3D-FD-Widerstandsmodellierung: Analyse von Diskretisierungsfehlern bei gitterunabhängiger Elektrodenpositionierung

Birgit Futterer¹, Ralph-Uwe Börner, Klaus Spitzer (TU Freiberg)

Zusammenfassung: Der Einsatz der Sekundärfeldlösung bei der Widerstandsmodellierung nach der Methode der Finiten Differenzen ermöglicht die Beseitigung der Quellensingularitäten. Ein zusätzlicher Vorteil dieser Methode ist die gitterunabhängige Positionierung der Quellen. Im Rahmen einer Genauigkeitsstudie wird festgestellt, dass dies mit hohen Genauigkeiten nur für kontrastferne Quellpositionen gewährleistet werden kann. Eine sinnvolle Maßnahme zur Verringerung der bei kontrastnahen Quellpositionen auftretenden Diskretisierungsfehler ist die Verwendung eines in Gebieten starker Lösungsänderung lokal verfeinerten Gitters. Mit einer Automatisierung der Gitterkonstruktion können die Arbeitsschritte effizient gestaltet werden. Die Entwicklung eines adaptiven Gitteralgorithmus wird am Beispiel des Modells einer vertikalen Platte vollzogen und die Funktionalität an einem komplizierten dreidimensionalen Modell geprüft.

1 Einleitung

Ein Nachteil bei der Modellierung gleichstromgeoelektrischer Felder mit Finiten Differenzen ist die Bindung von Strom- und Potentialelektroden an Gitterpunkte. Da die Größe und damit die räumliche Auflösung von Gittern begrenzt ist, können Abweichungen zwischen synthetischen und realen Elektrodenpositionen auftreten, die zu Fehlern bei der Simulation der wahren Gegebenheiten führen. Spitzer et al. (1999) greifen auf die Technik der Singularitätenbeseitigung (engl. singularity removal) zurück, um die Elektroden gitterunabhängig zu positionieren. Das Prinzip dieser Methode wird im Folgenden kurz dargelegt.

Die Grundlage der Vorwärtsmodellierung der geoelektrischen Potentialverteilung $V(\vec{r})$ für dreidimensionale Leitfähigkeitsstrukturen $\sigma(\vec{r})$ ist die Kontinuitätsgleichung

$$\nabla \cdot [\sigma(\vec{r})\nabla V(\vec{r})] = -I\delta(\vec{r} - \vec{r}_q). \tag{1}$$

Der auf der rechten Seite der Gleichung (1) auftretende Quellterm mit $\vec{r_q}$ als Einspeisepunkt für den Strom I wird im Bereich einer punktförmigen Quelle unendlich groß. Diese Singularität erzeugt in ihrer unmittelbaren Umgebung große Fehler, die durch eine entsprechende Verfeinerung des Modellgitters verringert werden können. Bei variierenden Quellpositionen wird diese Möglichkeit jedoch schnell unhandlich und aufwendig. Eine Ausweg bietet die Singularitätenbeseitigung nach Lowry et al. (1989). Dazu wird das Potential V in einen primären (Index p) und sekundären Anteil (Index s) aufgespalten:

$$V(\vec{r}) = V_p(\vec{r}) + V_s(\vec{r}).$$
 (2)

¹jetzt: TU Cottbus

Das Primärpotential V_p kann für eine einfache bekannte Leitfähigkeitsverteilung, z.B. für die des homogenen Halbraums der Leitfähigkeit $\bar{\sigma}$, analytisch berechnet werden. Man erhält eine neue Differentialgleichung:

$$\nabla \cdot [\sigma \nabla V_s(\vec{r})] = -\nabla \cdot [(\sigma - \bar{\sigma}) \nabla V_p(\vec{r})].$$
(3)

Auf der rechten Seite dieser Gleichung stehen jetzt Sekundärquellen, die durch die Abweichung $(\sigma - \bar{\sigma})$ und die Stärke des Gradienten des Primärpotentials V_p bestimmt werden.

Neben der Beseitigung der Singularität der rechten Seite ergibt sich ein weiterer Vorteil. Da V_p analytisch berechnet wird, kann der Quellpunkt auf einen beliebigen Ort positioniert werden, d.h. er ist nicht an Gitterpunkte gebunden.

