Entwicklung schneller Löser für Randwertprobleme in der geoelektrischen Widerstandstomographie

Diplomarbeit von Stefan Jongen
Jülich, Februar 2006
Die vorliegende Diplomarbeit wurde in Zusammenarbeit mit der Forschungszentrum Jülich GmbH, Institut für Festkörperforschung (IFF), angefertigt.

Diese Diplomarbeit wurde betreut von:

Referent: Prof. Dr. M. Reißel
Koreferent: Privatdozent Dr. H. Lustfeld

Diese Arbeit wurde von mir selbständig angefertigt und verfasst. Es sind keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt worden.

Jülich, den 6. Februar 2006
Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung
1.1 Einführung .......................................................... 1
1.2 Problembeschreibung .............................................. 2
1.3 Ziel der Arbeit ...................................................... 5

2 Grundlagen .......................................................... 7
2.1 Das Randwertproblem .............................................. 7
2.2 Das Cole-Cole Modell .............................................. 8
   2.2.1 Ableitungen der Cole-Cole Funktion .................. 8
2.3 Fréchet-Ableitungen ................................................ 9
2.4 Implizite Funktionen .............................................. 10
   2.4.1 Ableitung impliziter Funktionen ....................... 10
2.5 Der adjungierte Operator ......................................... 11
2.6 Der Satz von Gauß .................................................. 11
2.7 Das ADI-Verfahren ............................................... 13

3 Diskretisierung des Randwertproblems .......................... 15
3.1 Einleitung .......................................................... 15
3.2 Einteilung des Gebietes in ein äquidistantes Gitter ........ 17
3.3 Diskretisierung des Gradienten .................................. 18
3.4 Diskretisierung der Leitfähigkeit ............................... 20
3.5 Diskretisierung der Divergenz .................................. 20
3.6 Diskretisierung der rechten Seite der Differentialgleichung .... 22
3.7 Die diskreten Randbedingungen .................................. 24
   3.7.1 Neumann-Bedingung ....................................... 24
   3.7.2 Dirichlet-Bedingung ....................................... 27
3.8 Zusammenfassung aller Diskretisierungen .................... 28
   3.8.1 Zusammenhang Beispiel-Matrix und Randwertproblem ... 29
3.9 Approximierte Lösungen einiger Vorwärtsprobleme ........ 29
   3.9.1 Lösung eines Vorwärtsproblems bei grober Auflösung .... 30
3.9.2 Lösung eines Vorwärtsproblems bei feiner Auflösung  31
3.9.3 Positionierung einer δ-Quelle am Neumann-Rand  31
3.9.4 Mehrere δ-Quellen in Ω  32

3.10 Verfeinerung  33
3.10.1 Beliebige Positionierung der δ-Quellen  34
3.10.2 Position der Messpunkte  38
3.10.3 Verschiedene Frequenzen  39
3.10.4 Messprogramme  40
3.10.5 Grobes c-Gitter  42

4 Ableitung und adjungierte Ableitung des Randwertproblems  45
4.1 Bestimmung der gesuchten Ableitung ∂c u(c)(c₀)(c_r)  45
4.1.1 Bestimmung der Ableitung im kontinuierlichen Fall  46
4.1.2 Bestimmung der Ableitung im diskreten Fall  48
4.2 Bestimmung des adjungierten Operators  50
4.2.1 Bedeutung des adjungierten Operators in der geoelektrischen Tomographie  50
4.2.2 Bestimmung des adjungierten Operators im kontinuierlichen Fall  51
4.2.3 Bestimmung des adjungierten Operators im diskreten Fall  53
4.3 Kostenvergleich: Ableitungsmatrix gegen Matrix-Vektor Produkt  54

5 Spezielle Löser der linearen Gleichungssysteme  57
5.1 Einführung  57
5.2 Optimierung  58
5.2.1 Verkleinerung des Gleichungssystems  59
5.2.2 Erzeugung einer symmetrischen Matrix  62
5.3 Die klassische LU-Zerlegung  64
5.4 Die Cholesky-Zerlegung  65
5.5 Lösen mit Hilfe des ADI-Verfahrens  66
5.5.1 Erzeugung der Richtungs-Matrizen  67
5.5.2 Steuerung der Schrittweite  68
5.6 Die UMFPACK Bibliothek  70

6 Numerische Ergebnisse  71
6.1 Steuerung des ADI-Verfahrens  71
6.1.1 Konvergenzgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von t  71
6.1.2 Variation der Leitfähigkeit  75
6.1.3 Optimale Steuerung  76
6.1.4 Unterschiedliche Steuerung bei gleicher Dimension  78
6.1.5 Aussagen über die Abschätzung des Relaxationsparameters  79
6.2 Vergleich der Löser  79
6.2.1 Vergleich des ursprünglichen Systems mit dem optimierten System  79
7 Zusammenfassung und Ausblick
Kapitel 1

Einleitung

1.1 Einführung

In einem Projekt des Forschungszentrums Jülich versucht man, die Zusammensetzung eines Bodens mit möglichst geringem Aufwand zu ermitteln. Um dies zu erreichen, wird das Verfahren der Electric Resistance Tomography (ERT) genutzt. Dieses Verfahren gehört zu der Klasse der tomographischen Verfahren, bei denen die Verteilung eines Parameters in einem Objekt ermittelt werden soll. Das wohl bekannteste Verfahren ist die Computer-Tomographie, die oft in der Medizin eingesetzt wird.


Diese Aufgabe gehört zu der Klasse der inversen Probleme. Während man bei den direkten Problemen (Vorwärtsproblemen) aus bekannten Ursachen die unbekannten Wirkungen ermittelt, versucht man bei den inversen Problemen (Rückwärtsproblemen) anhand der beobachteten Wirkungen auf die Ursachen zu schließen. Auf das hier geschilderte Problem der Bodenidentifizierung angewandt bedeutet dies, dass versucht wird, aus einer gemessenen Potentialverteilung und einer bekannten Stromeinspeisung eine (eindeutige) Bodenstruktur zu ermitteln.

1.2 Problembeschreibung

Jeder Bodentyp besitzt eine frequenzabhängige Leitfähigkeit, die durch die vier sogenannten Cole-Cole Parameter (siehe Kapitel 2.2) dargestellt werden kann. Somit sieht die Potentialverteilung je nach Bodenzusammensetzung und Frequenz des injizierten Stroms unterschiedlich aus.

Abbildung 1.1: Gebiet $\Omega$, Ränder $\Gamma_d$ und $\Gamma_n$, Elektroden

In einem Versuchsaufbau wird bei einer gegebenen Frequenz $\omega$ und einer bekannten Stromeinspeisung $I$ das sich einstellende Potential

$$\hat{u}(I, \omega)$$  \hspace{1cm} (1.1)

an $p$ Sonden gemessen

$$\hat{u}_k(I, \omega) \quad k = 1, \ldots, p.$$  \hspace{1cm} (1.2)

Nun kann man bei dem gleichen Versuchsaufbau $(I, \omega)$ das Vorwärtsproblem bei einer beliebigen Verteilung der Cole-Cole Parameter $c$ numerisch berechnen. Hierbei ist zu beachten, dass die Cole-Cole Parameter $c$ auf dem Gebiet nicht konstant sein müssen. Je nach Bodenschicht können sich die vier Parameter $(\rho_0, m, \tau, \gamma)$ unterscheiden. Es sollen daher nicht nur vier Parameter identifiziert
werden, sondern eine Verteilung der Parameter über Ω. Auch bei der numerischen Näherung
\[ u(I, ω, c) \] mit \( c = (ρ_0, m, τ, γ)^T \).

(1.3)

werden nur die Potentiale \( u_k(I, ω, c) \) betrachtet, die sich an den Messsonden befinden. Für eine möglichst genaue Approximation der Bodenstruktur versucht man, die Differenzen
\[ m_k(c) = \hat{u}_k - u_k(c) \quad k = 1, ..., p \]

(1.4)
möglichst klein (betragsmäßig) zu halten. Je kleiner die Beträge der Differenzen sind, desto näher liegt die numerische Lösung \( u_k(c) \) an der gemessenen Lösung \( \hat{u}_k \) (bei festem \( I \) und \( ω \)).

Um mehr Informationen zu gewinnen, werden verschiedene Stromeinspeisungen und Frequenzen verwendet. Seien nun insgesamt \( n \) verschiedene Messungen mit den Eingangsdaten
\[ (I_j, ω_j) \quad j = 1, ..., n \]

(1.5)
durchgeführt worden. Hierbei ist es durchaus möglich, dass bei einer Stromeinspeisung \( I \) mehrere Frequenzen \( ω \) benutzt werden. Somit bezeichnet
\[ m_{k,j}(c) = \hat{u}_k(I_j, ω_j) - u_k(I_j, ω_j, c) \quad k = 1, ..., p, \quad j = 1, ..., n \]

(1.6)
einen Wert, der sich aus der Differenz der Messung im \( j \)-ten Versuch an dem \( k \)-ten Sensor mit dem entsprechenden numerisch angenäherten Wert ergibt.

Ziel ist es nun, eine Verteilung der Cole-Cole Parameter in Ω zu bestimmen, so dass alle \( m_{k,j}(c) \) möglichst klein sind. Diese Verteilung wird von nun an \( c_m \) genannt. Um diese zu ermitteln, wird ein weiterer Index \( i \) definiert, der die Indizes \( k \) und \( j \) ersetzen soll. Das bedeutet, dass jedes \( i \) eindeutig für einen Messpunkt \( k \) in einem Versuch \( j \) steht, wie dies zum Beispiel der Ausdruck
\[ i = (j - 1) \cdot p + k \]

verdeutlicht. Somit ergibt sich für eine Differenz in einem Messpunkt bei einem beliebigen Versuchsaufbau
\[ m_i(c) = \hat{u}_i - u_i(c) \quad i = 1, ..., s \quad \text{mit} \quad s = n \cdot p. \]

(1.7)

Alle Differenzen werden im Vektor
\[ m(c) := \begin{pmatrix} m_1(c) \\ \vdots \\ m_s(c) \end{pmatrix} \]

(1.8)
zusammengefasst.

**Bemerkung:**

Bei diesem Problem ist die Funktion $m_i(c)$ komplex. Lediglich bei Gleichstrom ($\omega = 0$) sind die Ergebnisse reell.

Mit Hilfe der Formulierung (1.7) kann man das inverse Problem in ein Least Squares Problem überführen.

**Definition 1 Least Squares Problem**

Finde $c_m$, einen lokalen Minimierer für

$$M(c) = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^{s} |m_i(c)|^2,$$

wobei die Funktionen $m_i : \mathbb{R}^z \to \mathbb{C}, i = 1, \ldots, s$ gegeben sind und es gilt: $s \geq z$.

Um das Minimum der Funktion $M(c)$ zu finden, wird diese mit Hilfe der Taylorentwicklung angenähert. Es gilt

$$M(c + h) = M(c) + h^T \cdot g(c) + O(\|h\|^2), \quad (1.9)$$

wobei $g$ der Gradient ist,

$$g(c) := M'(c) = \begin{pmatrix} \frac{\partial M}{\partial c_1}(c) \\ \vdots \\ \frac{\partial M}{\partial c_s}(c) \end{pmatrix}. \quad (1.10)$$

Ist nun $c_m$ ein lokales Minimum und $\|h\|$ klein genug, dann existiert kein Punkt $c_m + h$ mit einem kleineren Funktionswert, d.h. $M(c_m + h) > M(c_m)$.

**Theorem 1 Notwendige Bedingung für ein lokales Minimum**

Wenn $c_m$ ein lokaler Minimierer von $M(c)$ ist, dann gilt

$$g_m := M'(c_m) = 0.$$

Dieses notwendige Kriterium kann ebenso über die Funktion $m(c)$ dargestellt werden:

$$M(c) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{s} |m_i(c)|^2 = \frac{1}{2} \|m(c)\|^2 = \frac{1}{2} m(c)^H m(c), \quad (1.11)$$
wobei \( m(c)^H \) der hermitesche Vektor zu \( m(c) \) ist.

Auch die Funktion \( m(c) \) kann über die Taylor-Entwicklung angenähert werden:

\[
m(c + h) = m(c) + J(c) \cdot h + O(\|h\|^2),
\]

wobei \( J \) die Jacobi-Matrix repräsentiert. Diese Matrix beinhaltet die ersten partiellen Ableitungen der Funktionsparameter

\[
(J(c))_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial c_j}(c).
\]

Aus Gleichung (1.11) folgt:

\[
\frac{\partial M}{\partial c_j}(c) = \sum_{i=1}^k m_i(c) \frac{\partial m_i}{\partial c_j}(c).
\]

Daraus ergibt sich für den Gradienten der Funktion \( M \):

\[
g(c) = M'(c) = J(c)^H m(c)
\]

Die in [5] beschriebenen Regularisierungsverfahren bauen auf die Linearisierung der Funktion \( m(c) \) (Gleichung (1.12)) auf. Da zur Berechnung von \( m(c) \), von \( J(c) \) und somit von \( g(c) \) mehrere Randwertprobleme gelöst werden müssen, wird das kontinuierliche Problem zunächst in eine diskrete Form überführt. Erst dann kann das Vorwärtsproblem numerisch gelöst werden. Mit diesen gewonnen Daten und des Satzes über implizite Funktionen (vgl. Kapitel 2.4) kann man die Jacobi-Matrix \( J(c_0) \) (vgl. 1.13) aufstellen.

Da einige Regularisierungsverfahren auch die Adjungierte der Jacobi-Matrix \( J(c_0)^H \) benötigen, muss auch diese numerisch approximiert werden.

Alle diese numerischen Berechnungen führen zu der Aufgabe, große lineare Gleichungssysteme aufzustellen und zu lösen. Da die Matrizen neben ihrer dünnen Besetzung weitere spezielle Eigenschaften besitzen, sollen Lösungsverfahren angewandt werden, die diese Charakteristika ausnutzen und somit zu einer schnelleren Lösung führen.

### 1.3 Ziel der Arbeit

In dieser Arbeit wird nicht das gesamte inverse Problem gelöst; es werden die Schnittstellen zur Verfügung gestellt, die in [5] beschriebenen Regularisierungsverfahren zur Lösung des Problems benötigen. Diese sind:

- Lösung des Vorwärtsproblems
- Berechnung des Produktes \( J(c_0) \cdot c_r \)
- Berechnung des Produktes \( J^H(c_0) \cdot x \)
Mit Hilfe der zentralen finiten Differenzen wird das elliptische Randwertproblem (siehe Kapitel 2.1) numerisch approximiert. Somit kann das Vorwärtsproblem mittels Lösen eines linearen Gleichungssystems berechnet werden.

Zum Aufstellen einer Spalte der Ableitungsmatrix $J(c_0)$ muss jeweils ein Randwertproblem gelöst werden. Um nun die gesamte Matrix aufzustellen, ist sehr viel Rechenzeit und ein hoher Aufwand (siehe Kapitel 4.3) nötig. In allen in [5] vorkommenden Regularisierungsverfahren wird jedoch die Ableitung in einem Punkt $c_0$ in Richtung $c_r$ gesucht. Somit wäre es sinnvoll, nicht die gesamte Matrix $J(c_0)$ zu ermitteln, sondern direkt das Matrix-Vektor Produkt $J(c_0) \cdot c_r$. Dies erspart viele Berechnungen und beschleunigt die Verfahren. Da nun $J(c_0)$ nicht vollständig ermittelt werden muss, sollten auch die Matrix-Vektor Produkte $J(c_0)^H \cdot x$ direkt ermittelt werden.


In dieser Arbeit wird neben den klassischen Lösern (LU- und Cholesky-Zerlegung) auch das iterative ADI-Verfahren (siehe Kapitel 2.7) untersucht, welches nicht ein Gleichungssystem über zwei Richtungen löst, sondern dieses Große auf zwei Kleinere überführt, die nur in eine Richtung gelöst werden müssen.

Diese Berechnungen sollen mit Hilfe eines C++ Programms realisiert werden, das speziell an dieses elliptische Randwertproblem angepasst ist. Es soll das Vorwärtsproblem sowie die beiden Matrix-Vektor Produkte $J(c_0) \cdot c$ und $J^H(c_0) \cdot x$ ermitteln können. Hierbei wird ein besonderes Augenmerk auf ein effizientes und schnelles Lösen der linearen Gleichungssysteme gelegt. Zum Vergleich wird eine C-Bibliothek herangezogen, die speziell für das optimierte Lösen großer Gleichungssysteme mit dünnbesetzten Matrizen entwickelt wurde.

Kapitel 2
Grundlagen

2.1 Das Randwertproblem


\[-\text{div} (\sigma \cdot \text{grad}(u)) = I \quad \text{in} \; \Omega \tag{2.1}\]
\[u = 0 \quad \text{auf} \; \Gamma_d \tag{2.2}\]
\[\partial_{\nu} u = 0 \quad \text{auf} \; \Gamma_n \tag{2.3}\]

Der Strom $I$ wird eingeleitet und führt je nach Leitfähigkeit $\sigma$ des Bodens zu dem bestimmten Potential $u$.

Die Neumann-Bedingung an der Oberfläche $\Gamma_n$ (vgl. Abbildung 1.1) wurde aus physikalischen Gründen auf 0 gesetzt, da „an der Oberfläche bei ausreichender Luftfeuchtigkeit keine elektrischen Ladungen entstehen“\(^1\). Weil Luft ein sehr guter Isolator ist, endet das elektrische Feld $E$ an der Oberfläche ($\nu \cdot E = 0$).

Auf den Rändern $\Gamma_d$ soll das Potential 0 sein. Da sich die Messsonden in der Regel nicht direkt an den Dirichlet-Rändern befinden, sind die numerischen "Messungen" unabhängig von dieser Randbedingung. Mit zunehmender Entfernung zur Stromquelle nimmt das Potential immer weiter ab, so dass es irgendwann (am Dirichlet-Rand) den Wert 0 besitzt.

**Bemerkung:**
Hierbei ist zu beachten, dass die Leitfähigkeit $\sigma$ eines Bodens von den Cole-Cole Parametern $c$ (siehe Kapitel 2.2) des Bodens und der Frequenz $\omega$ abhängt.

\[\sigma : (c, \omega) \rightarrow \sigma(c, \omega) \tag{2.4}\]

\(^1\)siehe [6]
Je nach Frequenz und Beschaffenheit des Bodens (Cole-Cole Parameter) ergibt sich eine andere Leitfähigkeit und somit ein anderes Potential.

### 2.2 Das Cole-Cole Modell


\[
\sigma(\omega) = \frac{1}{\rho(c, \omega)} \quad \text{mit} \quad c = (\rho_0, m, \tau, \gamma)^T
\]

(2.5)

\[
\rho(c, \omega) = \rho_0 \cdot \left[1 - m \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau)^\gamma}\right)\right]
\]

(2.6)

**Erläuterung:**

Die Leitfähigkeit \(\sigma(c, \omega)\) ist der Kehrwert des Widerstandes \(\rho(c, \omega)\). Dieser ist frequenzabhängig und lässt sich durch die vier Cole-Cole Parameter charakterisieren:

- \(\rho_0\): Widerstand im Gleichstromfall (\(\omega = 0\))
- \(m\): Aufladefähigkeit des Bodens
- \(\gamma\): Frequenzabhängigkeit
- \(\tau\): Zeitkonstante

In der Regel ist die Leitfähigkeit komplex, da eine Frequenz \(\omega \neq 0\) immer einen imaginären Anteil in den Widerstand bringt (\(\tau, \gamma \neq 0\)).

