

3D-TEM-Simulation für axialsymmetrische Leitfähigkeitsstrukturen mit der Finite-Elemente-Methode

Ralph-Uwe Börner (TU Bergakademie Freiberg)

1 Einleitung

Die Berechnung elektromagnetischer Felder transienter Dipolquellen über dreidimensionalen Leitfähigkeitsstrukturen erfordert die numerische Lösung einer partiellen Differentialgleichung von parabolischem Typ. Als zuverlässige Lösungsmethode hat sich das Zeitschrittverfahren etabliert. Dabei wird das System der Maxwellgleichungen auf einem *staggered grid* diskretisiert. Die Stabilität des Verfahrens hängt von der Größe des gewählten Zeitschrittes ab. Die Zeitschrittweite ist proportional zu $\sqrt{\sigma_{\min} t}$, womit die Behandlung des Lufthalbraumes der Leitfähigkeit $\sigma_{\text{Luft}} = 10^{-14}$ S/m zu einem erheblichen numerischen Mehraufwand führen würde. Zur Vermeidung derartiger extrem kleiner Zeitschritte kann der Luft-Halbraum-Grenze eine integrale Randbedingung zugewiesen werden. Der numerische Aufwand wird nun jedoch durch eine 2D-FFT dominiert.

Diese Arbeit stellt einen alternativen Ansatz zur Lösung der Randwertaufgabe vor. Es werden Finite-Elemente-Lösungen im Frequenzbereich bereitgestellt, die den Transienten über eine Hankeltransformation synthetisieren. Die zur Synthese benötigten Frequenzbereichsantworten werden dabei für die zu einem speziellen Satz von Filterkoeffizienten gehörigen diskreten Frequenzen ermittelt.

Durch Verwendung eines unsymmetrischen Lanczos-Prozesses gelingt es, den numerischen Aufwand erheblich zu verringern.

2 Grundlagen

In quasistationärer Näherung lauten die Maxwell'schen Gleichungen

$$\nabla \times \mathbf{H} - \sigma \mathbf{E} = \mathbf{J}^e, \quad (1a)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} + \partial_t \mathbf{B} = 0, \quad (1b)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (1c)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0. \quad (1d)$$

Die Gleichungen (1) werden durch die konstitutive Beziehung

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (2)$$

ergänzt.

Mit der Definition des magnetischen Vektorpotentials \mathbf{A} und des elektrischen Skalarpotentials V

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (3a)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla V - \partial_t \mathbf{A} \quad (3b)$$

gelangt man zu einem System von Gleichungen für die beiden Unbekannten \mathbf{A} und V :

$$\sigma \partial_t \mathbf{A} + \nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \mathbf{A}) + \sigma \nabla V = \mathbf{J}^e \quad (4)$$

$$-\nabla \cdot (\sigma \partial_t \mathbf{A} + \sigma \nabla V - \mathbf{J}^e) = 0. \quad (5)$$

Mittels einer Eichtransformation der Art

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \nabla \Psi \quad (6)$$

$$\tilde{V} = V - \partial_t \Psi \quad \text{mit} \quad \Psi = \frac{V}{i\omega} \quad (7)$$

gelingt es, die Gleichungen zu reduzieren, so dass für einen harmonischen Ansatz mit der Zeitabhängigkeit $e^{i\omega t}$ nur noch drei Unbekannte auftreten:

$$\nabla \times (\mu^{-1} \nabla \times \tilde{\mathbf{A}}) + i\omega \sigma \tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{J}^e. \quad (8)$$

3 Numerische Lösung

Die partielle Differentialgleichung (8) wird in einem Simulationsbereich $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ gelöst. Ω ist berandet durch den künstlichen Rand Γ_∞ , welcher im Halbraum verläuft und der dazu dient, den zu simulierenden Bereich abzugrenzen. An diesen Rändern sind geeignete Randbedingungen an die Tangentialkomponente von \mathbf{E} und die Normalkomponente von \mathbf{H} zu stellen. An den inneren Rändern gelten die Stetigkeitsbedingungen der Felder. Im betrachteten Zylinderkoordinatensystem (Abb. 1) kann das magnetische Vektorpotential aus Symmetriegründen nur eine nichtverschwindende Komponente A_φ besitzen.

