#### 3.1 Neumann'sche Randbedingungen

Mit dieser Geometrie und der Bedingung, daß die Normalkomponente der Stromdichte  $\underline{j}$  an der Oberfläche verschwindet (außer in den Quellpunkten) ergeben sich für die Erdoberfläche  $z = 0$  die sogenannten Neumann'schen Randbedingungen:

$$\frac{\partial V}{\partial z} = 0 \quad (12)$$

Numerisch erhält man diese Randbedingungen dadurch, daß man die Potentiale mit dem Index  $k = 2$  auf den äußeren Rand mit dem Index  $k = 0$  überträgt, also an der Erdoberfläche spiegelt:

$$V_{i,j,0} = V_{i,j,2}$$

Dadurch modifizieren sich die Koeffizienten  $C5_{i,j,1}$  und  $C6_{i,j,1}$  wie folgt:

$$C5_{i,j,1} = 0$$

$$C6_{i,j,1} = \frac{2\sigma_{i,j,1}}{h_1^2}, \quad i = 1, \dots, i_m, \quad j = 1 \dots j_m$$

### 3.2 Dirichlet'sche Randbedingungen

Die Randbedingungen aller anderen Ränder können nach verschiedenen Gesichtspunkten gewählt werden. Es bietet sich an, die äußeren Ränder<sup>1</sup> mit

$$V_{i,j,k} = 0$$

zu belegen (Dirichlet'sche Randbedingung), da das Potential  $V$  mit dem Abstand vom Quellpunkt  $r \rightarrow \infty$  gegen Null geht. Die Koeffizienten  $C1$  und  $C2$  für die Ränder orthogonal zur  $x$ -Richtung,  $C3$  und  $C4$  orthogonal zur  $y$ -Richtung und  $C6$  für den unteren Rand können der folgenden Tabelle entnommen werden:

linker Rand	:	$C1_{1,j,k} = 0,$	$C2_{1,j,k}$	nach Gl. (11)
rechter Rand	:	$C2_{i_m,j,k} = 0,$	$C1_{i_m,j,k}$	nach Gl. (11)
hinterer Rand	:	$C3_{i,1,k} = 0,$	$C4_{i,1,k}$	nach Gl. (11)
vorderer Rand	:	$C4_{i,j_m,k} = 0,$	$C3_{i,j_m,k}$	nach Gl. (11)
unterer Rand	:	$C6_{i,j,k_m} = 0,$	$C5_{i,j,k_m}$	nach Gl. (11)

## 4 Die Lösung des linearen Gleichungssystems

Nachdem die Bestimmungsgleichungen (10) für jeden Punkt des Raumgitters definiert sind, erhält man ein lineares Gleichungssystem, das sich in der allgemeinen folgenden Form schreiben läßt:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{b} \quad (13)$$

$\underline{\underline{A}}$  ist die Koeffizientenmatrix, die die Kopplungskoeffizienten (Gl. 11) enthält,  $\underline{x}$  ist der Vektor der gesuchten Potentialverteilung und  $\underline{b}$  ist der Quellvektor, der im Falle von zwei Elektroden und Dirichlet'schen Randbedingungen auch nur zwei von Null verschiedene Komponenten besitzt. Die Matrix  $\underline{\underline{A}}$  besitzt die Elemente  $A_{ij}, i = 1, \dots, i_m \cdot j_m \cdot k_m, j = 1, \dots, i_m \cdot j_m \cdot k_m, \underline{x}$  die Komponenten  $x_i, i = 1, \dots, i_m \cdot j_m \cdot k_m$  und  $\underline{b}$  die Komponenten  $b_i, i = 1, \dots, i_m \cdot j_m \cdot k_m$ .