Gelöst wird also die Gleichung (3) nach dem wesentlich glatteren Sekundärpotential V_s . Anschließend werden Sekundär- und Primärpotential wieder addiert, um das Gesamtpotential V zu erhalten.

Bevor die Lösung ermittelt werden kann, wird die Gleichung (3) nach der Methode der zentralen Finiten Differenzen 2. Ordnung diskretisiert. Es entsteht ein Gleichungssystem, dass mit dem Verfahren der vorkonditionierten konjugierten Gradienten gelöst wird (Spitzer & Wurmstich, 2000).

Differenzenverfahren ermöglichen bei Netzverfeinerung eine beliebig genaue Berechnung der gesuchten Näherung (Schwetlick & Kretzschmar, 1991). Die Konvergenz von Näherungslösungen ist gesichert, wenn ein eingesetztes Diskretisierungsverfahren konsistent und stabil ist.

Konsistent ist ein Diskretisierungsverfahren, wenn der lokale Diskretisierungsfehler ε^l mit der Konsistenzordnung (auch: Konvergenzordnung) p konvergiert. Der lokale Diskretisierungsfehler entspricht dem Defekt, den man erhält, wenn man die exakte Lösung in die diskretisierte Gleichung einsetzt. Approximiert ein numerisch stabiles Diskretisierungsverfahren eine Näherungslösung mit der Konsistenzordnung p, konvergiert auch der globale Diskretisierungsfehler ε^g . Der globale Diskretisierungsfehler kann über den Vergleich mit einer analytischen Lösung berechnet werden.

Die Analyse von Diskretisierungsfehlern bei gitterunabhängiger Elektrodenpositionierung ist Gegenstand dieser Arbeit. Grundlage der 3D-Modellierung nach der Methode der Finiten Differenzen sind die im Programm 3ddcxh verwirklichten Ergebnisse von Spitzer et al. (1999) und Spitzer and Wurmstich (2000).

Untersucht wird die gitterunabhängige Positionierung der Quellen. Der Einfachheit halber bleiben die Potentialsonden auf Knotenpunkten, da bei deren gitterunabhängiger Positionierung erneute, vorerst nicht quantifizierbare Fehlerquellen entstehen. Ein besonders zu betrachtender Fall tritt auf, wenn die Quelle direkt auf einem Leitfähigkeitskontrast liegt. Sinkt der Abstand der Quelle zu diesem Kontrast, dann gehen V_p und damit ∇V_p gegen unendlich, d.h. es entsteht eine Singularität am Ort des Leitfähigkeitskontrasts. Damit wird auch die sekundäre Stromdichte $(\sigma - \bar{\sigma})\nabla V_p$ in Gleichung (3) unendlich.

Eine Maßnahme zur Erhöhung der Genauigkeit ist die Verwendung lokal verfeinerter Gitter (Schwetlick & Kretzschmar, 1991). Im Bereich starker Potentialgradienten wird ein solches Gitter entsprechend verfeinert. Ziel ist es, ein adaptives Gitter in den Lösungsprozess zu integrieren, um notwendige Gitterpunktverdichtungen quantifizieren zu können. Die Funktionalität einer auf diese Weise verwirklichten automatischen Gittergenerierung wird an einem beliebigen dreidimensionalen Modell getestet.

2 Genauigkeitsstudie für die gitterunabhängige Elektrodenpositionierung



Abbildung 1: Genauigkeit gitterunabhängiger Elektrodenpositionierung für kontrastferne Quellpositionen beim Dike-Modell. Die Quellen befinden sich bei x = -5 m (a), x = -3 m (b) und x = 0 m (c). Aufgetragen sind jeweils die analytisch und numerisch berechneten scheinbaren spezifischen Widerstände sowie deren relative Abweichung voneinander (rechte Skala).

Die Genauigkeit der berechneten Potentiale wird für verschiedene Quellpositionen auf und zwischen Gitterpunkten sowie in der Umgebung von Leitfähigkeitskontrasten für das Modell einer vertikalen Platte (Dike-Modell) untersucht. Die fünf Meter breite Platte mit dem spezifischen Widerstand von $\rho_{dike} = 10 \,\Omega$ m erstreckt sich im homogenen Halbraum mit $\rho_{backgr.} = 100 \,\Omega \cdot m$ (Primärmodell).

