

Dietmar Grubert

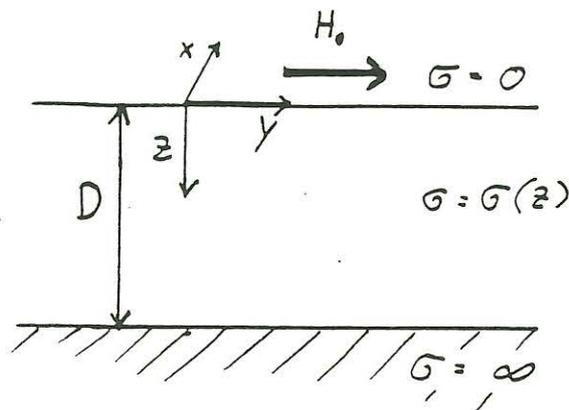
## Ein einfaches Beispiel zur Spektralen Differenzenmethode von V.L. Druskin und L.A. Knizhnerman

### 1. Einleitung

Die Spektrale Differenzenmethode soll für Transientenmessungen verwendet werden. Dazu wird das Modell diskretisiert, die Differentialgleichung wird zur Differenzgleichung. Diese wird aber nicht vollständig gelöst, sondern nur in einem geeigneten Unterraum, der mit dem Lanczosalgorithmus gefunden wird. Die Lösung wird so nach bestimmten Zerfallsmoden entwickelt, und nur für Teilbereiche, d.h. hier für anfängliche Zeiten, hinreichend genau bestimmt.

### 2. Das Modell

Mein Beispiel ist ein eindimensionaler geschichteter Halbraum mit der Leitfähigkeit  $\sigma(z)$  und einem darunterliegenden idealen Leiter.



Eindimensionalität:  $\frac{\partial}{\partial x} \equiv \frac{\partial}{\partial y} \equiv 0$  Es gibt nur Veränderungen in  $z$ -Richtung.

$$\underline{H}(z) = H(z) \hat{y}$$

$$\underline{E}(z) = E(z) \hat{x}$$

$$\sigma = \sigma(z)$$

Im Frequenzbereich gelten die Grundgleichungen:

$$\begin{aligned} \nabla \times \underline{H} &= \sigma \underline{E} & \xrightarrow{1D} & -H'(z) = \sigma(z) E(z) \\ \nabla \times \underline{E} &= -i\omega \mu_0 \underline{H} & \implies & E'(z) = -i\omega \mu_0 H(z) \end{aligned}$$

Daraus erhält man die Diffusionsgleichung:

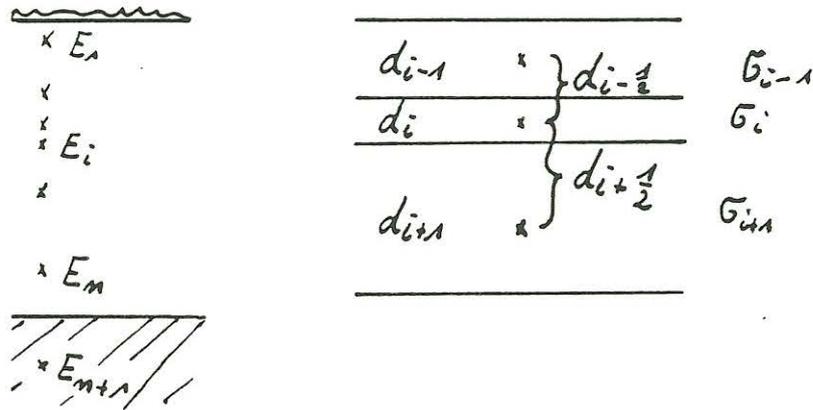
$$\underline{-E''(z) + i\omega \mu_0 \sigma(z) E(z) = 0}$$

Mit den Randbedingungen:

$$\begin{aligned} E'(0) &= -i\omega\mu_0 H_0 && \text{an der Erdoberfläche} \\ E(D) &= 0 && \text{am idealen Leiter} \end{aligned}$$

### 3. Diskretisierung

Dieses Modell wird diskretisiert, das elektrische Feld am Ort  $z_i$  ist die Komponente  $E_i$  von  $\underline{E}$ .



$$d_{i+\frac{1}{2}} := \frac{1}{2} (d_i + d_{i+1})$$

Es ergibt sich der Differenzenquotient:

$$E''(z_i) \simeq \frac{1}{d_i} (E'_{i+\frac{1}{2}} - E'_{i-\frac{1}{2}}) \simeq \frac{1}{d_i} \left( \frac{E_{i+1} - E_i}{d_{i+\frac{1}{2}}} - \frac{E_i - E_{i-1}}{d_{i-\frac{1}{2}}} \right)$$

Für  $i = 1$  und  $i = n$  müssen die obigen Randbedingungen berücksichtigt werden.