In Tabelle 2.1 sind typische Parameter für Böden aufgelistet.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Bodentyp</th>
<th>(\rho_0)</th>
<th>(m)</th>
<th>(\tau)</th>
<th>(\gamma)</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>polarisierbarer Boden</td>
<td>100</td>
<td>0.25</td>
<td>(10^{-2})</td>
<td>0.1</td>
</tr>
<tr>
<td>steiniger Boden</td>
<td>1000</td>
<td>0.1</td>
<td>(10^{-1}\times)</td>
<td>0.4</td>
</tr>
<tr>
<td>Bruchzone</td>
<td>500</td>
<td>0.4</td>
<td>10</td>
<td>0.3</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 2.1: Cole-Cole Parameter verschiedener Böden

### 2.2.1 Ableitungen der Cole-Cole Funktion

Um das Rückwärtsproblem lösen zu können, werden die Fréchet-Ableitungen (siehe Kapitel 2.3) des Potentials nach den Cole-Cole Parametern benötigt. Um diese berechnen zu können, müssen
2.3. FRÉCHET-ABLEITUNGEN

unter anderem die partiellen Ableitungen der Cole-Cole Formel ermittelt werden.

\[
\frac{\partial \sigma}{\partial \rho_0}(\omega) = \frac{-1}{\rho_0^2 \cdot \left[1 - m \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + (i\omega \tau)^\gamma}\right)\right]} \quad (2.7)
\]

\[
\frac{\partial \sigma}{\partial m}(\omega) = \frac{1 - \frac{1}{1 + (i\omega \tau)^\gamma}}{\rho_0 \cdot \left[1 - m \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + (i\omega \tau)^\gamma}\right)\right]^2} \quad (2.8)
\]

\[
\frac{\partial \sigma}{\partial \tau}(\omega) = \frac{1}{\rho_0 \cdot \left[1 - m \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + (i\omega \tau)^\gamma}\right)\right]^2} \cdot \frac{m \cdot (i\omega \tau)^\gamma}{\tau(1 + (i\omega \tau)^\gamma)^2} \quad (2.9)
\]

\[
\frac{\partial \sigma}{\partial \gamma}(\omega) = \frac{1}{\rho_0 \cdot \left[1 - m \cdot \left(1 - \frac{1}{1 + (i\omega \tau)^\gamma}\right)\right]^2} \cdot \frac{m \cdot (i\omega \tau)^\gamma \cdot \ln(i\omega \tau)}{(1 + (i\omega \tau)^\gamma)^2} \quad (2.10)
\]

2.3 Fréchet-Ableitungen

Im Kapitel 1.2 wird die Linearisierung einer Funktion \( M(c) \) (vgl. Ausdruck (1.9)) bzw. \( m(c) \) (vgl. Ausdruck (1.12)) beschrieben, um deren Minima zu ermitteln. Als wichtiges Hilfsmittel zur Berechnung einer Ableitung ist die Definition der Fréchet-Differenzierbarkeit, die einen Differenzierbarkeitsbegriff für Operatoren auf Banachräumen beschreibt.

**Definition 2**

Die Fréchet-Differenzierbarkeit

Seien \( X \) und \( Y \) Banachräume. Eine Abbildung \( f : X \rightarrow Y \) heißt Fréchet-differenzierbar an der Stelle \( x_0 \in X \), falls es eine beschränkte, lineare Abbildung \( L_{x_0} : X \rightarrow Y \) gibt, so dass

\[
f(x_0 + h) = f(x_0) + L_{x_0}h + O(\|h\|_X) \quad \text{für} \quad h \rightarrow 0.
\]

Die Abbildung \( L_{x_0} \) heißt Fréchet-Ableitung oder Linearisierung von \( f \) in \( x_0 \). Man schreibt

\[
L_{x_0} := f'(x_0).
\]

**Beispiel:**

Es sei \( A \) eine lineare, stetige Abbildung zwischen den normierten Räumen \( X \) und \( Y \). Dann gilt für ein beliebiges \( x_0 \in X \):

\[
A(x_0 + h) = Ax_0 + Ah
\]

und damit \( A'(x_0) = A \). Die Fréchet-Ableitung eines linearen stetigen Operators ist also dieser Operator selbst.

Ist insbesondere \( X = \mathbb{R}^n \) und \( Y = \mathbb{R}^m \), so lässt sich die Abbildung \( A \in L(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^m) \) durch eine
Matrix

\[ a = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \]

vom Typ \((m, n)\) darstellen. Analog gilt dies für die Ableitung: \(A'(x_0) = A = a\).

### 2.4 Implizite Funktionen

Eine implizite Funktion ist eine Funktion, die nicht in der einfachen Zuordnungsvorschrift \(y = f(x)\) gegeben ist, sondern implizit definiert ist: \(F(x, y) = 0\). Diese Gleichung definiert eine Funktion implizit dadurch, dass jedem Wert \(x\) derjenige Wert \(y(x)\) zugeordnet wird, der die Gleichung \(F(x, y(x)) = 0\) erfüllt.

Auch die in Kapitel 2.1 beschriebene Differentialgleichung kann durch eine implizite Funktion dargestellt werden.

\[ g(\sigma, u(\sigma)) := \begin{pmatrix} -\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(u)) - I \\ u \mid \Gamma_d \\ \partial_n u \mid \Gamma_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.11) \]

#### 2.4.1 Ableitung impliziter Funktionen

Bisher ist es lediglich möglich, aus einer vorgegebenen Cole-Cole Parameter Verteilung \(c\) und einer Frequenz \(\omega\) die Leitfähigkeit und somit das sich einstellende Potential zu berechnen. Für das inverse Problem wird jedoch die Ableitung des Potentials nach den Cole-Cole Parametern benötigt. Da die Funktion \(u(\sigma(c, \omega))\) nur implizit gegeben ist, wird der Satz über implizite Funktionen zu Hilfe genommen.

**Satz 1 Implizite Funktionen**

Seien \(X, Y\) und \(Z\) Banachräume über \(\mathbb{C}\), \((x_0, y_0) \in X \times Y\) und \(V(x_0, y_0)\) eine offene Umgebung mit

\[ g: V(x_0, y_0) \subset X \times Y \rightarrow Z \]

Fréchet-differenzierbar. Ist \(\partial_y g(x_0, y_0) \in L(X \times Y, Z)\) bijektiv, dann gibt es eine Umgebung \(V\), für die gilt:

1) \(\forall x \in V\) hat \(g(x, y) = 0\) genau eine Lösung \(y(x)\)
2) \(g(x)\) ist Fréchet-differenzierbar auf \(V\)
3) \(\partial_x y(x_0) \in L(X, Y)\) ist gegeben durch

\[ \partial_x y(x_0) = -\partial_y g(x_0, y(x_0))^{-1} \circ \partial_x g(x_0, y(x_0)) \]
2.5 Der adjungierte Operator

Sei $A$ derjenige Operator, der zu dem gegebenen Randwertproblem bei einer festen Frequenz $\omega$ die Cole-Cole Parameter $c_0$ auf die Ableitung des Potentials $u$ nach den Cole-Cole Parametern in $c_0$ abbildet.

$$A : c_0 \rightarrow \frac{\partial u}{\partial c}(c_0)$$ (2.12)


**Definition 3 Der adjungierte Operator**

Für einen beschränkten linearen Operator $L$ auf einem separablen Hilbert-Raum $H$ wird durch

$$\langle Lv, w \rangle = \langle v, L^*w \rangle, \quad v, w \in H,$$

der sogenannte adjungierte Operator $L^*$ definiert.

Gilt $L^* = L$, so bezeichnet man $L$ als selbstadjungiert.

Im diskreten Fall des hier untersuchten Problems ist der Operator $A$ eine (komplexe) Matrix. Der adjungierte Operator $A^*$ ist die hermitesche Matrix zu $A$:

$$A^* = A^H$$ (2.13)

2.6 Der Satz von Gauß

Mit Hilfe des *Satzes von Gauß* lässt sich das Integral über die Divergenz eines Vektorfeldes leichter berechnen. Er stellt eine Beziehung zwischen einem $n$-dimensionalen und einem $n-1$ – dimensionalen Integral her. In dieser Arbeit wird ein zwei-dimensionales Integral auf ein ein-dimensionalnes zurückgeführt.

**Satz 2 Integralsatz von Gauß**

Gegeben seien eine vektorielle Ortsfunktion $\vec{p}(\vec{r})$ auf einem geschlossenen zwei-dimensionalen Gebiet $\Omega$, das durch dessen stückweise stetig differenzierbaren Rand $\partial \Omega$ begrenzt ist, sowie der äußere Normalenvektor $\nu$ auf diesem Rand. Dann gilt:

$$\int_{\Omega} \text{div}(\vec{p}) \, dA = \int_{\partial \Omega} \langle \vec{p}, \nu \rangle \, ds$$

Die in einem Volumen aus den Quellen des Vektorfeldes erzeugten Vektoren müssen durch dessen
Oberfläche hindurchtreten. Integriert man die aus dem Volumen austretenden Vektoren über die gesamte Oberfläche, dann muss man gerade den im Innern des Volumens erzeugten Strom erhalten.

**Beispiel:**

Gegeben sei das Gebiet $\Omega$ und das Vektorfeld $p$ mit

$$
\Omega = (0, 2) \times (0, 1), \quad p(x, y) = \begin{pmatrix}
  x^2 \cdot y \\
  x \cdot y^2
\end{pmatrix}
$$

Abbildung 2.1: Gebiet $\Omega$ mit Normalenvektoren $\nu_i$ auf den Rändern

Gesucht ist das Volumen des Vektorfeldes über dem Gebiet.

- **direkte Berechnung**

Mit

$$
\text{div}(p(x, y)) = \partial_x p_x(x, y) + \partial_y p_y(x, y) = 2 \cdot xy + 2 \cdot xy = 4 \cdot xy
$$

folgt für das Integral:

$$
\int_{\Omega} \text{div}(p) \, dA = \int_{\Omega} \text{div}(p) \, dx \, dy = \int_0^2 \int_0^1 \text{div} \left( \begin{pmatrix}
  x^2 \cdot y \\
  x \cdot y^2
\end{pmatrix} \right) \, dx \, dy
$$

$$
= \int_0^2 \int_0^1 4 \cdot x \cdot y \, dx \, dy = 4 \cdot \int_0^2 x \, dx \cdot \int_0^1 y \, dy
$$

$$
= 4 \cdot \left[ \frac{x^2}{2} \right]_0^2 \cdot \left[ \frac{y^2}{2} \right]_0^1 = 4
$$
2.7 Das ADI-Verfahren

Das ADI-Verfahren (alternating direction implicit) wurde speziell für die Lösung von Differentialgleichungen im Mehrdimensionalen entwickelt. Liegt ein großes zwei-dimensionales Problem vor, zerlegt das ADI-Verfahren dieses in zwei kleinere ein-dimensionale Probleme. Dabei wird ein Zeitschritt des Problems in zwei Halbschritte aufgeteilt. Im ersten Halbschritt wird in x-Richtung explizit und in y-Richtung implizit gerechnet und im zweiten Halbschritt umgekehrt.

Beispiel:

Gegeben ist die 2D-Diffusionsgleichung

\[ u_t = u_{xx} + u_{yy} \]  \hspace{1cm} (2.14)

und deren diskrete Form

\[ u_t = A_1 u + A_2 u. \]  \hspace{1cm} (2.15)

Zerlege das zwei-dimensionale Problem in zwei (einfachere) ein-dimensionale Probleme. Die Näherungen \( u^n \) sind zeitabhängig (\( t^n = t^0 + n \cdot \Delta t \)) und werden iterativ bestimmt:

\[
\frac{u^{n+1} - u^n}{\Delta t} = \frac{1}{2}(A_1 u^{n+1} + A_2 u^{n+1}) + \frac{1}{2}(A_1 u^n + A_2 u^n) + O(\Delta t^2)
\]  \hspace{1cm} (2.16)
bzw.

\[ \left( I - \frac{\Delta t}{2} A_1 - \frac{\Delta t}{2} A_2 \right) u^{n+1} = \left( I + \frac{\Delta t}{2} A_1 + \frac{\Delta t}{2} A_2 \right) u^n + O(\Delta t^3) \]  
(2.17)

Durch Umformen ergibt sich:

\[ \left( I - \frac{\Delta t}{2} A_1 \right) \cdot \left( I - \frac{\Delta t}{2} A_2 \right) u^{n+1} = \left( I + \frac{\Delta t}{2} A_1 \right) \cdot \left( I + \frac{\Delta t}{2} A_2 \right) u^n + O(\Delta t^2) \]  
(2.18)

Zur Lösung dieses Systems wird die Näherung \( v \) in zwei Schritten ermittelt:

\[ \left( I - \frac{\Delta t}{2} A_1 \right) v^{n+\frac{1}{2}} = \left( I + \frac{\Delta t}{2} A_2 \right) v^n \]  
(2.19)

und

\[ \left( I - \frac{\Delta t}{2} A_2 \right) v^{n+1} = \left( I + \frac{\Delta t}{2} A_1 \right) v^{n+\frac{1}{2}} \]  
(2.20)
Kapitel 3

Diskretisierung des Randwertproblems

3.1 Einleitung

Aus Kapitel 2.1 ist bekannt, dass das Randwertproblem im 2D-Fall folgende Form besitzt:

\[
-\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(u)) = I \quad \text{in } \Omega \tag{3.1}
\]
\[
u = 0 \quad \text{auf } \Gamma_d \tag{3.2}
\]
\[
\partial_n u = 0 \quad \text{auf } \Gamma_n \tag{3.3}
\]

Die Operatoren Divergenz und Gradient werden mit Hilfe der zentralen finiten Differenzen approximiert. Die einzelnen Berechnungen werden auf verschiedenen äquidistanten Gittern durchgeführt. Hierbei wird zwischen drei verschiedenen Gittern unterschieden:

- **u-Gitter:** diskrete Form des Potentials (vgl. Abbildung 3.1)
- **p-Gitter:** Produkt aus diskretem Gradienten und der diskreten Leitfähigkeit (vgl. Abbildung 3.3)
- **f-Gitter:** diskrete Form des injizierten Stroms (vgl. Abbildung 3.4)

Die Auflösung aller Gitter wird durch den Approximationsgrad des u-Gitters bestimmt, welches in \( n_x \times n_y \) Gitterpunkte unterteilt werden soll. Die Abstände der einzelnen Punkte sind bei allen drei Gittern gleich,

\[
h_x := \frac{x_2 - x_1}{n_x} \quad \text{und} \quad h_y := \frac{y_2 - y_1}{n_y} \tag{3.4}
\]

wobei \( x_1 \) und \( x_2 \) die Begrenzungen des Gebiets in x- bzw. \( y_1 \) und \( y_2 \) die Begrenzungen in y-Richtung sind.
Da jeder Operator diskretisiert werden muss, werden sowohl der Gradient als auch die Divergenz durch ein Matrix-Vektor Produkt dargestellt. Auch die Multiplikation mit der Leitfähigkeit und die rechte Seite des Randwertproblems werden durch Matrizen ausgedrückt. Somit wird die kontinuierliche Gleichung (3.1) in die diskrete Gleichung

$$-D \cdot A \cdot G \cdot u = F$$

überführt.

**Erläuterung:**

\[D\] : Matrix für die diskrete Divergenz

\[A\] : Matrix, in der die Leitfähigkeiten eingetragen sind

\[G\] : Matrix für den diskreten Gradienten

\[F\] : Matrix der diskreten rechten Seite

Um die Randbedingungen zu erfüllen, wird eine weitere Matrix \(B\) benötigt, die die Dirichlet-Ränder erzwingen soll. Es ergibt sich das vollständige Gleichungssystem

$$-D \cdot A \cdot G \cdot u + B \cdot u = F.$$  \tag{3.6}

Die Matrizen \(D, G\) und \(B\) sind bei einer festen Gittereinteilung (siehe Kapitel 3.2) konstant. Die Matrizen \(A\) und \(F\) ändern sich je nach Leitfähigkeit \(\sigma\) bzw. rechter Seite \(I\). Somit lässt sich das diskrete Problem

\[
(-D \cdot A(\sigma) \cdot G + B) \cdot u = F(I)
\]

in die vereinfachte Gleichung

$$R(\sigma) \cdot u(\sigma) = F(I)$$  \tag{3.7}

umformen.

Im Folgenden wird nun erläutert, wie die einzelnen Matrizen aufgestellt werden. Um ein besseres Verständnis zu erlangen, werden alle Matrizen anhand eines kleinen Beispiels berechnet. Hierzu wird das Gebiet in ein äquidistantes Gitter der Größe \(n_x \times n_y = 4 \times 3 = n_y\) eingeteilt (vgl. Kapitel 3.2).

**Bemerkung:**

Zur Vereinfachung der Diskretisierung werden zunächst alle Stromquellen genau auf den Gitterpunkten positioniert. Dies hat den Vorteil, dass sich die diskrete rechte Seite \(F(I)\) sehr leicht ermitteln lässt. In Kapitel 3.10.1 wird die beliebige Positionierung der Stromquellen in \(\Omega\) erläutert.
3.2 Einteilung des Gebietes in ein äquidistantes Gitter

Um eine diskrete Variante der in Kapitel 2.1 beschriebenen Differentialgleichung zu erhalten, wird das Gebiet Ω zunächst durch ein äquidistantes Gitter beschrieben. Dieses Gitter wird durch die Anzahl der Punkte \( n_x \) in x-Richtung und \( n_y \) in y-Richtung definiert. Somit wird das kontinuierliche Potential \( u \) durch \( n_x \cdot n_y \) diskrete u-Gitterpunkte (vgl. Abbildung 3.1) approximiert. Je größer die Anzahl der Punkte ist, desto feiner wird das Gitter und desto besser wird das Potential angenähert.

![äquidistantes u-Gitter auf Ω, \( n_x = 4, n_y = 3 \)](image)

Abbildung 3.1: äquidistantes u-Gitter auf Ω, \( n_x = 4, n_y = 3 \)

**Bemerkung:**

Sowohl bei den Zeichnungen als auch bei den Herleitungen der Matrizen werden die Gitterpunkte ähnlich einer Matrix durchnummeriert (siehe Abbildung 3.1). Dies erleichtert das Verständnis beim Aufstellen der diskreten Gleichungen.