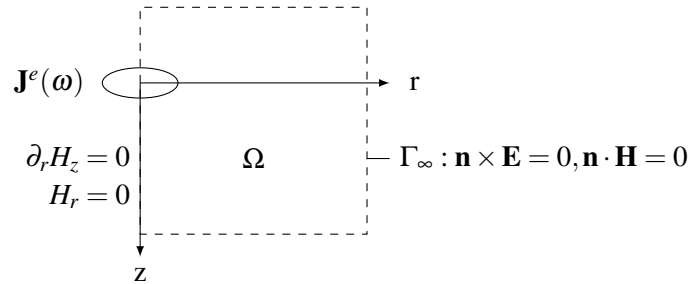


Abbildung 1: Zylinderkoordinatensystem mit magnetischem Dipol auf z -Achse.

Es ist vorteilhaft, die Axialsymmetrie auszunutzen. Das erfordert, gewisse Bedingungen an die Felder auf der z -Achse zu stellen:

$$B_r = -\partial_z A_\varphi = 0 \quad (9)$$

$$\partial_r B_z = \partial_r \left(\frac{1}{r} \partial_r (r A_\varphi) \right) = \partial_r (r \partial_r u + 2u) = 0, \quad (10)$$

was automatisch erfüllt ist für $r = 0$ bzw. $\partial_r u = 0$. Die Variable u

$$u = \frac{A_\varphi}{r} \quad (11)$$

transformiert (8) in eine Form, bei der keine Singularitäten auf der Symmetrieachse auftreten können. Die genannten Randbedingungen sind somit äquivalent zu einer homogenen Neumannschen Randbedingung für die Variable u auf dem Rand $z = 0$.

Eine Diskretisierung der Gleichung (8) auf einem Finite-Elemente-Gitter führt auf ein System der Form

$$(\mathbf{K} + i\omega\mathbf{M})\mathbf{u} = \mathbf{f}. \quad (12)$$

\mathbf{K} und \mathbf{M} bilden die Systemmatrix und sind unter den Bezeichnungen Steifigkeits- bzw. Massematrix bekannt. Die Lösung \mathbf{u} wird für eine rechte Seite \mathbf{f} , welche Randbedingungen und Quellen repräsentiert, gelöst. \mathbf{K} und \mathbf{M} sind schwachbesetzte und symmetrische $N \times N$ -Matrizen, wobei N die Anzahl der gesuchten Lösungen \mathbf{u} in Ω bedeutet. Im vorliegenden axialsymmetrischen Fall wird eine Dreiecksvernetzung verwendet, wobei mittels einer adaptiven Gitterverfeinerungsstrategie basierend auf einem *a-posteriori*-Fehlerschätzer gesteuert wird, in welchen Bereichen des Gebietes Ω besonders fein diskretisiert werden muss, um eine möglichst exakte Lösung zu erhalten.

Das Gleichungssystem (12) kann mit einem direkten Verfahren wie z.B. UMFPACK gelöst werden.

4 Transformation der Felder in den Zeitbereich

Für ein kausales Signal $f(t)$, $t > 0$, gilt für die Spektraldarstellung der Felder nach dem Einschalten (Newman et al., 1986)

$$f(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{f}(\omega)}{i\omega} e^{i\omega t} d\omega \quad (13a)$$

$$0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\tilde{f}(\omega)}{i\omega} e^{-i\omega t} d\omega. \quad (13b)$$

Die reellen Felder im Zeitbereich sollen über Sinus- oder Cosinustransformationen der komplexen frequenzabhängigen Felder bestimmt werden. Ausmultiplizieren der Integranden führt unter Berücksichtigung der für reelle Signale gültigen Symmetrieeigenschaft

$$\tilde{f}(-\omega) = \tilde{f}^*(\omega) \quad (14)$$

zu den Darstellungen

$$f(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Re \tilde{f}}{\omega} \sin \omega t d\omega = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Im \tilde{f}}{\omega} \cos \omega t d\omega. \quad (15)$$

für die Stepresponse. Üblicherweise benutzt man in der messtechnischen Praxis Ausschaltvorgänge. Für $t \rightarrow \infty$ stellt sich ein stationärer Zustand ein. Die zu diesem Zeitpunkt beobachteten Felder sind reine Gleichstromfelder. Die Stepresponse für Ausschaltvorgänge muss daher aus der Vorschrift

$$f_{\text{off}}(t) = f(\infty) - f(t), \quad t > 0 \quad (16)$$

berechnet werden, woraus schließlich

$$f_{\text{off}}(t) = f(\infty) - \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Re \tilde{f}}{\omega} \sin \omega t d\omega = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Im \tilde{f}}{\omega} \cos \omega t d\omega \quad (17)$$

folgt. Die Transformation in den Zeitbereich wird über eine Schnelle Hankeltransformation realisiert. Die Sinustransformierte des Imaginärteils der Vertikalkomponente von \mathbf{H} ist definiert als

$$h_z(t, r, z) = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{\Im H_z(\omega, r, z)}{\omega} \sin \omega t d\omega. \quad (18)$$