$i = 1$ : An der Erdoberfläche ist die Ableitung der elektrischen Feldstärke gegeben durch den Quellterm:

$$E''(z_1) \simeq E''_1 = \frac{1}{d_1} \left( \frac{E_2 - E_1}{d_{1+\frac{1}{2}}} + i\omega\mu_0 H_0 \right)$$

$i = n$ : Um am idealen Leiter für  $E(D)$  den Wert Null festzulegen, kann man das  $E$ -Feld bei einem Spiegelpunkt  $E_{n+1}$  von  $E_n$  auf  $-E_n$  setzen:

$$E''_n = \frac{1}{d_n} \left( \frac{-E_n - E_n}{d_{n+\frac{1}{2}}} - \frac{E_n - E_{n-1}}{d_{n-\frac{1}{2}}} \right) = \frac{1}{d_n} \left( \frac{-2E_n}{d_n} - \frac{E_n - E_{n-1}}{d_{n-\frac{1}{2}}} \right)$$

Man erhält so die  $E_i''$  als lineare Funktionen der  $E_i$ , die nach Umformung dargestellt werden mit der Matrix  $\tilde{\underline{A}}$ . Die Diffusionsgleichung erhält die Form:

$$\tilde{\underline{A}} \underline{E} - i \omega \mu_0 \text{Diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n) \underline{E} = -i \omega \frac{\mu_0 H_0}{d_1} \underline{\delta}_n^1, \quad \underline{\delta}_n^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Um den Lanczosalgorithmus anwenden zu können, muß  $\tilde{\underline{A}}$  noch auf eine symmetrische Form gebracht werden. Mit der Transformation

$$u_i = \sqrt{\sigma_i d_i} E_i$$

ergibt sich folgende Gestalt, bei der die Matrix  $\underline{A}$  symmetrisch ist und die Modellinformation enthält mit Schichtdicken und Leitfähigkeiten.  $\underline{u}(\omega)$  ist der Lösungsvektor für eine Frequenz  $\omega$  und  $\underline{g}(\omega)$  der Quellterm.

$$(\underline{A} + i \omega \underline{I}) \underline{u}(\omega) = \underline{g}(\omega) = \frac{i \omega H_0}{\sqrt{\sigma_1 d_1}} \underline{\delta}_n^1, \quad \underline{\delta}_n^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Für  $n=3$  sieht das bei meinem Modell so aus:

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\mu_0 \sigma_1 d_1 d_3} & \frac{-1}{\mu_0 \sqrt{\sigma_1 \sigma_2 d_1 d_2} d_3} & 0 \\ \frac{-1}{\mu_0 \sqrt{\sigma_2 \sigma_1 d_2 d_1} d_3} & \frac{1}{\mu_0 \sigma_2 d_2} \left( \frac{1}{d_3} + \frac{1}{d_5} \right) & \frac{-1}{\mu_0 \sqrt{\sigma_2 \sigma_3 d_2 d_3} d_5} \\ 0 & \frac{-1}{\mu_0 \sqrt{\sigma_3 \sigma_2 d_3 d_2} d_5} & \frac{1}{\mu_0 \sigma_3 d_3} \left( \frac{1}{d_5} + \frac{2}{d_3} \right) \end{pmatrix} \underline{u} + i \omega \underline{u} = \begin{pmatrix} \frac{i \omega H_0}{\sqrt{\sigma_1 d_1}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

#### 4. Approximation

Solch ein lineares Gleichungssystem läßt sich als Eigenwertproblem lösen:

$$\underline{u}(\omega) = \sum_{k=1}^n \frac{\underline{v}_k^T \underline{g}(\omega)}{\lambda_k + i \omega} \underline{v}_k$$

$\lambda_k$  = Eigenwert  $k$

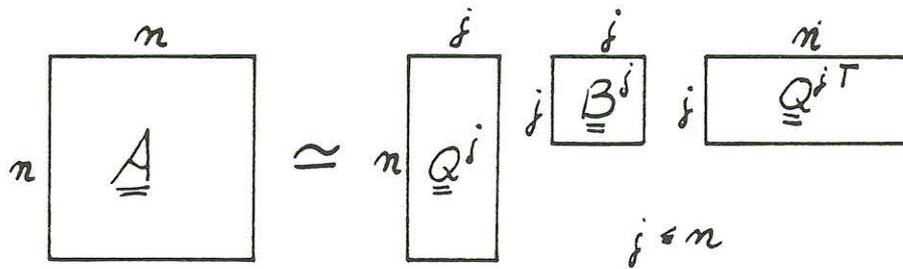
$\underline{v}_k$  = Eigenvektor von  $\underline{A}$  zum Eigenwert  $\lambda_k$