### 4.1 Kompakte Speicherung der Koeffizientenmatrix mittels Positionsvektor

Um die Struktur des Gleichungssystems zu verdeutlichen, soll im folgenden zur Veranschaulichung ein  $3 \times 3 \times 3$ -Gitter ( $i_m = 3, j_m = 3, k_m = 3$ ) betrachtet werden, das bereits eine Koeffizientenmatrix von  $(i_m \cdot j_m \cdot k_m) \times (i_m \cdot j_m \cdot k_m) = 27 \times 27 = 729$  Elementen ergibt. Konkret ist diese Matrix in **Tabelle 1** dargestellt.

Sie besitzt eine Bandstruktur, und die meisten Elemente sind gleich Null. Deshalb liegt es nahe, nur die von Null verschiedenen Elemente abzuspeichern und einen mathematischen Algorithmus zu entwickeln, der nur mit diesen Elementen rechnet. Effektiv stehen in jeder Zeile maximal die sieben Koeffizienten  $C0, \dots, C6$ , die für die Rechnung von Bedeutung sind. Für mathematische Operationen, wie z.B. Matrizenmultiplikationen, benötigt man jedoch ihre Position, also Zeilen und Spaltenindex. Führt man Positionsvektoren

$$i\text{pos}(C0, i), \dots, i\text{pos}(C6, i) \quad i = 1, \dots, i_m \cdot j_m \cdot k_m$$

<sup>1</sup>Die äußeren Ränder sind hier wie folgt indiziert und werden der Einfachheit halber mit den nachstehenden Begriffen belegt: „linker“ Rand:  $i = 0, j = 0 \dots, j_m + 1, k = 0, \dots, k_m + 1$ , „rechter“ Rand:  $i = i_m + 1, j = 0 \dots, j_m + 1, k = 0, \dots, k_m + 1$ , „hinterer“ Rand:  $i = 0, \dots, i_m + 1, j = 0, k = 0, \dots, k_m + 1$ , „vorderer“ Rand:  $i = 0, \dots, i_m + 1, j = j_m + 1, k = 0, \dots, k_m + 1$ , „oberer“ Rand:  $i = 0, \dots, i_m + 1, j = 0 \dots, j_m + 1, k = 0$  und „unterer“ Rand:  $i = 0, \dots, i_m + 1, j = 0 \dots, j_m + 1, k = k_m + 1$ . Die „inneren“ Ränder haben äquivalente Bezeichnungen, deren Indexnumerierung beginnt jedoch jeweils mit 1 statt 0 und endet mit  $i_m, j_m$  oder  $k_m$  statt  $i_m + 1, j_m + 1$  oder  $k_m + 1$ .



Die Koeffizienten  $K_i$  können sukzessiv berechnet werden:

$$\begin{aligned} K_1 &= 1 \\ K_i &= C2(i-1)/C1(i) && \text{für } i = 2, \dots, i_m \\ K_i &= C4(i-i_m)/C3(i) && \text{für } i = i_m + 1, \dots, i_m \cdot j_m \\ K_i &= C6(i-i_m \cdot j_m)/C5(i) && \text{für } i = i_m \cdot j_m + 1, \dots, i_m \cdot j_m \cdot k_m \end{aligned}$$

Die Symmetrisierung erfolgt dann in der Form

$$\underline{\underline{K}} \cdot \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{\underline{K}} \cdot \underline{b} \quad . \quad (15)$$

Durch eine entsprechende Skalierung der Matrix, die die Symmetrie erhält, werden alle Hauptdiagonalelemente  $\tilde{A}_{ii}$  gleich eins gesetzt. Dies erhält man auf die folgende Weise:

$$\tilde{A}_{ij} = d_i A_{ij} d_j, \quad i, j = 1, \dots, i_m \cdot j_m \cdot k_m \quad (16)$$

mit  $d_i = 1/\sqrt{A_{ii}}$  (Schwarz, 1991). Um die Äquivalenz der Gleichungssysteme zu wahren, müssen die Vektoren  $\underline{b}$  und  $\underline{x}$  ebenfalls mit  $d_i$  multipliziert werden. Diese Skalierung stellt die einfachste Art einer Vorkonditionierung dar, verkleinert bereits im allgemeinen die Konditionszahl  $\kappa^2$  beträchtlich und führt dadurch zu einer schnelleren Konvergenz.