Intern wird das u-Gitter jedoch auf einem Vektor abgespeichert:

\[
\begin{pmatrix}
  u_{31} & u_{32} & u_{33} & u_{34} \\
  u_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\
  u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14}
\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}
  u_9 & u_{10} & u_{11} & u_{12} \\
  u_5 & u_6 & u_7 & u_8 \\
  u_1 & u_2 & u_3 & u_4
\end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix}
  u_1 \\
  u_2 \\
  \vdots \\
  u_{11} \\
  u_{12}
\end{pmatrix}
\] (3.9)

Somit werden auch alle weiteren Gittergrößen, wie z.B. der Gradient des Potentials, durch einen Vektor dargestellt. Im Folgenden werden daher zunächst alle Herleitungen und Bilder zum besseren Verständnis an einer Gitterstruktur verdeutlicht, die Matrizen-Aufstellung jedoch anhand des durchnummerierten Vektors.
3.3 Diskretisierung des Gradienten


Die partielle Ableitung in x- bzw. in y-Richtung wird mit Hilfe der zentralen finiten Differenzen über u bestimmt und ist wie folgt definiert:

\[
\frac{\partial}{\partial x} u_{ij} \approx g_{x ij} = \frac{1}{h_x} \cdot (u_{i,j+1} - u_{ij}) \tag{3.10}
\]

\[
\frac{\partial}{\partial y} u_{ij} \approx g_{y ij} = \frac{1}{h_y} \cdot (u_{i+1,j} - u_{ij}) \tag{3.11}
\]

Somit lässt sich der Gradient durch eine einfache Matrix-Vektor Multiplikation approximieren:

\[
\text{grad}(u) = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} u \\ \frac{\partial}{\partial y} u \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} G_x \\ G_y \end{pmatrix} \cdot u = G \cdot u \tag{3.12}
\]

Die beiden Matrizen \(G_x\) und \(G_y\) sind dünn besetzt. Es sind 2-Band Matrizen, da der Gradient nur von dem rechten und linken bzw. oberen und unteren Wert des u-Gitters (vgl. Abbildung 3.1) abhängt. Somit ist die zusammengefasste Matrix G eine 4-Band Matrix. In der internen Schreibweise (Potential u als Vektor) sind die einzelnen Gitterpunkte des Gradi-
### 3.3. Diskretisierung des Gradienten

entspricht nun wie folgt angeordnet:

\[
\begin{pmatrix}
g_{x1} & g_{x2} & g_{x3} \\
g_{x1} & g_{x2} & g_{x3} \\
g_{x1} & g_{x1} & g_{x1} \\
g_{y1} & g_{y1} & g_{y1} \\
g_{y2} & g_{y2} & g_{y2} \\
g_{y2} & g_{y2} & g_{y2} \\
\end{pmatrix}
\Rightarrow
\begin{pmatrix}
g_7 & g_8 & g_9 \\
g_4 & g_5 & g_6 \\
g_1 & g_2 & g_3 \\
g_{14} & g_{15} & g_{16} & g_{17} \\
g_{10} & g_{11} & g_{12} & g_{13} \\
g_{10} & g_{11} & g_{12} & g_{13} \\
\end{pmatrix}
\Rightarrow
\begin{pmatrix}
g_{1} \\
g_{2} \\
\vDash \\
g_{16} \\
g_{17} \\
\end{pmatrix}
\]

Somit läßt sich der Vektor \( \mathbf{g} \) in dem \( 4 \times 3 \) Beispiel folgendermaßen berechnen:

\[
\begin{pmatrix}
g_1 \\
g_2 \\
\vDash \\
g_{16} \\
\end{pmatrix}
= \begin{pmatrix}
G_x \\
G_y \\
\end{pmatrix}
\cdot \begin{pmatrix}
u_1 \\
u_2 \\
\vDash \\
u_{11} \\
u_{12} \\
\end{pmatrix}
\]

mit

\[
G = \begin{pmatrix}
-\frac{1}{h_x} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -\frac{1}{h_x} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & \frac{1}{h^2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & \frac{1}{h^2} & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & \frac{1}{h^2} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{h_x} \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\end{pmatrix}
\]

Die Dimension dieser Matrix ist \( 17 \times 12 \). Es gibt neun partielle Ableitungen in \( x \)- und acht in \( y \)-Richtung, die mit Hilfe der zwölf \( u \)-Gitterpunkte berechnet werden.
3.4 Diskretisierung der Leitfähigkeit

Wie in der Abbildung 3.2 zu sehen ist, ist der Gradient in der Mitte der Gitterkanten zwischen zwei u-Gitterpunkten definiert. Da im Randwertproblem das Produkt aus der Leitfähigkeit \( \sigma \) und dem Gradienten gebildet werden muss, ist es demnach sinnvoll, die diskreten Leitfähigkeiten an exakt den gleichen Koordinaten zu positionieren. Nun kann punktweise das Produkt berechnet werden, so dass sich ein p-Gitter ergibt, das genau wie das Gradienten-Gitter angeordnet ist und wie folgt definiert wird:

\[
p_{x \ i, j} := \sigma_{x \ i, j} \cdot g_{x \ i, j} \quad i = 1, \ldots, n_x - 1 \quad j = 1, \ldots, n_y
\]

\[
p_{y \ k, l} := \sigma_{y \ k, l} \cdot g_{y \ k, l} \quad k = 1, \ldots, n_x \quad l = 1, \ldots, n_y - 1
\]

Um diese Produkte zu ermitteln, werden zwei Hilfsmatrizen \( A_x \) und \( A_y \) definiert, auf deren Diagonalen die Leitfähigkeiten der x- bzw. y-Kanten eingetragen sind:

\[
\sigma \cdot \text{grad}(u) \approx \begin{pmatrix} A_x & 0 \\ 0 & A_y \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} G_x \\ G_y \end{pmatrix} \cdot u = A \cdot G \cdot u \quad (3.15)
\]

Für das mitgeführte \( 4 \times 3 \) Beispiel wird der Vektor \( p \) durch

\[
\begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_{16} \\ p_{17} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_9) & 0 \\ 0 & \text{diag}(\sigma_{10}, \ldots, \sigma_{17}) \end{pmatrix} \cdot G \cdot u
\]

berechnet.

3.5 Diskretisierung der Divergenz

Die Divergenz ist ein Differential-Operator eines Vektorfeldes. Im zwei-dimensionalen Fall lässt sie sich durch die vier benachbarten Punkte berechnen. Da ein Divergenz-Punkt \( d_{ij} \) genau in der Mitte der vier umliegenden p-Gitterpunkte liegt (vgl. Abbildung 3.3), wird das Divergenz-Gitter wieder auf das ursprüngliche u-Gitter abgebildet.

Hierbei ist jedoch zu beachten, dass die Divergenz (zunächst) \(^1\) nur in den inneren Gitterpunkten von \( \Omega \) berechnet werden kann, da die Randpunkte des Gitters keine vier Nachbarn besitzen. Daher wird in diesen Punkten die diskrete Divergenz auf den Wert 0 gesetzt.

\(^1\)In diesem Kapitel wird lediglich die Divergenz im Inneren des Gebietes \( \Omega \) berechnet. Um die Neumann-Bedingung zu erfüllen, muss auch an \( \Gamma_n \) die Divergenz approximiert werden. Genaueres wird in Kapitel 3.7.1 erläutert.
3.5. DISKRETISIERUNG DER DIVERGENZ

Die Divergenz lässt sich wie folgt approximieren:

\[
\begin{align*}
    d_{ij} &= \begin{cases} 
    \frac{1}{h_x}(p_{x,i,j} - p_{x,i,j-1}) + \frac{1}{h_y}(p_{y,i,j} - p_{y,i-1,j}) & i = 2 \ldots n_y - 1 \\
    0 & \text{sonst}
    \end{cases} \\
    &+ \frac{1}{h_x}(p_{x,i,j} - p_{x,i-1,j}) + \frac{1}{h_y}(p_{y,i,j} - p_{y,i-1,j}) \\
    i &= 2 \ldots n_x - 1 \\
    j &= 2 \ldots n_y - 1
\end{align*}
\]

(3.16)

Da alle Gitterpunkte äquidistant angeordnet sind, werden sowohl zur Berechnung des Gradienten als auch zur Bestimmung der Divergenz die zentralen Differenzenquotienten ermittelt. Dies führt dazu, dass der Ausdruck \(-\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(u))\) durch eine Approximation 2. Ordnung diskretisiert wird.

\[
D \cdot p = \begin{pmatrix}
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & -\frac{1}{h_x} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
    0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
    p_1 \\
    p_2 \\
    \vdots \\
    p_{16} \\
    p_{17}
\end{pmatrix}
\]
Jeder innere Divergenz-Gitterpunkt \( d_{ij} \) lässt sich aus vier Gradientenkomponenten darstellen. Da diese vier Gradienten aus nur fünf \( u \)-Gitterpunkten ermittelt werden, ist

\[
L(\sigma) := -D \cdot A(\sigma) \cdot G
\]
eine 5 Band Matrix.

Bei einer Leitfähigkeit \( \hat{\sigma} \) konstant \( 1 \, \Omega^{-1} \) und den Abmessungen \( x = 1 \, m, \, y = 2 \, m \) besitzt \( L(\hat{\sigma}) \) im mitgeführten Beispiel folgende Form:

\[
L(\hat{\sigma}) = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & 0 & 0 & -9 & 20 & -9 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -9 & 20 & -9 & 0 & 0 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
\]

Bemerkung:
Um die Neumann-Bedingungen in die diskrete Variante einzubringen, wird die Matrix \( D \) und somit auch \( L(\sigma) \) um einige Einträge erweitert. Eine detaillierte Beschreibung der Änderungen wird in Kapitel 3.7.1 angegeben.

### 3.6 Diskretisierung der rechten Seite der Differentialgleichung

Die rechte Seite \( I \) der Differentialgleichung (siehe Kapitel 2.1) repräsentiert den eingeleiteten Strom. Die einzelnen Stromquellen sind \( \delta \)-Quellen und sind (zunächst\(^1\)) genau auf einem Gitterpunkt positioniert. Hierbei ist zu beachten, dass das \( f \)-Gitter der diskreten rechten Seite (vgl. Abbildung 3.4) identisch ist mit dem \( u \)-Gitter.

---

\(^1\)Eine allgemeine Positionierung ist in Kapitel 3.10.1 beschrieben.
Eine $\delta$-Quelle ist dadurch charakterisiert, dass das Integral über diese Quelle identisch 1 ist.

\[ \int_\Omega \delta = 1 \] (3.17)

Diese Eigenschaft soll auch die diskrete rechte Seite $F$ besitzen. Nur an den Gitterpunkten, an denen sich eine $\delta$-Quelle befindet, soll ein Wert $\neq 0$ stehen. Um die Bedingung (3.17) zu erfüllen, muss dieser Wert die Größe $\frac{1}{h_x \cdot h_y}$ besitzen (siehe Kapitel 3.10.1).

Somit kann man bei einer beliebigen Anzahl an $\delta$-Quellen auf dem Gitter eine diskrete rechte Seite $F$ ermitteln. Dies wird in dem mitgeführten Beispiel anhand zwei frei angeordneter $\delta$-Quellen verdeutlicht.

Abbildung 3.4: Diskretisierung der rechten Seite des RWP bei zwei $\delta$-Quellen

Bei dieser Konstellation der zwei $\delta$-Quellen und einer Durchnummierung des Vektors entsprechend Ausdruck (3.9) besitzt die diskrete rechte Seite $F$ bei dem $4 \times 3$ Beispiel folgende Form:

\[
F = \begin{pmatrix}
  f_{11} & f_{12} & f_{13} & f_{14} \\
  f_{21} & f_{22} & f_{23} & f_{24} \\
  f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34}
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
  0 & 0 & 0 & 0 \\
  0 & 0 & 0 & 0 \\
  0 & -\frac{1}{h_x \cdot h_y} & 0 & 0 \\
  0 & 0 & \frac{1}{h_x \cdot h_y} & 0 \\
  0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
\]
3.7 Die diskreten Randbedingungen

Im letzten Schritt der Diskretisierung des elliptischen Randwertproblems müssen noch die Randbedingungen eingebracht werden. Diese lauten wie folgt:

\begin{align*}
  u &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_d \\
  \partial_{\nu} u &= 0 \quad \text{auf } \Gamma_n
\end{align*}  

(3.18)  

(3.19)

Hierbei ist zu beachten, dass die Dirichlet-Bedingung (3.18) numerisch anders behandelt wird als die Neumann-Bedingung (3.19).


3.7.1 Neumann Bedingung

Die Neumann-Bedingung besagt, dass die Normalen-Ableitung des Potentials am oberen Rand des Gebietes Ω gleich 0 ist. Um diese Bedingung diskret erfüllen zu können, wird das Randwertproblem gedanklich gespiegelt und auf ein doppelt so großes Randwertproblem überführt:

Das Gebiet Ω und die rechte Seite \( I \) des Randwertproblems werden am oberen Neumann-Rand gespiegelt. Somit existiert an allen Rändern des doppelt so großen Gebietes Ω* nur noch die Dirichlet-Bedingung. Die Normalen-Ableitung \( \partial_{\nu} u = 0 \) ist nunmehr eine partielle Ableitung in-
3.7. DIE DISKREten RANDbedingungen

innerhalb des Gebietes.
Diese partielle Ableitung an der Spiegelachse lässt sich durch eine Approximation 2.Ordnung darstellen:

\[ \partial_y u_{m,j} \approx \frac{u_{m+1,j} - u_{m,j-1}}{2 \cdot h_y} \]

Durch die Symmetrieigenschaft des Randwertproblems ist auch die Lösung des doppelt so großen Randwertproblems eine Spiegelung des ursprünglichen Randwertproblems. Demnach ist

\[ u_{m+1,j} = u_{m,j-1} \]

und die Bedingung der partiellen Ableitung an der Spiegelachse erfüllt.
Des Weiteren ist es nun auch möglich, die diskrete Divergenz an der Spiegelachse auszurechnen (siehe Kapitel 3.5):

\[ \text{div}(u_{mj}) = \frac{1}{h_x} (p_{x m,j} - p_{x m,j-1}) + \frac{1}{h_y} (p_{y m,j} - p_{y m,j-1}) \]

Der Summand \( \frac{1}{h_x} (p_{x m,j} - p_{x m,j-1}) \) ist für das ursprüngliche Gebiet \( \Omega \) wohl definiert. Lediglich der zweite Summand beinhaltet zunächst einen Punkt, der nicht in \( \Omega \) liegt. Aber auch hier kann man sich die Symmetrieigenschaft zu Nutze machen.

Abbildung 3.6: diskretes Gitter am Neumann-Rand (vergrößert)
Es ergibt sich für den zweiten Summanden:

\[
\frac{1}{h_y}(p_{y,m,j} - p_{y,m-1,j})
\]

\[
= \frac{1}{h_y} \left( \frac{1}{h_y} \cdot \sigma_{y,m,j} \cdot (u_{m+1,j} - u_{m,j}) - \frac{1}{h_y} \cdot \sigma_{y,m-1,j} \cdot (u_{m,j} - u_{m-1,j}) \right)
\]

\[
= \frac{1}{h_y} \left( \sigma_{y,m,j} \cdot (u_{m+1,j} - u_{m,j}) + \sigma_{y,m-1,j} \cdot (u_{m,j} - u_{m-1,j}) \right)
\]

\[
\text{Symm.} \quad \frac{1}{h_y} \cdot \sigma_{y,m-1,j} \cdot (u_{m,j} - u_{m-1,j})
\]

\[
\text{Symm.} \quad \frac{1}{h_y} \cdot (-2) \cdot p_{y,m-1,j}
\]

(3.20)

(3.21)

(3.22)

(3.23)

(3.24)

(3.25)

Alle diese Überlegungen sind lediglich ein Gedankenspiel. Zur Lösung des ursprünglichen Randwertproblems muss nicht ein doppelt so großes Randwertproblem berechnet werden. Durch die Berechnung der Divergenz am Neumann-Rand \( \Gamma_n \) mittels der in \( \Omega \) befindlichen Punkte wird die Neumann-Bedingung des Randwertproblems erfüllt. Es muss lediglich der fiktive Punkt \( p_{y,m,j} \), der sich außerhalb des Gebietes \( \Omega \) befinden würde, durch seinen symmetrischen Bruder \( p_{y,m-1,j} \) ersetzt werden. Somit lässt sich die Divergenz am Neumann-Rand wie folgt berechnen:

\[
\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(u))_{m,j} \approx \frac{1}{h_x} \cdot (p_{x,m,j} - p_{x,m-1}) + \frac{-2}{h_y} \cdot p_{y,m-1,j} \quad , \quad u_{mj} \in \Gamma_n
\]

(3.26)

Diese Berechnung führt zu neuen Einträgen in der D-Matrix, die in dem 4×3 Beispiel nun folgende Form besitzt:

\[
D = \begin{pmatrix}
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0
\end{pmatrix}
\]
3.7.2 Dirichlet-Bedingung

Die Dirichlet-Bedingung besagt, dass das Potential am Rand den Wert 0 besitzt. Somit muss auch das lineare Gleichungssystem der diskreten Lösung so aufgebaut sein, dass auch bei der Lösung

\[ u = R(\sigma)^{-1} \cdot F \]  

alle Werte auf dem Dirichlet-Rand diese Bedingung erfüllen. Die in dem Gleichungssystem

\[ R(\sigma) \cdot u = (L(\sigma) + B) \cdot u = F \]  

befindliche Matrix B ist für die Einhaltung der Dirichlet-Bedingung zuständig. Da die Divergenzen nur innerhalb des Gebietes Ω und auf dem Neumann-Rand definiert sind, sind deren diskrete Werte auf dem Dirichlet-Rand 0. Dies führt (vereinfacht) im diskreten Fall zu einer Gleichung:

\[ L(\sigma) \cdot u_k = 0, \quad u_k \in \Gamma_d \]  

Da es numerisch nicht sinnvoll ist, eine δ-Quelle in die Nähe des Dirichlet-Randes zu setzen (vgl. 2.1), kann man den Strom auf \( \Gamma_d \) gleich 0 setzen.

\[ f_k = 0, \quad f_k \in \Gamma_d \]  

Somit ergibt sich ein Problem, da für jeden Wert von \( u_k \) die Gleichung

\[ L(\sigma) \cdot u_k = 0, \quad u_k \in \Gamma_d \]  

erfüllt ist. Um nun den Wert \( u_k \) gleich 0 zu erzwingen, muss der Eintrag aus der Matrix B ins Spiel kommen. Vereinfacht sieht das folgendermaßen aus:

\[ R(\sigma) \cdot u_k = L(\sigma) \cdot u_k + b \cdot u_k = (0 + b) \cdot u_k = 0, \quad u_k \in \Gamma_d \]  

Ist \( b \neq 0 \), muss \( u_k \) den Wert 0 annehmen, damit die Gleichung (3.32) erfüllt ist.

Somit kann man die Matrix B des diskreten Randwertproblems als Diagonalmatrix aufstellen, auf deren Diagonalen \( b_k \) der Wert 1 steht, wo sich das Potential \( u_k \) auf dem Dirichlet-Rand befindet.

\[ B = \text{diag}(b_k) \]  

mit

\[ b_k = \begin{cases} 
1, & u_k \in \Gamma_d \\
0, & \text{sonst} 
\end{cases} \]  

Anders ausgedrückt bedeutet dies, dass jede Nullzeile \( z_k \) von \( L(\sigma) \) eine 1 im Diagonalelement \( L_{kk} \) eingetragen bekommt. Somit ist die Matrix \( R(\sigma) \) regulär.
Im 4 × 3 Beispiel sieht die Matrix B wie folgt aus:

\[
B = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
\end{pmatrix}
\]

3.8 Zusammenfassung aller Diskretisierungen

Nachdem jeder Operator als Matrix aufgebaut wurde, kann nun bei gegebener Leitfähigkeit \( \sigma \) die gesamte Matrix \( R(\sigma) \) berechnet werden. Diese Matrix ist immer regulär und ist (im zweidimensionalen Modell) durch fünf Bänder charakterisiert. Durch die gewählte Nummerierung des u-Gitters ist eine Matrix entstanden, die dünn besetzt ist und deren Nebendiagonalen jeweils paarweise gleich sind. Lediglich die Neumann-Bedingung verfälscht diese Aussagen ein wenig. Somit besitzt die linke Seite des Gleichungssystems bei einer konstanten Leitfähigkeit \( \hat{\sigma} \) von 1 \( \Omega^{-1} \), den Abmessungen \( x = 1m, y = 2m \) und einer Einteilung in \( n_x = 4 \times 3 = n_y \) folgende Form:

\[
R(\hat{\sigma}) \cdot u = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & 0 & 0 & -9 & 20 & -9 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -9 & 20 & -9 & 0 & 0 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -9 & 20 & -9 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 0 & -9 & 20 & -9 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
u_1 \\
u_2 \\
u_3 \\
u_4 \\
u_5 \\
u_6 \\
u_7 \\
u_8 \\
u_9 \\
u_{10} \\
u_{11} \\
u_{12}
\end{pmatrix}
\]
3.9. APPROXIMIERTE LÖSUNGEN EINIGER VORWÄRTSPROBLEME

3.8.1 Zusammenhang Beispiel-Matrix und Randwertproblem

Für das mitgeführte Beispiel existieren nun folgende Zusammenhänge zwischen der Matrix \( R(\hat{\sigma}) \) und den Gitterpunkten des Randwertproblems:

\[
R(\hat{\sigma}) = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 &
3.9.1 Lösung eines Vorwärtsproblems bei grober Auflösung

Im ersten Beispiel werden zwei $\delta$-Quellen mitten in $\Omega$ positioniert.