$\underline{u}$  = Lösungsvektor

$\underline{g}$  = Quellvektor

Dies ist bei dreidimensionalen Problemen zu erwartenden Matrizen nicht möglich, weil sie viel zu groß sind. Deswegen wird die Matrix  $\underline{A}$  durch eine kleinere Matrix  $\underline{B}^j$  mit der Dimension  $j$  approximiert, für die das Eigenwertproblem lösbar ist.

$$\underline{A} \simeq \underline{Q} \underline{B} \underline{Q}^T \quad ; \quad \underline{B} = \underline{Q}^T \underline{A} \underline{Q}$$



Dabei soll  $\underline{B}^j$  möglichst viel Information, d.h. der Kern von  $\underline{Q}^{jT}$  nur unwesentliche Bereiche, enthalten.  $\underline{A}$  wird genähert dargestellt durch eine Projektion in einen geeigneten Unterraum, einen Krylov-Raum  $K^j$  der Dimension  $j$  über dem Quellvektor  $\underline{g}$ , der mit der Matrix  $\underline{A}$  gebildet wird:

$$K^j(\underline{g}, \underline{A}) = \text{span}(\underline{g}, \underline{A} \underline{g}, \underline{A}^2 \underline{g}, \dots, \underline{A}^{j-1} \underline{g})$$

Geeignet ist dieser Raum, weil er aufgespannt wird von Vektoren, die sich ergeben durch Abbilden von  $\underline{g}$  mit bis zu  $j - 1$  Potenzen von  $\underline{A}$  (wiederholtes Anwenden von  $\underline{A}$  auf  $\underline{g}$ ), wie sie gerade in der Hochfrequenzlösung von  $(\underline{A} + i \omega \underline{I}) \underline{u} = \underline{g}$  auftreten:

$$\underline{u} = \frac{1}{i \omega} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{-1}{i \omega} \right)^n \underline{A}^n \underline{g}.$$

Eine genäherte Darstellung  $\underline{u}^j$  der Lösung  $\underline{u}$  durch Vektoren dieses Raumes ist somit am ehesten eine Näherung für hohe Frequenzen, und entsprechend für anfängliche Zeiten bei Transienten im Zeitbereich:

Diffusionsgleichung:

$$\underline{A} \underline{u} + \dot{\underline{u}} = 0, \quad t > 0 \quad \underline{u}(t=0) = \underline{u}_0$$

D. h.:

$$\underline{u}(\Delta t) \simeq \underline{u}_0 + \dot{\underline{u}}(0) \Delta t = \underline{u}_0 - \Delta t \underline{A} \underline{u}_0$$

Und allgemein:

$$\underline{u}(t) = e^{-\underline{A}t} \underline{u}_0 = \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-t)^n}{n!} \underline{A}^n \right) \underline{u}_0$$

Hier treten die Potenzen von  $\underline{A}$  in der Taylorentwicklung der Lösung auf und werden auf den Anfangsvektor angewendet.

Eine Basis für diesen Krylov-Unterraum erhält man mit dem Lanczosalgorithmus: Ausgehend vom normierten Anfangsvektor, hier  $\underline{q}_1 = \underline{g}/\|\underline{g}\|$ , wird der jeweils letzte Basisvektor mit  $\underline{A}$  abgebildet, der so erhaltene Vektor  $\underline{r}_j = \underline{A} \underline{q}_j$  gegen alle bisherigen Basisvektoren nach Gram-Schmidt orthogonalisiert und der Rest normiert:

$$\begin{aligned} K^j(\underline{g}, \underline{A}) &= \text{span}(\underline{g}, \underline{A} \underline{g}, \underline{A}^2 \underline{g}, \dots, \underline{A}^{j-1} \underline{g}) \\ &= \text{span}(\underline{q}_1, \underline{q}_2, \underline{q}_3, \dots, \underline{q}_j) \end{aligned}$$

Die Orthogonalisierung braucht nur für die beiden letzten Basisvektoren  $\underline{q}_j$  und  $\underline{q}_{j-1}$  zu geschehen, gegen die vorherigen ist  $\underline{r}_j$  bereits orthogonal.