Für die Rechnung wird ein Gitter mit 97 x 97 x 49 Gitterpunkten verwendet. Der innere Teil des Gitters (von -170 bis +170 m in x- und y-Richtung und von 0 bis 170 m

in z-Richtung) ist äquidistant mit einem Gitterpunktabstand von 5 m. Damit die unvermeidlichen Fehler durch die Berandung des Modells im inneren Teil vernachlässigt werden können, sind um diesen inneren Teil Zellschichten angebracht, deren Mächtigkeit mit einem Prolongationsfaktor von ca. 1.3 nach außen hin zunehmen. Dieser äußere Teil beginnt bei ± 170 m in x-, y-Richtung und 170 m in z-Richtung. Die Modellränder liegen bei ± 5500 m in x- und y-Richtung und bei 5500 m in z-Richtung.

Als geoelektrische Elektrodenanordnung kommt eine Pol-Pol-Sondierung zum Einsatz. Die Spannungselektrode P_1 wandert entlang der x-Achse auf den Gitterpunkten mit einer Schrittweite von 5 m. Die Quelle C_1 wird sowohl auf Gitterpunkten als auch dazwischen positioniert. Ein Vergleich zwischen analytischer und numerischer Lösung findet für die Berechnung des scheinbaren spezifischen Widerstandes ρ_a^{mod} statt. Der globale Diskretisierungsfehler ε^g berechnet sich nach

$$\varepsilon^g = \frac{\rho_{mod} - \rho_{ana}}{\rho_{ana}} \cdot 100\%. \tag{4}$$

Die Indizes *mod* und *ana* kennzeichnen jeweils den modellierten und analytisch berechneten Widerstandswert.

In Abbildung 1 ist der scheinbare spezifische Widerstand ρ_a aufgetragen als Funktion der Position der Potentialsonde in x-Richtung für kontrastferne Quelllokationen C_1 bei x = -5 m (Abb. 1 a), x = -3 m (Abb. 1 b) und x = 0 m (Abb. 1 c). Die erste und letzte Lokation liegt damit auf einem Gitterpunkt, mit x = -3 m wird die Quelle zwischen zwei Gitterpunkten gesetzt. An der rechten Ordinate ist der globale Diskretisierungsfehler ε^g aufgetragen.

Der Fehler ist mit einer maximalen Abweichung von betragsmäßig ca. 0.2 % von der analytischen Lösung sehr gering. Das Fehlermaximum ist in der Umgebung der Leitfähigkeitskontraste zu finden, weil dort der Gradient des Sekundärpotentials am größten ist.

Das Verhalten des Diskretisierungsfehlers ändert sich nicht, wenn die Quelle zwischen die Knoten des Gitters gesetzt wird.

Die Ergebnisse der Pol-Pol-Sondierung mit kontrastnahen Einspeisepunkten C_1 bei x = 17 m (Abb. 2 a), x = 20 m (Abb. 2 b) und x = 22 m (Abb. 2 c) auf der x-Achse sind in der Abbildung 2 dargestellt. Insgesamt ist eine starke Zunahme der Diskretisierungsfehler zu verzeichnen. Das Maximum wird erreicht, wenn Quelle und Leitfähigkeitskontrast koinzidieren. Wie eingangs bereits erwähnt wurde, ist dies auf die dabei neu entstehenden Singularitäten am Ort des Leitfähigkeitskontrasts zurückzuführen.

Die Ergebnisse sind symmetrisch. Das heißt, dass sich bei Einspeisung auf der x-Achse rechts des Dike (x = 28 m) und auf dem rechten Leitfähigkeitskontakt (x = 25 m) analoge Resultate ergeben. Dies spricht dafür, dass der Einfluss der Ränder hinreichend eliminiert ist.

Es ist möglich, der Ungenauigkeit des Lösungsalgorithmus durch feinere Diskretisierung zu begegnen. Ein in Gebieten hoher Leitfähigkeitsgradienten und damit in Gebieten starker Lösungsänderung lokal verfeinertes Gitter ist dabei eine sinnvolle Maßnahme zur Erhöhung der Genauigkeit. Es stellt sich die Frage, wie eine Verringerung des Diskretisierungsfehlers bei gitterunabhängiger Elektrodenpositionierung mit Hilfe höher auflösender Netze quantifiziert werden kann.



