

Πολυτεχνείο Κρήτης
Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης



Διδακτορική Διατριβή

ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ ΣΕ ΣΥΓΧΡΟΝΕΣ
ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΕΣ ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΕΣ ΓΙΑ
ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΠΟΛΛΑΠΛΩΝ ΧΩΡΙΩΝ

ΝΙΚΟΛΑΟΣ Δ. ΒΙΛΑΝΑΚΗΣ

Χανιά, 2024

ΕΠΤΑΜΕΛΗΣ ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

Τίτλος (ελληνικά/αγγλικά):

Αριθμητικές Μέθοδοι σε Σύγχρονες Υπολογιστικές Αρχιτεκτονικές για Προβλήματα
Πολλαπλών Χωρίων

Numerical Methods in Modern Computing Architectures for Multidomain
Problems

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

ΝΙΚΟΛΑΟΣ Δ. ΒΙΛΑΝΑΚΗΣ

ΤΡΙΜΕΛΗΣ ΣΥΜΒΟΥΛΕΥΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ:

- Καθηγητής Ι. Σαριδάκης (Επιβλέπων)
- Καθηγητής Α. Δελής
- Καθηγητής Α. Βαφείδης

Εγκρίθηκε από την επταμελή εξεταστική επιτροπή την 23^η Ιανουαρίου 2025

(υπογραφή)

1. Καθηγητής Ιωάννης Σαριδάκης

IOANNIS SARIDAKIS
23/01/2025 18:07

2. Καθηγητής Ανάργυρος Δελής

Anargyros Delis
Digitally signed by
Delis
Date: 2025.01.23 13:14:34
+02'00'

3. Καθηγητής Αντώνιος Βαφείδης

ANTONIOS VAFEIDIS
23/01/2025 19:18

4. Επίκουρος Καθηγητής Εμμανουήλ Βαρουχάκης

Manolis
Varouchakis
Digitally signed by
Manolis Varouchakis
Date: 2025.01.24
14:17:09 +02'00'

5. Καθηγητής Γεώργιος Καρατζάς

Digitally signed by
Georgios Karatzas
Date: 2025.01.28
11:54:18 +02'00'

6. Καθηγητής Εμμανουήλ Βάβαλης

7. Διευθυντής Ερευνών ΙΤΕ-ΙΥΜ Δρ. Νικόλαος Καμπάνης

NIKOLAOS
KAMPANIS
S
Digitally signed by
NIKOLAOS KAMPANIS
DN: c=GR,
serialNumber=ERMIS-930
28330, sn=KAMPANIS,
givenName=NIKOLAOS,
cn=NIKOLAOS KAMPANIS
Date: 2025.01.27 16:20:35
+02'00'

Ψηφιακή Βεβαίωση Εγγράφου

Μπορείτε να ελέγξετε την ισχύ του εγγράφου
σκανάροντας το QR code ή εισάγοντας τον κωδικό
στο docs.gov.gr/validate



Επιβεβαιώνεται το γνήσιο. Υπουργείο
Ψηφιακής Διακυβέρνησης / Verified by the Ministry
of Digital Governance, Hellenic Republic
20250123193931+02'00'

Κωδικός εγγράφου: i1JN05VtHYmByxSrnr9zsg

000000: 1/1

Υπογραφή:

ΕΜΜΑΝΟΥΗΛ ΒΑΒΑΛΗΣ

Πατρώνυμο: ΑΝΑΣΤΑΣΙ

ΑΦΜ: 029115093

Ημ. Υπογραφής: 23/01/2025 19:38:52

Η παρούσα Διδακτορική Θέση εκπονήθηκε ως μέρος των απαιτήσεων για την απόκτηση του Διδακτορικού Διπλώματος στην κατεύθυνση **Εφαρμοσμένα Μαθηματικά στις Επιστήμες Μηχανικών** της Σχολής Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης του Πολυτεχνείου Κρήτης.

Η Εξεταστική Επιτροπή

Τριμελής Επιτροπή

Σαριδάκης Ιωάννης
Καθηγητής, Επιβλέπων, Σχολή ΜΠΔ, Πολυτεχνείο Κρήτης

Βαφείδης Αντώνιος
Καθηγητής, Σχολή ΜΗΧΟΠ, Πολυτεχνείο Κρήτης

Δελής Ανάργυρος
Καθηγητής, Σχολή ΜΠΔ, Πολυτεχνείο Κρήτης

Υπόλοιπα Μέλη

Βάβαλης Εμμανουήλ
Καθηγητής, Τμήμα ΗΜΜΥ, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Βαρουχάκης Εμμανουήλ
Επίκουρος Καθηγητής, Σχολή ΜΗΧΟΠ, Πολυτεχνείο Κρήτης

Καμπάνης Νικόλαος
Διευθυντής Ερευνών, ΙΤΕ-ΙΥΜ

Καρατζάς Γεώργιος
Καθηγητής, Σχολή ΧΗΜΗΠΕΡ, Πολυτεχνείο Κρήτης

Ευχαριστίες

Στο Σύμβουλο της Διδακτορικής Διατριβής μου Καθηγητή κ. Ιωάννη Σαριδάκη για τη στήριξη του σε όλη τη διαδρομή μου στο Εργαστήριο Εφαρμοσμένων Μαθηματικών του Πολυτεχνείου Κρήτης και την καθοριστική συμβολή του στην ολοκλήρωση της διδακτορικής διατριβής μου.

Στον Καθηγητή κ. Αντώνη Βαφειδή και τον Δρ. Νικόλαο Οικονόμου από το Εργαστήριο Γεωφυσικής του Πολυτεχνείου Κρήτης για τη συνεργασία που είχαμε και την ανεκτίμητη συνεισφορά τους στο μεγαλύτερο μέρος της έρευνας αυτής της διατριβής.

Στον Καθηγητή κ. Αργύρη Δελή για το ενδιαφέρον που επέδειξε και τη σημαντική συνεισφορά του στην ολοκλήρωση της διατριβής μου.

Στα υπόλοιπα μέλη της επταμελούς επιτροπής για την τιμή που μου έκαναν να συμμετάσχουν στην υποστήριξη της διατριβής μου, για τα σχόλια και τις παρατηρήσεις τους.

Στην Καθηγήτρια κ. Έλενα Παπαδοπούλου για την ουσιαστική συμβολή της ώστε κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της διατριβής να αποτελώ ενεργό μέλος στο διδακτικό έργο που παρέχει το Ε.Ε.Μ.Η.Υ. στη σχολή Μηχανικών Ορυκτών Πόρων.

Στους φίλους και συνεργάτες στο Ε.Ε.Μ.Η.Υ. Δρ. Ιωάννη Αθανασάκη, Δρ. Παρασκευά Στρατή, Δρ. Νικόλαο Σπανουδάκη, Δρ. Αναστάσιο Σηφαλάκη, Δρ. Μαριάννα Παπαδομανωλάκη, Δρ. Βασίλη Μάνδικα, Υπ. Διδάκτορα Γεώργιο Κοκκινάκη καθώς επίσης και το Δρ. Κωνσταντίνο Περράκη.

Τους ευχαριστώ όλους θερμά.

Τέλος, ένα ευχαριστώ δεν είναι αρκετό στο δάσκαλο, σύμβουλο και καθοδηγητή αρχικά, συνεργάτη και φίλο στη συνέχεια, για περισσότερα από 10 χρόνια στο Εργαστήριο Εφαρμοσμένων Μαθηματικών του Πολυτεχνείου Κρήτης, αείμνηστο Αναπληρωτή Καθηγητή Μανώλη Μαθιουδάκη, με τη βοήθεια του οποίου ξεκίνησα πριν αρκετά χρόνια αυτή την προσπάθεια, το αποτέλεσμα της οποίας ελπίζω να είναι αντάξιο της αμέριστης εμπιστοσύνης που έδειξε στο πρόσωπο μου.

Χανιά, 2024
Νικόλαος Δ. Βιλανάκης

Στη σύζυγο μου Ελένη και τα παιδιά μου Δημήτρη και Αγάπη.

Περίληψη

Τα προβλήματα πολλαπλών χωρίων απαντώνται συχνά σε ένα μεγάλο εύρος επιστημονικών πεδίων όπου και ερμηνεύουν διάφορα φυσικά φαινόμενα. Η διαδικασία της επίλυσης ενός προβλήματος με τέτοια χαρακτηριστικά απαιτεί κατά κανόνα σύνθετα μαθηματικά μοντέλα στα οποία εφαρμόζονται προηγμένες αριθμητικές μέθοδοι και πολύπλοκοι αλγόριθμοι που υλοποιούνται σε ισχυρά υπολογιστικά περιβάλλοντα.

Στον τομέα της Γεωφυσικής, ένα από τα πιο σημαντικά προβλήματα αυτού του είδους είναι η μοντελοποίηση ηλεκτρομαγνητικών πεδίων. Συγκεκριμένα, στις ηλεκτρομαγνητικές μεθόδους διασκόπησης, που αποτελούν ένα βασικό εργαλείο γεωφυσικών ερευνών, ελέγχονται οι φυσικές ιδιότητες του υπεδάφους κατά τον εντοπισμό γεωλογικών σχηματισμών με τη βοήθεια εκπεμπόμενων ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων και των αποκρίσεων τους. Στα πλαίσια της διαδικασίας, μια συσκευή, κατάλληλα προσανατολισμένη πάνω από το έδαφος, εκπέμπει ηλεκτρομαγνητικά κύματα τα οποία διαδίδονται στο χώρο, συναντούν ύλη με διαφορετική ανά περιοχή ηλεκτρική αγωγιμότητα στο υπέδαφος με την οποία αλληλεπιδρούν, με την απόκριση τους να καταγράφεται και τη διαφοροποίηση να προδίδει τα φυσικά χαρακτηριστικά του υλικού.

Η μαθηματική μοντελοποίηση της διαδικασίας βασίζεται στη συσχέτιση της συμπεριφοράς ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου στο χώρο, η οποία και αποτυπώνεται στις εξισώσεις του Maxwell, από κοινού με τις καταστατικές εξισώσεις, οι οποίες συνδέουν τα πεδία με τις ιδιότητες της ύλης. Η σύνθεση των παραπάνω οδηγεί σε μια διαφορική εξίσωση της μορφής Helmholtz, η οποία και προσομοιώνει τη συμπεριφορά της έντασης του δευτερεύοντος ηλεκτρικού πεδίου στο χώρο, δεδομένης της ύπαρξης πηγής ηλεκτρικού ρεύματος, που δημιουργεί αντίστοιχα πρωτεύον ηλεκτρικό πεδίο σε αυτόν. Η αριθμητική επίλυση της διαφορικής εξίσωσης σε 3-διάστατα μοντέλα με κατάλληλες συνοριακές συνθήκες απαιτείται να παράγει ακριβείς προσεγγίσεις και, σύμφωνα και με την υπάρχουσα επιστημονική αντίληψη, αποτελεί μια ιδιαίτερα απαιτητική αποστολή, για διάφορους λόγους, όπως το μέγεθος του προβλήματος και η επακόλουθη πολυπλοκότητα, το μεγάλο υπολογιστικό κόστος αλλά και οι φυσικές παράμετροι που συνθέτουν την εξίσωση π.χ. η ετερογένεια υλικών συνεπάγεται διαφορετική ηλεκτρική αγωγιμότητα ανά περιοχή, συνεπώς ασυνέχεια του αντίστοιχου συντελεστή της εξίσωσης.

Στα πλαίσια της παρούσας διατριβής αναπτύχθηκε και παρουσιάζεται επιλυτής της μη ομογενούς εξίσωσης Helmholtz, ο οποίος αξιοποιεί ένα τέταρτης τάξης συμπαγές αριθμητικό σχήμα πεπερασμένων διαφορών σε κλιμακωτό πλέγμα για την προσέγγιση της έντασης του δευτερεύοντος ηλεκτρικού πεδίου στον 3-διάστατο ημικόσμο. Οι συνιστώσες της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζονται σε συγκεκριμένες θέσεις του πλέγματος όπου παράλληλα θεωρείται και η σημειακή ηλεκτρική αγωγιμότητα. Η διακριτοποίηση καταλήγει σε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων, το οποίο με τη σειρά του, οδηγεί σε ένα block γραμμικό σύστημα, με την επίλυση του οποίου προσεγγίζονται οι συνιστώσες της έντασης.

Για την επίλυση του κύριου γραμμικού συστήματος, ο πίνακας του οποίου δεν έχει ωφέλιμες ιδιότητες, χρησιμοποιείται η ευσταθειοποιημένη επαναληπτική μέθοδος διςζυγών κλίσεων (BiCGSTAB) ενώ για επιμέρους επιλύσεις γραμμικών συστημάτων (εσωτερικά του κύριου συστήματος) γίνεται εφαρμογή της κυκλικής μεθόδου αναγωγής μονών-ζυγών (Cyclic Reduction Method) καθώς και παραλλαγής του αλγορίθμου Fourier.

Ο επιλυτής έχει σχεδιασθεί ώστε να υλοποιείται παράλληλα σε πολυπύρρηνα συστήματα κοινής μνήμης με χρήση του προτύπου OpenMP, με περιορισμένες απαιτήσεις σε μνήμη, με κατάλληλο σχεδιασμό των υπολογισμών και χωρίς αποθήκευση στοιχείων του πίνακα.

Όπως παρουσιάζεται δε στο αντίστοιχο τμήμα της διατριβής, ο χρόνος ολοκλήρωσης δοκιμών με πολλαπλά νήματα εκτέλεσης θεωρείται ικανοποιητικός για ρεαλιστικές υλοποιήσεις. Επιπλέον, παρουσιάζεται η επέκταση του επιλυτή που αναπτύχθηκε για περιβάλλοντα κατανεμημένης μνήμης, με χρήση της οποίας είναι εφικτή η ταυτόχρονη επίλυση της διαφορικής εξίσωσης για διαφορετικές θέσεις πηγής.

Η διάρθρωση της διατριβής έχει ως εξής:

- Στο πρώτο κεφάλαιο επιχειρείται μια εισαγωγή με την αναφορά σε έννοιες και επιμέρους εργαλεία επιστημονικού υπολογισμού που χρησιμοποιήθηκαν στη διατριβή.
- Στο δεύτερο κεφάλαιο παρουσιάζεται το πρόβλημα Γεωφυσικής, με ανάλυση της ηλεκτρομαγνητικής μεθόδου διασκόπησης πομπού-δέκτη και των εφαρμογών της, των εξισώσεων του Maxwell και της εξίσωσης του ηλεκτρικού πεδίου καθώς και των μεθόδων επίλυσης που συναντώνται στη βιβλιογραφία.
- Στο τρίτο κεφάλαιο αναπτύσσεται η μέθοδος επίλυσης με εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος που επιλέχθηκε και παρουσίαση των διαδρομών επίλυσης του γραμμικού συστήματος που δοκιμάστηκαν με τους αντίστοιχους αλγόριθμους.
- Στο τέταρτο κεφάλαιο ακολουθούν τα αποτελέσματα των υλοποιήσεων επίλυσης σε αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης. Για την επίλυση με BiCGSTAB παρουσιάζονται δοκιμές σε ομοιόμορφα και μη ομοιόμορφα πλέγματα με διαφορετικά χαρακτηριστικά ως προς τις φυσικές παραμέτρους του προβλήματος. Επίσης, γίνεται αναφορά και παρουσίαση της υλοποίησης αυτής μεθόδου σε δοκιμή που πραγματοποιήθηκε σε σύστημα υπολογισμών κατανεμημένης μνήμης.
- Στα δύο παραρτήματα που ακολουθούν παρουσιάζονται δύο επιπλέον προβλήματα πολλαπλών χωρίων στην επίλυση των οποίων συμμετείχε ο γράφων κατά τη διάρκεια της διατριβής
 - Στο παράρτημα Α, παρουσιάζεται πρόβλημα Ιατρικής, συγκεκριμένα στο πρόβλημα της διάδοσης των καρκινικών όγκων στον ανθρώπινο εγκέφαλο, ο οποίος και αποτελείται από περιοχές με διαφορετικά χαρακτηριστικά ως προς τη διάχυση υλικού. Στα πλαίσια της μελέτης του προβλήματος αναπτύχθηκε αριθμητική μέθοδος επίλυσης του και νέος παράλληλος αλγόριθμος. Στο παράρτημα αρχικά περιγράφεται ο πυρήνας του προβλήματος και κατόπιν η μέθοδος επίλυσης, ενώ στη συνέχεια ακολουθεί ο παράλληλος αλγόριθμος πάνω στον οποίο υλοποιήθηκε η μέθοδος σε ετερογενή συστήματα με κάρτες γραφικών καθώς και τα αποτελέσματα υλοποιήσεων.
 - Στο παράρτημα Β, περιγράφεται πρόβλημα Περιβαλλοντικής Μηχανικής, συγκεκριμένα στο πρόβλημα υφαλμύρισης των παράκτιων υδροφορέων, όπου προτείνεται μια νέα αριθμητική μέθοδος επίλυσης με χρήση εξειδικευμένου λογισμικού επίλυσης ΜΔΕ.¹

Το τέλος της εργασίας ολοκληρώνεται με τις επιστημονικές εργασίες στις οποίες συμμετείχε ο γράφων κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της διατριβής καθώς και στοιχεία βιβλιογραφίας.

¹Για τη μελέτη και παρουσίαση προτάσεων επίλυσης των παραπάνω προβλημάτων, ο γράφων συμμετείχε από κοινού με άλλους ερευνητές σε επιμέρους δράσεις της ερευνητικής ομάδας του Πολυτεχνείου Κρήτης, η οποία και είχε αναλάβει μέρους του έργου αυτού, από κοινού με ερευνητικές ομάδες άλλων Ιδρυμάτων Τριτοβάθμιας, κατά τη διάρκεια του Εθνικού Ερευνητικού Προγράμματος Θαλής. Δεδομένου ότι τα αναλυτικά στοιχεία που αφορούν τα παραπάνω προβλήματα έχουν ήδη παρουσιαστεί εκτενώς και είναι διαθέσιμα, στα Παραρτήματα Α και Β παρατίθενται μόνο βασικά στοιχεία που αφορούν τη συνδρομή του γράφοντος στην επίλυση τους.

Abstract

Multidomain problems involving partial differential equations (PDEs) are critical in simulating complex physical phenomena across various fields. The process of their investigation involves advanced numerical methods and complex algorithms implemented in robust computing environments.

The above consideration applies to the geophysics field among others. In particular, one of the most intriguing and, at the same time, essential area of interest is the accurate modeling of electromagnetic fields which serves as a crucial tool for geophysical applications. Electromagnetic (EM) induction methods involve generating a primary electromagnetic field using a transmitter coil which induces eddy currents in the subsurface. These currents in turn produce a secondary field which is detected by receiver coils, and its characteristics depend on the electrical conductivity of the subsurface materials. Analyzing these secondary fields allows geophysicists to infer the presence and properties of subsurface features, such as mineral deposits, groundwater, or other geological structures. In EM methods, the Helmholtz equation derived from Maxwell's equations is commonly used to describe scattered or residual electric field in the time or the frequency domain. Various numerical techniques are employed in different models to solve these equations.

This thesis presents a high-order compact finite difference scheme for solving the non-homogenous Helmholtz equation for the electric field intensity, when a vertical magnetic dipole (VMD) source is used in a three-dimensional half-space model. The residual electric field intensity is approximated using a fourth-order compact finite difference (FD) discretization on a staggered grid, with conductivity defined at discrete locations -where the components of the unknown electric field intensity are also marked out- allowing discontinuities to pass through cells. The above conformation leads to a system of differential equations and ultimately to a block linear system, where the coefficient matrices involved are large and sparse, each with a particular structure. To that end, a number of different numerical methods are being deployed: the BiCGSTAB iterative method is used for the main linear system, while inner linear system solutions with specific structured matrices employ the Cyclic Reduction method or the Fourier algorithm, depending on the block matrix layout.

The implementation of the solver targets primarily standalone multithreaded computing environments. The entire computation is performed under a matrix-free approach with a proper arrangement of operations which lead to the solution using contained computational resources.

The effectiveness of the proposed solver is evaluated through a series of test problems with both uniform and non-uniform grid spacing, comparing numerical and analytical solutions in several scenarios with multiple source heights in the homogeneous half-space. Results indicate that the proposed solver is effective for field use, with errors within an acceptable range and reduced computational effort in terms of time and resources.

Περιεχόμενα

1	Διαμόρφωση Προβλημάτων με Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις	19
1.1	Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις	19
1.1.1	Προβλήματα Αρχικών-Συνοριακών Τιμών	20
1.1.2	Η εξίσωση Helmholtz	21
1.2	Προβλήματα Πολλαπλών Χωρίων	22
1.3	Μέθοδοι Αριθμητικής Επίλυσης ΜΔΕ	22
1.3.1	Διακριτοποίηση του υπολογιστικού χώρου	23
1.3.2	Η μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών	24
1.4	Μέθοδοι Επίλυσης Γραμμικών Συστημάτων	26
1.4.1	Κυκλική μέθοδος αναγωγής μονών-ζυγών (Cyclic Reduction Method)	26
1.4.2	Η ευσταθειοποιημένη (stabilized) μέθοδος διςζυγών κλίσεων (Bi-CGSTAB)	33
1.4.3	Προρύθμιση Πίνακα Συντελεστών	35
1.5	Επιστημονικοί Υπολογισμοί σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές	39
1.5.1	Υπολογιστικά συστήματα κοινής μνήμης	39
2	Πρόβλημα Γεωφυσικής	45
2.1	Εισαγωγή - Ηλεκτρομαγνητική διασκόπηση σε γεωφυσικές έρευνες	45
2.1.1	Μέθοδοι ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης και εφαρμογή	45
2.1.2	FDEM μέθοδοι κινούμενου πομπού-δέκτη	47
2.1.3	Επίλυση ευθέως προβλήματος	50
2.2	Η εξίσωση του προβλήματος	55
2.2.1	Εξισώσεις Maxwell	55
2.2.2	Κατασκευή της κυματικής εξίσωσης	57
2.2.3	Η εξίσωση Helmholtz για το ηλεκτρικό πεδίο	58
3	Αριθμητική Επίλυση Προβλήματος Γεωφυσικής	62
3.1	Διακριτοποίηση του Χωρίου με Συμπαγές Σχήμα Πεπερασμένων Διαφορών	62
3.2	Εφαρμογή του Σχήματος Διακριτοποίησης	67
3.3	Επίλυση Γραμμικού Συστήματος	99
3.3.1	Επίλυση με BiCGSTAB	102
3.3.2	Επίλυση με απαλοιφή	109
4	Αριθμητικά Αποτελέσματα Προβλήματος Γεωφυσικής	114
4.0.1	Μοντέλο δοκιμών	116
4.1	Υλοποίηση σε αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης	120
4.1.1	Αποτελέσματα υλοποίησης με επίλυση συστήματος με απαλοιφή	120
4.1.2	Αποτελέσματα υλοποίησης με BiCGSTAB	124
4.1.3	Έλεγχος τάξης σύγκλισης μεθόδου	159
4.2	Υλοποίηση σε αρχιτεκτονικές πλέγματος	161

4.3	Συμπεράσματα	165
4.4	Μελλοντικοί Στόχοι	166
A'	Πρόβλημα Ιατρικής	175
A'.1	Διάχυση Πρωτογενών Καρκινικών Όγκων - Περιγραφή	175
A'.2	Αριθμητική Μέθοδος	176
A'.2.1	Εφαρμογή προρύθμισης	179
A'.3	Παράλληλος Αλγόριθμος	180
A'.4	Αριθμητικά Αποτελέσματα	183
B'	Πρόβλημα Περιβαλλοντικής Μηχανικής	186
B'.1	Εισαγωγή - Υφαλμύριση Υδροφορέων Λόγω Υπεράντλησης	186
B'.2	Περιγραφή Προβλήματος	186
B'.3	Επίλυση με FEniCS	188
B'.3.1	Το λογισμικό FEniCS	188
B'.3.2	Υποθέσεις μοντέλου	189
B'.4	Αριθμητικά αποτελέσματα	190
Γ'	Γραφήματα Προβλήματος Γεωφυσικής	194
Δ'	Σχετικές Δημοσιεύσεις	210