Dazu:

- 1) Jeder Basisvektor ist orthogonal zu dem von den bisherigen Basisvektoren aufgespannten Raum:

$$\underline{q}_i \perp K^{i-1}$$

- 2) Ein neuer Vektor  $\underline{r}_j = \underline{A} \underline{q}_j$  spannt mit  $K^j$  den neuen Raum  $K^{j+1}$  auf:

$$\text{span}(K^j, \underline{r}_j) = \text{span}(K^j, \underline{q}_{j+1}) = \text{span}(K^{j+1})$$

Also ist:

$$\underline{q}_i \perp \underline{A} \underline{q}_j \Leftrightarrow \underline{q}_i^T \underline{A} \underline{q}_j = 0 \quad \text{für } i > j + 1$$

Mit der Symmetrie von  $\underline{A}$  ( $\underline{A} = \underline{A}^T$ ) folgt:

$$\underline{q}_i^T \underline{A} \underline{q}_j = \underline{q}_i^T \underline{A}^T \underline{q}_j = \underline{q}_j^T \underline{A} \underline{q}_i = 0 \quad \text{für } i > j + 1$$

Und zusammengefaßt:

$$\underline{q}_i^T \underline{A} \underline{q}_j = 0 \quad \text{für } \begin{cases} i < j - 1 \\ i > j + 1 \end{cases}$$

Der neue Vektor ist also bereits orthogonal zu allen mindestens zwei Schritte zurückliegenden Basisvektoren. Zur Orthogonalisierung von  $\underline{r}_j$  genügt also:

$$\underline{r}'_j = \underline{r}_j - \underbrace{(\underline{r}_j^T \underline{q}_j)}_{\alpha_j} \underline{q}_j - \underbrace{(\underline{r}_j^T \underline{q}_{j-1})}_{\beta_{j-1}} \underline{q}_{j-1}$$

mit:

$$\alpha_j := \underline{q}_j^T \underline{A} \underline{q}_j, \quad \beta_{j-1} := \underline{q}_{j-1}^T \underline{A} \underline{q}_j$$

$\underline{r}'_j$  ist der Teil von  $\underline{r}_j$ , der senkrecht zum bisherigen Raum ist, und ergibt nach Normierung den neuen Basisvektor  $\underline{q}_{j+1}$ :

$$\underline{q}_{j+1} = \frac{\underline{r}'_j}{\|\underline{r}'_j\|} = \frac{1}{\|\underline{r}'_j\|} (\underline{A} \underline{q}_j - \alpha_j \underline{q}_j - \beta_{j-1} \underline{q}_{j-1})$$

Nach Multiplikation mit  $\|\underline{r}'_j\|$  und Umstellung erhält man:

$$\underline{A} \underline{q}_j = \beta_{j-1} \underline{q}_{j-1} + \alpha_j \underline{q}_j + \|\underline{r}'_j\| \underline{q}_{j+1}$$

Multiplikation mit  $\underline{q}_{j+1}^T$  ergibt:

$$\begin{aligned} \underline{q}_{j+1}^T \underline{A} \underline{q}_j &= \|\underline{r}'_j\| \underline{q}_{j+1}^T \underline{q}_{j+1} \\ \xrightarrow{\underline{A}^T = \underline{A}} \underline{q}_j^T \underbrace{\underline{A} \underline{q}_{j+1}}_{\underline{r}_{j+1}} &\stackrel{def}{=} \beta_i = \|\underline{r}'_j\| \end{aligned}$$

Der Betrag des Vektors  $\underline{r}'_j$  ist also das  $\beta_i$  für den nächsten Schritt. So ergibt sich eine für alle  $j$  Basisvektoren  $\underline{q}_j$  gültige Beziehung,

$$\underline{A} \underline{q}_i = \beta_{i-1} \underline{q}_{i-1} + \alpha_i \underline{q}_i + \beta_i \underline{q}_{i+1}$$

die in Matrixschreibweise, unter Berücksichtigung, daß es  $\underline{q}_0$  und  $\underline{q}_{j+1}$  nicht gibt, aussieht wie folgt:

$$\underline{A} \underline{Q}^j = \underline{Q}^j \underline{B} \quad , \quad \underline{Q}^j = (\underline{q}_1, \dots, \underline{q}_j)$$

Somit ist  $\underline{B}$  eine symmetrische Tridiagonalmatrix mit den Elementen  $\alpha_i$ ,  $i = 1, \dots, j$  in der Hauptdiagonalen und  $\beta_i$ ,  $i = 1, \dots, j-1$  in den Nebendiagonalen.