Abbildung 2: Genauigkeit gitterunabhängiger Elektrodenpositionierung für kontrastnahe Quellpositionen beim Dike-Modell. Die Quellen befinden sich bei x = 17 m (a), x = 20 m (b) und x = 22 m (c). Aufgetragen sind jeweils die analytisch und numerisch berechneten scheinbaren spezifischen Widerstände sowie deren relative Abweichung voneinander (rechte Skala).

3 Verringerung von Diskretisierungsfehlern mit Hilfe eines adaptiven Gitters

Ausgangspunkt für die Auswahl eines Netzes ist die Rechnung auf einem äquidistanten Grobnetz. Damit erhält man zunächst Informationen über das allgemeine Verhalten der Lösung. Anschließend werden dann die Rechnungen mit einem in entsprechenden Gebieten lokal verfeinerten Netz wiederholt. Eine Automatisierung dieser Arbeitsschritte wird durch die Verwendung eines adaptiven Gitters erreicht.

Kriterium für die Netzverfeinerung

Als Kriterium für die Netzverfeinerung, d.h. für das lokale Einfügen von Gitterpunkten in Gebieten rascher Lösungsänderung, wird die Differenz des Sekundärpotentials ΔV_s zwischen benachbarten Knoten x_i und x_{i+1} bzw. x_{i-1} ausgewertet:

$$\Delta V_s(x_i) = |V_s(x_i) - V_s(x_{i\pm 1})| \ge S.$$
(5)

Liegen die Differenzen über einem bestimmten Schwellenwert S, kann die Lösungsänderung als stark angenommen werden. In diesen Bereichen wird die Netzverfeinerung durch eine Halbierung des Gitterpunktabstandes realisiert. Der Schwellenwert S hängt vom Verhalten der Lösung ab, die im Wesentlichen von den Leitfähigkeitsstrukturen im Untergrund und der Elektrodenanordnung bestimmt wird. Er ist hier empirisch festgelegt worden.

Kriterium für die Qualität der Verfeinerung

Eine Einschätzung der Gitterqualität wird durch den Vergleich der Lösungen V_s auf den jeweiligen Gittern verschieden hoher Auflösung (2h) und (h) erreicht. Mit Kenntnis der Konsistenzordnung p lässt sich näherungsweise aus der Differenz der beiden numerischen Lösungen $V_s(2h)$ und $V_s(h)$ auf den lokalen Diskretisierungsfehler ε^l schließen (Steinrück, 2001). Für das hier eingesetzte Diskretisierunsverfahren nach der Methode der zentralen Finiten Differenzen 2. Ordnung gilt im Allgemeinen, dass es stabil ist und damit der eigentlich interessierende globale Diskretisierungsfehler ε^g ebenfalls konvergiert.

Der lokale Diskretisierungsfehler lässt sich damit durch

$$\varepsilon_h^l \approx \frac{V_s(2h) - V_s(h)}{1 - 2^p} \tag{6}$$

abschätzen.

Das diskrete Modell ist dabei bezüglich der verwendeten zentralen Finiten Differenzen 2. Ordnung mit der Ordnung p = 2 konsistent. Da aber die gemischten Randbedingungen mit einer einfachen Vorwärts- bzw. Rückwärtsdifferenz approximiert werden und diese mit der Ordnung p = 1 konsistent ist, gilt für die Formel (6) die Konsistenzordnung p = 1 (Schwetlick & Kretzschmar, 1991).

Die Formel für den Fehlerschätzer liest sich dementsprechend

$$\varepsilon_h^l = V_s(h) - V_s(2h) \tag{7}$$

und wird für gemeinsame Gitterpunkte zweier unterschiedlich auflösender Gitter berechnet. Er wird interpretiert als lokaler Diskretisierungsfehler ε^l eines feineren Gitters (*h*) gegenüber einem gröberen Gitter (2*h*).

Für das Abbruchkriterium wird der maximale lokale Diskretisierungsfehler ε_{max}^{l} auf den größten Wert des Sekundärpotentials $V_{s,max}$ normiert:

$$\dot{\varepsilon}^l = \frac{\varepsilon_{max}^l}{V_{s,max}} < M. \tag{8}$$

Auch hier gilt es, ein Fehlerminimum M empirisch festzulegen, welches für eine hinreichend gute Näherungslösung erreicht werden soll.