### 4.3 Die vorkonditionierte Methode der Konjugierten Gradienten (CGPC)

Als bisher schnellstes Verfahren hat sich die Methode der Konjugierten Gradienten mit Vorkonditionierung der Koeffizientenmatrix erwiesen. Nachdem die Koeffizientenmatrix symmetrisiert und skaliert wurde (s. Abschnitt 4.2, Reihenfolge beachten!), kann man  $\underline{\underline{A}}$  als Summe einer unteren Dreiecksmatrix  $\underline{\underline{E}}$ , einer oberen Dreiecksmatrix  $\underline{\underline{F}}$  und der Einheitsmatrix  $\underline{\underline{I}}$  darstellen:

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{E}} + \underline{\underline{I}} + \underline{\underline{F}} \quad , \quad (17)$$

mit  $\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{E}}^T$ .

Die Vorkonditionierungsmatrix  $\underline{\underline{M}}$  wird bestimmt durch:

$$\underline{\underline{M}} = \underline{\underline{C}} \underline{\underline{C}}^T \quad . \quad (18)$$

Mit  $\underline{\underline{C}}$  als Linksdreiecksmatrix ergibt sich eine effiziente LU-Zerlegung. Wählt man für  $\underline{\underline{C}}$  eine der oben eingeführten Matrix  $\underline{\underline{E}}$  ähnliche, dann ergibt sich für  $\underline{\underline{C}}$  die gleiche Besetzungsstruktur wie für  $\underline{\underline{A}}$ , was speichertechnische Vorteile hat. Die Vorkonditionierungsmatrix wird deshalb definiert als

$$\underline{\underline{M}} = (\underline{\underline{I}} + \omega \underline{\underline{E}})(\underline{\underline{I}} + \omega \underline{\underline{F}}) \quad (19)$$

mit  $\underline{\underline{C}} = \underline{\underline{I}} + \omega \underline{\underline{E}}$  und  $\omega \in \mathbb{R}$  als Relaxationsfaktor. Dieser Faktor muß willkürlich gewählt werden, was in der Praxis jedoch wenig Probleme verursacht, da die optimale Wahl von  $\omega$  durch ein breites Maximum gekennzeichnet ist. Bei der vorgestellten Rechnung in Abschnitt 5 wurde  $\omega = 1.4$  gesetzt.

Da die Matrix  $\underline{\underline{M}}$  eine von  $\underline{\underline{A}}$  verschiedene Besetzungsstruktur aufweist, ist es sinnvoll, die Vorkonditionierung in das Verfahren der Konjugierten Gradienten einfließen zu lassen, ohne die

<sup>2</sup>Die Konditionszahl  $\kappa$  einer symmetrischen Matrix ist definiert als Quotient von größtem ( $\lambda_{\max}$ ) und kleinstem Eigenwert ( $\lambda_{\min}$ ) dieser Matrix:  $\kappa = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$

explizite Berechnung von  $\underline{M}$  auszuführen (Schwarz, 1991). Nach geeigneter Wahl von  $\underline{x}_0$  ergibt sich die folgende Methode, die diesen Ansprüchen genügt:

$$\begin{array}{l}
 \underline{r}_0 = \underline{b} - \underline{A} \underline{x}_0; \quad \underline{p}_{-1} = \underline{0}; \\
 \rho_{-1} = 1; \quad k = 0; \\
 \text{while Residuum} > \text{Grenzwert do} \\
 \text{begin} \\
 \quad \underline{M} \underline{q}_k = \underline{r}_k; \quad \text{Auflösen nach } \underline{q}_k! \\
 \quad \rho_k = \underline{r}_k^T \underline{q}_k; \\
 \quad \beta_k = \frac{\rho_k}{\rho_{k-1}}; \\
 \quad \underline{p}_k = \underline{q}_k + \beta_k \underline{p}_{k-1}; \\
 \quad \sigma_k = \underline{p}_k^T \underline{A} \underline{p}_k; \quad \alpha_k = \frac{\rho_k}{\sigma_k}; \\
 \quad \underline{r}_{k+1} = \underline{r}_k - \alpha_k \underline{A} \underline{p}_k; \\
 \quad \underline{x}_{k+1} = \underline{x}_k + \alpha_k \underline{p}_k; \\
 \quad k = k + 1; \\
 \text{end}
 \end{array} \tag{20}$$