Κατάλογος Σχημάτων

1.1	Καρτεσιανά πλέγματα πεπερασμένων διαφορών στις 2 διαστάσεις: (α) κόμβοι στις κορυφές κελιών, (β) κόμβοι στα κέντρα κελιών, (γ) κλιμακωτό (πηγή σχήματος: [113])	23
1.2	Προσεγγίσεις αρίθμησης κόμβων πλέγματος πεπερασμένων διαφορών στις 2 διαστάσεις: (α) λεξικογραφική, (β) red-black αρίθμηση, (γ) red-black zebra	24
1.4	Σχηματική αναπαράσταση βήματος V-κύκλου σε Τεχνική Πολυπλέγματος	37
1.3	Περιπτώσεις κύκλων Τεχνικής Πολυπλέγματος για διαφορετικό αριθμό πλεγμάτων (πηγή σχήματος: [113])	37
1.6	Σχηματική αναπαράσταση αρχιτεκτονικών UMA-NUMA	40
1.7	Αναπαράσταση της προσέγγισης Fork–Join σε υπολογισμούς με OpenMP	41
1.8	Εκτέλεση do loop στο OpenMP	42
1.9	Σχηματική αναπαράσταση περιβάλλοντος κατανεμημένης μνήμης	44
2.1	Σχηματική αναπαράσταση της επαναληπτικής διαδικασίας σε μια ηλεκτρομαγνητική έρευνα	46
2.2	Σχηματική αναπαράσταση τομών	47
2.3	Επισκόπηση της αρχής λειτουργίας ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης στη μέθοδο κινούμενου πομπού-δέκτη (πηγή σχήματος: [48])	48
2.4	Διάγραμμα φάσης. Ανάλυση του καταγραφέντος R ηλεκτρομαγνητικού κύματος στο δέκτη R_x , σε δευτερεύον κύμα S με συνιστώσες S_p (πραγματική) και S_{quad} (φανταστική), και σε πρωτεύον P	48
2.5	Ενδεικτική σύγκριση ηλεκτρομαγνητικών μεθόδων στο πεδίο των συχνοτήτων (FDEM) και στο πεδίο του χρόνου (TDEM) (πηγή σχήματος: [51])	49
2.6	Ηλεκτρομαγνητική διασκόπηση από αέρα (πηγή σχήματος: [121])	50
2.7	Ενδεικτική εφαρμογή AMR	53
2.8	Ενδεικτική εφαρμογή PML	54
2.9	Αναπαράσταση τιμών αγωγιμότητας στο xz –επίπεδο	60
3.1	Οι θέσεις όπου υπολογίζονται οι συνιστώσες της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου E σε ένα υπολογιστικό κελί $C_{i,j,k}$ του κλιμακωτού πλέγματος Yee	62
3.2	Υπολογιστικό κελί στη διεπαφή του εδάφους	64
3.3	Θέσεις προσέγγισης της ϕ' σε μονοδιάστατο πλέγμα βάσει της 3.4	65
3.4	Θέσεις προσέγγισης της ϕ'' σε μονοδιάστατο πλέγμα βάσει της 3.8	66
3.5	Αρίθμηση αγνώστων στις 3 διαστάσεις για ενδεικτικό πλέγμα	68
3.6	Αρίθμηση αγνώστων στο xz –επίπεδο	68
3.7	Αρίθμηση αγνώστων στο xy –επίπεδο	69
3.8	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την \mathbf{E}_y^x στον κόμβο $i = 1$	70
3.9	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την \mathbf{E}_y^x στους κόμβους με $i = 2, \dots, n_x - 2$	71
3.10	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την \mathbf{E}_y^x στον κόμβο $i = n_x$	71

3.11	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την \mathbf{E}_y^x σε κόμβους στα ενδιάμεσα xy -επίπεδα	72
3.12	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} για τους κόμβους $i = 1, \dots, n_x$	72
3.13	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} για τους κόμβους $i = n_x + 1, \dots, n_x n_y - 2n_x$	73
3.14	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} για τους κόμβους $i = n_x n_y - 2n_x + 1, \dots, n_x(n_y - 1)$	73
3.15	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} στα xy -επίπεδα	74
3.16	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^y στα xy -επίπεδα	75
3.17	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^z στα xy -επίπεδα	77
3.18	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^{zz} στα xy -επίπεδα	78
3.19	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_z^x	80
3.20	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_z^{xz}	80
3.21	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^y	82
3.22	Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_z^y	86
3.23	Δομή των block του πίνακα συντελεστών U	97
3.24	Δομή των block του πίνακα συντελεστών U	98
3.25	Δομή των block του πίνακα συντελεστών U	98
3.26	Δομή των block του πίνακα συντελεστών U	98
3.27	Δομή του block P	99
3.28	Έλεγχος ιδιοτιμών πινάκων P, V και U , $n_x = n_y = n_z = 16$, $f = 3000Hz$	109
4.1	Διάγραμμα ροής υπολογισμών του επιλυτή	115
4.2	Μοντέλο δοκιμών	116
4.3	Οι συνιστώσες E_x, E_y, E_z σε ομοιόμορφα διαμερισμένο πλέγμα. Το TH υποδηλώνει το ύψος του πομπού από το έδαφος, το T τη θέση του πομπού ενώ το Ground τη θέση του εδάφους. Το πλέγμα που εμφανίζεται ενδεικτικά μεταξύ εδάφους και πηγής είναι μέρος του συνολικού πλέγματος της διακριτοποίησης που εκτείνεται σε όλο το εύρος του μοντέλου.	117
4.4	Οι συνιστώσες E_x, E_y, E_z σε μη-ομοιόμορφα διαμερισμένο πλέγμα. Το TH υποδηλώνει το ύψος του πομπού από το έδαφος, το T τη θέση του πομπού ενώ το Ground τη θέση του εδάφους. Το πλέγμα που εμφανίζεται ενδεικτικά μεταξύ εδάφους και πηγής είναι μέρος του συνολικού πλέγματος της διακριτοποίησης που εκτείνεται σε όλο το εύρος του μοντέλου.	117
4.5	Αναπαράσταση της διαδρομής των υπολογισμών προς την επαλήθευση της αριθμητικής λύσης	118
4.6	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού μέρους των E_x και E_y στις περιπτώσεις P_1, P_2, P_3 και P_4	120
4.7	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 1000Hz	121
4.8	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 1000Hz	121
4.9	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz	121
4.10	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz	121
4.11	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz	122
4.12	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz	122
4.13	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz	122

4.14	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz . . .	122
4.15	Ευκλείδεια νόρμα υπολοίπου $\ r_i\ = \ b_i - U E_i\ $ κατά την επαναληπτική διαδικασία	124
4.16	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T με την αναλυτική λύση σε ομοιόμορφο πλέγμα με μήκος κελιού h . Η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζεται σε θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες $(x, y = 5, z = 22)$ για $h = 5m$ (ροζ *), $(x, y = 10, z = 22)$ για $h = 10m$ (μαύρο +) και $(x, y = 20, z = 22)$ για $h = 20m$ (μωβ 6-γωνο)	125
4.17	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T με την αναλυτική λύση σε ομοιόμορφο πλέγμα με μήκος κελιού h . Η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζεται σε θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες $(x, y = 2.5, z = 22)$ για $h = 5m$ (ροζ *), $(x, y = 5, z = 22)$ για $h = 10m$ (μαύρο +) και $(x, y = 10, z = 22)$ για $h = 20m$ (μωβ 6-γωνο)	125
4.18	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους \mathbf{E}_x^T - αναλυτικής λύσης	126
4.19	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους \mathbf{E}_y^T - αναλυτικής λύσης	126
4.20	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T με την αναλυτική λύση σε μη ομοιόμορφα πλέγματα με διαστάσεις κελιών όπως αναφέρονται στον πίνακα 4.2	127
4.21	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T με την αναλυτική λύση σε μη ομοιόμορφα πλέγματα με διαστάσεις κελιών όπως αναφέρονται στον πίνακα 4.2	127
4.22	Γράφημα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους του \mathbf{E}_x^T στις περιπτώσεις από $D1$ μέχρι και $D5$. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %.	128
4.23	Γράφημα σχετικού σφάλματος φανταστικού μέρους του \mathbf{E}_x^T στις περιπτώσεις από $D1$ μέχρι και $D5$. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %.	128
4.24	Γράφημα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους του \mathbf{E}_y^T στις περιπτώσεις από $D1$ μέχρι και $D5$. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα	129
4.25	Γράφημα σχετικού σφάλματος φανταστικού μέρους του \mathbf{E}_y^T στις περιπτώσεις από $D1$ μέχρι και $D5$. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %.	129
4.26	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους \mathbf{E}_x^T - αναλυτικής λύσης σε περιπτώσεις μη ομοιόμορφων πλεγμάτων	130
4.27	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους \mathbf{E}_y^T - αναλυτικής λύσης σε μη ομοιόμορφα πλέγματα	130
4.28	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα	131
4.29	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους \mathbf{E}_x^T - αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα	131
4.30	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους \mathbf{E}_y^T - αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα	132
4.31	Πραγματικό μέρος του δευτερεύοντος πεδίου \mathbf{E}_x για $f = 3000Hz$ για $y = 0$	132
4.36	Πραγματικό μέρος του συνολικού πεδίου \mathbf{E}_y^T για $y = 0$	132
4.32	Πραγματικό μέρος του συνολικού πεδίου \mathbf{E}_x^T για $y = 0$	133
4.33	Διάγραμμα ισοϋψών και κλίσεων πραγματικού μέρους δευτερεύοντος πεδίου \mathbf{E}_x για $y = 0$	133
4.34	Διάγραμμα ισοϋψών και κλίσεων πραγματικού μέρους συνολικού πεδίου \mathbf{E}_x^T για $y = 0$	133

4.35	Πραγματικό μέρος του δευτερεύοντος πεδίου \mathbf{E}_y για $y = 0$	134
4.37	Διάγραμμα ισοϋψών και κλίσεων πραγματικού μέρους δευτερεύοντος πεδίου \mathbf{E}_y για $y = 0$	134
4.38	Διάγραμμα ισοϋψών και κλίσεων πραγματικού μέρους συνολικού πεδίου \mathbf{E}_y^T για $f = 3000\text{Hz}$	134
4.39	Διάγραμμα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους των $\mathbf{E}_x^T, \mathbf{E}_y^T$ στις περιπτώσεις από P_1 μέχρι και P_8 . Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %	136
4.40	Διάγραμμα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους των $\mathbf{E}_x^T, \mathbf{E}_y^T$ στις περιπτώσεις από P_9 μέχρι και P_{16} . Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %	136
4.41	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 900Hz	137
4.42	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz	137
4.43	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz	137
4.44	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz	138
4.45	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 900Hz	138
4.46	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz	138
4.47	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz	139
4.48	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz	139
4.49	Σύγκριση φανταστικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz	139
4.50	Πραγματικό μέρος της \mathbf{E}_x^T σε ομοιόμορφο πλέγμα με μήκος κελιού h . Η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζεται σε θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες $(x, y = 5, z = 42)$ για $h = 5m$ (ροζ *), $(x, y = 10, z = 42)$ για $h = 10m$ (μαύρο +) και $(x, y = 20, z = 42)$ για $h = 20m$ (μωβ 6-γωνο)	142
4.51	Πραγματικό μέρος της \mathbf{E}_y^T σε ομοιόμορφο πλέγμα με μήκος κελιού h . Η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζεται σε θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες $(x, y = 2.5, z = 42)$ για $h = 5m$ (ροζ *), $(x, y = 5, z = 42)$ για $h = 10m$ (μαύρο +) και $(x, y = 10, z = 42)$ για $h = 20m$ (μωβ 6-γωνο)	142
4.52	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα στα 42m	143
4.53	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα στα 42m	143
4.54	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους \mathbf{E}_x^T - αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα στα 42m	144
4.55	Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους \mathbf{E}_y^T - αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα στα 42m	144
4.56	Γράφημα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους των $\mathbf{E}_x^T, \mathbf{E}_y^T$ στις περιπτώσεις από T_1 μέχρι και T_8 του πίνακα 4.4. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %	145
4.57	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 900Hz στα 42m	146
4.58	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz στα 42m	146
4.59	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz στα 42m	147
4.60	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz στα 42m	147
4.61	Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 900Hz στα 42m	148

4.62 Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz στα 42m	148
4.63 Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz στα 42m	149
4.64 Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz στα 42m	149
4.65 Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_x^T στα 3000Hz ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)	151
4.66 Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_y^T στα 3000Hz ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)	152
4.67 Χρόνος υλοποίησης και επαναλήψεις της BiCGSTAB σε ομοιόμορφη διαμέριση με χρήση 16 νημάτων εκτέλεσης και ανοχή σφάλματος της μεθόδου 10^{-6}	155
4.68 Χρόνος υλοποίησης και επαναλήψεις της BiCGSTAB σε ανομοιόμορφη διαμέριση με χρήση 16 νημάτων εκτέλεσης και ανοχή σφάλματος της μεθόδου 10^{-6}	155
4.69 Σύγκριση συνολικού χρόνου υλοποίησης με διαφορετικά νήματα εκτέλεσης σε μοιόμορφη διαμέριση	156
4.70 Σύγκριση συνολικού χρόνου υλοποίησης με διαφορετικά νήματα εκτέλεσης σε ανομοιόμορφη διαμέριση	156
4.71 Το speedup σε πολυεπεξεργαστικό σύστημα με πολλαπλά νήματα εκτέλεσης σε ομοιόμορφη (Uni) και μη ομοιόμορφη (non-Uni) διαμέριση όπου Uni A: $h_x = h_y = h_z = 20m$, Uni B: $h_x = h_y = h_z = 10m$, Uni C: $h_x = h_y = h_z = 5m$ και non-Uni A: $h_x = h_z = 20m, h_y = 80m$, non-Uni B: $h_x = h_z = 10m, h_y = 40m$, non-Uni C: $h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$	157
4.72 Πράξεις κινητής υποδιαστολής σε ανομοιόμορφη διαμέριση με 16 νήματα εκτέλεσης	157
4.73 Σύγκριση μέσου χρόνου υλοποίησης με 16 νήματα εκτέλεσης για κάθε διαδικασία της U-Mult σε ανομοιόμορφη διαμέριση	158
4.74 Διάγραμμα διαδρομής υπολογισμών σε περιβάλλον κατανεμημένης μνήμης όπου κάθε κόμβος υπολογίζει την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου για συγκεκριμένη θέση πομπού	162
4.75 Σχετικό σφάλμα E_x^T σε απόσταση $> 15m$ για τις θέσεις πομπού του πίνακα 4.11	163
4.76 Σχετικό σφάλμα E_y^T σε απόσταση $> 15m$ για τις θέσεις πομπού του πίνακα 4.11	164
4.77 Πολλαπλές θέσεις πομπού και ζητούμενη προσέγγιση	164
A'.1 Ασυνεχής συντελεστής D	177
A'.2 Ιδιοτιμές του πίνακα A πριν (αριστερά) και μετά την προρύθμιση (δεξιά)	179
A'.3 Ιδιοτιμές του πίνακα A_b πριν (αριστερά) και μετά την προρύθμιση (δεξιά)	179
A'.5 Τρισδιάστατο γράφημα (α') και διάγραμμα ισοϋψών (β') της προσέγγισης της λύσης για $t = 1$	183
A'.6 Τρισδιάστατο γράφημα (α') και διάγραμμα ισοϋψών (β') της προσέγγισης της λύσης για $t = 2$	183
A'.7 Τρισδιάστατο γράφημα (α') και διάγραμμα ισοϋψών (β') της προσέγγισης της λύσης για $t = 3$	184
A'.8 Τρισδιάστατο γράφημα (α') και διάγραμμα ισοϋψών (β') της προσέγγισης της λύσης για $t = 4$	184
A'.9 Μέτρηση speedup για υλοποιήσεις CPU Matlab και CPU-GPU Matlab-CUDA Fortran	185

B'.1	Η δομή του FEniCS	189
B'.2	Αποτύπωση του μετώπου της αλμυρής σφήνας	191
B'.3	Οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης $P(Q^{(k)})$	192
B'.4	Ρυθμός άντλησης Q_i για κάθε γεώτρηση	193
Γ'.1	Διάγραμμα σχετικού σφάλματος των περιπτώσεων του πίνακα 4.3 του πραγματικού μέρους των \mathbf{E}_x^T , \mathbf{E}_y^T σε υλοποιήσεις ομοιόμορφης διαμέρισης $5m$. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %.	195
Γ'.2	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $900Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_z = 5m$, $\mathbf{h}_y = 20m$)	196
Γ'.3	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $900Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_z = 5m$, $\mathbf{h}_y = 20m$)	197
Γ'.4	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $10000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_z = 5m$, $\mathbf{h}_y = 20m$)	198
Γ'.5	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $10000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_z = 5m$, $\mathbf{h}_y = 20m$)	199
Γ'.6	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $30000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_z = 5m$, $\mathbf{h}_y = 20m$)	200
Γ'.7	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $30000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_z = 5m$, $\mathbf{h}_y = 20m$)	201
Γ'.8	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $900Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)	202
Γ'.9	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $900Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)	203
Γ'.10	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $3000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)	204
Γ'.11	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $3000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)	205
Γ'.12	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $10000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)	206
Γ'.13	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $10000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)	207
Γ'.14	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $30000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)	208
Γ'.15	Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $30000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)	209

Κατάλογος Πινάκων

4.1	Περιπτώσεις δοκιμών για πλέγμα ομοιόμορφης διαμέρισης με $h = h_x = h_y = h_z = 10m$ με επίλυση του συστήματος με απαλοιφή	121
4.2	Υποδιαστήματα ανά κατεύθυνση για πλέγματα ανομοιόμορφης διαμέρισης που δοκιμάστηκαν	127
4.3	Περιπτώσεις δοκιμών για πλέγμα μη ομοιόμορφης διαμέρισης σε πολύ χαμηλά ύψη	135
4.4	Περιπτώσεις δοκιμών για πλέγμα μη ομοιόμορφης διαμέρισης σε χαμηλό ύψος	145
4.5	Πλήθος αναγκαίων βασικών και βοηθητικών μονοδιάστατων διατάξεων βάσει διάστασης στον επιλυτή	153
4.6	Τάξη σύγκλισης σε ομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 3000Hz$ και $TH = 22m$	159
4.7	Τάξη σύγκλισης σε ανομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 3000Hz$ και $TH = 22m$	159
4.8	Τάξη σύγκλισης σε ομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 900Hz$ και $TH = 22m$	160
4.9	Τάξη σύγκλισης σε ομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 10000Hz$ και $TH = 22m$	160
4.10	Τάξη σύγκλισης σε ομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 30000Hz$ και $TH = 22m$	160
4.11	Πίνακας περιπτώσεων θέσης πομπού σε σχέση με την απόσταση της από τη θέση 0 στην x -κατεύθυνση	163
B'.1	Σύγκριση βέλτιστων τιμών άντλησης μεταξύ αναλυτικής λύσης, υλοποίησης HC και FEniCS	191

Κατάλογος αλγορίθμων

1	Αλγόριθμος της μεθόδου BiCGSTAB ([78])	34
2	Ατελής παραγοντοποίηση iLU	36
3	Ο αλγόριθμος του επιλυτή με BiCGSTAB	102
4	Η διαδικασία BiCGSTAB-U	102
5	Ο αλγόριθμος της διαδικασίας U-Mult	103
6	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα A	103
7	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα B	103
8	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα C	104
9	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα D	104
10	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα Z	104
11	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα K	104
12	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα M	104
13	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα N	105
14	Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα P	105
15	Πολλαπλασιασμοί διανύσματος με πίνακα B_k με τη διαδικασία B-Mult	106
16	Επίλυση με τη μέθοδο Fourier με τη διαδικασία Solve-Fourier	106
17	Επίλυση με Cyclic Reduction με τη διαδικασία Solve-CR	106
18	Διαδικασία αναγωγής της μεθόδου Cyclic Reduction	107
19	Διαδικασία οπισθοδρόμησης της μεθόδου Cyclic Reduction	108
20	Ο αλγόριθμος της επίλυσης με απαλοιφή	111
21	Διαδικασία υπολογισμού b_1	112
22	Διαδικασία υπολογισμού b_2	112
23	Διαδικασία επίλυσης με τη BiCGSTAB	112
24	Η διαδικασία επίλυσης του $Px = b$	112
25	Η διαδικασία προρύθμισης του P μέσω τεχνικής πολυπλέγματος με επίλυση με BiCGSTAB	112
26	Διαδικασία πολλαπλασιασμού $s = Ut$	113
27	Διαδικασία πολλαπλασιασμού $s = Vt$	113
28	Διαδικασία υπολογισμού b_3	113
29	Αλγόριθμος επίλυσης συστήματος Α'.9	178
29	Παράλληλος αλγόριθμος επίλυσης συστήματος Α'.9	181
30	Αλγόριθμος υλοποίησης της μεθόδου BiCGSTAB στη GPU	182

Κεφάλαιο 1

Διαμόρφωση Προβλημάτων με Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις

1.1 Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις

Οι Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις αποτελούν το βασικό τρόπο με τον οποίο διατυπώνουμε τους νόμους που διέπουν τα φυσικά φαινόμενα του κόσμου γύρω μας. Τα φαινόμενα αυτά εξελίσσονται στο τρισδιάστατο γενικά χώρο άρα, στην περίπτωση που το μέγεθος που τα εξηγεί έχει βαθμωτό χαρακτήρα, περιγράφονται από συναρτήσεις της μορφής

$$u = u(x, y, z, t) \quad (1.1)$$

όπου (x, y, z) συνήθως οι χωρικές μεταβλητές και t η χρονική μεταβλητή. Αυτές τις συναρτήσεις αναζητά ως λύση μια ΜΔΕ, περιέχοντας μεταξύ άλλων συναρτήσεων και βαθμωτών, τις μερικές παραγώγους τους. Συνήθως, μια ΜΔΕ για τη συνάρτηση u περιγράφεται, στον κατάλληλο χώρο, ως

$$F(x, y, \dots, u, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \dots, \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y}, \dots) = G(x, y, \dots) \quad (1.2)$$

Αν η F είναι γραμμική συνάρτηση του u και των παραγώγων της, η ΜΔΕ καλείται γραμμική, διαφορετικά μη γραμμική (οι μη-γραμμικές ΜΔΕ κατατάσσονται σε επιμέρους υποκατηγορίες). Ανάλογα την τάξη της μεγαλύτερης μερικής παραγώγου, οι γραμμικές ΜΔΕ χωρίζονται σε 1ης, 2ης, κ.ο.κ. τάξης ενώ παράλληλα χαρακτηρίζονται ως ομογενείς, όταν $G(x, y, \dots) = 0$ ή μη ομογενείς όταν $G(x, y, \dots) \neq 0$. Επιπλέον, οι γραμμικές ΜΔΕ 2ης τάξης χαρακτηρίζονται ως ελλειπτικού, παραβολικού ή υπερβολικού τύπου, ανάλογα το πρόσημο της ποσότητας $b^2 - 4ac$, όπου a, b, c οι τιμές των συναρτήσεων-συντελεστών των όρων που περιέχουν 2ης τάξης παραγώγους. Για παράδειγμα, αν $u : \Omega \subseteq \mathbb{C}^2$ με

$$F = a \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + b \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + c \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + d \frac{\partial u}{\partial x} + e \frac{\partial u}{\partial y} + f u \quad (1.3)$$

- αν $b^2 - 4ac > 0$, η εξίσωση καλείται υπερβολική στο Ω . Στις υπερβολικές ΜΔΕ περιλαμβάνονται κυματικά φαινόμενα και γενικότερα όπως ηχητικά ή ηλεκτρομαγνητικά κύματα.
- αν $b^2 - 4ac = 0$, η εξίσωση καλείται παραβολική στο Ω , και περιγράφει χρονικά εξαρτώμενες διαδικασίες όπου η κατάσταση ενός συστήματος μεταβάλλεται προς την κατεύθυνση που καθορίζεται από την ίδια την εξίσωση

- αν $b^2 - 4ac < 0$, η εξίσωση καλείται ελλειπτική στο Ω , με την οποία περιγράφονται σταθερές κατάστασης διαδικασίες, μη εξαρτώμενες από τη χρονική μεταβολή.

Υπενθυμίζοντας τον τελεστή Laplace $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, από τις πλέον χαρακτηριστικές Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις είναι

- η εξίσωση Laplace

$$\nabla^2 u = 0 \quad (1.4)$$

η οποία είναι ελλειπτικού τύπου και περιγράφει φαινόμενα όπου η συνάρτηση $u(x, y, z)$ αναπαριστά ένα βαθμωτό πεδίο που βρίσκεται σε σταθερή κατάσταση,

- η κυματική εξίσωση

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{1}{c^2} \nabla^2 u \quad (1.5)$$

η οποία είναι υπερβολικού τύπου, περιγράφει τη διάδοση κυμάτων στο χώρο και το χρόνο. Ο συντελεστής c καθορίζει τα ειδικότερα χαρακτηριστικά του φαινομένου και εξαρτάται από το μέσο διάδοσης, και

- η εξίσωση διάχυσης

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D \nabla^2 u \quad (1.6)$$

η οποία είναι παραβολικού τύπου και περιγράφει τη διάχυση μεγεθών όπως η θερμότητα στο χώρο και το χρόνο, με τη βοήθεια του συντελεστή διάχυσης D .