Die Überlegungen zur Integration eines adaptiven Gitters in den Lösungsprozess zur Ermittlung geoelektrischer Potentialverteilungen wurden am Beispiel des Dike-Modells untersucht. Für verschiedene Widerstandsbelegungen des Dike wurde das Lösungsverhalten, die Gitteranpassung und die Genauigkeit sowohl für den lokalen als auch globalen Diskretisierungsfehler beobachtet. Die Leitfähigkeit des Primärmodells (homogener Halbraum) blieb unverändert. Die Ergebnisse werden an dieser Stelle nicht vorgestellt, interressant sind lediglich die Auswirkungen auf die empirisch zu bestimmenden Werte für den Schwellenwert S und die geforderte Genauigkeit M.

Die beobachtete Größenordnung des Sekundärpotentials liegt in Bereichen weniger Volt. Das lässt den Schluss zu, das der nach Gleichung (5) ein zu verfeinerndes Gebiet kennzeichnende Schwellenwert S für die Differenz des Sekundärpotentials zweier benachbarter Knoten prinzipiell im Bereich unter einem Volt gewählt werden kann.

Ein zu hoch bestimmter Schwellenwert S grenzt ein besser aufzulösendes Gebiet auf Regionen sehr starker Änderungen scharf ein. Zur Wahrung der Effizienz einer Rechnung soll ein Gitter aber auch nicht in übermäßig großen Regionen höher aufgelöst werden, was die Folge eines zu klein gewählten Schwellenwertes S wäre.

Die Untersuchungen am Dike-Modell haben den Schwellenwert von S = 0.1 praktikabel erscheinen lassen. Dieser Wert hat sich als ein guter Kompromiss für eine Reihe von realistischen Modellklassen bewährt. Sicherlich wird es problematisch sein für Modelle mit extremen Leitfähigkeitskontrasten.

Bei der Festlegung der geforderten Genauigkeit M wurde beobachtet, dass lokaler und globaler Diskretisierungsfehler einander nicht folgen, wenn bereits einige Verfeinerungsrechnungen durchgeführt waren. Diese Instabilitäten sind nicht quantifizierbar. Um zu gewährleisten, dass die Anpassung des Gitters vor dem Erreichen der Instabilitäten abbricht, wird die geforderte Genauigkeit mit M = 0.100 festgelegt.



Abbildung 3: Dreidimensionales Modell mit mehreren Widerstandsblöcken (hellgrau: 500 Ω m, schwarz: 20 $\Omega \cdot m$), Hintergrund: $\rho_{background} = 100 \Omega \cdot m$.

4 Funktionalität eines adaptiven Gitters

Dieser Abschnitt zeigt an einem Beispiel, dass die empirisch gewonnenen Werte für M und S auch für beliebige Modelle eine sinnvolle Gitteradaption bewirken. Berechnet wird die Sekundärfeldlösung für ein kompliziertes Widerstandsmodell mit einer Vielzahl von Sekundärquellen (vgl. Abb. 3). Es wird ein Vergleich der Sekundärpotentiale für ein im gesamten Modellgebiet fein diskretisiertes Gitter und einem lokal verfeinertem Gitter angegeben.

Um die Qualität der Lösungen vergleichen zu können, wurde das Sekundärpotential zunächst auf einem großen Gitter mit einer im gesamten Modellgebiet hohen Auflösung berechnet. Das Netz besteht aus 150 x 150 x 150 Knoten. Der Knotenabstand in x-



Abbildung 4: Darstellung der Verteilung des Sekundärpotentials für das Modell in Abb. 3 in verschiedenen Tiefen bei Einspeisung über eine Stromquelle im Punkt $C_1(14, 14, 0)$; links: Lösung für ein Gitter mit hoher Auflösung, rechts: Lösung für ein lokal verfeinertes Gitter - dritter Verfeinerungsschritt. Beide Ergebnisse stimmen gut überein.

und y-Richtung beträgt 0.25 m, in z-Richtung 0.0625 m. Die Laufzeit zur Berechnung der Lösung liegt hierfür bei 22 Minuten auf einem Prozessor mit einer Taktfrequenz von 800 MHz.