Abbildung 3.7: Positionierung der $\delta$-Quellen in $\Omega$

Bei einer groben Gitterauflösung von $n_x = 11 \times 6 = n_y$ kann das kontinuierliche Potential $u$ nur sehr grob angenähert werden.

Abbildung 3.8: diskretes Potential bei grober Auflösung

Trotz der geringen Auflösung kann man erkennen, dass die Potentiale am Dirichlet-Rand den Wert 0 besitzen, während am Neumann-Rand Werte $\neq 0$ ermittelt wurden. Da sich die beiden $\delta$-Quellen lediglich in ihrem Vorzeichen unterscheiden, erkennt man in den approximierten Lösungen zwei etwa gleich hohe Erhebungen.
3.9.2 Lösung eines Vorwärtsproblems bei feiner Auflösung

In diesem Beispiel werden die gleichen Positionen der δ-Quellen wie im Beispiel 3.9.1 verwendet. Eine feinere Auflösung des Gitters \((n_x = 51 \times 31 = n_y)\) liefert eine deutlich exaktere Approximation der Lösung des kontinuierlichen Vorwärtsproblems.

\[\text{Abbildung 3.9: diskretes Potential bei feiner Auflösung}\]

3.9.3 Positionierung einer δ-Quelle am Neumann-Rand

In diesem Beispiel wird bei einer Auflösung von \(n_x = 51 \times 31 = n_y\) eine δ-Quelle direkt auf dem Neumann-Rand positioniert.

\[\text{Abbildung 3.10: Positionierung einer δ-Quelle am Neumann-Rand}\]
Hier wird gezeigt, dass auch am Neumann-Rand die diskrete Lösung die Randbedingung erfüllt.

Abbildung 3.11: diskretes Potential mit δ-Quelle am Neumann-Rand

3.9.4 Mehrere δ-Quellen in Ω

Auch wenn mehrere (vier) δ-Quellen eingeschaltet sind, ermittelt das diskrete Randwertproblem eine gute Approximation.

Abbildung 3.12: diskretes Potential bei vier δ-Quellen
3.10 Verfeinerung

Bei dem Feldversuch des Forschungszentrums Jülich werden die Elektroden/Messsonden an festen Stellen angebracht und zunächst nicht mehr bewegt. Damit stellt sich das Problem, dass je nach Auflösung des äquidistanten Gitters sowohl die Elektroden als auch die Messsonden nicht zwingend auf den Gitterpunkten liegen.


Ebenso muss der abgegebene Strom auf das diskrete f-Gitter (vgl. 3.6) aufgeteilt werden. Liegt die Elektrode nicht genau auf einem Gitterpunkt (siehe Abbildung 3.13), wird die δ-Quelle entsprechend auf die vier umliegenden Gitterpunkte verteilt. Genaueres ist in Kapitel 3.10.1 zu lesen.

Des Weiteren kann man mit Hilfe mehrerer verschiedener Versuchsdurchführungen (Versuchsaufbauten) mehr Informationen erhalten. Durch die Wahl verschiedener Frequenzen (Kapitel 3.10.3) und einer Reihe verschiedener Messungen (Kapitel 3.10.4) kann man Daten generieren, die später zu einer genaueren Lösung des inversen Problems führen sollen.

3.10.1 Beliebige Positionierung der δ-Quellen

In der geoelektrischen Widerstandstomographie ist die Gewinnung von relevanten Daten zunächst sehr gering. Demnach ist es sehr wichtig, die Eingangsdaten möglichst genau zu behandeln. So werden die Elektroden im realen Versuch an festen Stellen positioniert und dann nicht mehr verändert.

Da die Elektrode in der Regel nicht genau auf einem f-Gitterpunkt (vgl. Kapitel 3.6) liegt, muss der abgegebene / aufgenommene Strom auf die vier umliegenden Punkte des diskreten Gitters aufgeteilt werden.

Sei nun eine δ-Quelle nicht auf einem Gitterpunkt gelegen (vgl. Abbildung 3.13). Bei der Verteilung des Stromes auf die vier entsprechenden Gitterpunkte muss beachtet werden, dass das Integral über diese verteilte Quelle identisch 1 ist.

\[ \int_{\Omega} \delta_{\text{diskret}} = 1 \]  

(3.34)

Um dies auch in der Approximation zu erreichen, werden die diskreten Werte mit Hilfe einer Hüttchen-Funktion (siehe Abbildung 3.16) ausgewertet. Zum besseren Verständnis wird diese Verteilung zunächst im ein-dimensionalen Fall dargestellt und später auf das zwei-dimensionale Problem erweitert.

- 1 dimensional

Abbildung 3.14: δ-Quelle beliebig in Ω (1 D)

Um die Verteilung der δ-Quelle auf die beiden f-Gitterpunkte zu ermitteln, wird über jedem dieser Punkte ein Rechteck der Breite h aufgebaut.

Abbildung 3.15: Rechtecke über diskrete Gitterpunkte definieren

Die Höhen \( f_1 \) und \( f_2 \) sind abhängig von dem Abstand der δ-Quelle zu den Gitterpunkten.
Demnach wird als erstes eine Gewichtung von
\[ \hat{f}_1 = \frac{h - x_1}{h}, \quad \hat{f}_2 = \frac{h - x_2}{h} \]
vermutet. Berechnet man mit diesen Werten nun die Fläche
\[ A := \hat{f}_1 \cdot h + \hat{f}_2 \cdot h = \left( \frac{x_2}{h} + \frac{x_1}{h} \right) \cdot h = h \]
(3.35)
ist die Bedingung (3.34) nicht erfüllt. Setzt man nun für die Höhen
\[ f_1 = \frac{1}{h} \cdot \frac{h - x_1}{h} = \frac{1}{h} \cdot \frac{x_2}{h} \]
(3.36)
\[ f_2 = \frac{1}{h} \cdot \frac{h - x_2}{h} = \frac{1}{h} \cdot \frac{x_1}{h} \]
(3.37)
so ist die Fläche der Rechtecke identisch 1.
Diese Höhen können mit Hilfe einer Hüttchen-Funktion berechnet werden.

Abbildung 3.16: Hüttchen-Funktion über δ-Quelle (1 D)

Die Breite der Hüttchen-Funktion ist \( 2 \cdot h \), da der Wert der δ-Quelle auf zwei diskrete f-Gitterpunkte aufgeteilt werden soll. Lediglich die Höhe \( f \) und somit die gesuchten Werte \( f_1 \) und \( f_2 \) des Gitters sind unbekannt. Doch diese Höhe \( f \) kann mit Hilfe des Strahlensatzes ermittelt werden:
\[ \frac{f_1}{x_2} = \frac{f}{h} \quad \text{bzw.} \quad \frac{f_2}{x_1} = \frac{f}{h}. \]
(3.38)
Es ergibt sich
\[ f = \frac{f_1}{x_2} \cdot h = \frac{1}{h} \cdot \frac{x_2}{x_2} \cdot h = \frac{1}{h}. \]
(3.39)
Die gewichteten Werte \( f_1 \) und \( f_2 \) lassen sich somit mit Hilfe der Hüttchen-Funktion der Breite \( 2 \cdot h \) und der Höhe \( \frac{1}{h} \) über der δ-Quelle berechnen. Der Wert eines diskreten Gitterpunktes ist daher umgekehrt proportional zu dem Abstand zu der δ-Quelle. Je kleiner der Abstand, desto größer ist die Gewichtung des Gitterpunktes.
• 2 dimensional

Abbildung 3.17: Δ-Quelle beliebig in Ω (2 D)

Auch im zwei-dimensionalen Fall wird zunächst eine Hilfe benötigt. Über jedem Gitterpunkt wird ein Quader mit der Grundfläche $h_x \cdot h_y$ aufgebaut.

Abbildung 3.18: Quadrate über diskrete Gitterpunkte definieren

Hierbei sind die Höhen jedoch nicht mehr nur von einem Abstand der Δ-Quelle zum entsprechenden Gitterpunkt, sondern von den beiden Abständen, in x- bzw. in y-Richtung, abhängig. Daraus ergibt sich analog zu (3.36) und (3.37) für die einzelnen Höhen:

\[
\begin{align*}
    f_1 &= \left( \frac{1}{h_x} \cdot \frac{h_x - x_1}{h_x} \right) \cdot \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_1}{h_y} \right) \\
    f_2 &= \left( \frac{1}{h_x} \cdot \frac{h_x - x_2}{h_x} \right) \cdot \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_1}{h_y} \right) \\
    f_3 &= \left( \frac{1}{h_x} \cdot \frac{h_x - x_1}{h_x} \right) \cdot \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_2}{h_y} \right) \\
    f_4 &= \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_2}{h_y} \right) \cdot \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_2}{h_y} \right)
\end{align*}
\]

(3.40) (3.41) (3.42) (3.43)

Berechnet man das Volumen $V$ der vier Quader, so ist mit

\[
\begin{align*}
    V &= (h_x \cdot h_y) \cdot (f_1 + f_2 + f_3 + f_4) \\
    &= \frac{1}{h_x \cdot h_y} \cdot (x_2 \cdot y_2 + x_1 \cdot y_2 + x_2 \cdot y_1 + x_1 \cdot y_1) = 1
\end{align*}
\]
die Bedingung (3.34) erfüllt.
Auch hier können die Höhen
\[ f_i \quad , \quad i = 1, \ldots, 4 \]
über zwei Hüttchen-Funktionen berechnet werden. Während eine Funktion entlang der x-Kante (siehe Abbildung 3.19) aufgestellt wird, wird die andere entlang der y-Kante (siehe Abbildung 3.20) definiert. Die Breiten sind (analog zur ein-dimensionalen Herleitung) \( 2 \cdot h_x \) bzw. \( 2 \cdot h_y \), während mit \( f_x = \frac{1}{h_x} \) bzw. \( f_y = \frac{1}{h_y} \) die Höhen angesetzt werden.

![Abbildung 3.19: Hüttchen-Funktion entlang der x-Kante](image1)

![Abbildung 3.20: Hüttchen-Funktion entlang der y-Kante](image2)

Somit lassen sich die einzelnen Höhen durch die Produkte der beiden Hüttchen-Funktionen (ausgewertet an den entsprechenden Kanten) berechnen.

\[
\begin{align*}
 f_1 &= f_{x_1} \cdot f_{y_1} = \left( \frac{1}{h_x} \cdot \frac{h_x - x_1}{h_x} \right) \cdot \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_1}{h_y} \right) \\
 f_2 &= f_{x_2} \cdot f_{y_1} = \left( \frac{1}{h_x} \cdot \frac{h_x - x_2}{h_x} \right) \cdot \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_1}{h_y} \right) \\
 f_3 &= f_{x_1} \cdot f_{y_2} = \left( \frac{1}{h_x} \cdot \frac{h_x - x_1}{h_x} \right) \cdot \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_2}{h_y} \right) \\
 f_4 &= f_{x_2} \cdot f_{y_2} = \left( \frac{1}{h_x} \cdot \frac{h_x - x_2}{h_x} \right) \cdot \left( \frac{1}{h_y} \cdot \frac{h_y - y_2}{h_y} \right)
\end{align*}
\]
Bemerkung:
Im ein-dimensionalen Fall ist die Höhe eines Rechtecks umgekehrt proportional zum Verhältnis vom Abstand der δ-Quelle zum Gitterpunkt und der Gitterbreite:

\[ f_i = \frac{1}{h} \cdot \frac{h - x_i}{h}. \]  \hspace{2cm} (3.48)

Bei der Berechnung der Höhe im zwei-Dimensionalen sind es nun zwei Abstände, über die die Höhen der Quader definiert werden:

\[ f_i = \frac{1}{h_x \cdot h_y} \cdot \frac{(h_x - x_i) \cdot (h_y - y_i)}{h_x \cdot h_y}. \]  \hspace{2cm} (3.49)

Diese Verteilung der δ-Quelle(n) auf das diskrete Gitter kann durch eine Matrix dargestellt werden, in der die einzelnen Gewichte eingetragen sind.

3.10.2 Position der Messpunkte

Auch die Sensoren müssen nicht zwingend auf einem Gitterpunkt liegen. Im Gegensatz zu den Elektroden, bei denen eine δ-Quelle auf die vier benachbarten f-Gitterpunkte verteilt wird, muss bei den Messungen ein Potential aus den vier umliegenden Potentialen des u-Gitters berechnet werden.

Befindet sich die Sonde exakt in der Mitte eines Gitter-Rechtecks, so ist der numerisch gemessene Wert genau \( \frac{1}{4} \) der Summe der vier angrenzenden Gitterpunkte. Bei einem Messpunkt genau auf einem Gitterpunkt wird nur dieser Wert gewichtet. Somit ist auch der Anteil eines Gitterpunktes umgekehrt proportional zur Entfernung zur Messsonde.

Abbildung 3.21: Beispiel-Anordnung der Messsonden

Für diese Anordnung der Messstellen im $4 \times 3$ Gitter gilt:

$$
\begin{pmatrix}
  m_1 \\
  m_2 \\
  m_3 
\end{pmatrix} =
\begin{pmatrix}
  0 & 0.4 & 0 & 0 & 0 & 0.6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
  0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.1 & 0.1 & 0 & 0 & 0.4 & 0.4 \\
  0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 
\end{pmatrix} \cdot u \quad (3.50)
$$

3.10.3 Verschiedene Frequenzen

Eine Möglichkeit, noch mehr Informationen zu gewinnen, ohne die Anordnung der Elektroden und Messsensoren neu zu gestalten, ist die Messung bei verschiedenen Frequenzen. Da die Leitfähigkeit frequenzabhängig ist, kann man bei verschiedenen Frequenzen, aber gleichen Versuchsaufbauten, einige neue Daten erfassen.

Am bedeutsamsten ist der Übergang vom Gleichstrom ($\omega = 0$) zum Wechselstrom ($\omega > 0$). Während die Leitfähigkeit beim Gleichstrom reell ist, erhält man bei den übrigen Frequenzen komplexe Leitfähigkeiten (siehe Kapitel 2.2).

Hierbei sollte man jedoch beachten, dass man neue Frequenzen geschickt wählt. Zwei zu nah aneinander liegende Frequenzen liefern in etwa das gleiche Potentialbild und somit wenig neue Informationen (siehe [6]).

In der numerischen Lösung muss für jede Frequenz das Vorwärtsproblem gelöst und an den entsprechenden Messstellen ausgewertet werden. Diese Daten werden für das inverse Problem mit ihren im Versuch zu der Frequenz passenden Potentialen verglichen (siehe Ausdruck (1.6)) und führen somit zu einer genaueren Lösung.
3.10.4 Messprogramme


- **Schaltung der Elektroden**


  \[
  J = \begin{pmatrix}
  1 & -1 & 0 & -1 & 1 & 0 \\
  1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
  -1 & 1 & -1 & 0 & 0 & -1 \\
  -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\
  \end{pmatrix}
  \]  

  (3.51)

- **Messprogramm der Sonden**

  In der Regel sollte man so viele Daten wie möglich sammeln. Daher ist es eigentlich sinnvoll, alle Sonden eingeschaltet zu haben.

  In dem realen Versuchsaufbau besitzen die im Boden befindlichen Geräte sowohl die Fähigkeit, den Stromfluss zu regulieren, als auch die Möglichkeit, diesen zu messen. Im Versuch ist es daher nicht möglich, eine Elektrode auch gleichzeitig als Messsonde zu nutzen. Diese muss ausgeschaltet bleiben.

  Somit gibt es bei der Mess-Matrix \( P \) exakt gleich viele Spalten wie bei der Schalt-Matrix \( J \). Die Spaltengröße wird durch die Anzahl der Messsonden festgelegt. Hierbei steht die 1 in der Spalte für eine eingeschaltete Sonde und die 0 für einen Messpunkt, der ausgeschaltet bleibt.

  Bei vier Messpunkten und obiger Schalt-Matrix \( J \) kann die Mess-Matrix folgende Form haben:

  \[
  P = \begin{pmatrix}
  0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\
  0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\
  0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\
  0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
  \end{pmatrix}
  \]  

  (3.52)
**Bemerkung:**


Seien im Gebiet zwei $\delta$-Quellen an beliebigen Stellen $r_i, r_j \neq j$ positioniert. Die Elektrode an der Position $r_i$ gebe den Strom ab, und die andere nehme ihn auf. Dann ist $\phi_{i,j}$ die Potentialverteilung, die das Randwertproblem

$$-\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(\phi_{i,j})) = \delta(r - r_i) - \delta(r - r_j) + \text{Randbedingungen} \quad (3.53)$$

bei einer gegebenen Leitfähigkeit $\sigma$ erfüllt.

Seien nun $\phi_{0,1}$ und $\phi_{2,3}$ zwei Lösungen der Randwertprobleme

$$-\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(\phi_{0,1})) = \delta(r - r_0) - \delta(r - r_1) + \text{RB} \quad (3.54)$$

$$-\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(\phi_{2,3})) = \delta(r - r_2) - \delta(r - r_3) + \text{RB}. \quad (3.55)$$

Schaltet man nun diese vier $\delta$-Quellen gleichzeitig und ermittelt dann das Potential $\phi_{02,13}$, so ist die neue Potentialverteilung die zusammengefasste Variante der beiden ursprünglichen.

$$\begin{align*}
&\begin{cases}
-\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(\phi_{0,1})) = \delta(r - r_0) - \delta(r - r_1) + \text{RB} \\
+ \quad -\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(\phi_{2,3})) = \delta(r - r_2) - \delta(r - r_3) + \text{RB}
\end{cases} \\
-\text{div}(\sigma \cdot \text{grad}(\phi_{0,1} + \phi_{2,3})) = \delta(r - r_0) + \delta(r - r_2) - \delta(r - r_1) - \delta(r - r_3) + \text{RB}
\end{align*}$$

Auch in der diskreten Lösung kann man die Linearität erkennen. Es werden zwei Potentialverteilungen auf einem Gebiet mit zwei $\delta$-Quellen berechnet.

![Abbildung 3.22: Potentialverteilungen bei zwei verschiedenen Stromeinspeisungen](image-url)
Schaltet man alle $\delta$-Quellen gleichzeitig und berechnet die daraus resultierende Potentialverteilung $\phi_{02,13}$, so ist diese gleich der Summe der beiden einzelnen Verteilungen $\phi_{0,1} + \phi_{2,3}$.

![Diagramm]

(a) Lösung des zusammengefassten Problems  
(b) Summe der einzelnen Potentialverteilungen

Abbildung 3.23: Gegenüberstellung beider Potentialverteilungen

Nun werde eine Elektrode ($e_i$) von insgesamt $n$ Elektroden immer als Stromausgang genutzt. Somit gibt es $n - 1$ Tupel, so dass nur zwei Stromquellen geschaltet sind:

$$(e_1, e_i) \quad i = 2, \ldots, n.$$

Da man alle anderen Schaltungen durch eine Summe dieser $n - 1$ Tupel realisieren kann, gibt es insgesamt $n - 1$ linear unabhängige Potentialverteilungen.

Diese Bemerkung ist in der Numerik ein wenig kritisch zu betrachten. Sind die Eingangsdaten gestört, kann es dennoch sinnvoll sein, mehr als $n - 1$ Schaltungen durchzuführen. Der Grund liegt in der Nicht-Linearität der Störungen, so dass das lineare Superpositionsprinzip nicht angewandt werden kann.