Στις περισσότερες περιπτώσεις, το μέγεθος το οποίο περιγράφεται με μια ΜΔΕ, έχει διανυσματικά χαρακτηριστικά. Τότε χαρακτηρίζεται ως διανυσματικό πεδίο και η 1.1 γράφεται

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(x, y, z, t) \quad (1.7)$$

Έτσι, το ζητούμενο μέγεθος έχει περισσότερες της μιας συνιστώσες όποτε και περισσότερες της μιας άγνωστες συναρτήσεις ως προς (x, y, z, t) -μάλιστα, σε περίπτωση που το πεδίο αυτό είναι στατικό, είναι ανεξάρτητο του χρόνου t και εξαρτάται μόνο από τις χωρικές μεταβλητές (x, y, z) . Χαρακτηριστικό παράδειγμα, το ηλεκτρικό πεδίο

$$\mathbf{E} = (E_x(x, y, z), E_y(x, y, z), E_z(x, y, z)) \quad (1.8)$$

όπου οι ζητούμενες ποσότητες είναι οι συνιστώσες E_x, E_y, E_z του πεδίου. Οι ΜΔΕ μέσων των οποίων αναζητείται ένα διανυσματικό πεδίο καταλήγουν σε ένα σύστημα Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων.

1.1.1 Προβλήματα Αρχικών-Συνοριακών Τιμών

Για την επίλυση οποιασδήποτε ΜΔΕ, είναι απαραίτητο να τεθούν εξ αρχής πρόσθετες συνθήκες που σχετίζονται με τον μονοσήμαντο προσδιορισμό της λύσης αυτής της εξίσωσης. Αυτές χαρακτηρίζονται ως **αρχικές συνθήκες**, όταν αφορούν την κατάσταση ενός χρονοεξαρτώμενου συστήματος για $t = t_0$ -συνεπώς καθορίζουν τη συνάρτηση $u(x, y, z, t)$ ή τις παραγώγους της σε αυτή τη χρονική στιγμή- και ως **συνοριακές συνθήκες**, όταν αφορούν τις χωρικές μεταβλητές x, y, z στα άκρα του διαστήματος που αυτές ορίζονται (όπως συμβαίνει στο βασικό πρόβλημα γεωφυσικής που αντιμετωπίζεται στην παρούσα διατριβή). Είναι επακόλουθο, ότι η επίλυση μιας ΜΔΕ προϋποθέτει την εισαγωγή του συνόλου των απαραίτητων συνθηκών που απαιτούνται. Η ΜΔΕ, από κοινού με τις συνθήκες που το καθορίζουν, ορίζει ένα πρόβλημα αρχικών - συνοριακών συνθηκών, το οποίο αντιμετωπίζεται συνολικά στα πλαίσια της διαδικασίας επίλυσης.

1.1.2 Η εξίσωση Helmholtz

Μια ΜΔΕ που συχνά αντιμετωπίζεται σε προβλήματα φυσικών φαινομένων είναι η εξίσωση Helmholtz. Για την αναπαράσταση της, θεωρείται αρχικά η κυματική εξίσωση 1.5, η οποία, όπως ειπώθηκε, είναι υπερβολικού τύπου ΜΔΕ. Είναι γνωστό ότι κυματικά φαινόμενα, όπως τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα, που εμφανίζουν αρμονική χρονική εξάρτηση, δηλαδή χρονική μεταβολή της μορφής $u(x, y, z, t) = u_0 \cos(\omega t + \theta)$, με γωνιακή συχνότητα $\omega = 2\pi f > 0$, f η συχνότητα του κύματος, μπορούν να περιγραφούν διαχωρίζοντας χωρικές και χρονική μεταβλητές, μελετώντας τα σε σταθερή κατάσταση, επιτρέποντας έτσι και τη μελέτη της συμπεριφοράς τους σε διαφορετικές συχνότητες εκπομπής. Θεωρώντας αρμονική χρονική εξάρτηση $e^{-i\omega t}$ ([83]) για την $u \in \Omega \subseteq \mathbb{C}^3$ προκύπτει ότι

$$u(x, y, z, t) = \phi(x, y, z)e^{-i\omega t} \quad (1.9)$$

όπου $\phi(x, y, z)$ το χωρικό μέρος του κύματος. Με διαδοχικές παραγωγίσεις της 1.9 ως προς την χρονική (t) και τις χωρικές ($\mathbf{x} = (x, y, z)$) μεταβλητές, προκύπτει ότι

$$\frac{\partial^2 u(\mathbf{x}, t)}{\partial t^2} = -\omega^2 \phi(\mathbf{x})e^{-i\omega t} \quad (1.10)$$

και

$$\frac{\partial^2 u(\mathbf{x}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(\mathbf{x}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u(\mathbf{x}, t)}{\partial z^2} = \left(\frac{\partial^2 \phi(\mathbf{x})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi(\mathbf{x})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi(\mathbf{x})}{\partial z^2} \right) e^{-i\omega t} \quad (1.11)$$

Παράλληλα, με την εισαγωγή του τελεστή Laplace

$$\nabla^2 u(\mathbf{x}, t) = \frac{\partial^2 u(\mathbf{x}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(\mathbf{x}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u(\mathbf{x}, t)}{\partial z^2}$$

η 1.11 γράφεται

$$\nabla^2 u(\mathbf{x}, t) = e^{-i\omega t} \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) \quad (1.12)$$

οπότε με αντικατάσταση στην 1.5

$$e^{-i\omega t} \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) = -\frac{1}{c^2} \omega^2 e^{-i\omega t} \phi(\mathbf{x}) \quad (1.13)$$

Εν τέλει, διαιρώντας με $e^{-i\omega t}$, προκύπτει η εξίσωση **Helmholtz**

$$\nabla^2 \phi + k^2 \phi = 0 \quad (1.14)$$

όπου $k = \frac{\omega}{c}$ ο κυματικός αριθμός, η οποία είναι μια χρονικά ανεξάρτητη κυματική ΜΔΕ ελλειπτικού τύπου που περιγράφει την χωρική κατανομή διάφορων κυματικών πεδίων, αποτελώντας βασική εξίσωση στη θεωρία της κυματικής διάδοσης. Εμφανίζεται σε κατηγορίες κυμάτων όπως τα ακουστικά, τα ηλεκτρομαγνητικά και τα ελαστικά. Στην περίπτωση των ακουστικών κυμάτων τα κυματικά πεδία είναι βαθμωτά και επομένως η εξίσωση Helmholtz εμφανίζεται στην ως άνω βαθμωτή μορφή της ενώ στην περίπτωση των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων τα κυματικά πεδία είναι διανυσματικά και επομένως η εξίσωση Helmholtz εμφανίζεται στη διανυσματική -ομογενή- μορφή της

$$\nabla^2 \mathbf{F} + k^2 \mathbf{F} = 0 \quad (1.15)$$

Στην περίπτωση δε που η εξίσωση περιγράφει διάδοση στο χώρο με ύπαρξη πηγής, γράφεται στη μη ομογενή μορφή της

$$\nabla^2 \mathbf{F} + k^2 \mathbf{F} = J_s \quad (1.16)$$

όπου J_s ο πηγαίος όρος. Η ανάπτυξη της διανυσματικής μη ομογενούς εξίσωσης Helmholtz για το ηλεκτρικό πεδίο μέσω των εξισώσεων Maxwell ακολουθεί στο κεφάλαιο 2.2.2, όπου και χρησιμοποιείται στη διαδικασία της επίλυσης του ευθέως προβλήματος της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης.

1.2 Προβλήματα Πολλαπλών Χωρίων

Τα προβλήματα πολλαπλών χωρίων (ΠΠΧ) αναφέρονται σε προβλήματα αρχικών/συνοριακών συνθηκών όπου η περιοχή ενδιαφέροντος, το χωρίο Ω , δεν είναι ομοιογενής, αλλά αποτελείται από επιμέρους τμήματα που χαρακτηρίζονται από διαφορετικές φυσικές ή χημικές ιδιότητες. Ενδεικτικά παραδείγματα ΠΠΧ συναντώνται σε πλήθος επιστημονικών πεδίων όπως:

- Στη φυσική, όπου η μελέτη της διάδοσης κυμάτων ή η θερμική μεταφορά σε μέσα με διαφορετικές ιδιότητες μπορεί να απαιτούν τη χρήση τεχνικών πολλαπλών χωρίων για την ακριβή περιγραφή της συμπεριφοράς του συστήματος.
- Στη μηχανική, τα προβλήματα πολλαπλών χωρίων μπορεί να προκύψουν όταν αναλύεται μια δομή που περιλαμβάνει διάφορα υλικά με διαφορετικές μηχανικές ιδιότητες.
- Στη βιολογία και στην ιατρική, όπου μοντέλα που περιλαμβάνουν πολλαπλά όργανα ή ιστούς με διαφορετικές βιολογικές ή φυσιολογικές συνθήκες απαιτούν προσεγγίσεις πολλαπλών χωρίων για την προσομοίωση των διαδικασιών που εμπλέκονται.
- Στην περιβαλλοντική επιστήμη, η μοντελοποίηση της ροής υδάτων ή της μεταφοράς ρύπων σε περιοχές με διαφορετικά οικοσυστήματα ή γεωλογικές συνθήκες απαιτεί την εφαρμογή μεθόδων που λαμβάνουν υπόψη τις διαφορές μεταξύ των χωρίων.

Οι γραμμικές ΜΔΕ που χρησιμοποιούνται για την μοντελοποίηση των ΠΠΧ είναι κατά κανόνα υπερβολικού ή παραβολικού τύπου και έχουν χαρακτηριστικό την ύπαρξη ασυνεχών συντελεστών στις διεπαφές μεταξύ των υλικών, δηλαδή στα εσωτερικά σύνορα της αλληλεπίδρασης τους. Σε πολλές περιπτώσεις όπου η μεταβολή του χρόνου δεν μεταβάλλει τις ιδιότητες του συστήματος που περιγράφει το πρόβλημα -οπότε και βρίσκεται σε σταθερή κατάσταση (steady-state)- η ΜΔΕ μπορεί να γραφεί και ως εξίσωση ελλειπτικού τύπου. Για την αντιμετώπιση ΠΠΧ προτείνονται διάφορες τεχνικές με διαφορετικά χαρακτηριστικά. Ενδεικτικά, ο επιλυτής για ένα ΠΠΧ μπορεί να αντιμετωπίζει τη ΜΔΕ καθολικά στον υπολογιστικό χώρο ή να έχει χαρακτηριστικά σειριακής επίλυσης -επιλύοντας στα υποχωρία διαδοχικά και χρησιμοποιώντας την προσέγγιση στο ένα ως πληροφορία εισόδου για το επόμενο- ή να βασίζεται σε πιο σύνθετες μεθόδους όπως η μέθοδος ανάλυσης χωρίων (domain decomposition), η μέθοδος Schwarz ή η μέθοδος χαλάρωσης στις διεπαφές ([87], [88], [89]). Όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγή, το κύριο ΠΠΧ που θεωρήθηκε στην παρούσα διατριβή ήταν αυτό του εντοπισμού γεωλογικών σχηματισμών με χρήση ηλεκτρομαγνητικών μεθόδων διασκόπησης σε ομοιογενή ημιχώρο, το οποίο εμπίπτει στη συγκεκριμένη κατηγορία. Στο πρόβλημα πραγματοποιήθηκε μετάβαση από το πεδίο του χρόνου στο πεδίο των συχνοτήτων για την επίλυση της ελλειπτικού τύπου μη ομογενούς Helmholtz για την οποία αναπτύχθηκε επιλυτής στον οποίο εισάγεται ένα συμπαγές αριθμητικό σχήμα σε κλιμακωτό πλέγμα και ο οποίος βασίζεται σε αλγόριθμο παράλληλης υλοποίησης.

Επιπλέον, στα πλαίσια ερευνητικού προγράμματος αναπτύχθηκαν αλγόριθμοι παράλληλης υλοποίησης και επικύρωσης αποτελεσμάτων που αφορούν ΠΠΧ ιατρικής και περιβαλλοντικής μηχανικής αντίστοιχα που παρατίθενται σε παραρτήματα.

1.3 Μέθοδοι Αριθμητικής Επίλυσης ΜΔΕ

Η αναλυτική επίλυση μιας ΜΔΕ είναι ένα δύσκολο πρόβλημα. Για κάποιες κατηγορίες ΜΔΕ μπορεί να επιτευχθεί με διάφορες μεθόδους και τεχνικές, καθεμιά εκ των οποίων προκρίνεται με βάση το είδος της εξίσωσης. Για παράδειγμα, η μέθοδος χωριζομένων μεταβλητών, όπου η ΜΔΕ ανάγεται σε ένα σύστημα συνήθων διαφορικών εξισώσεων, η μέθοδος ολοκληρωτικών μετασχηματισμών και το ανάπτυγμα ιδιοσυναρτήσεων. Τα περισσότερα προβλήματα

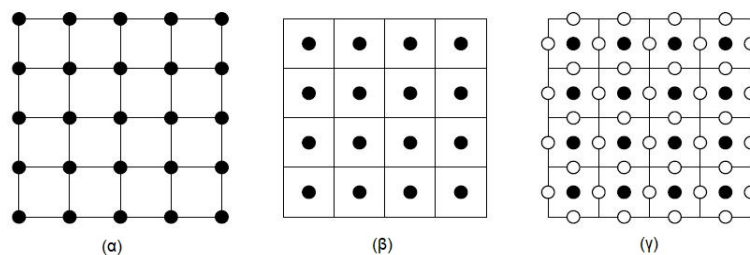
όμως επιλύονται με αριθμητικές μεθόδους, όπου η ΜΔΕ μετασχηματίζεται σε ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων που περιέχει τις άγνωστες ποσότητες της εξίσωσης και το οποίο επιλύεται με την εφαρμογή κατάλληλων αλγορίθμων σε υπολογιστικά συστήματα. Οι αλγεβρικές εξισώσεις κατασκευάζονται με χρήση συγκεκριμένων μεθόδων, οι συνηθέστερες εκ των οποίων είναι η μέθοδος πεπερασμένων διαφορών και η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων, και αφού πρώτα ο υπολογιστικός χώρος αποκτήσει διακριτά σημεία όπου προσεγγίζονται οι προαναφερόμενες ποσότητες.

1.3.1 Διακριτοποίηση του υπολογιστικού χώρου

Η διακριτοποίηση του υπολογιστικού χώρου αναφέρεται στη μετάβαση του προβλήματος που περιγράφει η ΜΔΕ από το συνεχή στο διακριτό χώρο. Στις μεθόδους πεπερασμένων διαφορών που μας ενδιαφέρουν, το χωρίο Ω όπου ορίζεται το πρόβλημα διαμερίζεται, με επιλογή πεπερασμένου πλήθους σημείων (κόμβων) (ενώ στις μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων αντίστοιχα με επιλογή πεπερασμένου πλήθους στοιχείων), δημιουργώντας ένα υπολογιστικό πλέγμα στις 2 ή στις 3 διαστάσεις αντίστοιχα. Στις διακριτές θέσεις (x_i, y_j) ή (x_i, y_j, z_k) που προκύπτουν, επιχειρείται η προσέγγιση συνεχών μεταβλητών και παραγώγων με τη διατύπωση των εξισώσεων κάποιας εκ των μεθόδων που προαναφέρθηκαν και παράλληλη εφαρμογή των ανάλογων αρχικών ή/και συνοριακών συνθηκών.

Η επιλογή αριθμητικής μεθόδου καθορίζει και τα χαρακτηριστικά του πλέγματος. Η εφαρμογή της μεθόδου πεπερασμένων διαφορών συνήθως πραγματοποιείται σε δομημένα πλέγματα (όπως το καρτεσιανό), όπου η διαμέριση μπορεί να είναι ομοιόμορφη με κοινό μήκος h σε κάθε κατεύθυνση ή ανομοιόμορφη με διαφορετικά μήκη h_x, h_y, \dots δημιουργώντας ορθογώνια υπολογιστικά κελιά. Σε μια τέτοια διάταξη, οι κόμβοι μπορούν θεωρηθούν είτε στις κορυφές (1.1α) είτε στα κέντρα των κελιών (1.1β) όπου και προσεγγίζονται οι μεταβλητές ποσότητες του προβλήματος.

Χαρακτηριστική περίπτωση πλέγματος είναι το κλιμακωτό (staggered), όπου κόμβοι θεωρούνται σε επιπλέον θέσεις των κελιών ώστε διαφορετικές ποσότητες να εκφράζονται σε διαφορετικές θέσεις (1.1γ) - τυπικά, στις ακμές του κελιού και στο κέντρο του. Ο συγκεκριμένος τύπος έχει εφαρμογή σε πεδία όπως η υπολογιστική ρευστομηχανική, όπου οι συνιστώσες της ταχύτητας προσεγγίζονται στις ακμές του κελιού ενώ η πίεση στο κέντρο του, στη μελέτη ελαστοδυναμικών φαινομένων, κ.α.. Στα πλεονεκτήματα των κλιμακωτών πλεγμάτων μεταξύ άλλων συμπεριλαμβάνεται η ορθή αποτύπωση των φυσικών νόμων στις εξισώσεις που διαμορφώνονται και η ικανοποιητική διαχείριση κοντά σε περιοχές ασυνέχειας του υπολογιστικού χώρου ([84], [85]).



Σχήμα 1.1: Καρτεσιανά πλέγματα πεπερασμένων διαφορών στις 2 διαστάσεις: (α) κόμβοι στις κορυφές κελιών, (β) κόμβοι στα κέντρα κελιών, (γ) κλιμακωτό (πηγή σχήματος: [113])

13	14	15	16	15	7	16	8	13	14	15	16
9	10	11	12	5	13	6	14	5	6	7	8
5	6	7	8	11	3	12	4	9	10	11	12
1	2	3	4	1	9	2	10	1	2	3	4

Σχήμα 1.2: Προσεγγίσεις αρίθμησης κόμβων πλέγματος πεπερασμένων διαφορών στις 2 διαστάσεις: (α) λεξικογραφική, (β) red-black αρίθμηση, (γ) red-black zebra

Σε κάθε περίπτωση πλέγματος, ουσιαστικής σημασίας στην κατασκευή αποδοτικών υπολογιστικών αλγορίθμων και, κατά συνέπεια, στην επίλυση του προβλήματος είναι η σειρά αρίθμησης των κόμβων του, συνθέτοντας ανάλογα τις αλγεβρικές εξισώσεις της μεθόδου διακριτοποίησης και κατ' επέκτασιν το γραμμικό σύστημα, με τις ανάλογες συνέπειες σε υπολογιστική επίδοση και διαχείριση μνήμης. Στα 1.2(α,β,γ) παρατίθενται ενδεικτικά τεχνικές αρίθμησης σε δομημένο καρτεσιανό πλέγμα πεπερασμένων διαφορών.

Τέλος, όταν το υπολογιστικό πλέγμα αποτελείται από μικρό πλήθος κόμβων χαρακτηρίζεται ως αραιό (coarse) ενώ σε αντίθετη περίπτωση χαρακτηρίζεται ως πυκνό (fine). Η επιλογή της πυκνότητας του πλέγματος είναι ουσιαστικής σημασίας στη ακρίβεια της επίλυσης καθώς, γενικά, περισσότεροι κόμβοι οδηγούν σε καλύτερες προσεγγίσεις, αυξάνοντας όμως παράλληλα το υπολογιστικό κόστος και την πολυπλοκότητα των αλγορίθμων επίλυσης.

1.3.2 Η μέθοδος Πεπερασμένων Διαφορών

Στη μέθοδο Πεπερασμένων Διαφορών οι παράγωγοι 1ης, 2ης, ... τάξης της ΜΔΕ εκφράζονται με τη βοήθεια διαφορών των τιμών της ζητούμενης συνάρτησης σε διακριτούς κόμβους του πλέγματος. Η μέθοδος βασίζεται στο ανάπτυγμα Taylor, σύμφωνα με το οποίο, π.χ. για την v της 1.14 στη θέση x_i μονοδιάστατου πλέγματος θα ισχύει

$$\phi(x_i + h) = \phi(x_i) + h \frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i) + \frac{h^2}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x_i) + \dots \quad (1.17)$$

Η παραπάνω σχέση μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i) = \frac{\phi(x_i + h) - \phi(x_i)}{h} - \frac{h}{2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x_i) + \dots \Leftrightarrow \quad (1.18)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}(x_i) = \frac{\phi(x_i + h) - \phi(x_i)}{h} + O(h) \quad (1.19)$$

ή

$$\phi'_i = \frac{1}{h}(\phi_{i+1} - \phi_i) + O(h) \quad (1.20)$$

οπότε η $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ μπορεί να προσεγγιστεί σε κόμβο i ενός μονοδιάστατου πλέγματος με τις διαφορές $\Delta_x \phi_i \approx \frac{\phi(x_i+h) - \phi(x_i)}{h} = \frac{1}{h}(\phi_{i+1} - \phi_i)$ που καλούνται εμπρός διαφορές. Αντίστοιχα, ορίζονται οι πίσω διαφορές $\nabla_x \phi_i \approx \frac{\phi(x_i) - \phi(x_i-h)}{h} = \frac{1}{h}(\phi(x_i) - \phi(x_{i-1}))$ και, συνδυαστικά, οι κεντρικές διαφορές $\delta_x \phi_i \approx \frac{\phi(x_i+h) - \phi(x_i-h)}{2h} = \frac{1}{2h}(\phi_{i+1} - \phi_{i-1})$. Με αντίστοιχο τρόπο ορίζονται οι διαφορές για την $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ και για μεγαλύτερες τάξεις παραγώγων, όταν αυτές υπάρχουν. Οι παραπάνω διαφορές χαρακτηρίζονται ως πρώτης τάξης ακρίβειας καθώς ο $O(h)$ που αποκόπηκε στην 1.19 περιέχει όρους βαθμού > 1 ως προς το μήκος της διακριτοποίησης h . Με την κατάλληλη επιλογή όρων της 1.19 προκύπτουν οι διαφορές δεύτερης, τρίτης και μεγαλύτερων τάξεων ακρίβειας προσέγγισης. Οι όροι αποκοπής $O(h^a)$ σε αυτές τις περιπτώσεις

περιέχουν ανάλογους όρους βαθμού $> \alpha$. Ενδεικτικά, μια προσέγγιση της $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$ με κεντρικές διαφορές δεύτερης τάξης σε μονοδιάστατο πλέγμα είναι

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{\phi(x_i - h) - 2\phi(x_i) + \phi(x_i + h)}{h^2} + O(h^2)$$

ενώ με κεντρικές διαφορές τέταρτης τάξης

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} = \frac{-\phi(x_i + 2h) + 16\phi(x_i + h) - 30\phi(x_i) + 16\phi(x_i - h) - \phi(x_i - 2h)}{12h^2} + O(h^4)$$

Γενικά, κατά την επίλυση μιας ΜΔΕ με τη μέθοδο Πεπερασμένων Διαφορών η επιλογή της τάξης ακρίβειας των διαφορών καθορίζει τη θεωρητική ακρίβεια του σχήματος επίλυσης: αύξηση της τάξης ακρίβειας επιφέρει βελτιωμένη προσέγγιση της παραγώγου και μείωση του σφάλματος υπολογισμών -π.χ. αν το σχήμα είναι δεύτερης τάξης ακρίβειας, το σφάλμα μειώνεται τετραγωνικά με τον υποδιπλασιασμό του μήκους της διακριτοποίησης. Αυτό έρχεται με αντίστοιχη αύξηση του πλήθους των γειτονικών κόμβων του πλέγματος που χρησιμοποιούνται για τις προσεγγίσεις και κατ' επέκτασιν του πλήθους υπολογισμών.

Συμπαγή αριθμητικά σχήματα

Διαδεδομένη επιλογή διακριτοποίησης αποτελούν τα συμπαγή σχήματα διαφορών (compact schemes). Ένα σχήμα πεπερασμένων διαφορών καλείται συμπαγές όταν για τις προσεγγίσεις χρησιμοποιεί κόμβους μόνο από τα άμεσα γειτονικά κελιά του ελεγχόμενου κόμβου. Χρησιμοποιεί λιγότερους κόμβους σε σχέση με τα μη συμπαγή (ρητά) σχήματα, όμως η διατύπωση τους δεν προσεγγίζει άμεσα την απαιτούμενη παράγωγο στον κόμβο x_i αλλά μέσω γραμμικού συνδυασμού με τιμές αυτής και σε γειτονικούς κόμβους. Γενικά, η ανάπτυξη ενός συμπαγούς σχήματος βασίζεται σε αυτή την έμμεση συσχέτιση τιμών παραγώγων και συνάρτησης σε σημεία του πλέγματος διακριτοποίησης. Τα συμπαγή σχήματα επιτυγχάνουν υψηλή ακρίβεια στις προσεγγίσεις των παραγώγων αυτών με περιορισμένης έκτασης stencil.

Ένα συμπαγές σχήμα κατασκευάζεται με το ανάπτυγμα Taylor της συνάρτησης γύρω από κάθε σημείο του stencil. Για να επιτευχθεί υψηλής τάξης ακρίβεια διατηρούνται όσοι όροι του αναπτύγματος είναι απαραίτητοι ώστε το σφάλμα αποκοπής να ελαχιστοποιείται (για την αντίστοιχη τάξη) και αντιστοιχίζονται οι κατάλληλοι συντελεστές των όρων.