Darüberhinaus gilt die Identität $J_{1/2}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \sin x$, womit man zu

$$h_z(t) = -\sqrt{\frac{2}{\pi t}} \int_0^{\infty} \frac{\Im H_z(\omega)}{\sqrt{\omega}} J_{1/2}(\omega t) d\omega \quad (19)$$

gelangt. Gl. (19) kann mit einer Schnellen Hankeltransformation näherungsweise berechnet werden. Um den Zeitbereich von $10^{-6} \leq t \leq 10^{-3}$ s mit 5 Zeitschritten pro Dekade bei Verwendung von n_c Filterkoeffizienten abzudecken, sind $n_c + n_t - 1 = 85$ Lösungen von (12) für Frequenzen von $10^{-4} \dots 10^{13}$ Hz bereitzustellen (Abb. 2).

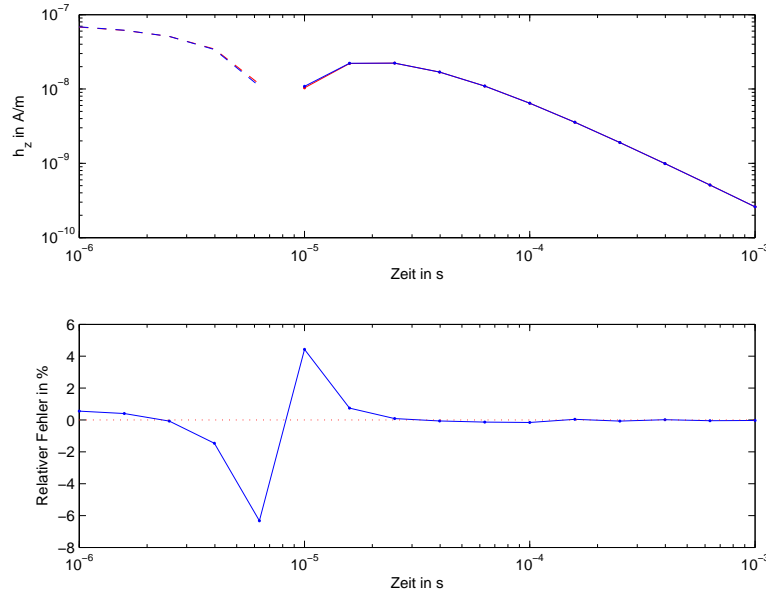


Abbildung 2: Vergleich von analytischer und numerischer Lösung (oben) und relativer Fehler (unten) für vertikalen magnetischen Dipol über homogenem Halbraum. Der Abstand zum Dipol beträgt 100 m.

5 Reduced Order Modelling

Die Bereitstellung von Lösungen des in Gl. (12) aufgestellten Gleichungssystems für viele Frequenzen ω macht die Transformation in den Zeitbereich unattraktiv. Mit $\kappa^2 = -i\omega$ ist

$$(\mathbf{K} - \kappa^2 \mathbf{M}) \mathbf{u} = \mathbf{f}. \quad (20)$$

Gesucht ist eine effiziente Methode zur Bereitstellung von Lösungen für einen begrenzten Bereich des Gebietes Ω . Die j -te Komponente von \mathbf{u} ist

$$u_j = \mathbf{e}_j^T \mathbf{u} = \mathbf{e}_j^T (\mathbf{K} - \kappa^2 \mathbf{M})^{-1} \mathbf{f} \quad (21)$$