### 3.10.5 Grobes c-Gitter

Abbildung 3.24: grobes c-Gitter auf feinem u-Gitter gelegt

Kapitel 4

Ableitung und adjungierte Ableitung des Randwertproblems

4.1 Bestimmung der gesuchten Ableitung \( \partial_c u(c)(c_0)(c_r) \)

Bei dem gegebenen elliptischen Randwertproblem ist die Leitfähigkeit \( \sigma \) eine Funktion \( \sigma(c, \omega) \), wobei \( c \) die Verteilung der vier Cole-Cole Parameter (siehe Kapitel 2.2) einer Bodenschicht in \( \Omega \) repräsentiert. Zur Lösung des Vorwärtsproblems muss lediglich die Leitfähigkeit \( \sigma \) betrachtet werden, die sich aus den Cole-Cole Parametern und der Frequenz berechnen lässt. Die Ableitung hingegen soll bzgl. der Cole-Cole Parameter berechnet werden, weil diese im inversen Problem identifiziert werden sollen. Da bei der Funktion \( m(c) \) (siehe Kapitel 1.2) lediglich die Funktion \( u \) von den Cole-Cole Parametern abhängt (vgl. Ausdruck (1.7)), werden die partiellen Ableitungen des Potentials \( u \) nach den Cole-Cole Parametern in einer aktuellen Verteilung \( c_0 \) in Richtung \( c_r \) gesucht, also

\[
\partial_c u(c)(c_0)(c_r). \tag{4.1}
\]

Zur Bestimmung der gesuchten Ableitung (4.1) kann man sowohl bei der kontinuierlichen Gleichung, als auch bei der diskreten Lösung, den Satz der impliziten Funktionen (vgl. Satz 1) anwenden.
4.1.1 Bestimmung der Ableitung im kontinuierlichen Fall

Wie in Kapitel 2.4.1 beschrieben, lässt sich das kontinuierliche Randwertproblem als eine implizite Funktion darstellen.

\[
g(\sigma(c, \omega), u(c, \omega)) := \begin{pmatrix}
-\text{div} (\sigma \cdot \text{grad}(u)) - I \\
u \mid \Gamma_d \\
\partial_{\nu} u \mid \Gamma_n
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
0 \\
0 \\
0
\end{pmatrix}
\] (4.2)

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit wird nun eine feste Frequenz \(\omega_0\) vorgegeben. Somit kann die komplexe Gleichung (4.2) in eine vereinfachte Gleichung überführt werden, da die Leitfähigkeit \(\sigma\) und somit auch das Potential \(u\) nur noch von den Cole-Cole Parametern \(c\) abhängt.

\[
g(c, u(c)) := \begin{pmatrix}
-\text{div} (\sigma(c) \cdot \text{grad}(u)) - I \\
u \mid \Gamma_d \\
\partial_{\nu} u \mid \Gamma_n
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}
0 \\
0 \\
0
\end{pmatrix}
\] (4.3)

Wendet man nun den Satz über implizite Funktionen (Kapitel 2.4.1) auf Gleichung (4.3) an, lässt sich die gesuchte Ableitung \(\partial_c u(c_0)(c_r)\) folgendermaßen berechnen:

\[
\frac{\partial_c u(c)(c_0)(c_r)}{\partial u} = -\partial_u g(c, u(c))(c_0)^{-1} \circ \partial_c g(c, u(c))(c_0)(c_r)
\] (4.4)

\[
\Leftrightarrow \quad \partial_u g(c, u(c))(c_0) \cdot s = -\partial_c g(c, u(c))(c_0)(c_r)
\] (4.5)

Mit

\[
L(c, u) := -\text{div} (\sigma(c) \cdot \text{grad}(u))
\] (4.6)

ist ein Operator definiert, der sowohl in \(u\) als auch in \(\sigma\) linear ist \(^1\). Über diesen Operator lassen sich die partiellen Ableitungen berechnen:

- **Berechnung von** \(\partial_u g(c, u(c))(c_0)\)

\[
\partial_u g(c, u(c))(c_0) = \partial_u \begin{pmatrix}
L(c, u) - I \\
u \mid \Gamma_d \\
\partial_{\nu} u \mid \Gamma_n
\end{pmatrix}(c_0)
\] (4.7)

Da der Operator \(L(c, u)\) linear in \(u\) ist, ist die Ableitung \(\partial_u L(c, u)\) wieder der Operator \(L(c, u)\) selbst. Auch die Abbildung von \(u\) bzw. \(\partial_{\nu} u\) auf die Ränder \(\Gamma_d\) bzw. \(\Gamma_n\) sind durch

\(^1\)siehe [6]
lineare Operatoren ausdrückbar. Es folgt

\[
\partial_u \begin{pmatrix} L(\sigma(c), u) - I \\ u \mid \Gamma_d \\ \partial_\nu u \mid \Gamma_n \end{pmatrix} (c_0) = \begin{pmatrix} L(\sigma(c), u) \\ u \mid \Gamma_d \\ \partial_\nu u \mid \Gamma_n \end{pmatrix} (c_0) = \begin{pmatrix} L(\sigma(c_0), u) \\ u \mid \Gamma_d \\ \partial_\nu u \mid \Gamma_n \end{pmatrix}
\]

(4.8)

Es gilt

\[
\partial_u g(c, u(c)) (c_0) = \begin{pmatrix} L(\sigma(c_0), u) \\ u \mid \Gamma_d \\ \partial_\nu u \mid \Gamma_n \end{pmatrix}
\]

(4.9)

**Berechnung von** \( \partial_c g(c, u(c))(c_0)(c_r) \)

\[
\partial_c g(c, u(c))(c_0)(c_r) = \partial_c \begin{pmatrix} L(\sigma(c), u(c)) - I \\ u \mid \Gamma_d \\ \partial_\nu u \mid \Gamma_n \end{pmatrix} (c_0)(c_r)
\]

(4.10)

Die Abbildung von \( u \) auf \( u \mid \Gamma_d \) bzw. \( \partial_\nu u \mid \Gamma_n \) ist unabhängig von den Cole-Cole Parametern \( c \) und somit als konstant zu betrachten. Es folgt:

\[
\partial_c \begin{pmatrix} L(\sigma(c), u(c)) - I \\ u \mid \Gamma_d \\ \partial_\nu u \mid \Gamma_n \end{pmatrix} (c_0)(c_r) = \begin{pmatrix} \partial_c (L(\sigma(c), u(c)) - I) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} (c_0)(c_r)
\]

(4.11)

Nun muss für den Ausdruck \( \partial_c (L(\sigma(c), u(c)) - I) (c_0)(c_r) \) die Kettenregel angewandt werden, da die Leitfähigkeit von den Cole-Cole Parametern abhängt.

\[
\partial_c (L(\sigma(c), u(c)) - I) (c_0)(c_r) = \partial_c L(\sigma(c), u(c_0)) (c_0)(c_r)
\]

(4.12)

\[
= (\partial_\sigma L(\sigma(c), u(c_0)) \circ \partial_c \sigma(c)) (c_0)(c_r)
\]

(4.13)

Nun wird wiederum die Linearität des Operators (in \( \sigma \)) ausgenutzt und

\[
\partial_\sigma L(\sigma(c), u(c)) = L(\sigma(c), u(c))
\]

(4.14)

in Gleichung (4.13) eingesetzt.

\[
( L(\sigma(c), u(c)) \circ \partial_c \sigma(c) ) (c_0)(c_r) = L(\partial_c \sigma(c), u(c))(c_0)(c_r)
\]

(4.15)

\[
= L(\partial_c \sigma(c)(c_0)(c_r), u(c_0))
\]

(4.16)
Somit gilt für die zweite partielle Ableitung des Ausdrucks (4.5):

\[ \partial_c g(c, u(c))(c_r)(c_0) = \begin{pmatrix} L(\partial_c \sigma(c_0)(c_r), u(c_0)) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \] (4.17)

Verwendet man nun die Ergebnisse aus den Gleichungen (4.9) und (4.17), lässt sich die Gleichung (4.5) in

\[ \begin{pmatrix} L(\sigma(c_0), s) \\ s \bigr|_{\Gamma_d} \\ \partial_n s \bigr|_{\Gamma_n} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} L(\partial_c \sigma(c_0)(c_r), u(c_0)) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \] (4.18)

überführen. Somit kann die gesuchte Ableitung \( s \) über zwei Randwertprobleme bestimmt werden:

1. Randwertproblem:

\[ -\text{div} \left( \sigma(c_0) \cdot \text{grad}(s) \right) = \text{div} \left( \partial_c \sigma(c) \cdot \text{grad}(u_0) \right) \quad \text{in } \Omega \] (4.19)

\[ s = 0 \quad \text{auf } \Gamma_d \] (4.20)

\[ \partial_n s = 0 \quad \text{auf } \Gamma_n \] (4.21)

wobei \( u_0 \) Lösung ist von

2. Randwertproblem:

\[ -\text{div} \left( \sigma(c_0) \cdot \text{grad}(u_0) \right) = f \quad \text{in } \Omega \] (4.22)

\[ u_0 = 0 \quad \text{auf } \Gamma_d \] (4.23)

\[ \partial_n u_0 = 0 \quad \text{auf } \Gamma_n \] (4.24)

4.1.2 Bestimmung der Ableitung im diskreten Fall

Die im Kapitel 4.1.1 ermittelte Gleichung

\[ \begin{pmatrix} L(c_0, s) \\ s \bigr|_{\Gamma_d} \\ \partial_n s \bigr|_{\Gamma_n} \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} L(\partial_c \sigma(c_0)(c_r), u_0) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \] (4.25)

kann auch für die diskrete Berechnung der Ableitung \( s \) genutzt werden. Die linke Seite der Gleichung (4.25) lässt sich, wie in Kapitel 3 beschrieben, durch

\[ (-D \cdot A(\sigma(c_0)) \cdot G + B) \cdot s = R(\sigma(c_0)) \cdot s \] (4.26)
4.1. BESTIMMUNG DER GESUCHTEN ABLEITUNG $\partial_{C} U(C_0)(C_R)$

approximieren, während

$$-(D \cdot A(\partial_c \sigma(c_0)(c_r)) \cdot G) \cdot u_0 \quad (4.27)$$

eine Näherung der rechten Seite darstellt. Hierbei wird der Ausdruck $\partial_c \sigma(c_0)(c_r)$ mit den diskreten $c_0$ Parametern berechnet und kann durch eine Matrix dargestellt werden, die fortan $S_{c_0}$ genannt wird.

$$\partial_c \sigma(c_0) \overset{\text{diskret}}{\rightarrow} S_{c_0} \quad (4.28)$$

Somit ist der Ausdruck $\partial_c \sigma(c_0)(c_r)$ lediglich ein Produkt aus der gerade definierten Matrix $S_{c_0}$ und dem Richtungsvektor $c_r$.

Gleichung (4.27) wird in die Form

$$(D \cdot A(S_{c_0} \cdot c_r) \cdot G) \cdot u_0 \quad (4.29)$$

überführt, wobei $u_0$ die Lösung des diskreten Vorwärtsproblems

$$R(\sigma(c_0)) \cdot u = F \quad (4.30)$$

ist. Zusammenfassend lässt sich die diskrete Ableitung $s$ durch

$$R(\sigma(c_0)) \cdot s = (D \cdot A(S_{c_0} \cdot c_r) \cdot G) \cdot u_0$$

$$\Leftrightarrow \quad s = R^{-1}(\sigma(c_0)) \cdot (D \cdot A(S_{c_0} \cdot c_r) \cdot G) \cdot (R^{-1}(\sigma(c_0)) \cdot F)$$

berechnen.

- Bestimmung der Ableitungsmatrix

Die komplette Ableitungsmatrix $J$ repräsentiert die Ableitung in dem Punkt $c_0$ in jede beliebige Richtung $c_r$. Da sich alle Richtungen durch die Basisvektoren $c_{e_1}, ..., c_{e_n}$ darstellen lassen, muss die Ableitung in Richtung jedes Basisvektors berechnet werden. Diese berechneten Ableitungsvektoren werden hintereinander als Spalte der Matrix abgespeichert, so dass man nach n Schritten die gesamte Ableitungsmatrix $J$ aufgestellt hat. Nun kann man die Ableitung in eine beliebige Richtung $c_r$ durch das Matrix-Vektor Produkt $J \cdot c_r$ bestimmen.

Bemerkung:

Natürlich kann man die Richtung direkt in Gleichung (4.31) einsetzen. Muss man jedoch sehr
viele Richtungsableitungen (mehr als n) im Punkt \( c_0 \) ermitteln, ist es sinnvoller, erst die gesamte Matrix aufzustellen.

**4.2 Bestimmung des adjungierten Operators**

Im Kapitel 4.1 wurde der Operator ermittelt, der die Ableitung eines Potentials in einer Cole-Cole Verteilung \( c_0 \) in Richtung einer anderen Verteilung \( c_r \) berechnet. Gesucht ist nun der adjungierte Operator zu dem gerade beschriebenen, sowohl kontinuierlich als auch diskret.

Es ist jedoch nicht zwingend, den adjungierten Operator komplett aufzustellen. Lediglich das Ergebnis von dem adjungierten Operator angewandt auf einen Vektor \( w \) muss berechnet werden. Im diskreten Fall wird der Operator \( J \) durch eine Matrix angenähert. Nicht die ganze Matrix \( J^* \) muss aufgestellt werden, das Matrix-Vektor Produkt \( J^* \cdot w \) reicht aus.

**4.2.1 Bedeutung des adjungierten Operators in der geoelektrischen Tomographie**

In der geoelektrischen Tomographie beschreibt der adjungierte Operator den Einzugsbereich eines Sensors in \( \Omega \). Angenommen im Punkt \( x_0 \) des Gebietes befindet sich ein Sensor. Dort wird bei einer Cole-Cole Verteilung \( c_k \) ein Potential \( u(c_k) \) ermittelt.

![Abbildung 4.1](image)

Abbildung 4.1: Änderung der Leitfähigkeit lokal in \( \tilde{x} \)

Nun werde in einem in \( \Omega \) befindlichen Punkt \( \tilde{x} \) die Cole-Cole Parameter lokal ein wenig verändert. Dies führt zu einem geänderten Potentialwert an der Stelle \( x_0 \). Je weiter der Punkt \( \tilde{x} \) von dem Messpunkt \( x_0 \) entfernt ist, desto weniger macht sich die Veränderung der Leitfähigkeit in \( \tilde{x} \) bemerkbar.

Daher wird in einigen Regularisierungsverfahren (siehe [5]) der adjungierte Operator verwendet, um die ursprünglichen Gleichungen auf einen kleineren Unterraum zu projizieren, bei dem nur die relevanten Werte in Betracht gezogen werden. Das heißt, dass diejenigen Punkte \( \tilde{x}_i \) bei einem Sensor \( x_0 \) mehr Gewichtung erhalten, die im Einzugsgebiet dieses Messpunktes liegen.
4.2. BESTIMMUNG DES ADJUNGIERTEN OPERATORS

4.2.2 Bestimmung des adjungierten Operators im kontinuierlichen Fall

Sei $A_{c_0}$ der Operator, der die Cole-Cole Parameter $c_r$ auf die Ableitung $\partial_c u(c_0)(c_r)$ abbildet, d.h. in Richtung $c_r$ bei einer Potentialableitung in einem festen Punkt $c_0$. Gesucht ist nun der adjungierte Operator $A^\star_{c_0}$, so dass gilt:

$$\langle A_{c_0} c_r, w \rangle_{L^2} = \langle c_r, A^\star_{c_0} w \rangle_{L^2} \quad (4.32)$$

Mit $s = \partial_c u(c)(c_0)(c_r)$ lässt sich die Ableitung berechnen durch (siehe (4.19)):

$$- \text{div}(\sigma(c_0) \cdot \text{grad}(s)) = \text{div}(\partial_c \sigma(c)(c_0)(c_r) \cdot \text{grad}(u_0)) \quad (4.33)$$

$$\Leftrightarrow \quad s = R^{-1}(- \text{div}(\partial_c \sigma(c)(c_0)(c_r) \cdot \text{grad}(u_0))) \quad (4.34)$$

Für die linke Seite der Gleichung (4.32) lässt sich

$$\langle A_{c_0} c_r, w \rangle_{L^2} = \langle s, w \rangle_{L^2} \quad (4.35)$$

$$= \langle R^{-1}(- \text{div}(\partial_c \sigma(c)(c_0)(c_r) \cdot \text{grad}(u_0))), w \rangle_{L^2} \quad (4.36)$$

bestimmen. Da der Operator $R$ eine Abbildung zwischen zwei (in der Regel komplexen) Räumen darstellt, gilt nach [9]:

$$\langle R^{-1}a, b \rangle_{L^2} = \langle a, R^{-1}b \rangle_{L^2} \quad (4.37)$$

Setzt man die Gleichung (4.37) in die Gleichung (4.36) ein, erhält man

$$\left\langle - \text{div}(\partial_c \sigma(c)(c_0)(c_r) \cdot \text{grad}(u_0)), R^{-1}(\pi) \right\rangle_{L^2} = \langle \text{div}(r), t \rangle_{L^2} \quad (4.38)$$

Nun kann man die $L^2$-Norm berechnen:

$$\langle - \text{div}(r), t \rangle_{L^2} = \int_\Omega - \text{div}(r) \cdot t \, dx \quad (4.39)$$

Im nächsten Schritt wird der Ausdruck $- \text{div}(r) \cdot t$ umgeformt und anschließend der Satz von Gauß (Kapitel 2.6) angewandt:

$$\int_\Omega \text{div}(r) \cdot t \, dx = - \int_\Omega \text{div}(r \cdot t) - r \cdot \text{grad}(t) \, dx \quad (4.40)$$

$$= - \int_\Gamma \nu \cdot r \cdot t \, dx + \int_\Omega r \cdot \text{grad}(t) \, dx \quad (4.41)$$
Da \( t = R^{-1}w \) eine Lösung des ursprünglichen Randwertproblems (siehe Kapitel 2.1) ist, gilt mit
\[
\begin{align*}
t \mid \Gamma_d &= 0 \quad (4.42) \\
\partial_t t \mid \Gamma_n &= 0 \quad (4.43)
\end{align*}
\]
für das Integral über den Rändern:
\[
\int_{\Gamma} \nu \cdot r \cdot t \, dx = 0 \quad (4.44)
\]
Somit bleibt nur noch das zweite Integral übrig, das wieder als ein Skalarprodukt dargestellt werden kann.
\[
\langle A_{c_0} c_r, w \rangle_{L^2} = \int_{\Omega} r \cdot \text{grad}(t) \, dx \quad (4.45)
\]
\[
= \int_{\Omega} \left( \partial_c \sigma(c)(c_0) \cdot \text{grad}(u_0) \right) \cdot \left( \text{grad}(R^{-1}(w)) \right) \, dx \quad (4.46)
\]
\[
= \left\langle \partial_c \sigma(c)(c_0) \cdot \text{grad}(u_0) \cdot \text{grad}(R^{-1}(w)) \right\rangle_{L^2} \quad (4.47)
\]
Zuletzt muss die Richtung \( c_r \) in der linken Seite des Skalarproduktes isoliert werden. Da die Leitfähigkeit \( \sigma \) von vier Cole-Cole Parametern abhängt (vgl. Kapitel 2.2), gilt:
\[
\partial_c \sigma(c)(c_0)(c_r) = \sum_{i=1}^{4} \partial_{c_i} \sigma(c)(c_0)(c_{r_i}) \quad (4.48)
\]
\[
= \sum_{i=1}^{4} \partial_{c_i} \sigma(c)(c_0) \cdot c_{r_i} \quad (4.49)
\]
\[
= \begin{pmatrix}
\partial_1 \sigma(c)(c_0) \\
\vdots \\
\partial_4 \sigma(c)(c_0)
\end{pmatrix}^T \cdot c_r \quad (4.50)
\]
Es ergibt sich
\[
\langle A_{c_0} c_r, w \rangle_{L^2} = \left\langle c_r, \begin{pmatrix}
\partial_1 \sigma(c)(c_0) \\
\vdots \\
\partial_4 \sigma(c)(c_0)
\end{pmatrix} \cdot \text{grad}(u_0) \cdot \text{grad}(R^{-1}(w)) \right\rangle_{L^2} \quad (4.51)
\]
\[
= \langle c_r, A_{c_0}^* w \rangle_{L^2} \quad (4.52)
\]
4.2. BESTIMMUNG DES ADJUNGIERTEN OPERATORS

Somit ist

\[ A^{\ast}_{c_0} w = \begin{pmatrix} \partial_1 \sigma(c)(c_0) \\ \vdots \\ \partial_4 \sigma(c)(c_0) \end{pmatrix} \cdot \text{grad}(u_0) \cdot \text{grad}(R^{-1}(w)). \] (4.53)

4.2.3 Bestimmung des adjungierten Operators im diskreten Fall

Im diskreten Fall ist es zunächst einfach, den adjungierten Operator zu der Matrix \( J \) zu bestimmen. Man muss lediglich die gesamte Ableitungsmatrix aufstellen und anschließend die hermische Matrix \( J^H \) berechnen.