Σε αρκετές περιπτώσεις, τα συμπαγή σχήματα έχουν ελεύθερες παραμέτρους (και συντελεστές όρων που καθορίζονται βάσει αυτής της ελεύθερης παραμέτρου) επιτρέποντας την ευελιξία στο σχεδιασμό του επιλυτή.

Ενδεικτικά, ένα συμπαγές σχήμα τέταρτης τάξης προσέγγισης για την προσέγγιση της ϕ' , όπως στην 1.20, είναι το

$$\alpha\phi'_{i-1} + \phi'_i + \alpha\phi'_{i+1} = b\frac{\phi_{i+2} - \phi_{i-2}}{4} + a\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2} \quad (1.21)$$

στο οποίο για την επίτευξη ακρίβειας $O(h^4)$ οι τιμές των παραμέτρων α , a και b παίρνουν τις τιμές $\frac{1}{4}$, $\frac{3}{2}$, 0 αντίστοιχα, οπότε προκύπτει

$$\frac{1}{4}\phi'_{i-1} + \phi'_i + \frac{1}{4}\phi'_{i+1} = \frac{3}{4}\phi_{i+1} + \frac{3}{4}\phi_{i-1} + O(h^4) \quad (1.22)$$

([7]). Γίνεται κατανοητό ότι σε περιπτώσεις προσεγγίσεων της ϕ' σε κόμβους κοντά στο σύνορο του υπολογιστικού χωρίου, τύπος όπως ο 1.22 δεν μπορεί απαραίτητα να χρησιμοποιηθεί, οπότε και διαμορφώνεται ανάλογα με νέους συντελεστές, οδηγώντας σε ένα σύστημα

γραμμικών εξισώσεων, με την προσέγγιση των τιμών της ϕ' να επιτυγχάνεται εν τέλει με την επίλυση αυτού του συστήματος.

Στην επίλυση του προβλήματος Γεωφυσικής χρησιμοποιήθηκε ένα συμπαγές αριθμητικό σχήμα πεπερασμένων διαφορών τέταρτης τάξης τα χαρακτηριστικά του οποίου περιγράφονται στην 3.1.

1.4 Μέθοδοι Επίλυσης Γραμμικών Συστημάτων

Η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος της μορφής

$$Ax = y, A \in \mathbb{C}^{m \times n}, x \in \mathbb{C}^n, y \in \mathbb{C}^m \quad (1.23)$$

είναι εκ των βασικότερων βημάτων κατά τη διαδικασία επίλυσης ενός Προβλήματος Αρχικών/Συνοριακών Συνθηκών, αποτελώντας το αποτέλεσμα της διαδικασίας διακριτοποίησης της ΜΔΕ. Δεδομένης της ανάγκης ικανοποιητικής ακρίβειας στην προσέγγιση της λύσης της ΜΔΕ, η επιλογή ενός σχετικά πυκνού πλέγματος διακριτοποίησης, όπως ειπώθηκε παραπάνω, οδηγεί σε μεγαλύτερο πλήθος όρων στις παραγόμενες από την αριθμητική μέθοδο αλγεβρικές εξισώσεις και κατ' επέκτασιν σε μεγαλύτερη διάσταση του γραμμικού συστήματος. Σ' αυτή την περίπτωση, η επίλυση του 1.23 στηρίζεται σε αλγορίθμους με διαφορετικά χαρακτηριστικά ανάλογα με τη δομή του πίνακα συντελεστών A του συστήματος, η υλοποίηση των οποίων πραγματοποιείται σε υπολογιστικά συστήματα.

Η αριθμητική επίλυση ενός γραμμικού συστήματος εξαρτάται από διαφορετικούς παράγοντες όπως η ευστάθεια του συστήματος και του αλγορίθμου (η ευαισθησία του σε σφάλματα που προκύπτουν κατά τη διάρκεια της υλοποίησης του, π.χ. σφάλματα αποκοπής ή στρογγύλευσης), το κόστος του αλγορίθμου σε επίπεδο πράξεων καθώς και η δομή του πίνακα που συμμετέχει (αν ο πίνακας είναι συμμετρικός, αραιός ή πυκνός). Συνέπεια αυτών είναι η ύπαρξη πλήθους διαφορετικών μεθόδων αριθμητικής επίλυσης γραμμικών συστημάτων για την αντιμετώπιση τους, με την βασική κατηγοριοποίηση τους να τις διακρίνει σε **άμεσες** (direct) και **επαναληπτικές** (iterative).

Άμεσες μέθοδοι επίλυσης γραμμικών συστημάτων

Οι άμεσες μέθοδοι ολοκληρώνονται σε ένα πεπερασμένο πλήθος βημάτων και μετά από ένα συγκεκριμένο αριθμό πράξεων. Η πλέον διαδεδομένη άμεση μέθοδος είναι η απαλοιφή Gauss με παραλλαγές της την παραγοντοποίηση LU και τη διάσπαση Cholesky. Η χρήση αυτών ενδείκνυται συνήθως σε περιπτώσεις όπου ο πίνακας του γραμμικού συστήματος είναι μικρής διάστασης και πυκνός (πυκνός χαρακτηρίζεται ένας πίνακας $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ με πλήθος μη μηδενικών στοιχείων της τάξης $O(n^2)$). Στις άμεσες μεθόδους κατατάσσεται και η Κυκλική μέθοδος αναγωγής μονών-ζυγών (Cyclic Reduction Method) η οποία χρησιμοποιείται σε επιμέρους επιλύσεις γραμμικών συστημάτων του προβλήματος Γεωφυσικής.

1.4.1 Κυκλική μέθοδος αναγωγής μονών-ζυγών (Cyclic Reduction Method)

Η Κυκλική μέθοδος αναγωγής μονών-ζυγών είναι άμεση μέθοδος επίλυσης που προτάθηκε από τους Golub και Hockney στα μέσα της δεκαετίας του '60 για την επίλυση γραμμικών συστημάτων που προκύπτουν από τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών και έκτοτε θεωρείται εξαιρετικά χρήσιμη για την αντιμετώπιση προβλημάτων με γραμμικές και μη γραμμικές εξισώσεις ([43]), ειδικά στην περίπτωση (block) τριδιαγώνιων ή (block) Toeplitz πινάκων, όπου η εφαρμογή της έχει αποδειχθεί ιδιαίτερα αποδοτική ([8]).

Η υλοποίηση της μεθόδου στηρίζεται συντελείται σε δύο φάσεις. Στην πρώτη, την προς-τα-εμπρός αναγωγή (Forward Reduction), πραγματοποιείται διαδοχικά η ταυτόχρονη απαλοιφή του μισού πλήθους αγνώστων, για την ακρίβεια των περιττού δείκτη αγνώστων του γραμμικού συστήματος, διαδικασία που μπορεί να περιγραφεί και ως παραγοντοποίηση LU μιας αναδιατεταγμένης εκδοχής του πίνακα A , και κατόπιν, η νέα ομαδοποίηση των υπολοίπων έως ότου προκύψει ένα 2×2 σύστημα. Στη συνέχεια αυτό επιλύεται με περιορισμένο υπολογιστικό κόστος καθώς οι ευρεθείσες τιμές χρησιμοποιούνται για την εύρεση των υπολοίπων αγνώστων με προς-τα-πίσω αντικατάσταση (Backward Substitution).

Ο αλγόριθμος της μεθόδου μπορεί να περιγραφεί με την block αναπαράσταση στοιχείων του πίνακα στο 1.23 που ακολουθεί. Αν λοιπόν θεωρηθούν για τον πίνακα A (και αντίστοιχα για x και y)

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_3 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & c_{n-2} & a_{n-2} & b_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & c_n & a_n \end{pmatrix}, x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-2} \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-2} \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix}$$

και, επιπλέον, ο μεταθετικός πίνακας $P_1 = [\vec{e}_1 \vec{e}_3 \vec{e}_5 \dots \vec{e}_2 \vec{e}_4 \vec{e}_6]$, ο πίνακας A του 1.23 γράφεται

$$P_1 A P_1^T = \begin{pmatrix} W_1 & T_1 \\ S_1 & W_2 \end{pmatrix} \quad (1.24)$$

με W_1 ομαλό πίνακα και $a_{2j-1} \neq 0, j = 1, \dots, \frac{n}{2}, n$ άρτιο, έτσι ώστε

$$W_1 = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_3 & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & a_5 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \ddots \end{pmatrix}, W_2 = \begin{pmatrix} a_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_4 & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & a_6 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

και

$$S_1 = \begin{pmatrix} c_2 & b_2 & \dots & 0 \\ 0 & c_4 & b_4 & \vdots \\ \vdots & 0 & c_6 & \ddots \\ 0 & \dots & 0 & \ddots \end{pmatrix}, T_1 = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & \dots & 0 \\ c_3 & b_3 & 0 & \vdots \\ 0 & c_5 & b_5 & 0 \\ 0 & \dots & \ddots & \ddots \end{pmatrix}$$

Ο 1.24 παραγοντοποιείται ως

$$P_1 A P_1^T = L_1 D_1 U_1$$

με L_1, U_1 τους κάτω και άνω τριγωνικούς block πίνακες και D_1 τον διαγώνιο block πίνακα για τους οποίους

$$L_1 = \begin{pmatrix} I & O \\ S_1 W_1^{-1} & I \end{pmatrix}, U_1 = \begin{pmatrix} W_1 & T_1 \\ O & I \end{pmatrix}, D_1 = \begin{pmatrix} I & O \\ O & A_1 \end{pmatrix},$$

Ο πίνακας A_1 είναι διάστασης $\lfloor n/2 \rfloor \times \lfloor n/2 \rfloor$, είναι τριδιαγώνιος και γράφεται $A_1 = W_2 - S_1 W_1^{-1} T_1$, οπότε αποτελεί το συμπλήρωμα Schur του W_1 του 1.24 ([37]).

Αν η ίδια διαδικασία επαναληφθεί για τον A_1 (χρήση ενός μεταθετικού P_2 , παραγοντοποίηση του A_1) θα παράξει έναν νέο πίνακα A_2 διάστασης $\lfloor n/4 \rfloor \times \lfloor n/4 \rfloor$, ο οποίος μπορεί εκ νέου

να παραγοντοποιηθεί, κ.ο.κ.. Η αναγωγή αυτή θα καταλήξει μετά από $k = \lfloor \log_2 n \rfloor$ σε έναν διαγώνιο πίνακα D_k όπου

$$D_k = \begin{pmatrix} I & O & \dots & O \\ O & I & O & \vdots \\ \vdots & O & \ddots & \vdots \\ O & \dots & \dots & A_k \end{pmatrix},$$

με τον A_k διάστασης 1×1 . Ο αρχικός πίνακας A τότε γράφεται

$$A = P_1^T L_1 P_2^T L_2 \dots P_k^T L_k D_k U_k P_k \dots U_2 P_2 U_1 P_1$$

. Με την παραγοντοποίηση του πίνακα A και θεωρώντας επίσης τους πίνακες μεταθέσεων άρτιων-περιττών P_j για κάθε βήμα $j = 1, \dots, k$ ώστε

$$P_j A_{j-1} P_j^T = \begin{pmatrix} W_{1j} & T_j \\ S_j & W_{2j} \end{pmatrix}$$

και

$$P_j y_{j-1} = \begin{pmatrix} y_{j-1}^o \\ y_{j-1}^e \end{pmatrix}, y^o = y^{\text{odd}}, y^e = y^{\text{even}}$$

```

for  $j = 1$  to  $k$  do
  |  $R_j = S_j W_{1j}^{-1}$ 
  |  $A_j = W_{2j} - R_j T_j$ 
  |  $y_j = y_{j-1}^e - R_j y_{j-1}^o$ 
end
 $x_k = A_k^{-1} y_k$ 
for  $j = k$  to  $1$  do
  |  $x_{j-1} = P_j^T \begin{pmatrix} W_{1j}(y_{j-1}^o - T_j x_j) \\ x_j \end{pmatrix}$ 
end

```

Θεωρώντας δε τα στοιχεία a_i, b_i, c_i του τριδιαγώνιου πίνακα A_{j-1} (καθότι σε κάθε περίπτωση είναι προϊόν γινομένου άνω διδιαγώνιου, διαγώνιου και κάτω διδιαγώνιου), η διαδικασία αναγωγής σε κάθε της βήμα j με μέγιστο πλήθος βημάτων $k = \lfloor \log_2 n \rfloor$ και για $m = \lfloor \frac{n}{2^j} \rfloor$ υπολογίζει αρχικά τα στοιχεία a'_i, b'_i, c'_i του νέου, μειωμένης διάστασης A_j πίνακα σύμφωνα με τον αλγόριθμο

```

for  $i = 1$  to  $m$  do
  |  $s_i = \frac{c_{2i}}{a_{2i-1}}$ 
  |  $t_i = \frac{b_{2i}}{a_{2i+1}}$ 
  |  $a'_i = a_{2i} - s_i b_{2i-1} - t_i c_{2i+1}$ 
  |  $b'_i = -t_i b_{2i+1}$ 
  |  $c'_i = -s_i c_{2i-1}$ 
end

```

όπου s_i, t_i τα στοιχεία του (διδιαγώνιου) πίνακα R . Κατόπιν, τις τιμές του αντίστοιχου δευτέρου μέλους y_i του μειωμένης διάστασης συστήματος με

```

for  $i = 1$  to  $m$  do
  |  $y_i^{(j)} = y_{2i}^{(j-1)} - s_i y_{2i-1}^{(j-1)} - t_i y_{2i+1}^{(j-1)}$ 
end

```

και, τέλος, με οπισθοδρόμηση την προσέγγιση,

for i **to** m **do**

$$\left| \begin{array}{l} x_{2i-1}^{(j-1)} = y_{2i-1}^{(j-1)} - c_{2i-1} x_{i-1}^{(j)} b_{2i-1} x_i^{(j)} y_{2i+1}^{(j-1)} \\ x_{2i}^{(j-1)} = x_i^{(j)} \end{array} \right.$$

end

Κυκλική μέθοδος αναγωγής μονών-ζυγών σε block δομή (Block CR)

Αντίστοιχη εφαρμογή της μεθόδου μπορεί να πραγματοποιηθεί και σε block τριδιαγώνια γραμμικά συστήματα. Συγκεκριμένα, αν θεωρηθεί αντίστοιχο του 1.23 γραμμικό σύστημα σε block μορφή

$$A = \begin{pmatrix} \tilde{A}_1 & \tilde{B}_1 & O & \dots & \dots & O & O \\ \tilde{C}_2 & \tilde{A}_2 & \tilde{B}_2 & O & \dots & O & O \\ O & \tilde{C}_3 & \tilde{A}_3 & \tilde{B}_3 & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & \tilde{C}_{n-2} & \tilde{A}_{n-2} & \tilde{B}_{n-2} & O \\ O & O & \dots & O & \tilde{C}_{n-1} & \tilde{A}_{n-1} & \tilde{B}_{n-1} \\ O & O & \dots & \dots & O & \tilde{C}_n & \tilde{A}_n \end{pmatrix}, x = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_3 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{n-2} \\ \mathbf{x}_{n-1} \\ \mathbf{x}_n \end{pmatrix}, y = \begin{pmatrix} \mathbf{y}_1 \\ \mathbf{y}_2 \\ \mathbf{y}_3 \\ \vdots \\ \mathbf{y}_{n-2} \\ \mathbf{y}_{n-1} \\ \mathbf{y}_n \end{pmatrix}$$

για οποιαδήποτε διαδοχική 3-άδα εξισώσεων του συστήματος της μορφής

$$\tilde{C}_i x_{i-1} + \tilde{A}_i x_i + \tilde{B}_i x_{i+1} = y_i, i = 1, \dots, n, C_1 = O, B_n = O$$

η απαλοιφή των περιττών αγνώστων μπορεί να πραγματοποιηθεί με κατάλληλο πολλαπλασιασμό των εξισώσεων περιττού δείκτη και την πρόσθεση τους στην εξίσωση άρτιου δείκτη. Συγκεκριμένα, αν

Εξίσωση	\mathbf{x}_{2i-2}	\mathbf{x}_{2i-1}	\mathbf{x}_{2i}	\mathbf{x}_{2i+1}	\mathbf{x}_{2i+2}	β' μέλος
$2i-1$	\tilde{C}_{2i-1}	\tilde{A}_{2i-1}	\tilde{B}_{2i-1}	O	O	y_{2i-1}
$2i$	O	\tilde{C}_{2i}	\tilde{A}_{2i}	\tilde{B}_{2i}	O	y_{2i}
$2i+1$	O	O	\tilde{C}_{2i+1}	\tilde{A}_{2i+1}	\tilde{B}_{2i+1}	y_{2i+1}

η απαλοιφή των \mathbf{x}_{2i-1} και \mathbf{x}_{2i+1} προϋποθέτει τον πολλαπλασιασμό της εξίσωσης $2i-1$ με $-\tilde{C}_{2i} \tilde{A}_{2j-1}^{-1}$, της εξίσωσης $2i+1$ με $-\tilde{B}_{2i} \tilde{A}_{2i+1}^{-1}$ και κατόπιν την πρόσθεση τους στην $2i$, με αποτέλεσμα η νέα εξίσωση να περιέχει μόνο άρτιου δείκτη αγνώστους, δηλαδή στη μορφή

Εξίσωση	\mathbf{x}_{2i-2}	\mathbf{x}_{2i-1}	\mathbf{x}_{2i}	\mathbf{x}_{2i+1}	\mathbf{x}_{2i+2}	β' μέλος
i	\tilde{C}'_i	O	\tilde{A}'_i	O	\tilde{B}'_i	y'_i

όπου

- $\tilde{C}'_i = -\tilde{C}_{2i} \tilde{A}_{2j-1}^{-1} \tilde{C}_{2i-1}$
- $\tilde{A}'_i = \tilde{A}_{2i} - \tilde{C}_{2i} \tilde{A}_{2j-1}^{-1} \tilde{B}_{2i-1} - \tilde{B}_{2i} \tilde{A}_{2j+1}^{-1} \tilde{C}_{2i+1}$
- $\tilde{B}'_i = -\tilde{B}_{2i} \tilde{A}_{2i+1}^{-1} \tilde{B}_{2i+1}$
- $y'_i = y_{2i} - \tilde{C} \tilde{A}_{2i-1}^{-1} - \tilde{B}_{2i} \tilde{A}_{2i+1}^{-1}$

καταλήγοντας έτσι σε ένα νέο, μειωμένης διάστασης, block γραμμικό σύστημα (το μισό της αρχικής διάστασης). Λειτουργώντας επαναληπτικά, με την προϋπόθεση ότι τα block A_j της διαγωνίου ομαλοί πίνακες, η διαδικασία μπορεί να μειώσει διαδοχικά τη διάσταση του γραμμικού συστήματος καταλήγοντας σε ένα 2×2 γραμμικό σύστημα. Αυτό επιλύεται και στη συνέχεια υπολογίζονται οι -νωρίτερα- απαλοιφθέντες άγνωστοι με πίσω αντικατάσταση.

Το συνολικό υπολογιστικό κόστος της μεθόδου είναι $O(n \log n)$ ([10]) όταν η LU παραγοντοποίηση έχει $O(n)$. Η διαδικασία συνολικά περιέχει λίγο πάνω από τις διπλάσιες πράξεις σε σχέση με την LU - απαιτούνται $8n$ για την παραγοντοποίηση και $9n$ την επίλυση του συστήματος ([1]) σε συνολικά $2 \log_2 n$ αλγοριθμικά βήματα - πλεονεκτεί όμως καθότι μπορεί να παραλληλοποιηθεί ευκολότερα.

Αλγόριθμος Fourier

Σε συνδυασμό με τη μέθοδο Cyclic Reduction μπορεί να εφαρμοστεί κατά περίπτωση και ο αλγόριθμος Fourier ([8], [9]). Η εφαρμογή της μεθόδου προτείνεται για γραμμικά συστήματα της μορφής

$$\begin{pmatrix} a & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & a & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & a & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

και στηρίζεται στο γεγονός ότι ο πίνακας

$$B = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

έχει ιδιοτιμές λ_i με $\lambda_i = 2 - 2 \cos \frac{i\pi}{m+1}$ και ιδιοδιανύσματα

$$q_{ij} = \sqrt{\frac{2}{m+1}} \sin \frac{ij\pi}{m+1} \quad (1.26)$$

Γενικεύοντας για κάθε πίνακα της μορφής

$$C = \begin{pmatrix} a & b & 0 & \dots & 0 \\ b & a & b & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & b & a & b \\ 0 & \dots & 0 & b & a \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

παρατηρείται ότι για τον C ισχύει ότι $C = -bB + (a + 2b)I$ οπότε οι ιδιοτιμές του θα είναι $\hat{\lambda}_i = -b\lambda_i + a + 2b$ και τα ιδιοδιανύσματα του τα ίδια ([8]).

Τότε, ο πίνακας C αναλύεται ως $C = Q\Lambda Q^T$ όπου

$$Q = [q_{i,j}], \Lambda = \text{diag}(\hat{\lambda}_i), i = 1, \dots, m$$

Το γραμμικό σύστημα $Cx = y$ τότε γράφεται

$$\begin{aligned} Cx = y &\iff Q\Lambda Q^T x = y \iff \Lambda Q^T x = Q^T y \iff \\ &\Lambda \tilde{x} = \tilde{y} \iff \tilde{x} = \Lambda^{-1} \tilde{y} \end{aligned}$$

όπου $\tilde{x} = Q^T x$ και $\tilde{y} = Q^T y$.

Η επίλυση ολοκληρώνεται με τον υπολογισμό του x μέσω της $x = Q\tilde{x}$.

Ενδεικτικά, αν ο $C \in \mathbb{R}$ είναι ο

$$C = \begin{pmatrix} 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 22 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 22 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

οι ιδιοτιμές του θα είναι $\hat{\lambda}_i = 22 + 2\cos\frac{i\pi}{m+1}$, κατά συνέπεια η λύση x θα προσεγγίζεται από τον υπολογισμό

$$\tilde{x}_i = \frac{1}{22 + 2\cos\frac{i\pi}{m+1}} \sqrt{\frac{2}{m+1}} \sum_{j=1}^n \sin\frac{ij\pi}{m+1} y_j$$

$$x_i = \sqrt{\frac{2}{m+1}} \sum_{j=1}^n \sin\frac{ij\pi}{m+1} \tilde{x}_i$$

για $i = 1, \dots, m$, $j = 1, \dots, m$.

Ο αλγόριθμος 16 που ακολουθεί σε επόμενη παράγραφο, υλοποιεί τη μέθοδο Fourier σε επιλύσεις του προβλήματος της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης. Ο αλγόριθμος Fourier μπορεί να χρησιμοποιηθεί και για την επίλυση ενός block-τριδιαγώνιου συστήματος της μορφής

$$Ax = b \quad (1.27)$$

όπου

$$A = \begin{pmatrix} \bar{C} & I & 0 & \dots & 0 \\ I & \bar{C} & I & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & I & \bar{C} & I \\ 0 & \dots & 0 & I & \bar{C} \end{pmatrix},$$

όπου $I \in \mathbb{R}^{m \times m}$ και

$$\bar{C} = \begin{pmatrix} a & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & a & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & a & 1 \\ 0 & \dots & 0 & 1 & a \end{pmatrix},$$

σε συνδυασμό με την μέθοδο Cyclic Reduction. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιώντας την 1.26 και ιδιοδιάσπαση του A , το block-τριδιαγώνιο σύστημα 1.27 μετασχηματίζεται σε m ανεξάρτητα τριδιαγώνια συστήματα $n \times n$ της μορφής 1.25 τα οποία και λύνονται με τη μέθοδο Cyclic Reduction ([8]).

Η μέθοδος Cyclic Reduction και ο αλγόριθμος Fourier αποτέλεσαν βασικά εργαλεία επίλυσης των γραμμικών συστημάτων με βαθμωτούς αλλά και block πίνακες που προέκυψαν από τη διακριτοποίηση της εξίσωσης του προβλήματος ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης, όπως περιγράφεται στην ενότητα 3.3.

Επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης γραμμικών συστημάτων

Οι επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης δεν τροποποιούν τον πίνακα συντελεστών του συστήματος όπως συμβαίνει στις άμεσες μεθόδους αλλά ξεκινώντας από μια αρχική προσέγγιση x^0 της λύσης x κατασκευάζουν μια ακολουθία διαδοχικών προσεγγίσεων $x^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots$ η

οποία υπο ορισμένες προϋποθέσεις συγκλίνει στη λύση x για $m \rightarrow \infty$. Η χρήση τους προκρίνεται σε περιπτώσεις που ο πίνακας του γραμμικού συστήματος είναι μεγάλης διάστασης, αραιός (αραιός χαρακτηρίζεται ένας πίνακας $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ με πλήθος μη μηδενικών στοιχείων της τάξης $O(n)$), όπως συνήθως συμβαίνει κατά τη διακριτοποίηση ΜΔΕ) ή στην περίπτωση που δεν είναι καν άμεσα διαθέσιμος (λόγω κόστους δημιουργίας ή φύσης του προβλήματος μπορεί να είναι διαθέσιμες μόνο οι πράξεις μεταξύ στοιχείων του και κάποιου διανύσματος). Οι επαναληπτικές μέθοδοι μπορούν να διακριθούν σε **κλασικές** (stationary) και μεθόδους **υποχώρων Krylov** (non stationary).