Als Startpunkt für die adaptive Gitterverfeinerung kommt ein relativ kleines Ausgangsgitter zum Einsatz. Es erstreckt sich in x- und y-Richtung von -6 bis +36 m mit einem Gitterpunktabstand von 2 m. In z-Richtung reicht es bis in eine Tiefe von 12 m. Der Knotenabstand beträgt hier 0.5 m. Das Netz besteht somit aus 22 x 22 x 25 Knoten. Untersucht wird die Lösung für eine Einspeisung mit einer Pol-Quelle, die auf dem Gitterpunkt $C_1(14,14,0)$ im Zentrum des Gitters sitzt. Sie hat mit 0.5 m eine geringe Entfernung zum oberflächennahen Quader mit dem spezifischen elektrischen Wider-

Der adaptive Algorithmus benötigt drei Verfeinerungsrechnungen, um mit einem normierten Fehlermaximum von $\dot{\varepsilon}_{max}^l = 0.050$ die geforderte Genauigkeit von M = 0.100zu unterschreiten. Dabei wird in x- und y-Richtung das Gitter im Bereich aller vorkommenden Objekte verfeinert. Die Verfeinerungen in z-Richtung beschränken sich auf

stand von $500 \,\Omega \cdot m$.

einen Bereich bis maximal 6 m. Die Laufzeit zur Ermittlung der Lösung liegt mit ca. zwei Minuten erheblich unter der benötigten Laufzeit für das große Gitter.

Der Vergleich der Ergebnisse beider Modellrechnungen sind in der Abbildung 4 für verschiedene Tiefen dargestellt. Zusätzlich wurden die Kontaktflächen der Störkörper in die Darstellung aufgenommen.

Die beiden Lösungen auf dem extrem großen und auf dem lokal verfeinerten Gitter unterscheiden sich mit maximal 0.5% nur geringfügig. Für eine gute Näherungslösung reicht es daher aus, ein Gitter lediglich in Bereichen starker Lösungsänderung zu verfeinern. Damit gestaltet sich die Modellierung durch geringeren Speicherplatzbedarf und kürzere Laufzeiten wesentlich effektiver.

5 Zusammenfassung

Die Modellierung geoelektrischer Potentialverteilungen mit gitterunabhängiger Elektrodenpositionierung weist bei Quellpositionen in unmittelbarer Umgebung von Leitfähigkeitskontrasten aufgrund starker Sekundärquellen hohe Diskretisierungsfehler auf. Eine Maßnahme zur Erhöhung der Genauigkeit ist die Verringerung der Diskretisierungsschrittweiten.

Mit zunehmender Knotenzahl steigt die Zahl der zu lösenden Gleichungen und damit der numerische Aufwand. Dem stehen geringere Diskretisierungsfehler gegenüber. Ein in den Lösungsprozess integriertes adaptives Gitter, das nur lokal verfeinert wird, gestaltet die Gitterpunktverdichtungen effizient.

Die Entwicklung der Kriterien für die Netzverfeinerung und die Qualität der Verfeinerung geschieht empirisch am Beispiel des Modells einer vertikalen Platte im Vergleich zur analytischen Lösung. Der automatische Algorithmus liefert gute Ergebnisse für ein beliebiges dreidimensionales Widerstandsmodell.

Literatur

- Lowry, T., Allen, M., & Shive, P. (1989). Singularity removal: A refinement of resistivity modeling techniques. Geophysics, 54, 766-774.
- Schwetlick, H., & Kretzschmar, H. (1991). Numerische Verfahren f
 ür Naturwissenschaftler und Ingenieure. Fachbuchverlag Leipzig.
- Spitzer, K., Chouteau, M., & Boulanger, O. (1999). Grid-independent lectrode positioning for 3D DC resistivity and IP forward modeling. In Extended Abstracts Book, 2nd International Symposium in Three-Dimensional Electromagnetics (p. 189 - 192). Salt Lake City, Utah, USA.
- Spitzer, K., & Wurmstich, B. (2000). Speed and Accuracy in 3D Resistivity Modeling. In M. Oristaglio & B. Spies (Eds.), SEG BookSeries Geophysical Developments (pp. 171–176). Society of Expl. Geophysicists.
- Steinrück, H. (2001). VO Numerische Methoden der Strömungsmechanik. http: //cdlab2.fluid.tuwien.ac.at/LEHRE/322005/index.html. ((zuletzt aktualisiert am 30.03.2001))