Da dies jedoch sehr kostenaufwendig (siehe Kapitel 4.3) und demnach nicht empfehlenswert ist, soll auch hier das Produkt \( J^H \cdot w \) direkt berechnet werden. Die Herleitung verläuft ähnlich der kontinuierlichen Herleitung.

\[ \begin{pmatrix} \text{div}(\sigma(c_0) \cdot \text{grad}(s)) \\ s \mid \Gamma_d \\ \partial_v s \mid \Gamma_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{div}(\partial_1 \sigma(c_0)(c_r) \cdot \text{grad}(u_0)) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \] (4.54)

\[ \Rightarrow R_0 \cdot s = D \cdot A(S_{c_0} \cdot c_r) \cdot G \cdot u_0 \] (4.55)

Demnach ergibt sich:

\[ \langle J_{c_0} c_r, w \rangle = \langle s, w \rangle \] (4.56)

\[ = \langle R_0^{-1} \cdot D \cdot A(S_{c_0} \cdot c_r) \cdot G \cdot u_0, w \rangle \] (4.57)

\[ = \left\langle A(S_{c_0} \cdot c_r) \cdot G \cdot u_0, \underbrace{D^H \cdot R_0^{-H}}_{:= b} \cdot w \right\rangle \] (4.58)

Nun ist es problematisch, im Ausdruck

\[ \langle A(S_{c_0} \cdot c_r) \cdot v, b \rangle \] (4.59)

die Richtung \( c_r \) zu isolieren, da die Matrix \( A \) eine Diagonalmatrix ist, auf deren Einträge die Ableitungen des Potentials in \( c_0 \) in Richtung \( c_r \) stehen.

\[ \langle A(S_{c_0} \cdot c_r) \cdot v, b \rangle = \left\langle \begin{pmatrix} (S_{c_0} \cdot c_r)_1 \\ \vdots \\ (S_{c_0} \cdot c_r)_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \right\rangle \] (4.60)

\[ = \left\langle \begin{pmatrix} (S_{c_0} \cdot c_r)_1 \cdot v_1 \\ \vdots \\ (S_{c_0} \cdot c_r)_n \cdot v_n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} \right\rangle \] (4.61)
Im nächsten Schritt kann man das Skalarprodukt ausschreiben. Hierbei ist wieder zu beachten, dass die einzelnen Komponenten komplex sind.

\[
\left\langle \begin{pmatrix}
    (S_{c_0} \cdot c_r)_1 \cdot v_1 \\
    \vdots \\
    (S_{c_0} \cdot c_r)_n \cdot v_n
\end{pmatrix}, \begin{pmatrix}
    b_1 \\
    \vdots \\
    b_n
\end{pmatrix} \right\rangle = \sum_{i=1}^{n} (S_{c_0} \cdot c_r)_i \cdot v_i \cdot b_i
\]

(4.62)

\[
= \sum_{i=1}^{n} (S_{c_0} \cdot c_r)_i \cdot (v_i \cdot b_i)
\]

(4.63)

\[
= \left\langle S_{c_0} \cdot c_r, \begin{pmatrix}
    \overline{v_1} b_1 \\
    \vdots \\
    \overline{v_n} b_n
\end{pmatrix} \right\rangle
\]

(4.64)

\[
= (S_{c_0} \cdot c_r)^H \cdot \begin{pmatrix}
    \overline{v_1} b_1 \\
    \vdots \\
    \overline{v_n} b_n
\end{pmatrix}
\]

(4.65)

\[
= c_r^H \cdot \left( \begin{pmatrix}
    S_{c_0}^H \cdot \overline{v_1} b_1 \\
    \vdots \\
    S_{c_0}^H \cdot \overline{v_n} b_n
\end{pmatrix} \right)
\]

(4.66)

\[
= \left\langle c_r, S_{c_0}^H \cdot \begin{pmatrix}
    \overline{v_1} b_1 \\
    \vdots \\
    \overline{v_n} b_n
\end{pmatrix} \right\rangle
\]

(4.67)

Ersetzt man nun die Substitutionen wieder durch ihre ursprüngliche Form, erhält man zu der Matrix \( J_{c_0} \) den adjungierten Operator \( J^*_{c_0} \).

\[
\langle J_{c_0} c_r, w \rangle = \langle c_r, J^*_{c_0} w \rangle
\]

(4.68)

\[
= \left\langle c_r, S_{c_0}^H \cdot \begin{pmatrix}
    \overline{G \cdot u_0}_1 \cdot (D^H \cdot R_0^{-H} \cdot w)_1 \\
    \vdots \\
    \overline{G \cdot u_0}_n \cdot (D^H \cdot R_0^{-H} \cdot w)_n
\end{pmatrix} \right\rangle
\]

(4.69)

\[
= \left\langle c_r, S_{c_0}^H \cdot \begin{pmatrix}
    \overline{G \cdot u_0}_1 \cdot (D^H \cdot R_0^{-H} \cdot w)_1 \\
    \vdots \\
    \overline{G \cdot u_0}_n \cdot (D^H \cdot R_0^{-H} \cdot w)_n
\end{pmatrix} \right\rangle
\]

(4.70)

4.3 Kostenvergleich: Ableitungsmatrix gegen Matrix-Vektor Produkt

In diesem Kapitel werden die Kosten verglichen, die bei der Aufstellung der kompletten Ableitungsmatrix \( J \) bzw. dem Matrix-Vektor Produkt \( J \cdot c \) entstehen. Unter Kosten wird hier die Anzahl der zu lösenden Gleichungssysteme verstanden.

Bei beiden Varianten muss zunächst das Vorwärtsproblem, also ein Gleichungssystem gelöst wer-
4.3. KOSTENVERGLEICH: ABLEITUNGSMATRIX GEGEN MATRIX-VEKTOR

PRODUKT

den.
Mit der ersten Variante berechnet man die gesamte Ableitungsmatrix $J$ und kann somit problemlos die hermitesche $J^H$ ermitteln. Dies ist jedoch sehr aufwendig, da für jeden Einheitsvektor des Gebietes die Ableitung ermittelt werden muss. Also hat man bei $n$ Einheitsvektoren auch $n$ Gleichungssysteme zu lösen.


- **direktes Aufstellen der Matrix:**
  - 1 Randwertproblem für das Lösen des Vorwärtsproblems
  - für **jeden** Einheitsvektor das Gleichungssystem lösen
  - Berechnung der hermitesche Matrix ohne Kosten

- **Matrix-Vektor Produkt:**
  - 1 Randwertproblem für das Lösen des Vorwärtsproblems
  - für jeden Iterationsschritt:
    - 1 Randwertproblem für $J \cdot v$
    - 1 Randwertproblem für $J^H \cdot v$

Da bei diesen Versuchen auch noch weitere Messprogramme und verschiedene Frequenzen in die numerischen Berechnungen eingehen, wird somit das Aufstellen der gesamten Ableitungsmatrix sehr teuer.

<table>
<thead>
<tr>
<th>$n_x$</th>
<th>$n_y$</th>
<th>Anzahl Frequenzen</th>
<th>Anzahl Messungen pro Frequenz</th>
<th>Kosten $J$ berechnen</th>
<th>Kosten $J \cdot v$ direkt $^1$</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>2</td>
<td>2</td>
<td>1</td>
<td>1</td>
<td>5</td>
<td>3</td>
</tr>
<tr>
<td>8</td>
<td>8</td>
<td>1</td>
<td>1</td>
<td>65</td>
<td>3</td>
</tr>
<tr>
<td>32</td>
<td>32</td>
<td>1</td>
<td>1</td>
<td>1065</td>
<td>3</td>
</tr>
<tr>
<td>32</td>
<td>32</td>
<td>5</td>
<td>25</td>
<td>133125</td>
<td>375</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 4.1: Kosten der verschiedenen Varianten bei gegebenen Beispielen

$^1$Kosten bei nur einem Iterationsschritt
Kapitel 5

Spezielle Löser der linearen Gleichungssysteme

5.1 Einführung

Wird das Gebiet in ein u-Gitter der Größe $n_x \times n_y$ eingeteilt (vgl. Kapitel 3.2), so ergibt sich ein Gleichungssystem mit $n := n_x \cdot n_y$ Unbekannten, die sich durch

$$R \cdot u = f, \quad R \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

(5.1)

berechnen lassen. Neben (5.1) muss (bei gleicher Matrix $R$) für die Berechnung des adjungierten Operators das System

$$R^H \cdot v = s, \quad R \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

(5.2)

gelöst werden.

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit wird eine feste Frequenz $\omega_0$ und eine Cole-Cole Verteilung $c_0$ vorgegeben, so dass sich eine Matrix $R_0$ ergibt, die in sehr vielen Gleichungssystemen verwendet wird. Es ändern sich lediglich die rechten Seiten.

Ziel ist es nun, einen/mehrere Löser zu entwickeln, der einerseits die Eigenschaften von $R_0$ berücksichtigt, jedoch auch die Lösung der hermitschen Gleichung (5.2) mit sich bringt.

Bei diesem Randwertproblem ist es möglich, das große Gleichungssystem auf ein kleineres zu reduzieren, ohne dabei das Ergebnis des inversen Problems zu beeinflussen. Die Matrix des verkleiner ten Systems wird mit $R_{\text{opt}}$ bezeichnet. Es ist sogar möglich, die Matrix $R_0$ auf eine symmetrische Form zu bringen, die fortan $R_{\text{sym}}$ genannt wird. Diese Thematik wird im Kapitel Optimierung (5.2) genauer behandelt.

Da die Matrix $R_0$ (und deren optimierte Matrix) eine reguläre 5-Band Matrix ist, sollen zunächst die klassischen Verfahren das Gleichungssystem lösen. Hierbei wird die LU-Zerlegung (Kapitel
5.3) bei beliebigen und die Cholesky-Zerlegung (Kapitel 5.4) auf symmetrischen Matrizen durchgeführt. Desweiteren werden speziell angepasste Löser, wie das ADI-Verfahren (Kapitel 5.5) und UMFPACK (Kapitel 5.6), genauer betrachtet.

Bemerkung:

Auch hier werden alle Matrizen anhand eines kleinen Beispiels veranschaulicht. Es wird eine Gittereinteilung von \( n_x = 4 \times n_y = 3 \), sowie eine Leitfähigkeit konstant \( \frac{1}{\text{m} \cdot \Omega} \) vorgegeben. Es ergibt sich für die Matrix \( R_0 \):

\[
R_0 = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -0.04 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & -0.09 & 0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & -0.09 & 0 & 0 & -0.04 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.08 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & -0.09 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.08 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & -0.09 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\]

5.2 Optimierung

Um eine Optimierung der Gleichungssysteme durchführen zu können, müssen vorab zwei Bedingungen an das diskrete Problem gestellt werden:

1. Es darf kein Strom auf den Dirichlet-Rand abgebildet werden.
   \[ f_i = 0 , \forall f_i \in \Gamma_d \]

2. Die Messsonden dürfen keine Messungen am Dirichlet-Rand durchführen, d.h. alle Werte werden aus diskreten Punkten innerhalb des Gebietes oder am Neumann-Rand ermittelt. Somit sind die numerischen Ergebnisse am Dirichlet-Rand für die Lösung uninteressant.

Treffen diese Bedingungen nicht ein, müssen entweder die \( \delta \)-Quellen bzw. Messsonden neu positioniert oder die Auflösung des Vorwärtsproblems verfeinert werden.
5.2. OPTIMIERUNG

5.2.1 Verkleinerung des Gleichungssystems

Will man die Gleichungen (5.1) und (5.2) mit Hilfe eines kleineren Gleichungssystems lösen, muss jede Gleichung einzeln analysiert werden.

- **Berechnung von** $R_0 \cdot u = f$

Wird kein Strom auf dem Rand abgebildet, werden auch alle Potentiale $u_i$, die auf dem Dirichlet-Rand liegen, den Wert 0 annehmen (vgl. Kapitel 3.7.2). Dies hingegen bedeutet, dass alle Spalten der Matrix $R_0$ gestrichen werden können, die mit einem $u_i \in \Gamma_d$ multipliziert werden, da das Produkt ohnehin den Wert 0 annehmen wird.

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -0.04 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & -0.09 & 0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & -0.09 & 0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.08 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & -0.09 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.08 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & -0.09 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
$$

Es bleiben **NULL-Zeilen** stehen, die keine weitere Verwendung für das Gleichungssystem besitzen. Werden auch diese Zeilen (und die $f_i \in \Gamma_d$) gestrichen, bleibt ein kleineres Gleichungssystem mit der Matrix $R_{opt}$ übrig, welches nur noch die Potentiale $u_{in}$ innerhalb von $\Omega$ und am Neumann-Rand identifiziert.

$$
R_{opt} \cdot u_{in} = R_{opt} \cdot \begin{pmatrix}
u_6 \\
u_7 \\
u_{10} \\
u_{11}
\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}f_6 \\
f_7 \\
f_{10} \\
f_{11}
\end{pmatrix} := f_{in}
$$

mit

$$
R_{opt} = \begin{pmatrix}
0.26 & -0.09 & -0.04 & 0 \\
-0.09 & 0.26 & 0 & -0.04 \\
-0.08 & 0 & 0.26 & -0.09 \\
0 & -0.08 & -0.09 & 0.26
\end{pmatrix}
$$

(5.3)
Die vollständige Lösung $u$ kann nun wieder aus der Lösung von $u_{re}$ bestimmt werden.

\[
\begin{pmatrix}
0 \\
0 \\
0 \\
0 \\
u_6 \\
u_7 \\
0 \\
0 \\
u_{10} \\
u_{11} \\
0
\end{pmatrix}
\]

- **Berechnung von $R_0^H \cdot v = s$**


\[
R_0^H =
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -0.09 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.26 & -0.09 & 0 & 0 & -0.08 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 & 0 & 0 & 0 & -0.08 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.09 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -0.09 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 & 0 & 0.26 & -0.09 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 & -0.09 & 0.26 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.09 & 1
\end{pmatrix}
\]

Somit kann zur Bestimmung der diskreten Werte $v_i$ in $\Omega$ und am Neumann-Rand die verkleinerte Matrix

\[
(R_0^H)_{opt} =
\begin{pmatrix}
0.26 & -0.09 & -0.08 & 0 & -0.04 & 0.26 & -0.09 \\
-0.09 & 0.26 & 0 & -0.08 & 0 & 0.26 & -0.09 \\
-0.04 & 0 & 0.26 & -0.09 & 0 & -0.04 & 0.26 \\
0 & -0.04 & -0.09 & 0.26
\end{pmatrix}
\]  \hfill (5.4)
verwendet werden. Die Werte am Dirichlet-Rand werden wiederum auf 0 gesetzt. Dieses Ergebnis der optimierten Lösung stimmt jedoch nicht exakt mit der Lösung des großen Problems $R_0^H \cdot v = s$ überein, da dieses Werte ungleich 0 am Dirichlet-Rand ermittelt. Bei einer rechten Seite

$$s = (0, 0, 0, 0, 6, 0, 0, 0, 0, -6, 0)^T$$

werden die Lösungen

$$v = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.8528 \\ -0.0123 \\ 0 \\ 1.9187 \\ -21.3189 \\ -0.3072 \\ -0.0277 \\ -0.4831 \\ -5.3679 \\ -24.9823 \\ -2.2484 \end{pmatrix} \quad \text{bzw.} \quad v_{\text{in}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 21.3189 \\ -0.3072 \\ 0 \\ 0 \\ -5.3679 \\ -24.9823 \\ 0 \end{pmatrix}$$

berechnet. Hierbei kann man erkennen, dass in den inneren Punkten von $\Omega$ und am Neumann-Rand die gleichen Werte identifiziert werden. Es unterscheiden sich lediglich die Ergebnisse am Dirichlet-Rand. Hier greift jedoch die zweite Bedingung ein, die es verbietet, Werte des Dirichlet-Randes zu ’messen’. Da nur die Ergebnisse innerhalb $\Omega$ und am Neumann-Rand von Bedeutung sind, spielt es keine Rolle, ob nun das große System

$$R_0^H \cdot v = s$$

oder das reduzierte

$$(R_0^H)_{\text{opt}} \cdot v_{\text{in}} = s_{\text{in}}$$

gelöst wird.

**Bemerkung:**

Für die Berechnung der verkleinerten Matrizen gilt:

$$(R_{\text{opt}})^H = (R^H)_{\text{opt}} \quad (5.5)$$
5.2.2 Erzeugung einer symmetrischen Matrix

- Berechnung von $R_0 \cdot u = f$

Die Umwandlung der großen Matrix $R_0$ in die symmetrische Matrix $R_{sym}$ baut auf die zuvor erklärte Verkleinerung des Systems auf. Die ursprüngliche Matrix $R_0$ ist eine $n \times n$-Matrix ($n = n_x \cdot n_y$), die auf eine kleinere Matrix $R_{opt}$ reduziert wird. Bei dieser Matrix ist die Symmetrie fast gegeben. Lediglich die Diskretisierung der Differentialgleichung an den $n_x - 2$ Punkten des Neumann-Randes verfälschen (zunächst) diese Bedingung (vgl. (5.3)). Werden nun die letzten $n_x - 2$ Zeilen von $R_{opt}$ mit dem Faktor $\frac{1}{2}$ multipliziert, ist die Symmetrie gegeben.

$$ R_{sym} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \begin{pmatrix} 0.26 & -0.09 & -0.04 & 0 \\ -0.09 & 0.26 & 0 & -0.04 \\ -0.08 & 0 & 0.26 & -0.09 \\ 0 & -0.08 & -0.09 & 0.26 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.26 & -0.09 & -0.04 & 0 \\ -0.09 & 0.26 & 0 & -0.04 \\ -0.04 & 0 & 0.13 & -0.045 \\ 0 & -0.04 & -0.045 & 0.13 \end{pmatrix} $$

Um nun wieder das gleiche Ergebnis $u_{in}$ zu erhalten, muss auch die rechte Seite $f_{in}$ entsprechend multipliziert werden.

$$ f_{sym} := \begin{pmatrix} f_6 \\ f_7 \\ \frac{1}{2} \cdot f_{10} \\ \frac{1}{2} \cdot f_{11} \end{pmatrix} $$

Nun ist die Lösung der Gleichung

$$ R_{sym} \cdot u_{in} = f_{sym} $$

gleich der Lösung von

$$ R_{opt} \cdot u_{in} = f_{in}. $$
• Berechnung von $R_0^H \cdot v = s$

Multipliziert man die letzten $n_x - 2$ Spalten der Matrix $(R_0^H)_{opt}$ (vgl. Gleichung (5.4)) mit dem Faktor $\frac{1}{2}$, so erhält man die symmetrische Matrix

$$(R^H)_{sym} = \begin{pmatrix} 0.26 & -0.09 & -0.04 & 0 \\ -0.09 & 0.26 & 0 & -0.04 \\ -0.04 & 0 & 0.13 & -0.045 \\ 0 & -0.04 & -0.045 & 0.13 \end{pmatrix}$$

Bei diesem Gleichungssystem wird die rechte Seite $s_{in}$ nicht verändert. Nach der Ermittlung der Lösung von

$$(R^H)_{sym} \cdot \hat{v}_{in} = s_{in}$$

müssen die letzten $n_x - 2$ Elemente von $\hat{v}_{in}$ mit dem Faktor $\frac{1}{2}$ multipliziert werden, um wieder die ursprüngliche Lösung von

$$(R^H)_{opt} \cdot v_{in} = s_{in}$$

zu erhalten.