Dieser Algorithmus enthält in jedem Iterationsschritt die Auflösung des Gleichungssystems

$$\underline{M} \underline{q} = \underline{r} \tag{21}$$

nach  $\underline{q}$ .<sup>3</sup> Dies geschieht nach dem Gauß-Verfahren. Die LU-Zerlegung ist bei der Wahl von  $\underline{M}$  bereits gegeben:

$$\underline{C}(\underline{C}^T \underline{q}) = \underline{r} \quad , \tag{22}$$

wobei  $\underline{C}$  die untere und  $\underline{C}^T$  die obere Dreiecksmatrix darstellt. Dieses Gleichungssystem wird in zwei Schritten gelöst, zuerst durch Vorwärtssubstitution das Gleichungssystem

$$\underline{C} \underline{y} = \underline{r} \quad , \tag{23}$$

dann durch Rückwärtssubstitution

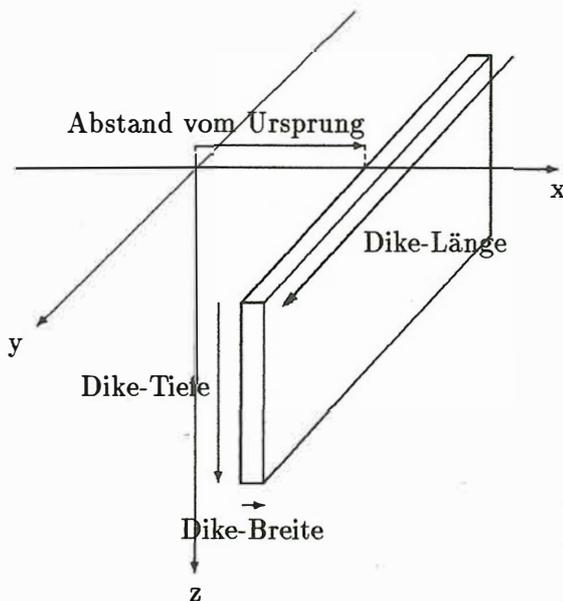
$$\underline{C}^T \underline{q} = \underline{y} \quad . \tag{24}$$

Die Eigenschaften der schwach besetzten Matrix werden, wie in Abschnitt 4.1 beschrieben, ausgenutzt, um überflüssige Nulloperationen zu vermeiden und Speicherplatz zu sparen.

## 5 Ein Dike-Modell

Der Algorithmus wurde anhand verschiedener Modellklassen auf seine numerische Genauigkeit untersucht. Für diese Modellklassen gibt es jeweils analytische Lösungen oder prinzipiell unterschiedliche Modellrechnungen (Randintegralmethoden). Es wurden Lösungen des homogenen Halbraums, zweier Viertelräume, von Dike-Modellen (Telford, Geldart & Sherriff, 1990), des geschichteten Halbraums (Koefoed, 1979), der eingelagerten Kugel (Schulz, 1979) und des in den Halbraum und in Zweischichtfälle eingelagertern Quaders (Hvoždara, 1994) betrachtet. Detaillierte Beschreibungen dieser Vergleiche findet man bei Spitzer (1994). Im folgenden soll an einem Dike-Modell beispielhaft demonstriert werden, bis zu welchem Grad der Genauigkeit die numerischen Modellrechnungen gelangen können. Die prinzipielle Anordnung der Dike-Modelle ist auf **Abb. 2** dargestellt.

<sup>3</sup>Der Einfachheit halber wurde hier die Indizierung  $k$  für den  $k$ -ten Iterationsschritt weggelassen.