\mathbf{e}_j ist hierbei der j -te Basisvektor im \mathbb{R}^N . Von Interesse sind Lösungen \mathbf{u} für gewisse $\omega_i = 1, \dots, N_f$. Dafür ist die Inversion von (20) für jede dieser Frequenzen nötig. Diese Aufgabe ist numerisch extrem aufwendig. Mit der Einführung eines *shift*-Parameters $\sigma_i = \kappa_i^2 - \kappa_0^2$, $i = 1, \dots, N_f$ bzgl. einer Referenzfrequenz κ_0^2 kann Gl. (21) als Funktion des *shift*-Parameters ausgedrückt werden:

$$u_j(\sigma_i) = \mathbf{e}_j^T \underbrace{(\mathbf{K} - \kappa_0^2 \mathbf{M} - \sigma_i \mathbf{M})^{-1}}_{\mathbf{A}_0} \mathbf{f} = \mathbf{e}_j^T (\mathbf{I} - \sigma_i \mathbf{A}_0^{-1} \mathbf{M})^{-1} (\mathbf{A}_0^{-1} \mathbf{f}) \quad (22)$$

Mit $\mathbf{L} := \mathbf{e}_j \in \mathbb{R}^{N \times 1}$, $\mathbf{R} := \mathbf{A}_0^{-1} \mathbf{f} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$ und $\mathbf{A} := \mathbf{A}_0^{-1} \mathbf{M} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ wird

$$u_j(\sigma_i) = \mathbf{L}^T (\mathbf{I} - \sigma_i \mathbf{A})^{-1} \mathbf{R}. \quad (23)$$

Die Größe der Inversen ist hierbei immer noch $N \times N$. Eine Methode, die auf einem unsymmetrischen Lanczos-Prozess beruht (Wagner et al., 2003), überführt das System in die Form

$$u_j(\sigma_i) = \boldsymbol{\eta}_n^T [\boldsymbol{\Delta}_n^{-1} - \sigma_i \boldsymbol{\Delta}_n \mathbf{T}_n \boldsymbol{\Delta}_n^{-1}]^{-1} \boldsymbol{\rho}_n. \quad (24)$$

\mathbf{T} ist eine Tridiagonalmatrix, welche \mathbf{A} approximiert. Eine derartige Projektion ersetzt das N -dimensionale Problem (23) in \mathbf{A} durch eine n -dimensionale Approximation in \mathbf{T}_n , wobei $n \ll N$. In den vorgestellten Untersuchungen ist N in der Größenordnung von $N \approx 2000$ und $20 < n < 50$.

Für Genauigkeits- und Effizienzuntersuchungen dient das Modell eines geschichteten Halbraums (Abb. 3), wofür analytische Lösungen zur Verfügung stehen. Für die Diskretisierung der Randwertaufgabe sowie die Assemblierung des linearen Gleichungssystems (20) wurde *COMSOL Multiphysics* benutzt.

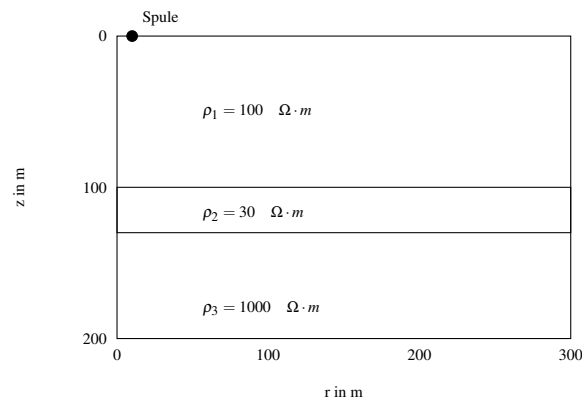


Abbildung 3: Für die Tests verwendetes Leitfähigkeitsmodell. Das simulierte Gebiet erstreckt sich von $-3550 < z < 5000$ m und $0 < r < 5000$ m.

Einen Ausschnitt der Finite-Elemente-Vernetzung zeigt Abb. 4. Es ist deutlich zu erkennen, dass sich eine adaptive Gitterverfeinerungsstrategie insbesondere im Bereich der Spule auswirkt.

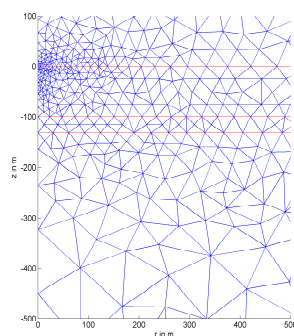


Abbildung 4: Ausschnitt des Finite-Elemente-Gitters nach adaptiver Gitterverfeinerung.