Κλασικές επαναληπτικές μέθοδοι

Οι κλασικές επαναληπτικές μέθοδοι βασίζονται στην παρακάτω διάσπαση του πίνακα συντελεστών A του γραμμικού συστήματος $Ax = b$

$$A = M - N,$$

οπότε άμεσα συνάγεται $Mx = Nx + b$ και, για M αντιστρέψιμο πίνακα, ακολουθεί η επίλυση του σύμφωνα με την επαναληπτική διαδικασία

$$x^{(i)} = M^{-1}Nx^{(i-1)} + M^{-1}b, i = 1, 2, \dots \quad (1.28)$$

με επιλογή κατάλληλης αρχικής προσέγγισης της λύσης x^0 . Ο πίνακας $M^{-1}N$ καλείται επαναληπτικός πίνακας. Η διαφοροποίηση του επαναληπτικού πίνακα διαφοροποιεί αντίστοιχα τις κλασικές επαναληπτικές μεθόδους. Συγκεκριμένα, στην κατηγορία των κλασικών επαναληπτικών μεθόδων εμπίπτουν οι μέθοδοι Jacobi (όπου $M = D$ και $N = L + U$), Gauss-Seidel (όπου $M = D - L$ και $N = U$) και SOR (όπου $M = \frac{1}{\omega}(D - \omega L)$ και $N = \frac{1}{\omega}(\omega U + (1 - \omega D))$), θεωρώντας τους D, L, U σύμφωνα με τη διάσπαση $A = D - L - U$. Πρέπει να αναφερθεί ότι η σύγκλιση μιας κλασικής επαναληπτικής μεθόδου εξαρτάται από τον επαναληπτικό πίνακα $M^{-1}N$ και συγκεκριμένα από τη φασματική του ακτίνα (αν $\rho(M^{-1}N) < 1$ η μέθοδος συγκλίνει).

Μέθοδοι υποχώρων Krylov

Σε αντίθεση με τις κλασικές επαναληπτικές μεθόδους όπου οι υπολογισμοί σε κάθε βήμα εμπλέκουν ποσότητες που παραμένουν σταθερές σε κάθε επαναληπτικό βήμα, στις μεθόδους υποχώρων Krylov οι ποσότητες αυτές μεταβάλλονται και υπολογίζονται κυρίως με εσωτερικά γινόμενα διανυσμάτων. Η βασική ιδέα είναι η έκφραση ενός πολωνύμου του πίνακα συντελεστών επί το αρχικό υπόλοιπο του σφάλματος $r^{(0)}$ με $r^{(0)} = Ax^{(0)} - b$. Οι μέθοδοι που εμπίπτουν στην κατηγορία αυτή παράγουν προσεγγίσεις της λύσης

$$x^{(m+1)} \in \{r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^1r^{(0)}, A^2r^{(0)}, \dots, A^mr^{(0)}\} \quad (1.29)$$

στον υπόχωρο $K^{m+1}(A; r^{(0)})$ ο οποίος ονομάζεται υπόχωρος Krylov και παράγεται από τον πίνακα συντελεστών A και το αρχικό διάνυσμα του υπολοίπου $r^{(0)}$. Για την εύρεση της βέλτιστης προσέγγισης της λύσης στον Krylov υπόχωρο απαιτείται μια κατάλληλη βάση του υποχώρου. Οι επαναληπτικές μέθοδοι Krylov είναι εξαιρετικά διαδεδομένες στην αριθμητική επίλυση ΜΔΕ όπου συχνά το γραμμικό σύστημα 1.23 είναι μεγάλο και αραιό. Πλεονεκτούν έναντι των υπολοίπων μεθόδων

Γνωστότερες Krylov μέθοδοι είναι η μέθοδος συζυγών κλίσεων (CG, [75]), η μέθοδος γενικευμένου ελάχιστου υπολοίπου (GMRES, [76]), η μέθοδος δις συζυγών κλίσεων (BiCG, [77]) και η ευσταθειοποιημένη μέθοδος δις συζυγών κλίσεων (BiCGSTAB, [78]).

Στους αλγόριθμους που παρουσιάζονται στην παρούσα διατριβή και αναπτύχθηκαν για την αριθμητική επίλυση των γραμμικών συστημάτων που ανακύπτουν από τις μεθόδους διακριτοποίησης στα συγκεκριμένα προβλήματα πολλαπλών χωρίων, η βασική επαναληπτική μέθοδος που χρησιμοποιείται είναι η ευσταθειοποιημένη μέθοδος δισυζυγών κλίσεων BiCG-STAB.

1.4.2 Η ευσταθειοποιημένη (stabilized) μέθοδος δισυζυγών κλίσεων (Bi-CGSTAB)

Η ευσταθειοποιημένη μέθοδος δισυζυγών κλίσεων (BiConjugate Gradient Stabilized - Bi-CGSTAB) είναι υβριδική επαναληπτική μέθοδος που ανήκει στην κατηγορία μεθόδων υποχώρων Krylov, χρησιμοποιείται για την επίλυση γενικών γραμμικών συστημάτων και αποτελεί συνδυασμό των επαναληπτικών μεθόδων συζυγών κλίσεων (BiCG) και γενικευμένου ελαχίστου υπολοίπου (GMRES).

Η βασική διαφοροποίηση της μεθόδου είναι η χρήση διαφορετικών διανυσμάτων σε σχέση με τη μέθοδο BiCG για την κατασκευή της λύσης x . Η μέθοδος εμφανίζει κατά κανόνα εξίσου γρήγορη σύγκλιση όπως η μέθοδος συζυγών κλίσεων (CGS) αλλά πιο ομαλή, ειδικά σε περιπτώσεις μεγάλων και αραιών, μη συμμετρικών πινάκων ([78], [112]) ενώ η χρήση σε υλοποιήσεις αριθμητικών επιλύσεων έχει αποδειχθεί εξαιρετικά αποδοτική σε μεγάλο εύρος εφαρμογών σε σύγχρονα υπολογιστικά περιβάλλοντα ([25], [26], [81], [82]).

Η μέθοδος ξεκινάει με την αρχική επιλογή προσέγγισης της λύσης $x^{(0)}$ και τον υπολογισμό του διανύσματος του υπολοίπου $\hat{r} = b - Ax^{(0)}$ και κατόπιν ξεκινάει το επαναληπτική διαδικασία που σκοπό έχει την ελαχιστοποίηση του \hat{r} (αλγόριθμος 1). Σε κάθε βήμα της μπορούν να θεωρηθούν δύο φάσεις υπολογισμών: στην πρώτη, πραγματοποιούνται υπολογισμοί αντίστοιχοι της μεθόδου BiCG όπου κατασκευάζονται τα διανύσματα βάσης που θα χρησιμοποιηθούν στην προσέγγιση της λύσης και την ελαχιστοποίηση του υπολοίπου (υπολογισμός της παραμέτρου κατεύθυνσης β , του διανύσματος κατεύθυνσης αναζήτησης της λύσης p και της προσωρινής λύσης v) ενώ στη δεύτερη, τη φάση της σταθεροποίησης (stabilization) επιχειρείται η ελαχιστοποίηση των ταλαντώσεων του σφάλματος και βελτίωση της προσέγγισης της λύσης (υπολογισμός του ενδιάμεσου υπολοίπου s , της προσέγγισης της λύσης x στην κατεύθυνση του p και του νέου υπολοίπου r) ([78]).

Ως κριτήριο τερματισμού στον έλεγχο της σύγκλισης της μεθόδου χρησιμοποιείται κατά κανόνα ο έλεγχος μιας νόρμας του υπολοίπου $r = b - Ax$ ($\|\cdot\|$) σε σχέση με μια τιμή ανοχής ϵ είτε κατά απόλυτο τρόπο $\|r\| < \epsilon$ είτε σχετικό $\frac{\|r\|}{\|b\|} < \epsilon$. Με τον δεύτερο τρόπο λαμβάνεται υπόψη και η διάσταση του προβλήματος για τη σύγκλιση. Παράλληλα ορίζεται και μέγιστο πλήθος βημάτων το οποίο και διασφαλίζει ότι η μέθοδος θα τερματίσει ακόμα και αν η απαιτούμενη μέσω ανοχής ϵ ακρίβεια δεν έχει επιτευχθεί.

Υπάρχουν βεβαίως συνθήκες στις οποίες η BiCGSTAB αποτυγχάνει να συγκλίνει (κατάσταση στασιμότητας - stagnation) ή συγκλίνει εξαιρετικά αργά - ο μεγάλος δείκτης κατάστασης του πίνακα του γραμμικού συστήματος, πιθανά ανεπιτυχής προρρύθμιση του πίνακα, λανθασμένη επιλογή αρχικής προσέγγισης της λύσης ή κριτηρίων τερματισμού μπορεί να οδηγήσουν σε μειωμένη απόδοση της μεθόδου. Αντίστοιχα, εφαρμογή σε πίνακα με επιθυμητές ιδιότητες (π.χ. θετικά διευθετημένος πίνακας), κατάλληλη ρύθμιση των παραμέτρων υλοποίησης και ελαχιστοποίηση των αριθμητικών σφαλμάτων στις πράξεις του αλγορίθμου οδηγούν σε ομαλή σύγκλιση, αν και όχι απαραίτητα μονοτονικού τύπου.

Ο αλγόριθμος της επαναληπτικής μεθόδου BiCGSTAB για την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος $Ax = b$ μπορεί να περιγραφεί ως εξής:

```

Επιλογή αρχικής τιμής  $x^{(0)}$ 
 $r^{(0)} \leftarrow b - Ax^{(0)}$ 
Επιλογή αρχικής τιμής  $\hat{r}$  (συνήθως  $\hat{r} \leftarrow r^{(0)}$ )
for  $i = 1$  to  $\dots$  do
     $\rho_{i-1} \leftarrow \hat{r}^T r^{i-1}$ 
    if  $\rho_{i-1} = 0$  then
        | η μέθοδος αποτυγχάνει
    end
    if  $i = 1$  then
        |  $p^{(1)} \leftarrow r^{(0)}$ 
    else
        |  $\beta_{i-1} \leftarrow \frac{\rho_{i-1} \alpha_{i-1}}{\rho_{i-2} \omega_{i-1}}$ 
        |  $p^{(i)} \leftarrow r^{(i-1)} + \beta_{i-1}(p^{(i-1)} - \omega_{i-1}v^{(i-1)})$ 
    end
     $\hat{p} \leftarrow p^{(i)}$ 
     $v^{(i)} \leftarrow A\hat{p}$ 
     $\alpha_i \leftarrow \frac{\rho_{i-1}}{\hat{r}^T v^{(i)}}$ 
     $s \leftarrow \rho^{(i-1)} - \alpha_i v^{(i)}$ 
    if  $\|s\|$  αρκετά μικρό then
        |  $x^{(i)} \leftarrow x^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p}$  exit
    end
     $z \leftarrow s$ 
     $t \leftarrow Az$ 
     $\omega_i \leftarrow \frac{s^T t}{t^T t}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p} + \omega_i z$ 
    Έλεγχος σύγκλισης
    if  $\omega_i = 0$  then
        | η μέθοδος ολοκληρώνεται
    end
     $r^{(i)} \leftarrow s - \omega_i t$ 
end
return  $x$ 

```

Algorithm 1: Αλγόριθμος της μεθόδου BiCGSTAB ([78])

Η μέθοδος χρησιμοποιήθηκε με κατάλληλες τροποποιήσεις στις εφαρμογές που εξετάστηκαν στην παρούσα διατριβή. Στο βασικό πρόβλημα της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης αποτέλεσε τη βασική μέθοδο πάνω στην οποία στηρίχθηκε ο επιλυτής, με διαφορετικές προσεγγίσεις και αποτελέσματα. Στο πρόβλημα της διάχυσης καρκινικών κυττάρων στον εγκέφαλο επελέγη λόγω της φύσης του πίνακα του γραμμικού συστήματος (με βάση την κατανομή των ιδιοτιμών) και υλοποιήθηκε σε συστήματα με κάρτες γραφικών με αξιοπρόσεκτες επιδόσεις. Και για τις δύο αυτές περιπτώσεις ακολουθούν λεπτομέρειες των υλοποιήσεων της μεθόδου στις αντίστοιχες ενότητες.

1.4.3 Προρύθμιση Πίνακα Συντελεστών

Σε αρκετές περιπτώσεις οι επαναληπτικές μέθοδοι επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος αποκλίνουν ή συγκλίνουν αργά στη λύση. Στην περίπτωση των μεθόδων υποχώρων Krylov, η σύγκλιση εξαρτάται από το δείκτη κατάστασης του πίνακα συντελεστών του γραμμικού συστήματος 1.23

$$\kappa(A) = \|A\| \|A^{-1}\| \quad (1.30)$$

ο οποίος καθορίζει και την κατάσταση του συστήματος -τιμές του $\kappa(A) \gg 1$ συνήθως οδηγούν σε αργή σύγκλιση. Η αντιμετώπιση αυτής της συμπεριφοράς μπορεί σε αρκετές περιπτώσεις να επιτευχθεί με την εφαρμογή ενός μετασχηματισμού με τη συμμετοχή ενός πίνακα M στο γραμμικό σύστημα. Συγκεκριμένα, αν αυτός ο πίνακας M είναι καλή προσέγγιση του πίνακα A , ο $M^{-1}A \approx I$ θα έχει βελτιωμένο δείκτη κατάστασης οπότε η επαναληπτική μέθοδος θα συγκλίνει γρηγορότερα, επιλύοντας το γραμμικό σύστημα $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ αντί του 1.23. Ο πίνακας M ονομάζεται (αριστερός) πίνακας προρύθμισης (preconditioner) και στην περίπτωση που το κόστος κατασκευής του είναι σχετικά μικρό η χρήση του στην επίλυση θεωρείται ωφέλιμη. Αυτό βέβαια δεν είναι πάντα εφικτό. Από τη μια, η εφαρμογή προρύθμισης έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση του υπολογιστικού κόστους και της πολυπλοκότητας της επαναληπτικής μεθόδου, ως εκ τούτου, θα πρέπει να συνοδεύεται και με σημαντική μείωση των βημάτων της -δηλαδή αύξηση της ταχύτητας σύγκλισης. Από την άλλη, οι τεχνικές προρύθμισης δεν έχουν κατά κανόνα παράλληλες ιδιότητες ([112]), κατ'επέκτασιν η κατασκευή του πίνακα και η δράση του στο γραμμικό σύστημα για το μετασχηματισμό του θα πρέπει συνδυαστικά να απαιτούν χρόνο t_M μικρότερο της επίλυσης με την επαναληπτική μέθοδο t_s .

Οι περισσότεροι πίνακες προρύθμισης παράγονται άμεσα από τον πίνακα συντελεστών του γραμμικού συστήματος σύμφωνα με κάποια διαμέριση του. Χαρακτηριστικό παράδειγμα η ατελής παραγοντοποίηση LU, η οποία και χρησιμοποιήθηκε στον παράλληλο αλγόριθμο της επίλυσης στο πρόβλημα Ιατρικής. Στο πρόβλημα Γεωφυσικής, πραγματοποιήθηκε, σε μια από τις προσεγγίσεις επίλυσης του γραμμικού συστήματος, προρύθμιση με εφαρμογή V-κύκλου Τεχνικής Πολυπλέγματος, διαδικασία που περιγράφεται σε επόμενη παράγραφο.

Τεχνική ατελούς LU-παραγοντοποίησης (iLU)

Μια βασική κατηγορία πινάκων προρύθμισης είναι αυτοί που προκύπτουν από την ατελή παραγοντοποίηση του πίνακα συντελεστών. Χαρακτηρίζονται ως ατελείς διότι κατά την παραγοντοποίηση του πίνακα αγνοούνται όσα στοιχεία ήταν μηδενικά πριν την παραγοντοποίηση και έγιναν μη μηδενικά κατά τη διάρκεια της. Στην περίπτωση της iLU παραγοντοποίησης αναζητείται $M = LU$ έτσι ώστε $M^{-1} \approx A^{-1}$ ([71], [74]), με διάφορες παραλλαγές ως προς το πλήθος των στοιχείων που αγνοούνται κατά την υλοποίηση της (iLU(0), iLU(k), iLUT). Ο αλγόριθμος 2 παρουσιάζει τον αλγόριθμο του Crout ([33]) για την υλοποίηση της iLU στην οποία αγνοούνται όσα στοιχεία έχουν απόλυτη τιμή μικρότερη από την τιμή ανοχής τ . Γενικά, η μέθοδος προσφέρεται με περιορισμένες δυνατότητες παραλληλοποίησης παρά τις βελτιωμένες εκδοχές για συγκεκριμένες κατηγορίες πινάκων ([72],[73],[79]).


```

Procedure iLU( $A, n$ )
for  $j = 1$  to  $n$  do
     $L(j, j) \leftarrow 1$ 
     $L(j + 1 : n, j) \leftarrow A(j + 1 : n, j)$ 
     $U(j, j : n) \leftarrow A(j, j : n)$ 
    for  $k = 1$  to  $j - 1$  do
         $U(j, j : n) \leftarrow U(j, j : n) - L(j, k)U(k, j : n)$ 
    end
    Αγνόησε  $U(j, j + 1 : n)$  από τη γραμμή  $j$  του  $U$ 
    for  $k = 1$  to  $j - 1$  do
         $L(j + 1 : n, j) \leftarrow L(j + 1 : n, j) - U(k, j)L(j + 1, n : k)$ 
    end
    Αγνόησε  $L(j + 1 : n, j)$  από τη στήλη  $j$  του  $L$ 
     $L(j + 1 : n, j) \leftarrow L(j + 1 : n, j)/U(j, j)$ 
end

```

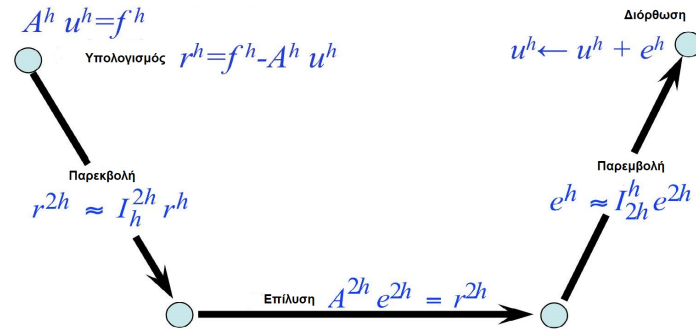
Algorithm 2: Ατελής παραγοντοποίηση iLU

Η υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου διαμορφώνεται ανάλογα τη δομή του πίνακα και την παραλλαγή που επιλέγεται αλλά είναι γενικά μικρότερη του $O(n^3)$ που ισχύει για την τυπική LU παραγοντοποίηση (ενός πίνακα $n \times n$). Η μέθοδος υλοποιήθηκε για την προρύθμιση του συστήματος του προβλήματος Ιατρικής στο παράρτημα Α'.

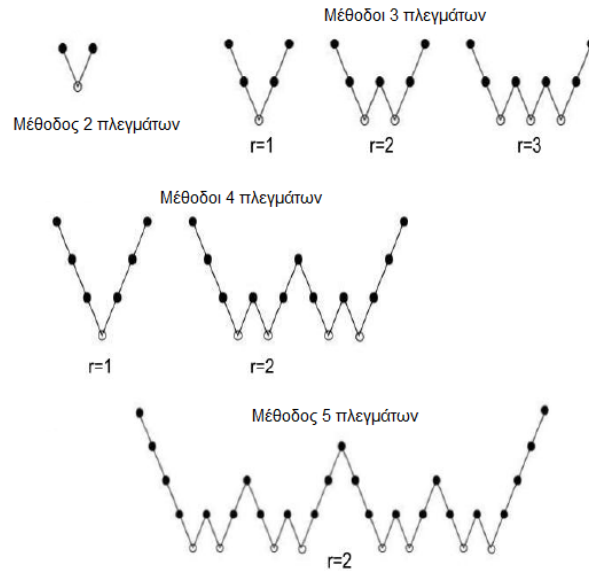
Προρύθμιση με Τεχνική Πολυπλέγματος - Multigrid Preconditioning

Η Τεχνική Πολυπλέγματος (Multigrid Technique) είναι μια ιδιαίτερα διαδεδομένη μέθοδος για την επίλυση γραμμικών συστημάτων που παράγονται από αριθμητικές μεθόδους διακριτοποίησης Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων, αλλά και για την προρύθμιση του πίνακα συντελεστών σε μια επαναληπτική μέθοδο στην προσπάθεια επιτάχυνσης της διαδικασίας επίλυσης, η οποία μπορεί να υλοποιηθεί με πλήθος διαφορετικών παραλλαγών, τροποποιώντας μερικές από τις υποδιαδικασίες που τη συνθέτουν. Διακρίνεται σε αλγεβρικού τύπου (Algebraic Multigrid), όπου δεν χρησιμοποιείται πληροφορία από το πλέγμα στο οποίο διακριτοποιείται η ΜΔΕ και σε γεωμετρικού τύπου, η εφαρμογή του οποίου αποτέλεσε τμήμα δοκιμής επίλυσης στο πρόβλημα γεωφυσικής οπότε και αναλύεται περαιτέρω.

Συγκεκριμένα, ξεκινώντας από το ομοιόμορφα αρχικά διακριτοποιημένο σε n υποδιαστήματα πλέγμα $\Omega \equiv [0, L_x] \times [0, L_y]$ (θεωρώντας δύο χωρικές διαστάσεις) χρησιμοποιεί μια ιεραρχία πλεγμάτων διακριτοποίησης ($\Omega_h, \Omega_{2h}, \Omega_{4h}, \dots$) με $h = \frac{1}{n}$ και επιλύει το σύστημα στο αραιότερο εξ' αυτών, το οποίο αποτελείται από ένα κλάσμα του πλήθους των αρχικών κόμβων. Στην απλή εκδοχή της η μέθοδος περιλαμβάνει τη χρήση δύο πλεγμάτων ενώ σε πιο σύνθετες περισσότερα των δύο, στα οποία η μετάβαση στο αραιό πλέγμα μπορεί να πραγματοποιείται περισσότερες από μια φορές (r φορές), χαρακτηρίζοντάς έτσι τον κύκλο υλοποίησης της Τεχνικής (V-κύκλος, W-κύκλος, κ.α., 1.3).

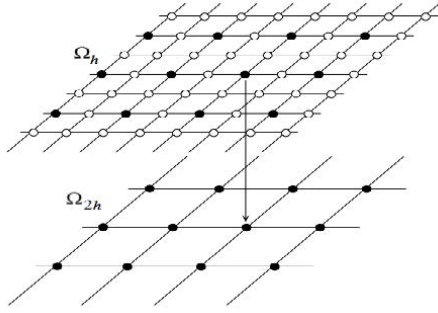


Σχήμα 1.4: Σχηματική αναπαράσταση βήματος V-κύκλου σε Τεχνική Πολυπλέγματος

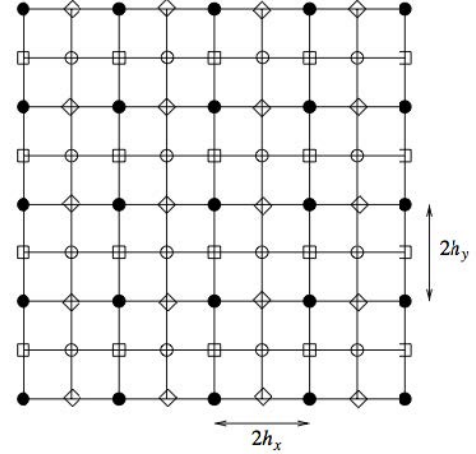


Σχήμα 1.3: Περιπτώσεις κύκλων Τεχνικής Πολυπλέγματος για διαφορετικό αριθμό πλεγμάτων (πηγή σχήματος: [113])

Ο V-κύκλος σε κάθε βήμα αποτελείται από τη διαδικασία της προεξομάλυνσης (presmoothing) με την εξομάλυνση του υπολοίπου, της μεταφοράς της πληροφορίας από το πυκνό στο αραιό πλέγμα και αντίστροφα με τη βοήθεια τελεστών καθώς και της εξομάλυνσης του σφάλματος. Για κάθε βήμα της επαναληπτικής αυτής διαδικασίας ακολουθείται ο αλγόριθμος 1.4. Η μεταφορά της πληροφορίας από το πυκνό στο αραιό πλέγμα ονομάζεται παρεμβολή (restriction) ενώ από το αραιό στο πυκνό παρεμβολή (interpolation) και πραγματοποιείται με τους αντίστοιχους τελεστές $I_h^{2h} : \Omega_h \rightarrow \Omega_{2h}$ και $I_{2h}^h : \Omega_{2h} \rightarrow \Omega_h$ που μετασχηματίζουν κατάλληλα τα διανύσματα που εμπλέκουν τιμές των γειτονικών κόμβων.