Bemerkung:

Die Berechnung des hermiteschen Gleichungssystems kann bei der symmetrischen Matrix auch mit Hilfe der ursprünglichen Matrix durchgeführt werden. Da

$$(R^H)_{sym} = R^H_{sym}$$

(5.6)

gilt, lässt sich für das hermitesche Problem folgendes schreiben:

$$(R^H_{sym}) \cdot \hat{v} = R^H_{sym} \cdot \hat{v} = s$$

$\Leftrightarrow \quad R^H_{sym} \cdot \hat{v} = s$$

Somit muss nur einmal die Matrix $R_{sym}$ z.B. mit Hilfe der Cholesky-Zerlegung gesplittet werden und kann anschließend ebenfalls das hermitesche Problem lösen.
5.3 Die klassische LU-Zerlegung

Nutzt man zur Lösung des linearen Gleichungssystems die klassische LU-Zerlegung, wird ein Aufwand der Ordnung $\frac{2}{3}n^3$ benötigt. Zwar sind bei einer dünn besetzten Matrix $R_0$ die Matrizen $L$ und $U$ auch dünn besetzt, sie behalten jedoch nicht die Eigenschaft als Band-Matrizen. Man kann im Vorhinein nicht erkennen, an welcher Position die fill-in erzeugt werden.

Das Gleichungssystem (5.1) kann nun über die Matrizen $L$ und $U$ berechnet werden:

$$(L \cdot U) \cdot u = f$$

Durch die Eigenschaft, dass $L$ eine untere und $U$ eine obere Dreiecksmatrix ist, lässt sich die Lösung sehr schnell in zwei Schritten berechnen

$$L \cdot y = f$$
$$U \cdot u = y$$

Wurde die LU-Zerlegung für die Matrix $R_0$ durchgeführt, kann mit diesen beiden Matrizen die Lösung der Gleichung (5.2) ermittelt werden.

$$R_0^H \cdot v = (L \cdot U)^H \cdot v = U^H \cdot L^H \cdot v = s$$

Nun ist $U^H$ eine untere und $L^H$ eine obere Dreiecksmatrix, so dass das Problem durch

$$U^H \cdot y = s$$
$$L^H \cdot v = y$$

gelöst werden kann.

Für das mitgeführte Beispiel lässt sich $R_0$ durch das Produkt aus

$$L = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -0.04 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.09 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -0.04 & 0 & 0 & 0 & -0.35 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.31 & -0.12 & -0.01 & -0.09 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.35 & -0.03 & 0 & -0.39 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1
\end{pmatrix}$$
berechnen.

5.4 Die Cholesky-Zerlegung

Um eine Cholesky-Zerlegung durchführen zu können, muss die Matrix des Gleichungssystems symmetrisch positiv definit sein. Demnach können die im Kapitel 5.2.2 beschriebenen Matrizen \( R_{\text{sym}} \) mit Hilfe einer unteren Dreiecksmatrix dargestellt werden

\[
R_{\text{sym}} = L \cdot L^T
\]

Zur Berechnung dieser Dreiecksmatrix wird ein Aufwand von \( \frac{1}{2}n^3 \) benötigt. Das Gleichungssystem

\[
R_{\text{sym}} \cdot u = L \cdot L^T \cdot u = f
\]

cann wiederum in zwei Schritten berechnet werden

\[
L \cdot x = f
\]

\[
L^T \cdot u = x
\]

Da die Lösung des hermitschen Problems auf die Lösung der Gleichung mit der ursprünglichen symmetrischen Matrix \( R_{\text{sym}} \) zurückgeführt werden kann (vgl. Kapitel 5.2.2), ist kein weiterer Aufwand für

\[
(R_0^H)_{\text{sym}} \cdot \tilde{v}_{in} = f_{in}
\]

nötig.
Für das Beispiel gilt:

\[ R_{\text{sym}} = L \cdot L^T \]

mit

\[
L = \begin{pmatrix}
0.5099 & 0 & 0 & 0 \\
-0.1765 & 0.4784 & 0 & 0 \\
-0.0784 & -0.0289 & 0.3507 & 0 \\
0 & -0.0836 & -0.1352 & 0.3236
\end{pmatrix}
\]

5.5 Lösen mit Hilfe des ADI-Verfahrens

Das ADI-Verfahren wurde ursprünglich zum Lösen instationärer Differentialgleichungen entwickelt. Die Lösung \( u \) der Gleichung (5.1) ist jedoch eine stationäre Lösung eines elliptischen Randwertproblems. Aus diesem Grund wird diese Gleichung in eine zeitabhängige Variante umgeschrieben, die von einem Startpunkt \( u_{t_0} \) iterativ exaktere Lösungen \( u_{t_i} \) ermittelt. Für \( t \to \infty \) soll das Ergebnis die stationäre Lösung \( u \) sein.

Um aus dem Gleichungssystem ein iteratives Verfahren zu erhalten, wird die Matrix \( R_{\text{sym}} \) durch die Summe zweier Matrizen \( R_x \) und \( R_y \) dargestellt.

\[ R_{\text{sym}} = R_x + R_y \] (5.7)

Hierbei repräsentieren die beiden Matrizen die Approximation des Randwertproblems in x- bzw. in y-Richtung, so dass diese (durch die Wahl der zentralen finiten Differenzen) jeweils nur drei Bänder beinhalten. Die Bestimmung der Matrizen \( R_x \) und \( R_y \) wird in dem Kapitel 5.5.1 erläutert.

Mit (5.7) kann man Gleichung (5.1) in eine der beiden (äquivalenten) Formen

\[
(R_x + t \cdot I) \cdot u + (R_y - t \cdot I) \cdot u = f \] (5.8)

\[
(R_x - t \cdot I) \cdot u + (R_y + t \cdot I) \cdot u = f \] (5.9)

umwandeln. In der Peaceman-Rachford Methode [2] lässt sich nun der Vektor \( u^{(n+1)} \) in zwei Schritten aus dem Vektor \( u^{(n)} \) berechnen.

\[
(R_x + t \cdot I) \cdot u^{(n+\frac{1}{2})} + (R_y - t \cdot I) \cdot u^{(n)} = f \] (5.10)

\[
(R_x - t \cdot I) \cdot u^{(n+\frac{1}{2})} + (R_y + t \cdot I) \cdot u^{(n+1)} = f \] (5.11)

Da nun anstatt einem Gleichungssystem mit einer 5-Band Matrix mehrere Gleichungssysteme mit 3-Band Matrizen gelöst werden müssen, wird eine schnellere Ermittlung der Lösung \( u \) erhofft.

Durch die Wahl des Relaxationsparameters \( t \) wird die Schrittweite des instationären Problems
gesteuert. Eine optimale Wahl von $t$ wird in Kapitel 5.5.2 beschrieben. Als Abbruchkriterium der Iteration wird die neue Approximation $u^{(n+1)}$ mit dem vorigen Wert $u^{(n)}$ verglichen. Unterschreitet der Quotient aus dem Maximum von $|u^{(n+1)} - u^{(n)}|$ und dem Maximum von $|u^{(n+1)}|$ eine Schranke $\epsilon$, wird die Iteration beendet. Da bei den anderen Verfahren Genauigkeiten von $\epsilon = 10^{-15}$ erreicht werden, wird diese Schranke auch für das ADI-Verfahren übernommen.

Abbildung 5.1: ADI-Verfahren

**Bemerkung:**

### 5.5.1 Erzeugung der Richtungs-Matrizen

Die Matrix $R_{sym}$ ist eine 5-Band Matrix, da diese mit Hilfe der zentralen finiten Differenzen in x- bzw. in y-Richtung ermittelt wurde. Diese soll durch die Summe zweier Matrizen dargestellt werden.

$$R_{sym} = R_x + R_y$$

Da die Nummerierung des Gitters entlang der x-Achse verläuft (vgl. Kapitel 3.2), sind die Bänder links und rechts neben der Diagonalen nur von der Approximation des Randwertproblems in x-Richtung abhängig. Die zwei Bänder, die sich weiter außen befinden, machen die Approximation in y-Richtung aus. Lediglich auf der Diagonalen von $R_{sym}$ befinden sich gemischte Terme. Diese werden (in dieser Arbeit) je nach Auflösung ($n_x \times n_y$) gewichtet. Ist die Anzahl der Einteilungen in
x-Richtung größer als die in y-Richtung, so erhält die Diagonale von $R_x$ eine stärkere Gewichtung als die von $R_y$. Die Gewichte lassen sich berechnen durch:

\[
g_x = \frac{(n_x - 1)^2}{(n_x - 1)^2 + (n_y - 1)^2} \]  
\[
g_y = \frac{(n_y - 1)^2}{(n_x - 1)^2 + (n_y - 1)^2}
\]

Somit gilt für die Aufteilung der Beispiel-Matrix:

\[
R_{\text{sym}} = \begin{pmatrix}
0.26 & -0.09 & -0.04 & 0 \\
-0.09 & 0.26 & 0 & -0.04 \\
-0.04 & 0 & 0.13 & -0.045 \\
0 & -0.04 & -0.045 & 0.13
\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}
0.08 & 0 & -0.04 & 0 \\
0 & 0.08 & 0 & -0.04 \\
-0.04 & 0 & 0.04 & 0 \\
0 & -0.04 & 0 & 0.04
\end{pmatrix}
\]

### 5.5.2 Steuerung der Schrittweite

Das System

\[
R \cdot u = f
\]

wird in zwei Systeme der Form

\[
(R_x + t \cdot I) \cdot u^{(n+\frac{1}{2})} = f - (R_y - t \cdot I) \cdot u^{(n)}
\]

\[
(R_y + t \cdot I) \cdot u^{(n+1)} = f - (R_x - t \cdot I) \cdot u^{(n+\frac{1}{2})}
\]

überführt, wobei $R_x$ und $R_y$ die Stieltjes-Bedingung erfüllen.

Zur Analyse der Schrittweitensteuerung durch $t$ wird das System zunächst stark vereinfacht. Ist $R$ eine skalare Größe, kann man die Lösung zwar direkt bestimmen, sie lässt sich jedoch auch durch das ADI-Verfahren ermitteln. Es gilt:

\[
u^{(n+\frac{1}{2})} = \frac{f - (R_y - t \cdot I) \cdot u^{(n)}}{R_x + t}
\]

\[
u^{(n+1)} = \frac{f - (R_x - t \cdot I) \cdot u^{(n+\frac{1}{2})}}{R_y + t}
\]

Somit kann man $u^{(n+1)}$ direkt aus $u^{(n)}$ ermitteln mit

\[
u^{(n+1)} = \left(\frac{t - R_x}{t + R_x} \right) u^{(n)} + \left(\frac{2 \cdot t}{t + R_y} \right) f \]

\[:= V\]

\[:= f\]
5.5. LÖSEN MIT HILFE DES ADI-VERFAHRENS

Das Verfahren konvergiert, falls der skalare Wert \( V \) zwischen \(-1\) und \(1\) liegt. Dies ist aber für jedes \( t > 0 \) erfüllt, da

\[
\left| \frac{t - R_x}{t + R_x} \right| < 1 \quad \forall t > 0
\]

und

\[
\left| \frac{t - R_y}{t + R_y} \right| < 1 \quad \forall t > 0.
\]

Ziel ist es nun, den Relaxationsparameter \( t \) so zu wählen, dass \( |V| \) möglichst klein wird. Im skalaren Beispiel nimmt \( V \) mit \( t = R_x \) oder \( t = R_y \) den Wert 0 an. Somit wird die iterative Lösung nach nur einem Schritt ermittelt.

\[
u^{(n+1)} = 0 \cdot u^{(n)} + \hat{f} = \frac{1}{R_x + R_y} \cdot f = \frac{f}{R}
\]  \hspace{1cm} (5.12)

Für mehrdimensionale Matrizen \( R \) ist die Argumentation ähnlich. Die Konvergenz hängt nun nicht mehr von zwei skalaren Größen \( R_x \) und \( R_y \) ab, sondern von den Eigenwerten der Matrizen \( R_x \) und \( R_y \). Kennt man diese, so kann man \( t \) in jeder Iteration so wählen, dass ein Eigenwert und somit auch der zugehörige Eigenvektor des Gleichungssystems wegfällt. Demnach ist es beim ADI-Verfahren sinnvoll, in jedem Iterationsschritt einen anderen Wert für \( t \) zu nehmen, so dass jeder Eigenwert berücksichtigt werden kann.

Da es jedoch mit hohen Kosten verbunden ist, Eigenwerte einer Matrix zu ermitteln, versucht man, je nach Randwertproblem, die Eigenwerte abzuschätzen. In der hier vorliegenden Problemstellung ist es jedoch nicht ohne hohen Aufwand möglich, gute Abschätzungen für die Eigenwerte zu bestimmen.

Das ADI-Verfahren wird oft anhand einfacher Randwertprobleme erläutert, wie z.B.

\[
\begin{align*}
-u'' &= f & \text{in } \Omega \\
u &= 0 & \text{auf } \Gamma
\end{align*}
\]

Für dieses Randwertproblem lassen sich explizit die Eigenfunktionen und somit auch die Eigenwerte für die Operatoren in \( x \)-bzw. in \( y \)-Richtung bestimmen. Somit hat man auch die Eigenwerte der Matrizen berechnet und kann ein optimales \( t \) bestimmen.

Das hier vorliegende Randwertproblem hat (vereinfacht) die Form

\[
\begin{align*}
-(\sigma \cdot u')' &= f & \text{in } \Omega \\
\sigma \cdot u &= 0 & \text{auf } \Gamma_d \\
\partial_n u &= 0 & \text{auf } \Gamma_n
\end{align*}
\]

Eine Bestimmung der Eigenfunktion ist nun nicht so einfach, da die Funktion \( \sigma(x, y) \) in \( \Omega \) verschiedene Werte annehmen und daher nicht abgeschätzt werden kann.
Somit besteht nur noch die Möglichkeit, ein optimales $t$ mittels experimentellen Analysen zu ermitteln. Die Ergebnisse dieser Untersuchungen werden im Kapitel 6.1 vorgestellt.

5.6 Die UMFPACK Bibliothek


Bei den in dieser Arbeit vorkommenden Gleichungssystemen treten sehr häufig die gleichen Matrizen auf. Diese müssen nur einmal symbolisch analysiert werden und können dann beliebig oft die Gleichungssysteme mit Hilfe der numerischen Analyse lösen. Da man dem Löser sogar mitteilen kann, ob das ursprüngliche oder das hermitsche Problem gelöst werden soll, muss für beide Gleichungssysteme nur eine symbolische Analyse durchgeführt werden.
Kapitel 6

Numerische Ergebnisse

6.1 Steuerung des ADI-Verfahrens


6.1.1 Konvergenzgeschwindigkeiten in Abhängigkeit von $t$

In diesen Testbeispielen wird gezeigt, dass die Steuerung des Relaxationsparameters $t$ einen starken Einfluss auf die Konvergenzgeschwindigkeit des ADI-Verfahrens hat. Hierbei wird in allen Durchführungen eine Frequenz von 0 Hz und ein Gleichstromwiderstand von 1 Ω gesetzt. Durch die Veränderung der Auflösung des Problems werden verschieden große Gleichungssysteme aufgestellt, zu deren Lösung jeweils ein anderer Relaxationsparameter $t$ verwendet wird. Das optimale $t$ wird an der Anzahl der Iteration gemessen, die das ADI-Verfahren durchlaufen muss. In den Versuchsdurchführungen wird daher bei verschiedenen Relaxationsparametern die Anzahl der Iterationen dokumentiert und mit Hilfe einer Graphik veranschaulicht.
• 4 × 3 Auflösung

<table>
<thead>
<tr>
<th>t</th>
<th># Iterationen</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>0.02</td>
<td>57</td>
</tr>
<tr>
<td>0.04</td>
<td>28</td>
</tr>
<tr>
<td>0.06</td>
<td>27</td>
</tr>
<tr>
<td>0.08</td>
<td>24</td>
</tr>
<tr>
<td>0.10</td>
<td>21</td>
</tr>
<tr>
<td>0.12</td>
<td>27</td>
</tr>
<tr>
<td>0.14</td>
<td>32</td>
</tr>
<tr>
<td>0.16</td>
<td>37</td>
</tr>
<tr>
<td>0.18</td>
<td>42</td>
</tr>
<tr>
<td>0.20</td>
<td>46</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.1: Konvergenzgeschwindigkeit bei 4 × 3 Auflösung

Abbildung 6.1: Konvergenzgeschwindigkeit bei 4 × 3 Auflösung

Ergebnis:

Bei einer geringen Auflösung hat der Relaxationsparameter $t$ einen großen Einfluss auf die Konvergenzgeschwindigkeit. Wählt man den Wert zu klein, werden viele unnötige Iterationen durchlaufen, um ein akzeptables Ergebnis zu erhalten. Die Kurve fällt bis zur Schrittweite $t = 0.1$ ab, bei der bei nur noch 21 Iterationen durchgeführt werden müssen. Entfernt man sich wieder von diesem optimalen $t$, steigt die Anzahl der Iterationen. Will man nur einen groben Wert von $t_{opt}$ bestimmen, bewirken Abweichungen von 20% zum optimalen Parameter zwar mehr Iterationsschritte, diese Anzahl liegt dennoch in einer Toleranzgrenze von 20%. 
6.1. STEUERUNG DES ADI-VERFAHRENS

- $12 \times 8$ Auflösung

<table>
<thead>
<tr>
<th>$t$</th>
<th># Iterationen</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>0.33</td>
<td>102</td>
</tr>
<tr>
<td>0.39</td>
<td>99</td>
</tr>
<tr>
<td>0.45</td>
<td>94</td>
</tr>
<tr>
<td>0.51</td>
<td>89</td>
</tr>
<tr>
<td>0.57</td>
<td>86</td>
</tr>
<tr>
<td>0.63</td>
<td>93</td>
</tr>
<tr>
<td>0.69</td>
<td>101</td>
</tr>
<tr>
<td>0.75</td>
<td>110</td>
</tr>
<tr>
<td>0.81</td>
<td>118</td>
</tr>
<tr>
<td>0.87</td>
<td>127</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.2: Konvergenzgeschwindigkeit bei $12 \times 8$ Auflösung

Abbildung 6.2: Konvergenzgeschwindigkeit bei $12 \times 8$ Auflösung

Ergebnis:

• 25 × 25 Auflösung

<table>
<thead>
<tr>
<th>t</th>
<th># Iterationen</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>0.90</td>
<td>225</td>
</tr>
<tr>
<td>1.00</td>
<td>219</td>
</tr>
<tr>
<td>1.10</td>
<td>207</td>
</tr>
<tr>
<td>1.20</td>
<td>201</td>
</tr>
<tr>
<td>1.30</td>
<td>191</td>
</tr>
<tr>
<td>1.40</td>
<td>185</td>
</tr>
<tr>
<td>1.50</td>
<td>195</td>
</tr>
<tr>
<td>1.60</td>
<td>207</td>
</tr>
<tr>
<td>1.70</td>
<td>219</td>
</tr>
<tr>
<td>1.80</td>
<td>231</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.3: Konvergenzgeschwindigkeit bei 25 × 25 Auflösung

Abbildung 6.3: Konvergenzgeschwindigkeit bei 25 × 25 Auflösung

**Ergebnis:**

6.1. STEUERUNG DES ADI-VERFAHRENS

6.1.2 Variation der Leitfähigkeit


<table>
<thead>
<tr>
<th>Frequenz</th>
<th>$t_{opt}$</th>
<th># Iterationen</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>$10^{-4}$</td>
<td>0.3728</td>
<td>55</td>
</tr>
<tr>
<td>$10^{-3}$</td>
<td>0.3788</td>
<td>55</td>
</tr>
<tr>
<td>$10^{-2}$</td>
<td>0.3797</td>
<td>55</td>
</tr>
<tr>
<td>$10^{-1}$</td>
<td>0.3875</td>
<td>55</td>
</tr>
<tr>
<td>$10^{0}$</td>
<td>0.3916</td>
<td>55</td>
</tr>
<tr>
<td>$10^{1}$</td>
<td>0.3916</td>
<td>56</td>
</tr>
<tr>
<td>$10^{2}$</td>
<td>0.4070</td>
<td>55</td>
</tr>
<tr>
<td>$10^{3}$</td>
<td>0.4107</td>
<td>56</td>
</tr>
<tr>
<td>$10^{4}$</td>
<td>0.4129</td>
<td>56</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.4: Variation der Leitfähigkeit

Ergebnis:

Bei der Wahl des optimalen Relaxationswertes darf die Leitfähigkeit nicht vernachlässigt werden, da bei verschiedenen Leitfähigkeiten verschiedene beste Schrittweiten $t$ ermittelt werden. Dies zeigt, dass die Leitfähigkeit die Eigenwerte der Matrix beeinflusst und deren Approximation somit komplizierter wird.
6.1.3 Optimale Steuerung

Bei den folgenden Untersuchungen wird analysiert, wie das optimale $t$ und die Anzahl der Iterationen von der Auflösung und somit von der Anzahl der Unbekannten des Gleichungssystems abhängen.