Abb. 5 zeigt einen Genauigkeitsvergleich für den vorgestellten Algorithmus. Die Übereinstimmung mit der analytischen Lösung ist über zwei Frequenzdekaden sehr gut. Für größere Bandbreiten σ ist der gesamte Prozess für eine neu zu wählende Referenzfrequenz κ_0 zu wiederholen. Da die zu erwartenden Rechenzeiten im wesentlichen durch den Lanczos-Prozess selbst, nämlich durch LU-Zerlegung von \mathbf{A} und die Berechnung von \mathbf{L} und \mathbf{R} verursacht werden, ist die Anzahl der Frequenzshifts unerheblich (vgl. Abb. 6).

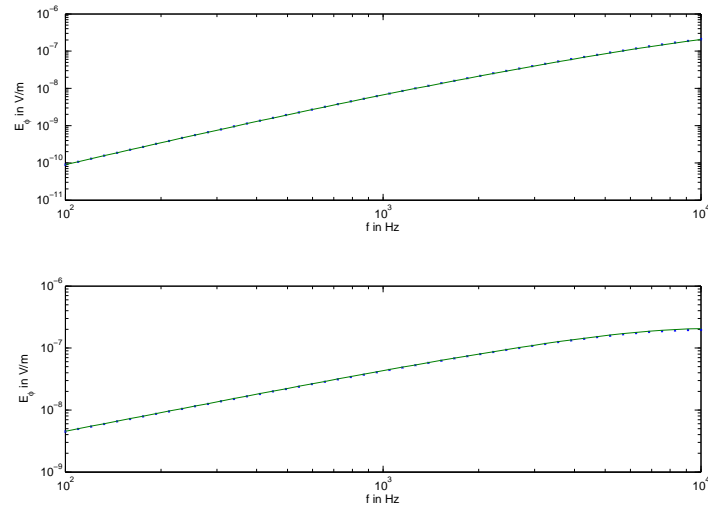


Abbildung 5: Elektrisches Feld eines vertikalen magnetischen Dipols über geschichtetem Halbraum (vgl. Abb. 3), beobachtet im Abstand von 100 m. Dargestellt sind analytische Lösung und Auswertung von Gl. (24) für 50 Frequenzen.

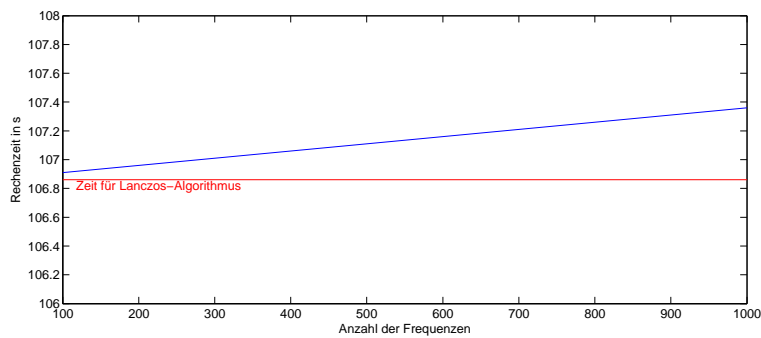


Abbildung 6: Gesamtzeit als Funktion der Anzahl der Frequenzen, für die Gl. (24) ausgewertet wird. Das Problem hat 2124 Freiheitsgrade, berechnet wurde ein Krylov-Unterraum mit der Dimension $n = 50$.

6 Zusammenfassung

Im Vergleich zu herkömmlichen Finite-Differenzen-Verfahren gewährleistet die Methode der Finite Elemente eine größere Flexibilität in der Parametrisierung von leitfähigen Strukturen und Topographie. Darüberhinaus kann durch Einsatz von adaptiven Gitterverfeinerungsstrategien die Anzahl der Lösungen im diskretisierten Modellgebiet reduziert werden. Mit der *Reduced Order Modelling* Methode kann eine erhebliche Rechenzeitsparung bei moderatem Genauigkeitseinbußen erreicht werden. Damit erschließt sich ein weites Feld von Anwendungen insbesondere im Hinblick auf Inversionsstrategien für TEM.

Literatur

- Newman, G. A., Hohmann, G. W. und Anderson, W. L. (1986). Transient electromagnetic response of a three-dimensional body in a layered earth. *Geophysics*, 51, 1608-1627.
- Wagner, M., Pinsky, P., Oberai, A. und Malhotra, M. (2003). A krylov subspace projection method for simultaneous solution of helmholtz problems at multiple frequencies. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 192, 4609-4640.