(α') Διαδικασία παρεμβολής



(β') Διαδικασία παρεμβολής

Ένας τελεστής παρεμβολής είναι ο περιοριστής πλήρους στάθμισης, ο οποίος στις δύο χωρικές διαστάσεις, έχει τη μορφή

$$I_h^{2h} = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}_h^{2h}$$

και μεταφέρει την πληροφορία του κόμβου $r_{i,j}^h$ στον $r_{i,j}^{2h}$ με βάση την ισότητα

$$r_{i,j}^{2h} = \frac{1}{16} (r_{2i-1,2j-1}^h + r_{2i-1,2j+1}^h + r_{2i+1,2j-1}^h + r_{2i+1,2j+1}^h + 2r_{2i,2j-1}^h + 2r_{2i,2j+1}^h + 2r_{2i-1,2j}^h + 2r_{2i+1,2j}^h + 4r_{2i,2j}^h)$$

Αντίστοιχα, ένας τελεστής παρεμβολής είναι ο διγραμμικός τελεστής με μορφή

$$I_{2h}^h = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}_{2h}^h$$

που μεταφέρει την πληροφορία του κόμβου $r_{i,j}^{2h}$ στον $r_{i,j}^h$ με βάση τις ισότητες

$$\begin{cases} r_{2i,2j}^h = r_{i,j}^{2h} \\ r_{2i+1,2j}^h = \frac{1}{2}(r_{i,j}^{2h} + r_{i+1,j}^{2h}) \\ r_{2i,2j+1}^h = \frac{1}{2}(r_{i,j}^{2h} + r_{i,j+1}^{2h}) \\ r_{2i+1,2j+1}^h = \frac{1}{2}(r_{i,j}^{2h} + r_{i+1,j}^{2h} + r_{i,j+1}^{2h} + r_{i+1,j+1}^{2h}) \end{cases}$$

Η τεχνική έχει πολυπλοκότητα $O(n)$ και είναι γνωστό ότι περιορίζει δραστικά τα στοιχεία του σφάλματος που μεταβάλλονται ραγδαία σε μικρή κλίμακα στις χωρικές διαστάσεις, γνωστά και ως υψίσυχνα σφάλματα, εφαρμόζοντας ελάχιστα βήματα μιας επαναληπτικής μεθόδου κατά τη διαδικασία εξομάλυνσης, ενώ η μετάβαση σε αραιότερο πλέγμα μέσω παρεμβολής στη συνέχεια και η επίλυση σε αυτό επιτρέπει την αντιμετώπιση των σφαλμάτων χαμηλότερης συχνότητας. Η ενσωμάτωση της Τεχνικής Πολυπλέγματος ως διαδικασία προρύθμισης σε μια επαναληπτική μέθοδο συνήθως περιλαμβάνει την πραγματοποίηση ενός V -κύκλου σε κάθε βήμα της επαναληπτικής διαδικασίας επίλυσης αντί του πίνακα συντελεστών, παράγοντας ένα 'προρρυθμισμένο' διάλυμα υπολοίπου το οποίο και χρησιμοποιείται κατόπιν στα ακόλουθα βήματα της μεθόδου. Η μέθοδος εφαρμόστηκε στην ηλεκτρομαγνητική διασκόπηση, κατά την επίλυση του γραμμικού συστήματος με απαλοιφή στην ενότητα 3.3.2.

1.5 Επιστημονικοί Υπολογισμοί σε Παράλληλες Αρχιτεκτονικές

Η αριθμητική επίλυση μιας ΜΔΕ -στην ουσία η επίλυση του γραμμικού συστήματος στο οποίο καταλήγει- είναι ξεκάθαρο ότι στηρίζεται σε σύνθετες αλγοριθμικές διαδικασίες για την υλοποίηση των οποίων απαιτούνται κατά κανόνα υπολογιστικά συστήματα με σημαντικούς πόρους. Στην περίπτωση δε που απαιτείται υψηλή ακρίβεια στην προσέγγιση της λύσης, συνήθως αυτή συνοδεύεται από την αντίστοιχη αύξηση του υπολογιστικού κόστους σε επίπεδο πράξεων και τη συνακόλουθη αύξηση του χρόνου υλοποίησης. Ο συνήθης τρόπος με τον οποίο επιχειρείται η επιτάχυνση των διαδικασιών είναι η παραλληλοποίηση τους, δηλαδή η ταυτόχρονη επεξεργασία δεδομένων του προγράμματος επίλυσης της ΜΔΕ.

Η παραλληλοποίηση ενός αλγορίθμου αποσκοπεί στην αύξηση των υπολογιστικών επιδόσεων μέσω του διαμοιρασμού του φόρτου εργασίας σε πολλαπλές επεξεργαστικές μονάδες. Το σύνολο των υπολογισμών διασπάται σε επιμέρους εργασίες οι οποίες μπορούν να εκτελεστούν ανεξάρτητα και οι οποίες ανατίθενται σε διακριτές υπολογιστικές οντότητες. Μέτρο ελέγχου της επίδοσης της παραλληλοποίησης είναι η επιτευχθείσα επιτάχυνση των υπολογισμών (speedup), η οποία τυπικά προσδιορίζεται ως το πηλίκο

$$s_n = \frac{T_s}{T_{p_n}} \quad (1.31)$$

όπου T_s και T_{p_n} οι χρόνοι εκτέλεσης σε σειριακό και παράλληλο (με n επεξεργαστικές μονάδες) περιβάλλον εκτέλεσης αντίστοιχα. Το περιβάλλον παράλληλης υλοποίησης Αυτές μπορεί να μοιράζονται τον ίδιο χώρο διευθύνσεων οπότε το συνολικό σύστημα χαρακτηρίζεται ως *σύστημα αρχιτεκτονικής κοινής μνήμης* ενώ, αντίθετα, όταν κάθε οντότητα έχει πρόσβαση μόνο στο δικό της χώρο διευθύνσεων ανήκει σε ένα σύστημα *κατακευμημένης μνήμης*.

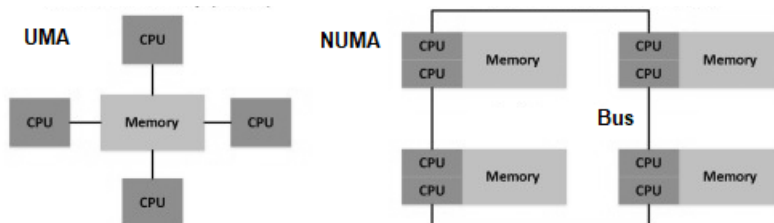
1.5.1 Υπολογιστικά συστήματα κοινής μνήμης

Τα υπολογιστικά συστήματα κοινής μνήμης είναι κατηγορία συστημάτων παράλληλης επεξεργασίας και υπολογισμών στα οποία όλες οι μονάδες είναι επεξεργαστές ή πυρήνες με άμεση πρόσβαση στην ίδια - κοινή - μνήμη. Σε αντίθεση με τα συστήματα κατακευμημένης μνήμης, όπου οι υπολογιστικές μονάδες είναι απομακρυσμένοι υπολογιστικοί κόμβοι και τα δεδομένα βρίσκονται διάσπαρτα μεταξύ αυτών με την ανταλλαγή πληροφορίας να πραγματοποιείται με αποστολή μηνυμάτων, η δυνατότητα πρόσβασης από κοινού σε ενιαία μνήμη, επιτρέπει την άμεση επικοινωνία μεταξύ των επεξεργαστικών μονάδων αλλά επιφέρει και προκλήσεις στη διαχείριση και συγχρονισμό της μνήμης.

Η κοινή μνήμη χρησιμοποιείται συνήθως σε συστήματα με έναν αριθμό πυρήνων (πολυπύρηνους επεξεργαστές) και συστήματα με λίγους επεξεργαστές. Αυτό επιτρέπει την αποδοτική εκμετάλλευση του παραλληλισμού σε εφαρμογές όπου η επικοινωνία και η αλληλεπίδραση μεταξύ των διεργασιών είναι συχνή και σημαντική.

Ωστόσο, τα συστήματα κοινής μνήμης αντιμετωπίζουν προκλήσεις όπως ο συγχρονισμός και η συνοχή της μνήμης. Ο συγχρονισμός απαιτείται για να διασφαλιστεί ότι πολλαπλές διεργασίες δεν προσπαθούν να αλλάξουν τα ίδια δεδομένα ταυτόχρονα, προκαλώντας σφάλματα ή ασυνέπειες. Η συνοχή της μνήμης αναφέρεται στην ανάγκη διατήρησης μιας συνεπούς κατάστασης μνήμης σε όλους τους πυρήνες, ώστε κάθε ανάγνωση να αντανακλά την πιο πρόσφατη εγγραφή.

Η αρχιτεκτονική κοινής μνήμης μπορεί να υλοποιηθεί είτε μέσω ενός κεντρικού συστήματος μνήμης, όπου η μνήμη βρίσκεται σε μια μοναδική φυσική τοποθεσία (Uniform Memory Access), είτε μέσω μιας μη ενιαίας πρόσβασης στη μνήμη (Non Uniform Memory Access), όπου η μνήμη είναι φυσικά διασκορπισμένη αλλά λογικά ενοποιημένη (σχήμα 1.6). Τα συστήματα NUMA προσφέρουν καλύτερη κλιμάκωση για συστήματα με μεγάλο αριθμό επεξεργαστών, αλλά παρουσιάζουν περισσότερες προκλήσεις στη διαχείριση της μνήμης.



Σχήμα 1.6: Σχηματική αναπαράσταση αρχιτεκτονικών UMA-NUMA

Το de facto πρότυπο για παράλληλο επιστημονικό προγραμματισμό σε περιβάλλοντα κοινής μνήμης NUMA και UMA είναι εδώ και δύο δεκαετίες το OpenMP, το οποίο χρησιμοποιήθηκε στο βασικό πρόβλημα Γεωφυσικής και του οποίου τα βασικά χαρακτηριστικά ακολουθούν στην επόμενη παράγραφο.

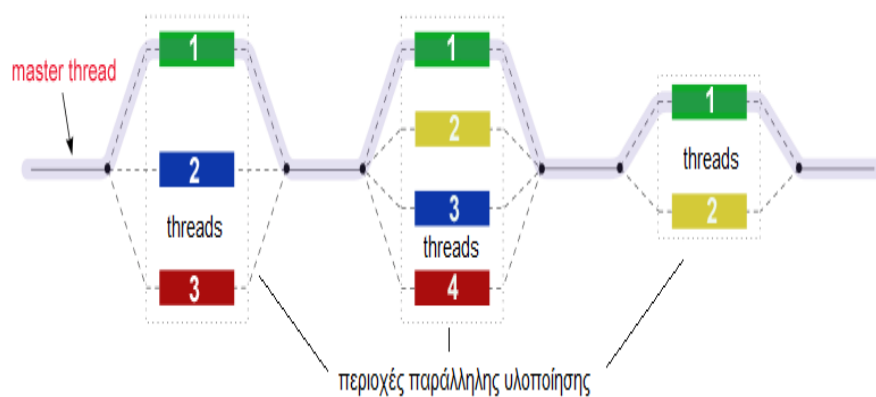
Το πρότυπο OpenMP

Το OpenMP είναι διεπαφή προγραμματισμού εφαρμογών που παρέχει ένα πλήθος οδηγιών προς το μεταγλωττιστή (compiler) ως επέκταση στις γλώσσες προγραμματισμού Fortran, C, C++, η ενσωμάτωση των οποίων στον κώδικα ενός προγράμματος υποδεικνύει την παράλληλη εκτέλεσης τμημάτων του. Δημιουργήθηκε με βάση την ανάγκη για ύπαρξη ενός κοινού προτύπου για τον παράλληλο προγραμματισμό σε αρχιτεκτονικές υπολογιστών κοινής μνήμης ενώ στην καθολική αποδοχή του συνετέλεσε το γεγονός ότι παρείχε τη δυνατότητα της μερικής παραλληλοποίησης, σε αντίθεση με το πρότυπο MPI στα συστήματα κατανεμμένης μνήμης, όπου ο παραλληλισμός είναι ολοκληρωτικός ή μηδενικός. Αποτελείται από τα παρακάτω στοιχεία:

- **Οδηγίες:** Σύνολο από οδηγίες προς τον μεταγλωττιστή (compiler), οι οποίες ενσωματώνονται στον κώδικα με τη μορφή σχολίων, και υποδεικνύουν στον compiler τις περιοχές παράλληλης εκτέλεσης, διαχείρισης δεδομένων, συγχρονισμού ή καταμερισμού εργασιών.
- **Συναρτήσεις Βιβλιοθήκης:** Συναρτήσεις βιβλιοθήκης με τη χρήση των οποίων διαμορφώνεται ανάλογα η παράλληλη εκτέλεση ή επιστρέφονται πληροφορίες σχετικές με τον τρόπο εκτέλεσης που έχει επιλεγεί.
- **Μεταβλητές Περιβάλλοντος:** Μεταβλητές περιβάλλοντος χρηστών για τον έλεγχο της παράλληλης εκτέλεσης στο περιβάλλον εργασίας.

Μοντέλο Ανάπτυξης Εφαρμογών

Το μοντέλο παραλληλισμού που εφαρμόζεται είναι thread based, στηρίζεται δηλαδή στην ύπαρξη πολλών υπολογιστικών νημάτων (threads) που μοιράζονται τον ίδιο χώρο μνήμης. Ο αριθμός των threads καθορίζεται από το χρήστη, ανάλογα τις δυνατότητες του μηχανήματος, με χρήση της κατάλληλης συνάρτησης βιβλιοθήκης ή θέτοντας την κατάλληλη μεταβλητή περιβάλλοντος του κελύφους. Το πρόγραμμα στο οποίο γίνεται χρήση του προτύπου OpenMP, ξεκινά να εκτελείται σειριακά από ένα thread (master thread) σαν μια διεργασία, μέχρις ότου αυτό συναντήσει οδηγία παράλληλης εκτέλεσης. Τότε το master thread δημιουργεί μια ομάδα από threads, με το πλήθος που όρισε ο προγραμματιστής, τα οποία εκτελούν παράλληλα τις εντολές που περιέχονται στην περιοχή αυτή του κώδικα. Το master thread αποτελεί επίσης μέλος της ομάδας υπολογισμών. Εντός της παραλληλοποιήσιμης περιοχής δεν υπάρχει συγχρονισμός μεταξύ threads, καθένα μπορεί να φτάσει σε οποιοδήποτε σημείο της οποιαδήποτε χρονική στιγμή. Στο τέλος της περιοχής, έχει δημιουργηθεί ένα φράγμα (barrier) όπου τα threads συγχρονίζονται και αφήνουν τη συνέχεια της εκτέλεσης στο master thread, παραμένοντας ανενεργά μέχρι την επόμενη περιοχή παράλληλης εκτέλεσης ([118]). Το μοντέλο αυτό εκτέλεσης είναι γνωστό και ως Fork—Join.



Σχήμα 1.7: Αναπαράσταση της προσέγγισης Fork—Join σε υπολογισμούς με OpenMP

Οι περιοχές παραλληλοποίησης ορίζονται με τις κατάλληλες οδηγίες προς το μεταγλωττιστή. Κατάλληλες προς παραλληλοποίηση περιοχές κώδικα -με υψηλή απόδοση παραλληλοποίησης- θεωρούνται αυτές που εμπλέκουν ανεξάρτητες διαδικασίες υπολογισμών. Χαρακτηριστικές περιπτώσεις είναι οι επαναληπτικοί βρόχοι (όταν κάθε επανάληψη τους είναι ανεξάρτητη των υπολοίπων), οι υπολογισμοί μεταξύ στοιχείων πινάκων και διανυσμάτων και ανεξάρτητες διεργασίες -μέρη του ίδιου προβλήματος- με διαφορετικά αριθμητικά δεδομένα .

Η ενσωμάτωση οδηγιών OpenMP σε επιλυτές μερικών διαφορικών εξισώσεων όπου κυριαρχούν μέθοδοι και υπολογισμοί με αυτά τα χαρακτηριστικά καθιστά εφικτή την παραλληλοποίηση του κώδικα που αναπαριστά τη φυσική του προβλήματος με περιορισμένο αριθμό παρεμβάσεων και οδηγεί, κατά κανόνα, στην ελάττωση του χρόνου εκτέλεσης διαδικασιών με μεγάλο υπολογιστικό φόρτο.

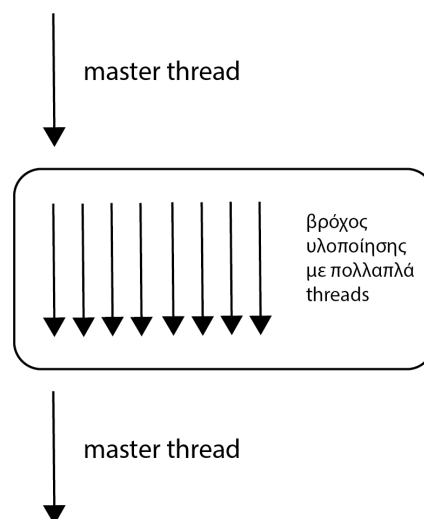
Μοντέλο Διαχείρισης Μνήμης στο OpenMP

Καθότι το πρότυπο OpenMP είναι σχεδιασμένο, όπως προαναφέρθηκε, για πολυεπεξεργαστικά μηχανήματα με κοινή μνήμη, όλα τα threads έχουν πρόσβαση στις θέσεις μνήμης, ενώ το καθένα μπορεί να έχει και μια αποκλειστική εικόνα μέρους της, σε περίπτωση που τα δεδομένα σε αυτές τις θέσεις αφορούν κάθε thread ξεχωριστά. Κάθε μεταβλητή εντός παράλληλης περιοχής μπορεί να είναι κοινής(shared) ή αποκλειστικής(private) χρήσης, να είναι δηλαδή προσβάσιμη, είτε από όλα τα threads, είτε καθένα να έχει ξεχωριστό αντίγραφο αυτής της μεταβλητής. Εξ' ορισμού, εντός παράλληλων περιοχών οι μεταβλητές είναι κοινές για όλα threads. Ωστόσο, ο καταμερισμός αυτών των δεδομένων οδηγεί ορισμένες φορές σε ένα ιδιότυπο ανταγωνισμό μεταξύ των threads. Για τον έλεγχο και την αποφυγή τέτοιας συμπεριφοράς, που οδηγεί συνήθως σε λάθος υλοποιήσεις, επιβάλλεται η οργάνωση των δεδομένων, όπως αλλαγή της εμβέλειας των μεταβλητών (από shared σε private), ή οδηγία συγχρονισμού μεταξύ των threads, με χρήση κατάλληλων οδηγιών. Γενικότερα, σε μοντέλα ανάπτυξης εφαρμογών για αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης, τα δύο βασικά ζητήματα της συμπεριφοράς της μνήμης του συστήματος είναι η συνάφεια (coherence) και η συνέπεια (consistency). Η συνάφεια αναφέρεται στη συμπεριφορά του συστήματος μνήμης, όταν πολλά threads προσπαθούν να αποκτήσουν πρόσβαση σε μια συγκεκριμένη θέση μνήμης, ενώ η συνέπεια στην σειρά πρόσβασης που θα έχουν τα threads σε διαφορετικές θέσεις μνήμης. Το OpenMP, όπως αναφέρθηκε, δεν εξασφαλίζει την ορθότητα των αποτελεσμάτων σε περιπτώσεις ανταγωνισμού των threads για μια θέση μνήμης —συνάφεια— όμως εξασφαλίζει συγκεκριμένη συμπεριφορά συνέπειας, με χρήση κατάλληλων οδηγιών ([118]).

Οδηγίες OpenMP

Οι directives περιγράφονται ενδεικτικά παρακάτω έχουν τη σύνταξη που απαιτείται στη γλώσσα Fortran όπως χρησιμοποιήθηκαν στην ανάπτυξη των εφαρμογών στα πλαίσια των προβλημάτων επίλυσης.

- **!\$omp parallel**
Η θεμελιώδης οδηγία στο OpenMP. Όταν τη συναντήσει το master thread, δημιουργεί την ομάδα των threads που εκτελούν παράλληλα τις ακολουθούμενες εντολές, όπως προαναφέρθηκε στο προγραμματιστικό μοντέλο. Η αρίθμηση των threads εντός παράλληλης περιοχής ξεκινά από το 0, που αντιστοιχεί στον master thread, έως και τον αριθμό $N - 1$, με N αριθμό threads.
- **!\$omp do**
Είναι μια από τις directives διαχείρισης εργασιών (work-sharing loops) στο OpenMP. Υποδεικνύει ότι οι επαναλήψεις του βρόγχου εργασίας που ακολουθεί θα εκτελεστούν παράλληλα από τα υπολογιστικά threads. Στην έναρξη της περιοχής, τα threads εισέρχονται ακανόνιστα, ενώ στο τέλος της υπονοείται φράγμα αναμονής στο οποίο συγχρονίζονται όλα τα threads για την ολοκλήρωση της παράλληλης εργασίας.



Σχήμα 1.8: Εκτέλεση do loop στο OpenMP

- **!\$omp sections** Ανήκει και αυτή στην κατηγορία των οδηγιών διαχείρισης εργασιών (work-sharing loops directives). Υποδεικνύει ότι τα τμήματα του κώδικα που καθορίζονται από τη section οδηγία θα διαμοιραστούν και θα εκτελεστούν από τα threads της ομάδας υπολογισμών. Κάθε section θα εκτελεστεί μια φορά από ένα thread. Διαφορετικά sections εκτελούνται από διαφορετικά threads.
- **!\$omp barrier** Συγχρονίζει όλα τα threads της ομάδας σε δεδομένο σημείο του κώδικα. Ουσιαστικά, το πρώτο thread που φτάνει σε αυτή την εντολή περιμένει όλα τα υπόλοιπα να φτάσουν και κατόπιν συνεχίζουν όλα μαζί την παράλληλη εκτέλεση που ακολουθεί.

Όροι(Clauses)

Όροι που χρησιμοποιήθηκαν στη συγκεκριμένη διατριβή και μπορούν να χρησιμοποιηθούν στις παραπάνω directives είναι οι εξής

- **shared(var1,var2,...)** Οι τιμές των μεταβλητών που περιέχονται θα είναι κοινές για όλα τα threads (τα threads θα προσπελάσουν τις ίδιες θέσεις μνήμης)
- **private(var1,var2,...)** Κάθε thread θα έχει δικό του αντίγραφο για τις μεταβλητές που έχουν δηλωθεί στην συγκεκριμένη directive.
- **collapse(n)** Όρος που καθορίζει το πλήθος των βρόχων που σχετίζονται με την OpenMP οδηγία.

Συναρτήσεις Βιβλιοθήκης

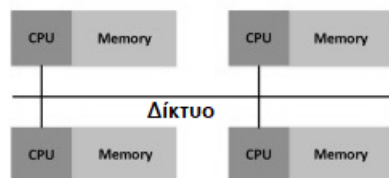
Οι συναρτήσεις βιβλιοθήκης παρέχουν λειτουργίες σχετικές με την εκτέλεση του προγράμματος όπως τον ορισμό του αριθμού των threads, πληροφορίες σχετικά με τον αριθμό των threads ή τον αριθμό των διαθέσιμων επεξεργαστών. Στη διατριβή χρησιμοποιήθηκαν σε κάποιες εκτελέσεις η συνάρτηση **omp_get_num_threads**, η οποία επιστρέφει τον αριθμό των threads που είναι ενεργά στην συγκεκριμένη παράλληλη περιοχή, και η διαδικασία **omp_set_num_threads** (αριθμός threads), η κλήση της οποίας θέτει τον αριθμό που θα χρησιμοποιηθούν στην εκτέλεση που ακολουθεί.

Μεταβλητές Περιβάλλοντος Χρηστών

Το OpenMP παρέχει τη δυνατότητα διαμόρφωσης των μεταβλητών κελύφους του περιβάλλοντος εκτέλεσης, με σκοπό την παραμετροποίησή της εκτέλεσης του παράλληλου κώδικα. Στη διατριβή επιλέχθηκε η χρήση της **OMP_NUM_THREADS** με την εντολή **export OMP_NUM_THREADS = αριθμός threads**, η οποία επιλέγει τον αριθμό των threads που θα χρησιμοποιηθούν.

Υπολογιστικά συστήματα κατανεμημένης μνήμης

Τα υπολογιστικά συστήματα κατανεμημένης μνήμης αποτελούνται από διακριτές επεξεργαστικές μονάδες (υπολογιστικούς κόμβους) καθεμία εκ των οποίων έχει τη δική της χώρο διευσθύνσεων μνήμης (1.9).