**Abb. 2:** Prinzipielle Konfiguration der Dike-Modelle. Im folgenden werden Auslagen betrachtet, die in  $x$ -Richtung senkrecht zum Dike und in  $y$ -Richtung parallel zum Dike durch den Ursprung verlaufen. Als Dike-Tiefe wird die Erstreckung in  $z$ -, als Dike-Länge die in  $y$ - und als Dike-Breite die in  $x$ -Richtung bezeichnet.

Die **Abb. 3** zeigt als Beispiel den Vergleich zwischen der analytischen und der numerischen Lösung für einen Dike von 5 m Breite, der sich in  $y$ - und  $z$ -Richtung unendlich ausdehnt und sich 20 m in  $x$ -Richtung vom Ursprung entfernt befindet. Zwei Schlumberger-Sondierungen werden senkrecht (entlang der  $x$ -Achse ( $y=0$ ), oberes Teilbild) bzw. parallel zum Dike (entlang der  $y$ -Achse ( $x=0$ ), unteres Teilbild) durchgeführt. Der Halbraum ist mit einem spezifischen Widerstand von  $\rho_{HR} = 100 \Omega\text{m}$ , der Dike mit einem von  $\rho_{Dike} = 10 \Omega\text{m}$  belegt. Die Potentialsonden befinden sich bei den Koordinaten  $x = \pm 1 \text{ m}$ ,  $y = 0 \text{ m}$ , und  $z = 0 \text{ m}$ . Die linke Ordinate zeigt den scheinbaren spezifischen Widerstand  $\rho_a$  in  $\Omega\text{m}$ , die Abszisse den halben Abstand der Einspeisungselektroden  $AB/2$  in m. Die vollen Punkte kennzeichnen die numerischen, die offenen Dreiecke die analytischen Lösungen. Das verwendete Gitter besteht aus  $73 \times 73 \times 39$  Linien ( $x$ -,  $y$ -,  $z$ -Richtung).

Die Abweichung zur exakten analytischen Lösung beträgt fast über den gesamten Bereich nur etwa 2% (offene Quadrate, Skalierung an der rechten  $y$ -Achse). Lediglich bei sehr kurzen und bei sehr langen Auslagen machen sich die Diskretisierungsfehler der räumlich endlichen Quelle und des nicht unendlich weit entfernten Randes stärker bemerkbar. Auf **Abb. 4** wurde ebenfalls die Abweichung zwischen numerischen und analytischen Ergebnissen für das gleiche Gitter, jedoch für den homogenen Halbraum dargestellt. Es fällt auf, daß die Abweichung den gleichen Verlauf nimmt, also auch im Bereich des Leitfähigkeitskontrasts keine signifikant größeren Fehler produziert, was für die Stabilität der numerischen Rechnungen auch bei komplizierterer Leitfähigkeitsverteilung spricht.

**Abb. 3** macht die Notwendigkeit dreidimensionaler Modellrechnungen nochmals deutlich. Während im oberen Teilbild laterale Leitfähigkeitskontraste durch die steilen Kurvenverläufe im Bereich des Dikes auf der Hand liegen, könnte man das untere Teilbild ohne weiteres als horizontalen Dreischichtfall interpretieren.

## 6 Abschließende Bemerkungen

Mit diesem Verfahren stellt sich ein leistungsstarker Gleichungslöser in seiner vorkonditionierten Variante vor, der an Gittern mit über 200 000 Knotenpunkten ( $73 \times 73 \times 39$ ) erprobt worden ist.