Der Wert mit der kleineren Anzahl an Iterationen wird als Mittelpunkt des neuen Intervalls definiert, das durch den rechten und linken Nachbarn des vorigen Intervalls begrenzt wird. Wird keine Verbesserung erreicht, ist der beste Wert ermittelt.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Auflösung $n_x$</th>
<th>$n_y$</th>
<th>bester Relaxationspar.</th>
<th>Anzahl Iterationen</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>4</td>
<td>3</td>
<td>0.0953</td>
<td>21</td>
</tr>
<tr>
<td>4</td>
<td>4</td>
<td>0.1037</td>
<td>21</td>
</tr>
<tr>
<td>5</td>
<td>4</td>
<td>0.1502</td>
<td>28</td>
</tr>
<tr>
<td>5</td>
<td>5</td>
<td>0.1579</td>
<td>28</td>
</tr>
<tr>
<td>6</td>
<td>6</td>
<td>0.2226</td>
<td>40</td>
</tr>
<tr>
<td>10</td>
<td>7</td>
<td>0.4469</td>
<td>71</td>
</tr>
<tr>
<td>12</td>
<td>8</td>
<td>0.5417</td>
<td>86</td>
</tr>
<tr>
<td>15</td>
<td>10</td>
<td>0.7051</td>
<td>104</td>
</tr>
<tr>
<td>16</td>
<td>16</td>
<td>0.8318</td>
<td>118</td>
</tr>
<tr>
<td>18</td>
<td>17</td>
<td>0.9491</td>
<td>130</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>18</td>
<td>1.0427</td>
<td>143</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>20</td>
<td>1.0541</td>
<td>145</td>
</tr>
<tr>
<td>22</td>
<td>22</td>
<td>1.1933</td>
<td>165</td>
</tr>
<tr>
<td>25</td>
<td>25</td>
<td>1.3439</td>
<td>185</td>
</tr>
<tr>
<td>30</td>
<td>25</td>
<td>1.5360</td>
<td>208</td>
</tr>
<tr>
<td>30</td>
<td>30</td>
<td>1.6668</td>
<td>228</td>
</tr>
<tr>
<td>35</td>
<td>40</td>
<td>1.9959</td>
<td>258</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.5: optimaler Relaxationsparameter in Abhängigkeit der Auflösung
6.1. STEUERUNG DES ADI-VERFAHRENS

Abbildung 6.5: optimaler Relaxationsparameter in Abhängigkeit der Auflösung

Abbildung 6.6: Anzahl der Iterationen bei optimaler Steuerung

**Ergebnis:**

Je größer die Anzahl der Unbekannten wird, desto größer werden auch die optimale Schrittweite und die Anzahl der Iterationen. Die ermittelten Ergebnisse hängen auch von der Vorgabe des Intervalls ab. Wird ein größeres Intervall angegeben, werden zwar die gleiche Anzahl an minimalen Iterationen ausgegeben, der Relaxationsparameter kann sich jedoch ein wenig unterscheiden. So gibt es zum Beispiel bei einer Auflösung von $4 \times 3$ ein ganzes Intervall für $t$, in dem 21 Iterationen erreicht werden.
6.1.4 Unterschiedliche Steuerung bei gleicher Dimension

Graphik 6.5 lässt die Vermutung aufkommen, dass die Steuerung des Relaxationswertes \( t \) mit Hilfe der Wurzelfunktion abgeschätzt werden kann.

\[
t_{\text{opt}} \approx a \cdot \sqrt{\text{Anzahl der Unbekannten}}
\]

Abbildung 6.7: Approximation der Kurve durch Wurzelfunktion mit \( a = 0.051 \)

Hierbei ist diese Aussage jedoch sehr kritisch zu betrachten, da die Auflösungen \( n_x \) und \( n_y \) immer im gleichen Verhältnis vergrößert wurden (vgl. Tabelle 6.5).

Bei dem folgenden Versuch ist daher die Anzahl der Unbekannten konstant 240. Es werden diejenigen Auflösungen untersucht, für die gilt: \( n_x \cdot n_y = 240 \).

<table>
<thead>
<tr>
<th>Auflösung</th>
<th>( n_x )</th>
<th>( n_y )</th>
<th>bester Relaxationsparameter</th>
<th>Anzahl Iterationen</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>4</td>
<td>60</td>
<td></td>
<td>0.1140</td>
<td>38</td>
</tr>
<tr>
<td>5</td>
<td>48</td>
<td></td>
<td>0.1762</td>
<td>54</td>
</tr>
<tr>
<td>6</td>
<td>40</td>
<td></td>
<td>0.2149</td>
<td>63</td>
</tr>
<tr>
<td>8</td>
<td>30</td>
<td></td>
<td>0.3270</td>
<td>75</td>
</tr>
<tr>
<td>10</td>
<td>24</td>
<td></td>
<td>0.4685</td>
<td>81</td>
</tr>
<tr>
<td>12</td>
<td>20</td>
<td></td>
<td>0.6183</td>
<td>87</td>
</tr>
<tr>
<td>15</td>
<td>16</td>
<td></td>
<td>0.7447</td>
<td>106</td>
</tr>
<tr>
<td>16</td>
<td>15</td>
<td></td>
<td>0.8403</td>
<td>117</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>12</td>
<td></td>
<td>1.0256</td>
<td>144</td>
</tr>
<tr>
<td>24</td>
<td>10</td>
<td></td>
<td>1.1943</td>
<td>173</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.6: optimaler Relaxationsparameter bei gleicher Dimension

Ergebnis:

Der optimale Relaxationsparameter hängt nicht ausschließlich von der Anzahl der Unbekannten ab. Die Auflösung spielt dabei eine sehr große Rolle.
6.1.5 Aussagen über die Abschätzung des Relaxationsparameters
Es ist nicht möglich, aus der Auflösung und der Leitfähigkeit ein optimales \( t \) abzuschätzen. Aus der Versuchsreihe des Kapitels 6.1.1 erkennt man, dass kleine Abweichungen (20%) zu dem optimalen Relaxationsparameter immer noch akzeptable Ergebnisse liefern, da die Anzahl der Iterationen auch um ca. 20% steigen.
Das Problem liegt jedoch darin, dass man dieses Intervall nicht abschätzen kann. Verschiedene Leitfähigkeiten und im Besonderen die Auflösung des Gitters beeinflussen das \( t_{\text{opt}} \) sehr stark.

6.2 Vergleich der Löser
In diesem Kapitel werden die einzelnen Löser miteinander verglichen. Es soll die gesamte Ableitungs matrix und deren hermitsche Matrix berechnet werden. Das Testbeispiel beinhaltet drei verschiedene Frequenzen bei einer konstanten Cole-Cole Verteilung und zwei unterschiedliche Stromeinspeisungen.

6.2.1 Vergleich des ursprünglichen Systems mit dem optimierten System
Im Folgenden wird getestet, ob die Optimierung der Matrix einen Vorteil erbracht hat. Nur die LU-Zerlegung und der Black Box Löser können sowohl das große als auch das verkleinerte Gleichungssystem lösen.
Um die anderen Verfahren (Cholesky und ADI) anwenden zu können, sind symmetrische Matrizen und somit die Optimierung vorausgesetzt.
• Optimierung bei der LU-Zerlegung

<table>
<thead>
<tr>
<th>$n_x$</th>
<th>$n_y$</th>
<th>großes GLS</th>
<th>optimiertes GLS</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>5</td>
<td>5</td>
<td>0.01</td>
<td>0.01</td>
</tr>
<tr>
<td>6</td>
<td>6</td>
<td>0.01</td>
<td>0.01</td>
</tr>
<tr>
<td>10</td>
<td>7</td>
<td>0.07</td>
<td>0.06</td>
</tr>
<tr>
<td>12</td>
<td>8</td>
<td>0.14</td>
<td>0.12</td>
</tr>
<tr>
<td>15</td>
<td>10</td>
<td>0.42</td>
<td>0.35</td>
</tr>
<tr>
<td>16</td>
<td>16</td>
<td>1.33</td>
<td>1.16</td>
</tr>
<tr>
<td>18</td>
<td>17</td>
<td>2.19</td>
<td>1.85</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>18</td>
<td>3.36</td>
<td>2.84</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>20</td>
<td>4.03</td>
<td>3.56</td>
</tr>
<tr>
<td>22</td>
<td>22</td>
<td>6.65</td>
<td>5.85</td>
</tr>
<tr>
<td>25</td>
<td>25</td>
<td>13.39</td>
<td>11.55</td>
</tr>
<tr>
<td>25</td>
<td>30</td>
<td>23.02</td>
<td>20.91</td>
</tr>
<tr>
<td>30</td>
<td>30</td>
<td>33.60</td>
<td>30.84</td>
</tr>
<tr>
<td>35</td>
<td>40</td>
<td>106.17</td>
<td>94.22</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.7: LU-Zerlegung auf dem optimierten System

Abbildung 6.8: LU-Zerlegung auf dem optimierten System
• Optimierung bei UMFPACK

<table>
<thead>
<tr>
<th>Auflösung</th>
<th>Dauer (sek)</th>
<th>großes GLS</th>
<th>optimiertes GLS</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>$n_x$</td>
<td>$n_y$</td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>5</td>
<td>5</td>
<td>0.01</td>
<td>0.01</td>
</tr>
<tr>
<td>6</td>
<td>6</td>
<td>0.01</td>
<td>0.01</td>
</tr>
<tr>
<td>10</td>
<td>7</td>
<td>0.04</td>
<td>0.04</td>
</tr>
<tr>
<td>12</td>
<td>8</td>
<td>0.08</td>
<td>0.08</td>
</tr>
<tr>
<td>15</td>
<td>10</td>
<td>0.20</td>
<td>0.20</td>
</tr>
<tr>
<td>16</td>
<td>16</td>
<td>0.55</td>
<td>0.55</td>
</tr>
<tr>
<td>18</td>
<td>17</td>
<td>0.79</td>
<td>0.79</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>18</td>
<td>1.09</td>
<td>1.10</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>20</td>
<td>1.35</td>
<td>1.36</td>
</tr>
<tr>
<td>22</td>
<td>22</td>
<td>1.98</td>
<td>1.99</td>
</tr>
<tr>
<td>25</td>
<td>25</td>
<td>3.35</td>
<td>3.36</td>
</tr>
<tr>
<td>25</td>
<td>30</td>
<td>4.79</td>
<td>4.82</td>
</tr>
<tr>
<td>30</td>
<td>30</td>
<td>6.95</td>
<td>6.95</td>
</tr>
<tr>
<td>35</td>
<td>40</td>
<td>16.68</td>
<td>16.95</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.8: Optimierung mit UMFPACK

Abbildung 6.9: Optimierung mit UMFPACK

Ergebnis:

u.a. daran, dass auch UMFPACK die ursprüngliche Matrix optimiert und dass das Umwandeln des eigenen Matrix-Formates in das UMFPACK-Format viel Zeit in Anspruch nimmt. Das C++ Programm speichert die Matrizen in einer anderen Form als UMFPACK. Somit müsste die Daten für jede Berechnung so umformatiert werden, dass UMFPACK diese Gleichungssysteme lösen kann.

### 6.2.2 Vergleich aller optimierten Löser

In diesem Test sollen alle Löser das gleiche Problem bewältigen. Hierbei werden ausschließlich die optimierten Varianten angewandt.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Auflösung</th>
<th>Dauer (sek)</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>n_x</td>
<td>n_y</td>
</tr>
<tr>
<td>5</td>
<td>5</td>
</tr>
<tr>
<td>6</td>
<td>6</td>
</tr>
<tr>
<td>10</td>
<td>7</td>
</tr>
<tr>
<td>12</td>
<td>8</td>
</tr>
<tr>
<td>15</td>
<td>10</td>
</tr>
<tr>
<td>16</td>
<td>16</td>
</tr>
<tr>
<td>18</td>
<td>17</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>18</td>
</tr>
<tr>
<td>20</td>
<td>20</td>
</tr>
<tr>
<td>22</td>
<td>22</td>
</tr>
<tr>
<td>25</td>
<td>25</td>
</tr>
<tr>
<td>25</td>
<td>30</td>
</tr>
<tr>
<td>30</td>
<td>30</td>
</tr>
<tr>
<td>35</td>
<td>40</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tabelle 6.9: Vergleich aller optimierten Löser
Ergebnis:


Die schnellste Art, diese spezielle Gleichungssysteme zu lösen, wird mit Hilfe der UMFPACK-Bibliothek erreicht.

Kapitel 7

Zusammenfassung und Ausblick

Die Aufgabe der geoelektrischen Widerstandstomographie ist in zwei Schritte geteilt, das Lösen des Vorwärts- und des Rückwärtsproblems. In dieser Arbeit wird das direkte Problem (Vorwärtsproblem) zunächst diskretisiert und anschließend gelöst. Die Potentialbildung lässt sich durch eine Differentialgleichung beschreiben, die mit Hilfe der zentralen finiten Differenzen approximiert werden kann. Hat man auch die Randbedingungen in eine diskrete Form gebracht, lässt sich das Vorwärtsproblem mit Hilfe eines Gleichungssystems lösen.


# Abbildungsverzeichnis

1.1 Gebiet $\Omega$, Ränder $\Gamma_d$ und $\Gamma_n$, Elektroden ........................................... 2

2.1 Gebiet $\Omega$ mit Normalenvektoren $\nu_i$ auf den Rändern .......................... 12

3.1 äquidistante $u$-Gitter auf $\Omega$, $n_x = 4, n_y = 3$ ........................................... 17
3.2 Aufteilung des diskreten Gradienten ................................................................. 18
3.3 diskretes Divergenz-Gitter .................................................................................... 21
3.4 Diskretisierung der rechten Seite des RWP bei zwei $\delta$-Quellen ............. 23
3.5 Umgestaltung des Randwertproblems ............................................................... 24
3.6 diskretes Gitter am Neumann-Rand (vergrößert) ........................................ 25
3.7 Positionierung der $\delta$-Quellen in $\Omega$ ............................................................ 30
3.8 diskretes Potential bei grober Auflösung ......................................................... 30
3.9 diskretes Potential bei feiner Auflösung ......................................................... 31
3.10 Positionierung einer $\delta$-Quelle am Neumann-Rand ...................................... 31
3.11 diskretes Potential mit $\delta$-Quelle am Neumann-Rand ................................. 32
3.12 diskretes Potential bei vier $\delta$-Quellen ......................................................... 32
3.13 diskretes Gitter mit Elektrode ($\delta$-Quelle) und Messsonde ....................... 33
3.14 $\delta$-Quelle beliebig in $\Omega$ (1 D) ................................................................. 34
3.15 Rechtecke über diskrete Gitterpunkte definieren .............................................. 34
3.16 Hutchen-Funktion über $\delta$-Quelle (1 D) ......................................................... 35
3.17 $\delta$-Quelle beliebig in $\Omega$ (2 D) ................................................................. 36
3.18 Quadrate über diskrete Gitterpunkte definieren .............................................. 36
3.19 Hutchen-Funktion entlang der x-Kante ............................................................ 37
3.20 Hutchen-Funktion entlang der y-Kante ............................................................ 37
3.21 Beispiel-Anordnung der Messsonden ............................................................... 39
3.22 Potentialverteilungen bei zwei verschiedenen Stromeinspeisungen ........... 41
3.23 Gegenüberstellung beider Potentialverteilungen ........................................... 42
3.24 grobes $c$-Gitter auf feinem $u$-Gitter gelegt ...................................................... 43

4.1 Änderung der Leitfähigkeit lokal in $\tilde{x}$ ......................................................... 50
<table>
<thead>
<tr>
<th>Section</th>
<th>Description</th>
<th>Page</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>5.1</td>
<td>ADI-Verfahren</td>
<td>67</td>
</tr>
<tr>
<td>6.1</td>
<td>Konvergenzgeschwindigkeit bei $4 \times 3$ Auflösung</td>
<td>72</td>
</tr>
<tr>
<td>6.2</td>
<td>Konvergenzgeschwindigkeit bei $12 \times 8$ Auflösung</td>
<td>73</td>
</tr>
<tr>
<td>6.3</td>
<td>Konvergenzgeschwindigkeit bei $25 \times 25$ Auflösung</td>
<td>74</td>
</tr>
<tr>
<td>6.4</td>
<td>Variation der Leitfähigkeit</td>
<td>75</td>
</tr>
<tr>
<td>6.5</td>
<td>optimaler Relaxationsparameter in Abhängigkeit der Auflösung</td>
<td>77</td>
</tr>
<tr>
<td>6.6</td>
<td>Anzahl der Iterationen bei optimaler Steuerung</td>
<td>77</td>
</tr>
<tr>
<td>6.7</td>
<td>Approximation der Kurve durch Wurzelfunktion mit $a = 0.051$</td>
<td>78</td>
</tr>
<tr>
<td>6.8</td>
<td>LU-Zerlegung auf dem optimierten System</td>
<td>80</td>
</tr>
<tr>
<td>6.9</td>
<td>Optimierung mit UMFPACK</td>
<td>81</td>
</tr>
<tr>
<td>6.10</td>
<td>Vergleich aller optimierten Löser</td>
<td>83</td>
</tr>
</tbody>
</table>
Tabellenverzeichnis

2.1 Cole-Cole Parameter verschiedener Böden ........................................ 8

4.1 Kosten der verschiedenen Varianten bei gegebenen Beispielen ............... 55

6.1 Konvergenzgeschwindigkeit bei $4 \times 3$ Auflösung ............................... 72
6.2 Konvergenzgeschwindigkeit bei $12 \times 8$ Auflösung ............................... 73
6.3 Konvergenzgeschwindigkeit bei $25 \times 25$ Auflösung ............................... 74
6.4 Variation der Leitfähigkeit .................................................................... 75
6.5 optimaler Relaxationsparameter in Abhängigkeit der Auflösung .......... 76
6.6 optimaler Relaxationsparameter bei gleicher Dimension ...................... 78
6.7 LU-Zerlegung auf dem optimierten System ........................................... 80
6.8 Optimierung mit UMFPACK .................................................................. 81
6.9 Vergleich aller optimierten Löser ......................................................... 82
Literaturverzeichnis


Danksagungen

Mein besonderer Dank gilt

Herrn Prof. Dr. Reißel für die Übernahme des Hauptreferats und

Herrn Dr. Lustfeld als Koreferent sowie

beiden vorher genannten für ihre fachliche Unterstützung.