Beispiel für  $j = 5 \leq n$  nach Multiplikation mit  $\underline{Q}^{jT}$ :

$$\left( \begin{array}{c} \underline{A} \end{array} \right) \approx \left( \begin{array}{c} \underline{Q}^j \end{array} \right) \left( \begin{array}{ccccc} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & 0 & 0 \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & 0 \\ 0 & 0 & \beta_3 & \alpha_4 & \beta_4 \\ 0 & 0 & 0 & \beta_4 & \alpha_5 \end{array} \right) \left( \begin{array}{c} \underline{Q}^{jT} \end{array} \right)$$

Ich führe nun die Transformation in den Unterraum durch:

$$\underbrace{(\underline{Q}^j \underline{B}^j \underline{Q}^{jT} + i \omega \underline{Q}^j \underline{I}^j \underline{Q}^{jT})}_{\underline{A}} \underline{u} = \underline{g}$$

$$(\underline{B}^j + i \omega \underline{I}^j) \underbrace{\underline{Q}^{jT} \underline{u}}_{\underline{x}^j} = \underbrace{\underline{Q}^{jT} \underline{g}}_{\underline{g}^j}$$

$\underline{x}^j$  = Lösung im  $j$ -dimensionalen Unterraum

$\underline{g}^j$  = Quellvektor in den Unterraum abgebildet

Das so entstandene kleinere Gleichungssystem wird nun im Unterraum nach dem gewöhnlichen Verfahren gelöst.

Transformation  $\underline{u}^j(\omega) = \underline{Q}^j \underline{x}^j(\omega)$

Gleichungssystem  $(\underline{B}^j + i \omega \underline{I}^j) \underline{x}^j = \underline{Q}^{jT} \underline{g}$

Lösung im Unterraum  $\underline{x}^j(\omega) = \sum_{k=1}^j \frac{\underline{w}_k^T (\underline{Q}^{jT} \underline{g})}{\mu_k + i \omega} \underline{w}_k$

zurücktransformierte Lösung  $\underline{u}^j(\omega) = \sum_{k=1}^j \frac{\underline{y}_k^T \underline{g}}{\mu_k + i \omega} \underline{y}_k \quad , \quad \underline{y}_k = \underline{Q}^j \underline{w}_k$

Dies sieht dann im Zeitbereich für eine transiente Anregung wie folgt aus:

$$\underline{u}^j(t) = \sum_{k=1}^j \left( \underline{y}_k^T \underline{u}_0 \right) \underline{y}_k e^{-\mu_k t}$$

Es ist eine Entwicklung von  $\underline{u}_0$  nach den Ritzvektoren  $\underline{y}_k$ , Zerfallsmoden, mit den jeweiligen Zerfallskonstanten  $\mu_k$ , den Ritzwerten.

### 5. Beispiel

Dies habe ich für das angegebene Modell bei konstantem  $\sigma$  und  $n=6$  in dimensionslosen Koordinaten durchgeführt. Dazu im Vergleich die analytische Lösung als Referenz:

$$\epsilon(\tau, \zeta) = -\frac{1}{\sqrt{\pi \tau}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (-1)^n \exp\left(-\frac{(2n + \zeta)^2}{4 \tau}\right)$$

mit

$$\tau := \frac{t}{\mu_0 \sigma D^2} \quad ; \quad \zeta := \frac{z}{D} \quad ; \quad \epsilon := E \frac{\sigma D}{H_0}$$

eingetragen. Die exakte diskretisierte Lösung, d.h. die des vollständigen Eigenwertproblems, ist mit der Lösung  $\underline{u}^j(t)$  für  $j=n=6$  identisch. Man sieht wie sich die genäherten Lösungen für zunehmende  $j$  immer besser und für immer spätere Zeiten der exakten diskretisierten Lösung anpassen. Daß die analytische Lösung am Anfang größer ist als alle anderen, liegt in der Diskretisierung begründet.

### 6. Zusammenfassung

Es ist in diesem Beispiel sichtbar, wie die frühen Zeiten eines transienten Signals durch nur wenige, mit Hilfe des Lanczosalgorithmus aus dem Anfangsvektor gewonnener Zerfallsmoden angenähert werden können.

### 7. Literatur

Druskin, V.L. und Knizhnerman, L.A. :

Die spektrale Differential-Differenzenmethode für die Lösung dreidimensionaler nichtstationärer Probleme der elektromagnetischen Prospektion. Izv, Akad. Nauk SSSR, Fiz. Zemli, No. 8, 63-74, 1988

Parlett, B.N. :

The symmetric eigenvalue problem. Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, 1980

Referenzlösung 01. Schicht

Ritzwert	Dicke	Leitf.
.14E+03	.10E+01	.10E+01
.12E+03	.10E+01	.10E+01
.91E+02	.10E+01	.10E+01
.53E+02	.10E+01	.10E+01
.21E+02	.10E+01	.10E+01
.25E+01	.10E+01	.10E+01