Mit diesen Gittern wurde gleichsam die hohe Genauigkeit der numerischen Rechnungen gezeigt, die in der Größenordnung von 2% liegen kann. Dabei stellt sich heraus, daß die Gitterkonfiguration

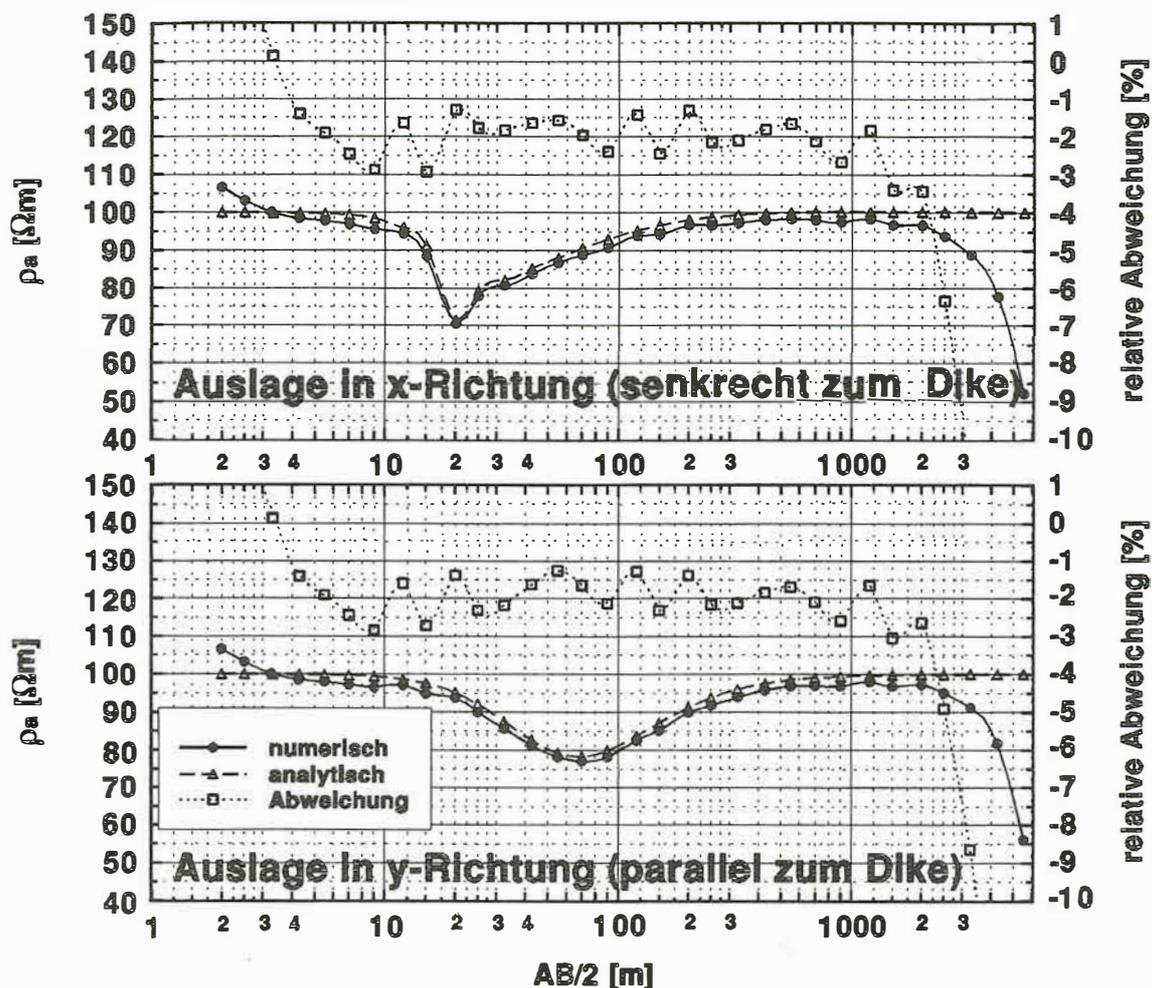
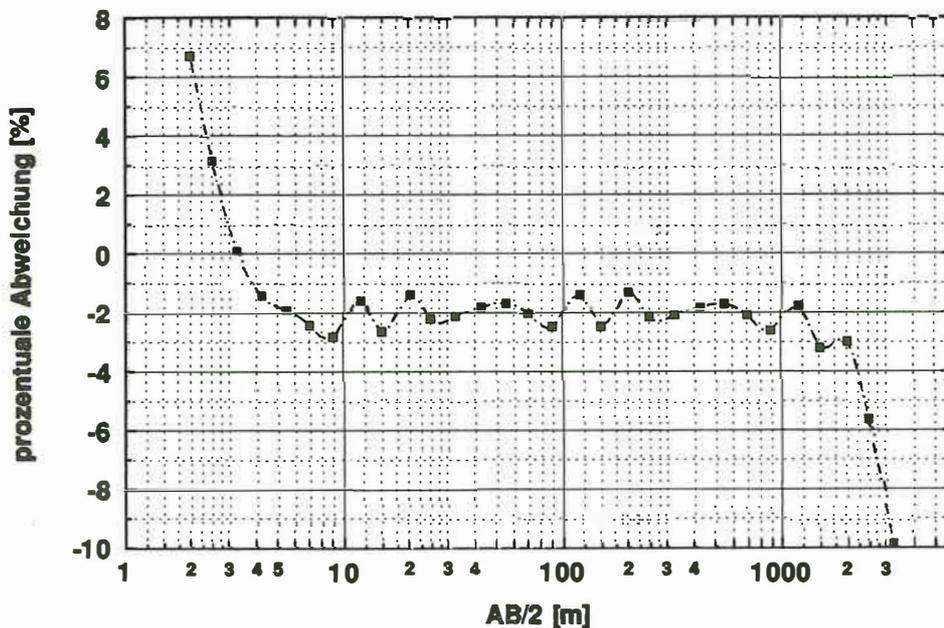