Σχήμα 1.9: Σχηματική αναπαράσταση περιβάλλοντος κατανεμημένης μνήμης

Το σύστημα συμπεριφέρεται σαν μια οργανωμένη ομάδα επεξεργασίας δεδομένων με την επικοινωνία μεταξύ των κόμβων, όταν είναι απαραίτητη, να πραγματοποιείται μέσω ιδιωτικού δικτύου με τη χρήση προτύπου ανταλλαγής μηνυμάτων (σε εφαρμογές επιστημονικών υπολογισμών χρησιμοποιείται κατά βάση το MPI) ενώ την επικοινωνία με το εξωτερικό δίκτυο χειρίζεται ο κόμβος διασύνδεσης του συστήματος. Ο συγκεκριμένος κόμβος αναλαμβάνει παράλληλα και την ανάθεση των διεργασιών στους υπολογιστικούς κόμβους. Στη συγκεκριμένη διαδικασία διαχειριστής είναι ο χρονοδρομολογητής (batch system) του κόμβου ο οποίος ελέγχει την πρόσβαση στους διαθέσιμους υπολογιστικούς πόρους (οι πλέον διαδεδομένοι τη δεδομένη χρονική στιγμή είναι οι SLURM και PBS/Torque). Όταν ο χρήστης επιθυμεί να εκτελέσει παράλληλα μια εργασία στο σύστημα, περιγράφει τους πόρους που χρειάζεται όπως πλήθος κόμβων, πλήθος πυρήνων και μνήμη στο χρονοδρομολογητή, οι πόροι που ζητήθηκαν καταγράφονται και όταν υπάρξουν διαθέσιμοι, ο χρονοδρομολογητής δίνει εντολή για την εκτέλεση της εργασίας στους υπολογιστικούς κόμβους.

Η αριθμητική επίλυση ΜΔΕ σε περιπτώσεις όπου απαιτούνται σημαντικοί υπολογιστικοί πόροι, όπως η εκτέλεση μετεωρολογικών μοντέλων, η προσομοίωση ροής ρευστών και η μελέτη κυματικών φαινομένων, πραγματοποιείται σε αντίστοιχα συστήματα με τον κάθε κόμβο να αναλαμβάνει ένα τμήμα της διαδικασίας επίλυσης (ή ένα τμήμα του χωρίου επίλυσης).

Στο πρόβλημα Γεωφυσικής της διατριβής, ο επιλυτής απευθύνεται σε πολυπύρνα συστήματα κοινής μνήμης ώστε να εκμεταλλεύεται το πλήθος των διαθέσιμων νημάτων εκτέλεσης. Δεδομένου όμως ότι κάθε υλοποίηση έχει συγκεκριμένα τεχνικά χαρακτηριστικά πεδίου (θέση πομπού και δέκτη, όπως περιγράφεται στο κεφάλαιο 2 και τις ενότητες του) αναπτύχθηκε επέκταση η οποία επιτρέπει την υβριδική παράλληλη υλοποίηση σε πλήθος υπολογιστικών κόμβων, σε κάθε έναν εκ των οποίων ανατίθεται η επίλυση του προβλήματος με διαφορετικά χαρακτηριστικά πεδίου.

Κεφάλαιο 2

Πρόβλημα Γεωφυσικής

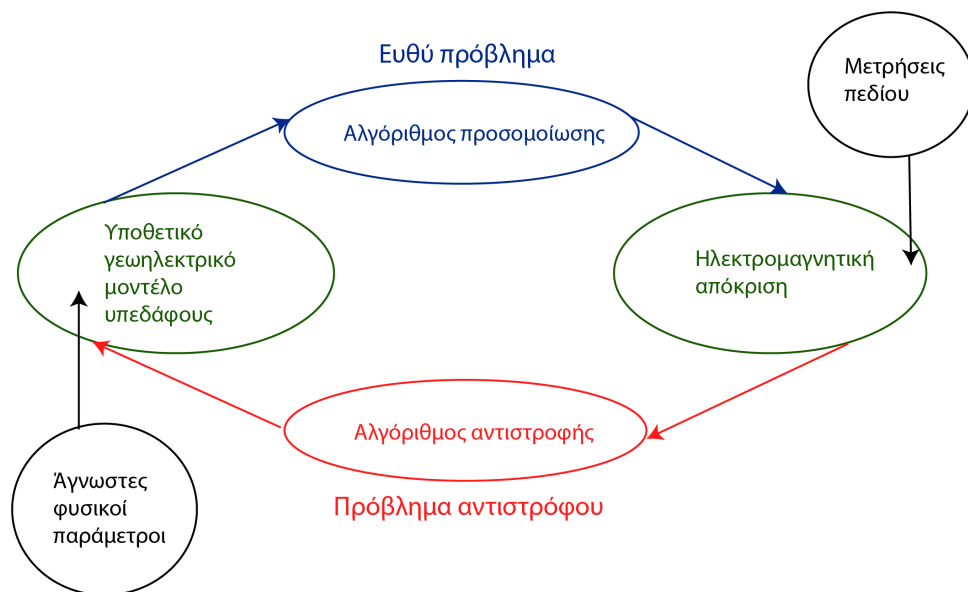
2.1 Εισαγωγή - Ηλεκτρομαγνητική διασκόπηση σε γεωφυσικές έρευνες

Η εξερεύνηση τους υπεδάφους για τον εντοπισμό γεωλογικών σχηματισμών και την αναζήτηση ορυκτών κοιτασμάτων αποτελεί πρωτεύουσας σημασίας διαδικασία για την τεχνολογική πρόοδο και εξέλιξη του ανθρώπινου πολιτισμού. Για την διεξαγωγή ερευνών γεωφυσικού ενδιαφέροντος έχουν αναπτυχθεί διαχρονικά διάφορες μέθοδοι με διαφορετικές προσεγγίσεις και διαφορετικά χαρακτηριστικά. Οι ηλεκτρομαγνητικές ή επαγωγικές μέθοδοι γεωφυσικής διασκόπησης (Electromagnetic Induction) είναι μέθοδοι στις οποίες γίνεται χρήση ηλεκτρομαγνητικού πεδίου, το οποίο δημιουργεί συσκευή ευρισκόμενη στο έδαφος ή πάνω από αυτό. Τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα διαδίδονται στο υπέδαφος, σε γεωλογικούς σχηματισμούς με διαφορετικές φυσικές ιδιότητες όπως η ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα, ανακλώνται και διαδίδονται εκ νέου προς την επιφάνεια όπου η συσκευή καταγράφει τις αποκρίσεις. Οι μετρήσεις των τιμών σε σταθμούς παρατήρησης και κατά μήκος της γραμμής μελέτης και η ανάλυση της πιθανής διαφοροποίησης του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου προδίδει τις φυσικές ιδιότητες της περιοχής του υπεδάφους που ερευνάται.

2.1.1 Μέθοδοι ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης και εφαρμογή

Οι ηλεκτρομαγνητικές μέθοδοι διαχωρίζονται ανάλογα με την κυματομορφή του πομπού και τον τρόπο μέτρησης σε μεθόδους στο πεδίο της συχνότητας (Frequency Domain Electromagnetics- FDEM) ή στο πεδίο του χρόνου (Time Domain Electromagnetics- TDEM) με ουσιαστικές διαφορές μεταξύ τους ως προς το ηλεκτρομαγνητικό κύμα που εκπέμπεται, την καταγραφή της απόκρισης, το δυνητικό βάθος διασκόπησης και τον τρόπο ανάγνωσης των μετρήσεων. Άλλος διαχωρισμός των ηλεκτρομαγνητικών μεθόδων βασίζεται στον τρόπο μετάδοσης των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων, σε ενεργητικές (ελεγχόμενης πηγής- controlled source electromagnetics), στις οποίες η γεωφυσική συσκευή περιλαμβάνει πομπό και δέκτη (FDEM ή TDEM) και παθητικές (επίπεδων κυμάτων-planewave sources), στις οποίες η γεωφυσική συσκευή έχουν μόνο δέκτη. Οι παθητικές μέθοδοι, μπορούν να διαχωριστούν σε ημιπαθητικές, που χρησιμοποιούν τεχνητά πεδία (VLF-RMT) και σε αυτές που χρησιμοποιούν φυσικά πεδία (μαγνητοτελλουρικά).

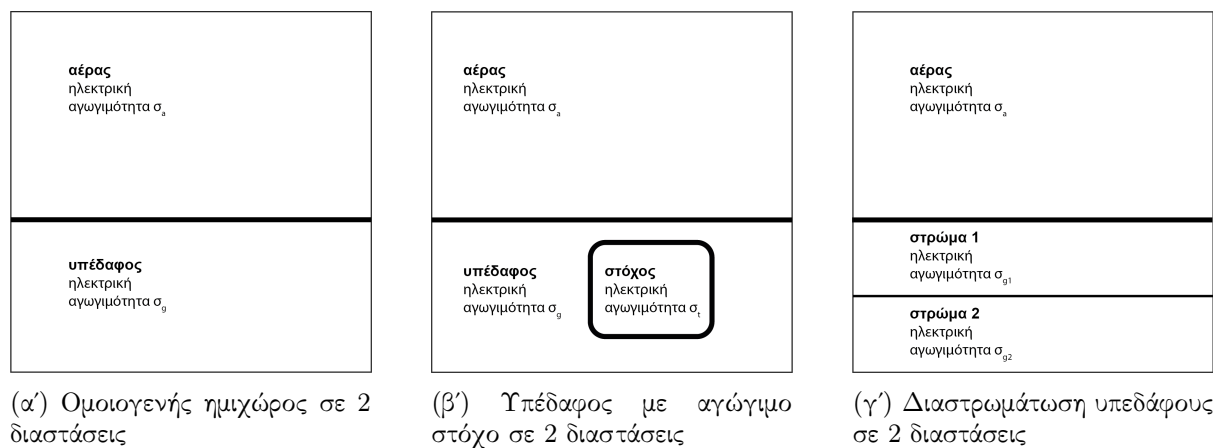
Σε όλες τις ηλεκτρομαγνητικές μεθόδους, όπως και σε άλλες γεωφυσικές μεθόδους, τα θεμελιώδη τμήματα της ερευνητικής διαδικασίας είναι η προσομοίωση μέσω της επίλυσης του ευθέως προβλήματος (**Forward Modelling**) και η επίλυση του αντίστροφου προβλήματος (**Inverse Problem**).



Σχήμα 2.1: Σχηματική αναπαράσταση της επαναληπτικής διαδικασίας σε μια ηλεκτρομαγνητική έρευνα

Η υλοποίηση της προσομοίωσης στο ευθύ πρόβλημα υποθέτει ένα μοντέλο της γης πάνω στο οποίο εκτελούνται υπολογισμοί για την πρόβλεψη του ηλεκτρομαγνητικού πεδίου και της ληφθείσας απόκρισης του μοντέλου εάν αυτό ήταν ακριβές. Οι θεμελιώδεις σχέσεις πάνω στις οποίες βασίζονται οι υπολογισμοί είναι φυσικοί νόμοι, όπως οι εξισώσεις του Maxwell, αναφορά τις οποίες γίνεται παρακάτω, ενώ το μοντέλο το οποίο θεωρείται κατά την προσομοίωση περιλαμβάνει φυσικές παραμέτρους του υπεδάφους - αλλά και του αέρα - όπως η **ηλεκτρική αγωγιμότητα** σ (conductivity), η **μαγνητική διαπερατότητα** μ (magnetic permeability) και η **ηλεκτρική επιτρεπτότητα** ϵ (electric permittivity). Είναι προφανές ότι οι γεωλογικοί σχηματισμοί του υπεδάφους αποτελούνται κατά κανόνα από ετερογενή υλικά, με διαφορετικές κατ'επέκτασιν φυσικές παραμέτρους, ως εκ τούτου, η αρχική διαμόρφωση ενός υποθετικού μοντέλου με όποιο βαθμό ετερογένειας του υπεδάφους καθίσταται σύνθετη διαδικασία (σχήματα 2.2β', 2.2γ'). Για το λόγο αυτό είναι συνήθης, σε πρώτο στάδιο, η επιλογή ενός απλούστερου μοντέλου της γης, του ομοιογενούς ημιχώρου. Ο **ομοιογενής ημιχώρος** (homogeneous halfspace) προσδιορίζεται ως ένα μοντέλο σε όλα τα σημεία του οποίου οι ηλεκτρομαγνητικές ιδιότητες του υπεδάφους είναι ίδιες (σχήμα 2.2α'). Το απλό αυτό μοντέλο μπορεί να χρησιμοποιηθεί κατά την προσομοίωση του ευθέως προβλήματος ως μοντέλο-βάση πάνω στο οποίο μπορούν να εντοπιστούν τυχόν ανωμαλίες ή διαφοροποιήσεις τιμών φυσικών παραμέτρων.

Το πρόβλημα του αντιστρόφου (inverse problem) είναι διαδικασία αντίστροφη της προσομοίωσης στο ευθύ πρόβλημα, δηλαδή ζητείται να βρεθεί ένα μοντέλο που αντιστοιχεί σε δεδομένες μετρήσεις όπως αυτές καταγράφηκαν στο πεδίο. Σκοπός της διαδικασίας είναι η εύρεση του καλύτερου δυνατού μοντέλου του υπεδάφους που εξηγεί τα παρατηρούμενα ηλεκτρομαγνητικά δεδομένα που συλλέχθηκαν κατά τη διάρκεια της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης. Αυτό περιλαμβάνει την προσαρμογή των παραμέτρων του υπεδάφους του μοντέλου ώστε τα αποτελέσματα της προσομοίωσης κατά το ευθύ πρόβλημα να αντιστοιχούν με τις ληφθείσες μετρήσεις στο μέγιστο βαθμό. Κατά την επίλυση του προβλήματος του αντιστρόφου ακολουθείται μια επαναληπτική διαδικασία. Ξεκινώντας από ένα αρχικό υποθετικό μοντέλο της γης -με υποθετική ηλεκτρική αγωγιμότητα στο υπέδαφος- πραγματοποιείται η προσομοίωση του ευθέως προβλήματος για την πρόβλεψη των ηλεκτρομαγνητικών αποκρίσεων. Στη συνέχεια, αυτές οι προβλέψεις συγκρίνονται με τις πραγματικές μετρήσεις. Κατόπιν,



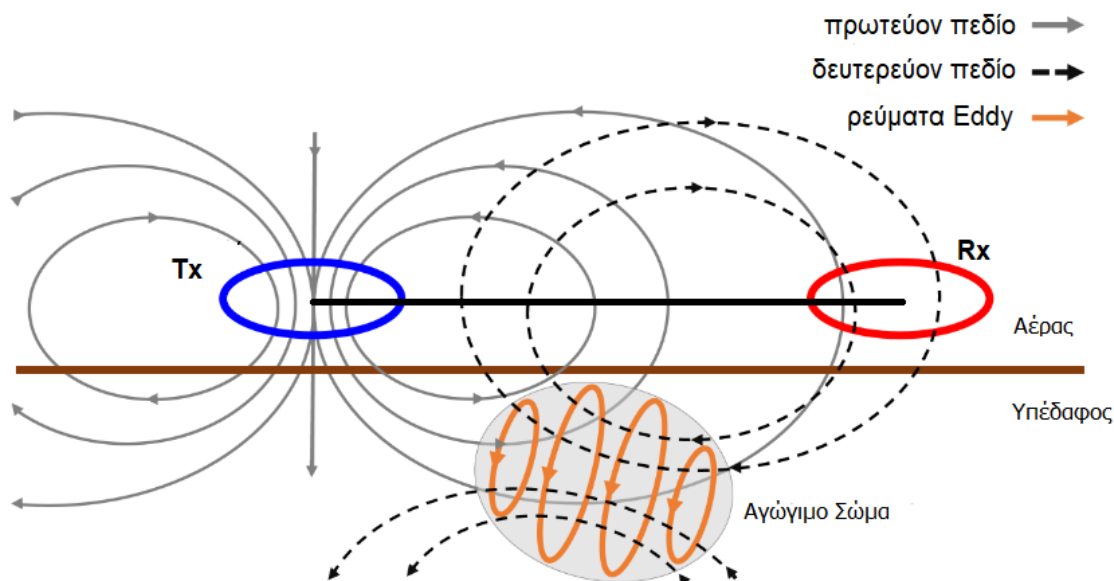
Σχήμα 2.2: Σχηματική αναπαράσταση τομών

το μοντέλο προσαρμόζεται για να μειωθούν οι αποκλίσεις μεταξύ των προβλεπόμενων (από το Forward Modeling) και των παρατηρούμενων στο πεδίο δεδομένων - η διαδικασία συνεχίζεται μέχρι να επιτευχθεί η ελαχιστοποίηση αυτών των αποκλίσεων στον προβλεπόμενο βαθμό.

Το ευθύ πρόβλημα και η αντιστροφή είναι αλληλεξαρτώμενα μέρη μιας έρευνας ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης. Η προσομοίωση του ευθέος προβλήματος χρησιμοποιείται στη διαδικασία αντιστροφής καθώς κάθε επανάληψη ενός αλγορίθμου αντιστροφής απαιτεί επίλυση του ευθέος προβλήματος για την πρόβλεψη της ηλεκτρομαγνητικής απόκρισης του υποτιθέμενου μοντέλου του υπεδάφους. Η απόδοση του αλγορίθμου αντιστροφής στηρίζεται στην ακρίβεια της επίλυσης της ευθέος προβλήματος - όσο πιο ακριβές είναι το μοντέλο στην πρόβλεψη των ηλεκτρομαγνητικών αποκρίσεων στο ευθύ πρόβλημα, τόσο πιο αξιόπιστα θα είναι τα αποτελέσματα του αλγορίθμου αντιστροφής. Συνοπτικά, το ευθύ πρόβλημα μπορεί να θεωρηθεί ως η διαδικασία πρόβλεψης δοθέντος ενός μοντέλου της γης ενώ η επίλυση του αντιστρόφου ως η διαδικασία βέλτιστης προσαρμογής του μοντέλου στα δεδομένα των μετρήσεων.

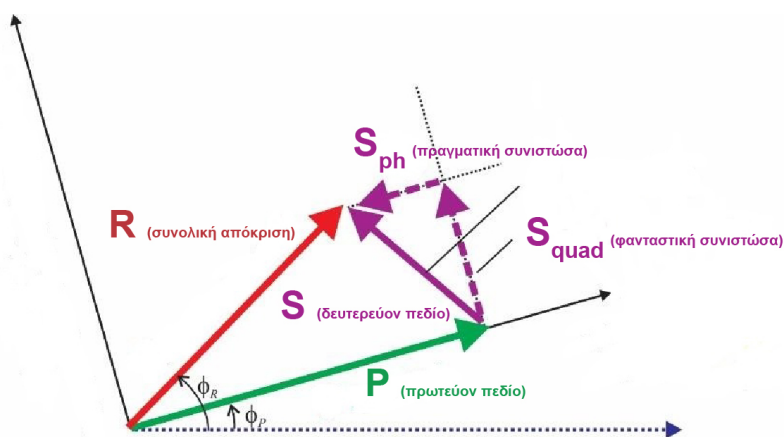
2.1.2 FDEM μέθοδοι κινούμενου πομπού-δέκτη

Οι ηλεκτρομαγνητικές μέθοδοι στον χώρο της συχνότητας (Frequency Domain Electromagnetics, FDEM) περιλαμβάνουν την συνεχή εκπομπή ημιτονοειδούς μεταβαλλόμενου μαγνητικού πεδίου συγκεκριμένης συχνότητας. Η πλέον διαδεδομένη FDEM μέθοδος, η οποία και θεωρήθηκε βάση της έρευνας της διατριβής, είναι η μέθοδος κινούμενου πομπού-δέκτη (Loop-Loop EM method). Η εφαρμογή της μεθόδου στο πεδίο πραγματοποιείται με τη χρήση συσκευής όπου βρίσκονται δύο βρόχοι (loops) σε σταθερή απόσταση: ένα μαγνητικό δίπολο - το οποίο ανάλογα με τον προσανατολισμό του μπορεί να θεωρηθεί ως οριζόντιο (Horizontal Magnetic Dipole - HMD) ή κατακόρυφο (Vertical Magnetic Dipole - VMD) - που λειτουργεί ως πομπός (Tx) εκπέμποντας συνεχές ηλεκτρομαγνητικό κύμα που ταλαντώνεται σε σταθερή συχνότητα, το **πρωτεύον** ηλεκτρομαγνητικό κύμα στο χώρο. Το πρωτεύον κύμα λαμβάνεται άμεσα από το δέκτη, ταυτόχρονα όμως διαχέεται και στο υπέδαφος προκαλώντας επαγωγή δινορευμάτων (ρεύματα Foucault ή Eddy) όταν σε αυτό συναντήσει ηλεκτρικά αγώγιμους σχηματισμούς, οι οποίοι, με τη σειρά τους, παράγουν ένα **δευτερεύον** ηλεκτρομαγνητικό κύμα, ο παλμός του οποίου λαμβάνεται επίσης από το δέκτη (Rx). Το καταγραφέν δευτερεύον κύμα παρότι έχει ίδια συχνότητα με το πρωτεύον, εμφανίζεται υπό διαφορετική διεύθυνση και με διαφορετικό πλάτος και φάση (ϕ) σε σχέση με αυτό, στοιχεία τα οποία επηρεάζονται από τη διαφοροποίηση της ηλεκτρικής αγωγιμότητας



Σχήμα 2.3: Επισκόπηση της αρχής λειτουργίας ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης στη μέθοδο κινούμενου πομπού-δέκτη (πηγή σχήματος: [48])

στο υπόδαφος. Οι συνιστώσες του δευτερεύοντος πεδίου ανάλογα τη διαφορά φάσης που έχουν με το πρωτεύον χαρακτηρίζονται ως in-phase (η πραγματική συνιστώσα της μιγαδικής διατύπωσης της τιμής του πεδίου, η διαφορά φάσης της οποίας με το πρωτεύον πεδίο είναι π) και quadrature (η φανταστική αντίστοιχα συνιστώσα, η διαφορά φάσης της οποίας με το πρωτεύον πεδίο είναι $\pi/2$). Το σχήμα 2.4 παρουσιάζει ενδεικτικά τη σχέση μεταξύ πρωτεύοντος και δευτερεύοντος πεδίου.



Σχήμα 2.4: Διάγραμμα φάσης. Ανάλυση του καταγραφέντος R ηλεκτρομαγνητικού κύματος στο δέκτη R_x , σε δευτερεύον κύμα S με συνιστώσες S_p (πραγματική) και S_{quad} (φανταστική), και σε πρωτεύον P .

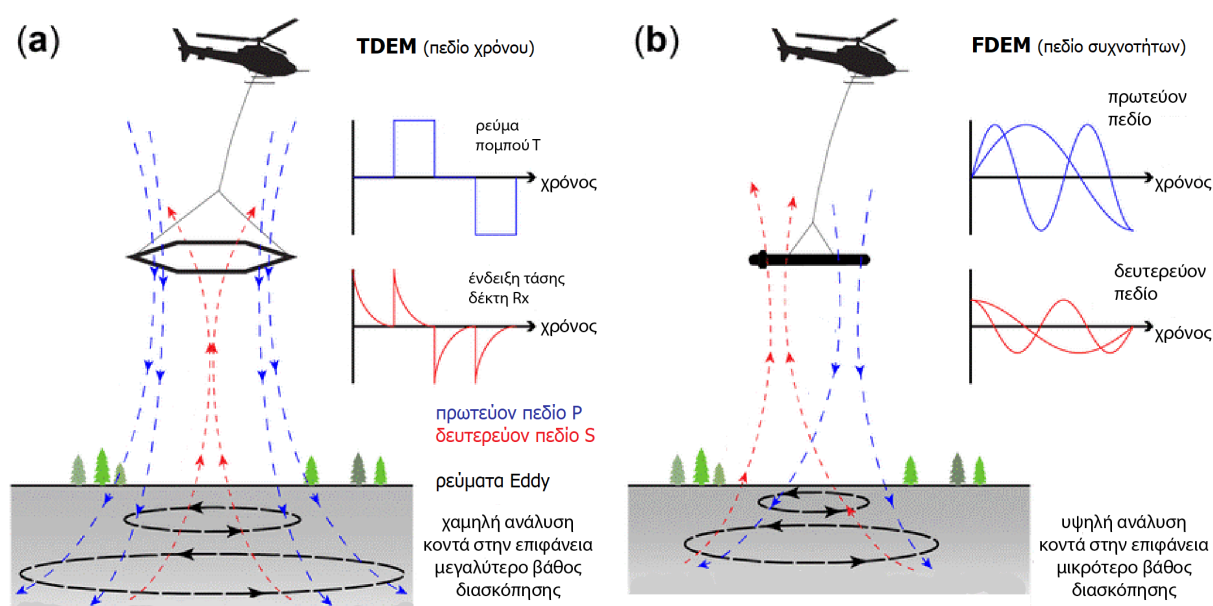
Πρέπει να αναφερθεί ότι το πλάτος του δευτερεύοντος κύματος S είναι κατά κανόνα αισθητά μικρότερο σε σχέση με αυτές του πρωτεύοντος P για μικρή απόσταση μεταξύ των πηνίων (μπορεί να αποτελεί 10-20% του αντίστοιχου πλάτους του πρωτεύοντος πεδίου).