Abb. 3: Analytisch und numerisch berechneter scheinbarer spezifischer Widerstand zweier Schlumberger-Sondierungen senkrecht und parallel zu einem Dike und relative Abweichung (jeweils obere gepunktete Kurve, rechte Skala).

starken Einfluß auf die Präzision der Rechnungen hat. Man sollte darauf achten, daß der Gitterlinienabstand langsam und möglichst gleichmäßig nach außen wächst (Prolongationsfaktor  $< 1.3$ ). Sicherlich könnten die Fehler insgesamt noch weiter verringert werden, wenn man die Ränder nicht durch die einfachen Dirichlet'schen Bedingungen belegen würde.

Nach Mundry (1984) ist die hier verwendete Diskretisierung nach Brewitt-Taylor & Weaver (1976) gerade im Bereich hoher Leitfähigkeitskontraste (d.h. bereits ab einem Verhältnis von 2:1) anderen Diskretisierungen (Dey & Morrison, 1979, Mufti, 1976) überlegen, was durch Vergleiche mit analytischen Lösungen seinerzeit bestätigt wurde. Selbst neuere dreidimensionale Inversionsansätze von Li & Oldenburg (1994) basieren auf der Diskretisierung nach Dey & Morrison. Vergleiche mit der „Current Balance Method“ nach Wurmstich & Morgan (1994) ergaben wiederum Genauigkeitsvorteile im Bereich von Leitfähigkeitssprüngen für die hier benutzte Diskretisierung (Wurmstich & Spitzer, 1994).

Die Laufzeiten auf PC's (386er, aufgerüstete 486er), einer VAX 6000, einer MICROVAX 4000 und auf einer Alpha-Workstation wurden ermittelt, wobei bei kleineren Problemen ( $\approx 50\,000$  Knotenpunkte) der gut ausgestattete 486er PC durchaus noch attraktiv sein kann. Bei allen Angaben über Laufzeiten muß im Vergleich mit anderen Programmen beachtet werden, daß alle Rechnungen



**Abb. 4:** Prozentuale Abweichung zwischen numerischer und analytischer Rechnung beim homogenen Halbraum. Der Kurvenverlauf ist fast identisch mit dem in Abb. 3.

doppeltgenau (REAL\*8) und bis zum Residuum  $|r_k| < 10^{-10}$  ausgeführt wurden. Die Testläufe auf der Alpha-Workstation mußten sich bisher noch auf kleinere Problemstellungen beschränken, da die verfügbare Maschine mit einem relativ geringen Arbeitsspeicher ausgestattet war und Laufzeiten für große Gitter daher in erster Linie interne Datenverwaltungsprozesse (Paging) beinhalteten. Mit entsprechender Bestückung wird hier jedoch ein Werkzeug zur Verfügung gestellt werden, das Vorwärtsrechnungen bei komplexen Leitfähigkeitsstrukturen mit großen Gittern ( $> 200\,000$  Knotenpunkten) und hoher Genauigkeit ( $< 2\%$ ) in moderaten Laufzeiten ( $\ll 1$  h) bewältigt.

## Literatur

- Brewitt-Taylor, C.R., & Weaver, J.T., 1976.** On the finite difference solution of two-dimensional induction problems, *Geophys. J. R. astr. Soc.*, **47**, 375 – 396.
- Dey, A., & Morrison, H.F., 1979.** Resistivity modelling for arbitrarily shaped two-dimensional structures, *Geophysical Prospecting*, **27**, 106 – 136.
- Fletcher, R., 1976.** Conjugate gradient methods for indefinite systems, *Lecture Notes in Mathematics*, **506**, 73 – 89.
- Hestenes, M.R., & Stiefel, E., 1952.** Method of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, **49**, 409 – 436.
- Hvozdara, M., 1994.** The boundary integral calculation of the D.C. geoelectric field due to a point current source on the surface of 2-layered Earth with a 3-D outcropping perturbing body, *Contr. Geophys. Inst. Slov. Acad. Sci.*, **25**.
- Koefoed, O., 1979.** *Geosounding principles 1*, Elsevier, Amsterdam – Oxford – New York.
- Li, Y., & Oldenburg, D.W., 1994.** Inversion of 3-D DC resistivity data using an approximate inverse mapping, *Geophys. J. Int.*, **116**, 527 – 537.
- Mufti, I.R., 1976.** Finite-difference resistivity modeling for arbitrarily shaped two-dimensional structures, *Geophysics*, **41**, 62 – 78.

- Mundry, E., 1981.** Geoelektrische Modellrechnungen für zweidimensionale Strukturen, Bericht des Niedersächsischen Landesamtes für Bodenforschung – Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben, Archiv-Nr. 91170, Hannover.
- Mundry, E., 1984.** Geoelectrical model calculations for two-dimensional resistivity distributions, *Geophysical Prospecting*, **32**, 124 – 131.
- Schulz, R., 1979.** Bericht über das Potential einer Kugel als geoelektrischer Störkörper im homogenen Halbraum, Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung – Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben, Archiv-Nr. 81821, Hannover.
- Schwarz, H.R., 1991.** Methode der finiten Elemente, Teubner, Stuttgart.
- Sonneveld, P., 1989.** CGS: a fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, **10**, 36 – 52.
- Spitzer, K., 1993.** Bericht über dreidimensionale geoelektrische Modellrechnungen nach der Methode der Finiten Differenzen, Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung – Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben, Archiv-Nr. 111551, Hannover.
- Spitzer, K., 1994.** Bericht über dreidimensionale gleichstromgeoelektrische FD-Modellrechnungen mit symmetrisierten Koeffizientenmatrizen mittels der Methode der vorkonditionierten konjugierten Gradienten, Niedersächsisches Landesamt für Bodenforschung – Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben, Archiv-Nr. 112229, Hannover.
- Telford, W.M., Geldart, L.P., & Sheriff, R.E., 1990.** *Applied Geophysics*, 2nd ed., Cambridge University Press, Cambridge.
- Wurmstich, B., & Morgan, F.D., 1994.** Modeling of streaming potential responses caused by oil well pumping, *Geophysics*, **59**, 46 – 56.
- Wurmstich, B., & Spitzer, K., 1994.** Comparison of Two Finite Difference Approaches and Five Solution Algorithms for 3D Resistivity Modeling, SEG 1994 Annual Meeting Report.