Σημαντικός παράγοντας επίσης, σχετικός με την εξασθένιση του πρωτεύοντος πεδίου, είναι το βάθος διασκόπησης. Αυτό εξαρτάται από τις φυσικές παραμέτρους του υπεδάφους και από τη συχνότητα εκπομπής του πομπού. Στις FDEM μεθόδους η ποσοτικοποίηση της επίδρασης των παραπάνω παραμέτρων στο βάθος διασκόπησης μπορεί να αποδοθεί με τον παρακάτω τύπο

$$\delta = \frac{1}{\sqrt{\pi \mu \sigma f}}$$

όπου δ το επιδερμικό βάθος, το οποίο εκφράζει το βάθος στο οποίο το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο έχει εξασθενήσει στο 37% του πλάτους που είχε στην επιφάνεια ([115]).

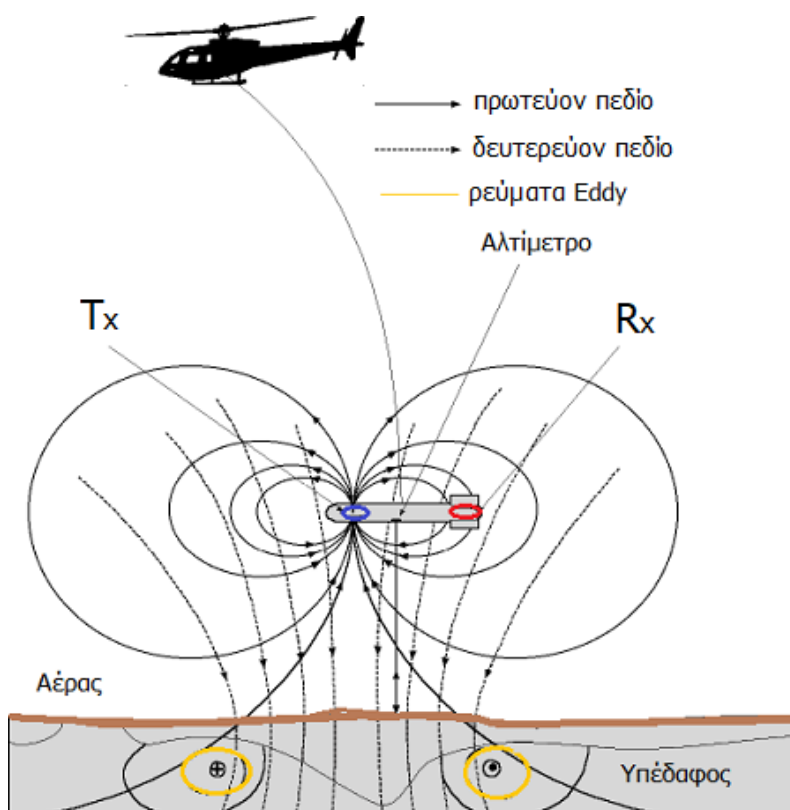
Εναλλακτική προσέγγιση στον εντοπισμό των αδύναμων δευτερευόντων πεδίων είναι οι μέθοδοι TDEM στις οποίες έγινε αναφορά νωρίτερα, η αρχή λειτουργίας των οποίων βασίζεται στην διακοπή εκπομπής του πρωτεύοντος πεδίου και την παρατήρηση της απομείωσης του δευτερευόντος (σχήμα 2.5).



Σχήμα 2.5: Ενδεικτική σύγκριση ηλεκτρομαγνητικών μεθόδων στο πεδίο των συχνοτήτων (FDEM) και στο πεδίο του χρόνου (TDEM) (πηγή σχήματος: [51])

Ηλεκτρομαγνητική διασκόπηση από αέρα

Η συσκευή με τον πομπο-δέκτη μπορεί να βρίσκεται στην επιφάνεια του εδάφους (Ground-based), να είναι εγκατεστημένο σε πλωτά μέσα (Marine) ή να φέρεται από εναέριο μέσο (Airborne). Κατά την ηλεκτρομαγνητική διασκόπηση από αέρα (airborne survey), συσκευή αποτελούμενη από πομπό και δέκτη, όπως περιγράφη νωρίτερα, αιωρείται από εναέριο μέσο (σχήμα 2.6). Ο πομπός εκπέμπει ηλεκτρομαγνητικά κύματα προς την επιφάνεια του εδάφους και στο υπέδαφος, η απόκριση των υλικών του οποίου σε αυτά καταγράφεται στη συνέχεια από το δέκτη. Το ύψος της αιωρούμενου εξοπλισμού από το έδαφος καθορίζεται από παράγοντες που σχετίζονται με τον τύπο του εδάφους πάνω από το οποίο πραγματοποιείται η έρευνα, τον τύπο του εναέριου μέσου και την επιθυμητή ανάλυση του υπεδάφους, και μπορεί να είναι από 10 μέτρα (με χρήση ελικοπτέρου ή drone, σε περιπτώσεις ερευνών ultra-low attitude όπου συνήθως είναι αναγκαία υψηλής ανάλυσης απεικόνιση των γεωλογικών σχηματισμών) μέχρι αρκετές εκατοντάδες μέτρα (με χρήση αεροσκάφους, για έρευνες μεγάλης κλίμακας).



Σχήμα 2.6: Ηλεκτρομαγνητική διασκόπηση από αέρα (πηγή σχήματος: [121])

2.1.3 Επίλυση ευθέως προβλήματος

Για την προσομοίωση του ευθέως προβλήματος της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης με τη μέθοδο κινούμενου πομπού-δέκτη στο πεδίο των συχνοτήτων ή του χρόνου με χρήση μαγνητικού διπόλου (MD) - και για ένα εύρος συχνοτήτων από 100Hz μέχρι 100MHz - έχει αναπτυχθεί πλήθος αριθμητικών μεθόδων ([4]) - στην περίπτωση επίλυσης στις 3 διαστάσεις μάλιστα, η βιβλιογραφία παραμένει σχετικά πιο περιορισμένη. Στις περισσότερες περιπτώσεις, χρησιμοποιείται διαφορική εξίσωση της μη ομογενούς μορφής Helmholtz

$$\nabla^2 \mathbf{f} + k^2 \mathbf{f} = \mathbf{S} \quad (2.1)$$

στην οποία ∇^2 ο τελεστής Laplace, f η άγνωστη φυσική ποσότητα, k ο κυματαριθμός που σχετίζεται με τη συχνότητα του κύματος εκπομπής και τις ιδιότητες των μέσων διάδοσης και \mathbf{S} ο πηγαιός όρος. Η διαφορική εξίσωση επιλύεται σε πεπερασμένων διαστάσεων χώρο-υπολογιστικό μοντέλο αποτελούμενο από επιμέρους περιοχές όπου διαφοροποιείται το μέσο διάδοσης- στα όρια του οποίου εφαρμόζονται συνοριακές συνθήκες. Για την περίπτωση της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης με κατάλληλες υποθέσεις και άγνωστη ποσότητα το ηλεκτρικό πεδίο, η εξίσωση γράφεται

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) + k^2 \mathbf{E} = \mathbf{J}_s \quad (2.2)$$

και προκύπτει από συνδυασμό εξισώσεων του Maxwell με διαδικασία η οποία περιγράφεται αναλυτικά στην ενότητα 2.2.2. Η εξίσωση περιγράφει τη διάχυση του ηλεκτρικού πεδίου βάσει της συχνότητας του κύματος σε μέσο με συγκεκριμένες ιδιότητες, η διαφοροποίηση των οποίων επιφέρει την ασυνέχεια του συντελεστή k στη διεπαφή τους. Το ηλεκτρικό πεδίο θεωρείται συνεχές μεταξύ των υλικών ([31]). Η επίλυση της εξίσωσης ως προς \mathbf{E} ακολουθείται από τον υπολογισμό του μαγνητικού πεδίου \mathbf{H} για θέσεις πάνω από την επιφάνεια

της γης

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{i\omega\mu_0}\nabla \times \mathbf{E} \quad (2.3)$$

ολοκληρώνοντας κατ' αυτόν τον τρόπο ένα επαναληπτικό βήμα του ευθέος προβλήματος όπως περιγράφηκε νωρίτερα, με τις τιμές του μαγνητικού πεδίου να καταγράφονται και συγκρίνονται με τις τιμές των μετρήσεων του δέκτη στο πεδίο ([56]).

Για τον υπολογισμό της προσέγγισης του ηλεκτρικού πεδίου \mathbf{E} έχουν προταθεί και χρησιμοποιηθεί διαδεδομένες αριθμητικές μέθοδοι όπως αυτές των πεπερασμένων στοιχείων και των πεπερασμένων διαφορών καθώς και διαδικασίες προσεγγίσεων μέσω υπολογισμού ολοκληρωμάτων ([4], [12], [20], [21], κ.α.).

Η επιλογή του υπολογισμού ολοκληρωμάτων μετατρέπει τις εξισώσεις του Maxwell σε μια δεύτερης τάξης εξίσωση Fredholm που πρέπει να επιλυθεί ως προς την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου, διαδικασία με μεγάλο υπολογιστικό φόρτο και περιορισμένες εφαρμογές ([22], [4], [21]).

Στην περίπτωση της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων, το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο εκφράζεται με τη βοήθεια βασικών πολυωνυμικών συναρτήσεων, οι συντελεστές των οποίων υπολογίζονται με χρήση της μεθόδου Galerkin, [20], [34], κ.α.. Η εφαρμογή της συγκεκριμένης μεθόδου επιτρέπει υλοποιήσεις σε πιο σύνθετα γεωμετρικά χωρία με μεγαλύτερη ανομοιογένεια αλλά και μεγαλύτερο υπολογιστικό κόστος, ειδικά σε 3-διάστατα προβλήματα. Οι επιλυτές που χρησιμοποιούν τη μέθοδο πεπερασμένων διαφορών από την άλλη, παρουσιάζονται διαχρονικά στη βιβλιογραφία, παλαιότερα με τις [2], [6] και [21], πιο πρόσφατα με [23], [50] και [38] μεταξύ άλλων, καθιστούν απλούστερη τη διαδικασία διακριτοποίησης του χωρίου του μοντέλου αέρα-γης, που -κατά κανόνα- είναι τυπικής γεωμετρίας. Στη βιβλιογραφία συναντάται σχεδόν καθολικά εφαρμογή τυπικών αριθμητικών σχημάτων κεντρικών διαφορών δεύτερης τάξης για τη διακριτοποίηση των συνιστωσών ηλεκτρικού ή/και μαγνητικού πεδίου στο πεδίο των συχνοτήτων στην εξίσωση Helmholtz που προκύπτει από την αποσύζευξη τους στις εξισώσεις του Maxwell ([28], [21], [50], [91], κ.α.) .

Ανεξαρτήτως επιλογής μεθόδου, η επίλυση του ευθέος προβλήματος της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης για την προσέγγιση του \mathbf{E} προϋποθέτει την επίλυση συστήματος γραμμικών εξισώσεων, ([3], [23], [38]), μια πολυσύνθετη υπολογιστικά διαδικασία για λόγους μεταξύ των οποίων, οι εξής:

1. η παρουσία του τελεστή $\nabla \times (\nabla \times)$, ο οποίος κατά τη διακριτοποίηση ενός συνεχούς χωρίου στις 3 διαστάσεις οδηγεί σε συστήματα γραμμικών εξισώσεων όπου ο πίνακας συντελεστών είναι αραιός με εξαιρετικά μεγάλη διάσταση και, συνήθως, μεγάλο δείκτη κατάστασης σε προβλήματα με ρεαλιστικές διαμερίσεις ([52]).
2. ο υπολογισμός των αποκρίσεων πρέπει να πραγματοποιηθεί με σχετική εγγύτητα στον πομπό όπου όμως το πεδίο παρουσιάζει διαρκείς μεταβολές. Σε περίπτωση χρήσης αραιού πλέγματος είναι δεδομένη η ύπαρξη σφαλμάτων από το αριθμητικό σχήμα ([21])
3. η χρήση σχημάτων υψηλής τάξης ακρίβειας επί πυκνών ομοιόμορφων πλεγμάτων σε όλο τον όγκο του υπολογιστικού χωρίου επιβαρύνει επιπλέον το γραμμικό σύστημα καθιστώντας ακόμα πιο περίπλοκη την επίλυση του και προϋποθέτοντας πλήθος υπολογιστικών πόρων.
4. μεγάλη απόκλιση μεταξύ τιμών παραγόντων της εξίσωσης που πηγάζουν από τις φυσικές ιδιότητες των υλικών στα επιμέρους χωρία του υπολογιστικού χώρου. Συγκεκριμένα, η διαφοροποίηση των τιμών της ηλεκτρικής αγωγιμότητας αέρα και εδάφους κατά μήκος της διεπαφής τους μπορεί να είναι μεγαλύτερη από $O(4)$ ([38]).

Η χρήση άμεσης μεθόδου επίλυσης προϋποθέτει την παραγοντοποίηση του πίνακα συντελεστών (LU παραγοντοποίηση ή ανάλυση Cholesky) όταν υφίστανται οι απαραίτητες προϋποθέσεις, διαδικασία χρονοβόρα και με μεγάλο κόστος σε υπολογιστικούς πόρους, ειδικά σε περιπτώσεις 3-διάστατων ερευνών όπου οι απαιτήσεις σε μνήμη αυξάνονται με $O(N^2)$ και $O(N^3)$ όταν N το συνολικό πλήθος των αγνώστων, περιορίζοντας έτσι το μέγεθος του προβλήματος που μπορεί να αντιμετωπιστεί ([28], [38]). Από την άλλη, οι άμεσες μέθοδοι θεωρούνται περιορισμένων επιδόσεων από πλευράς παράλληλης υλοποίησης και επεκτασιμότητας καθώς η υλοποίηση τους σε παράλληλο υπολογιστικό περιβάλλον δεν μπορεί να επιταχυνθεί από έναν αριθμό υπολογιστικών πυρήνων και πέρα λόγω σειριακότητας των υπολογισμών ([60], [61], [62], [63]). Παρόλα αυτά, διαχρονικά έχουν προταθεί επιλυτές που χρησιμοποιούν άμεσες μεθόδους επίλυσης στην επίλυση του ευθέως προβλήματος όπως ο MUMPS ([28], [53], [58]) και ο PARDISO, [59], ενώ συναντώνται γενικότερα στη βιβλιογραφία σε ευρύτερες εφαρμογές ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης ([64], [62], [65], [63], [66], [67]).

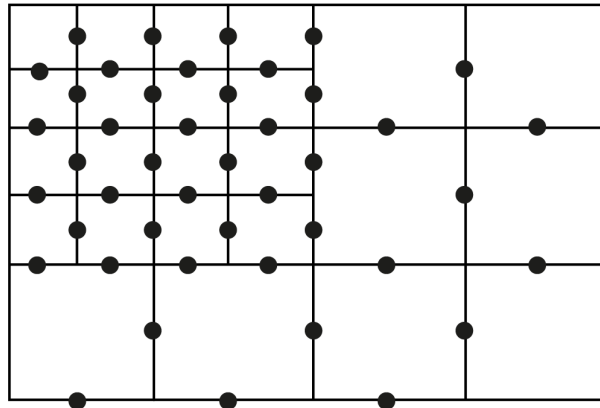
Από την άλλη, οι επαναληπτικές μέθοδοι υποχώρων Krylov, πλεονεκτούν λόγω της δυνατότητας τους να παραλληλοποιηθούν σε μεγάλο βαθμό και να υλοποιηθούν σε μεγάλης κλίμακας προβλήματα, όπως αναφέρθηκε και στο πρώτο κεφάλαιο. Μέθοδοι όπως η GMRES, η BiCG, η BiCGSTAB έχουν χρησιμοποιηθεί σε μεγάλο εύρος εφαρμογών σε γεωηλεκτρομαγνητικές μεθόδους ([94], [95], [23], [2], [21]). Με μειονέκτημα την αργή -ή σε άλλες περιπτώσεις μη εφικτή- σύγκλιση όταν ο πίνακας συντελεστών έχει μεγάλο δείκτη κατάστασης, όπως συμβαίνει στην 3-διάστατη ηλεκτρομαγνητική διασκόπηση, συνηθίζεται η εφαρμογή κάποιας τεχνικής προρύθμισης, με γενικά χαρακτηριστικά όπως αυτά περιγράφηκαν στο εισαγωγικό κεφάλαιο. Για τα γραμμικά συστήματα που προκύπτουν σε τέτοιους επιλυτές έχει προταθεί διαχρονικά πληθώρα τεχνικών προρύθμισης όπως η ατελής παραγοντοποίηση Cholesky ([24]), προρύθμιση με Jacobi ([2]) ή ατελή ανάλυση LU ([96], [92]). Αντίθετα, η χρήση τεχνικών πολυπλέγματος είτε σαν αυτόνομες διαδικασίες επίλυσης είτε σαν διαδικασίες προρύθμισης, δεν έχει ιστορικά την ίδια ευρεία εφαρμογή σε ηλεκτρομαγνητικές εφαρμογές γεωφυσικού ενδιαφέροντος, παρά την εμφάνιση αρκετών προτάσεων υλοποίησης πρόσφατα, [15], [17], [36]. Το γεγονός μπορεί ενδεχομένως να εξηγηθεί από την πολυπλοκότητα της αριθμητικής υλοποίησης καθώς και από το ότι τα γενικευμένα σχήματα τεχνικών πολυπλέγματος δεν ανταποκρίνονται ικανοποιητικά στις εξισώσεις του Maxwell λόγω της ύπαρξης του τελεστή στροβιλισμού [97], [52]. Ειδικά στην περίπτωση ηλεκτρομαγνητικών -αλλά και άλλων συναφών- εφαρμογών όπου το γραμμικό σύστημα $n \times n$, όπως θα εξηγηθεί και στη συνέχεια, περιέχει μιγαδικούς όρους και μπορεί να γραφτεί σαν ένα $2n \times 2n$ πραγματικό σύστημα, έχουν προταθεί block-διαγώνιοι και block-τριγωνικοί προρρυθμιστές ([98], [99], [100], [93]).

Πέραν των σχετικών με την αριθμητική μέθοδο και την υλοποίηση της τεχνικής, είναι διαδεδομένες και χρησιμοποιούνται επίσης τεχνικές που σχετίζονται άμεσα με τη φυσική υπόσταση του προβλήματος με σκοπό τη βελτίωση της αριθμητικής προσέγγισης της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου. Συγκεκριμένα,

- Χρήση Προσαρμοσμένης Διύλισης Πλέγματος (AMR - Adaptive Mesh Refinement)

Με την εφαρμογή της συγκεκριμένης τεχνικής (2.7) η επίλυση πραγματοποιείται σε πυκνό πλέγμα κοντά στην περιοχή ενδιαφέροντος -στην περίπτωση της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης κοντά στον πομπό όπου λαμβάνονται οι αποκρίσεις- ενώ στις υπόλοιπες περιοχές του χωρίου πραγματοποιείται σε αραιό πλέγμα. Η διαδικασία ξεκινάει με την επίλυση σε ένα καθολικά αραιό πλέγμα σε όλο το χωρίο. Μετά την εκτίμηση του σφάλματος και τον καθορισμό της περιοχής ενδιαφέροντος, τα υπολογιστικά κελιά σε αυτήν υποδιαιρούνται (όσες φορές κρίνεται αναγκαίο) οπότε και οι εξισώσεις λύνονται εκ νέου στο αρχικό και το διυλισμένο πλέγμα. Η διαδικασία ολοκληρώνεται

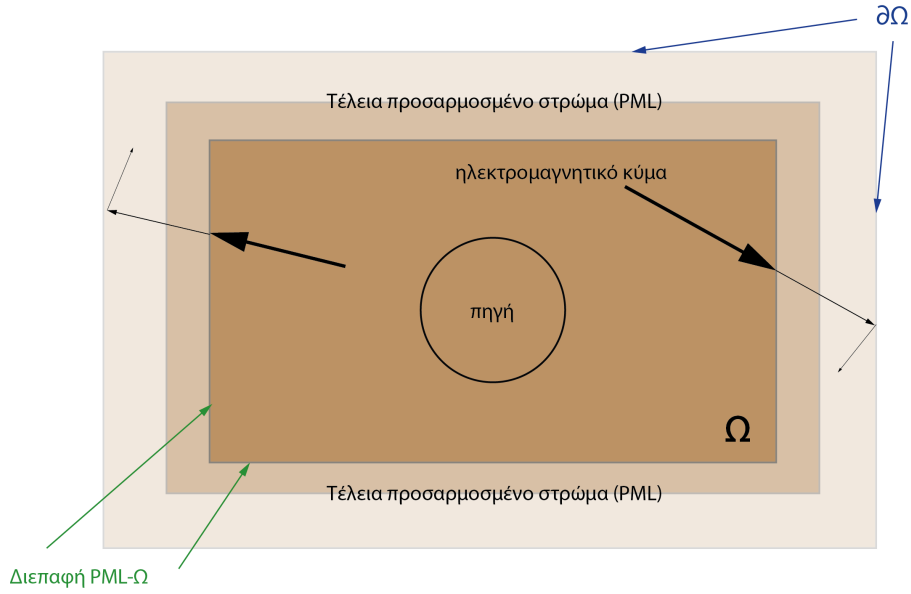
όταν η προσέγγιση της λύσης επιβεβαιώνει την προκαθορισμένη ακρίβεια. Η [21] είναι ενδεικτική εργασία με χρήση της τεχνικής, όπου παράλληλα τεκμηριώνεται η επίδραση που έχει το μη ομοιόμορφο πλέγμα που παράγεται από την AMR στο συνολικό χρόνο επίλυσης. Επίσης, σημειώνεται ότι η χρήση AMR εισάγει επιπλέον σφάλματα παρεμβολής, ειδικά στις διεπαφές μεταξύ αραιού και πυκνού πλέγματος ([86]).



Σχήμα 2.7: Ενδεικτική εφαρμογή AMR

- Χρήση Απορροφητικών Οριακών Συνθηκών (ABC - Absorbing Boundary Conditions) ή Τέλεια Προσαρμοσμένων Στρώματων (PML - Perfectly Matched Layers) στα όρια του μοντέλου ελέγχου.

Σε εξισώσεις κυματικής μορφής που επιλύονται σε πεπερασμένων διαστάσεων υπολογιστικό χώρο Ω , η εφαρμογή Dirichlet ή/και Neumann συνοριακών συνθηκών στο $\partial\Omega$ συχνά οδηγεί σε αλλοίωση της αριθμητικής προσέγγισης που αποδίδεται στην ανάλυση των κυμάτων στο εσωτερικό του χωρίου. Συγκεκριμένα, η απλή εφαρμογή των παραπάνω συνοριακών συνθηκών στα όρια του μοντέλου θεωρείται ότι οδηγεί το, κατά τα άλλα, αργά απομειούμενο κύμα διάδοσης στη συνοριακή τιμή με ραγδαίες ταλαντώσεις, οι οποίες δεν δύναται να αναπαρασταθούν σε πεπερασμένο πλέγμα και καταλήγουν σε ανακλάσεις στο εσωτερικό του μοντέλου ([5], [16], [29]). Οι απορροφητικές οριακές συνθήκες πρακτικά παρεχβάλουν από τα εσωτερικά σημεία στο εξωτερικό του μοντέλου ώστε η προσέγγιση να θεωρεί ότι προχωρά πέρα από τα όρια αυτού. Από την άλλη, στα τέλεια προσαρμοσμένα στρώματα (PML), η εφαρμογή κατάλληλων τανυστών επιφέρει την τεχνητή ύπαρξη στρώματων υλικού με κατάλληλες ιδιότητες στα όρια του μοντέλου, ανεξάρτητα των συνοριακών συνθηκών σε αυτό, τα οποία χρησιμοποιούνται για την εκθετική απομείωση των κυμάτων, ώστε όταν αυτά βρεθούν στα όρια του μοντέλου να ικανοποιήσουν τη συνοριακή συνθήκη ή, ακόμα και αν ανακλαστούν σε αυτά, το πλάτος τους κατά την επανείσοδο τους στο εσωτερικό του μοντέλου να είναι αμελητέο (σχήμα 2.8).



Σχήμα 2.8: Ενδεικτική εφαρμογή PML

Η εφαρμογή ABC ή PML έχει ισχυρά πλεονεκτήματα αλλά και μειονεκτήματα. Επιγραμματικά, οι ABCs μπορούν να υλοποιηθούν εύκολα σε μονοδιάστατα προβλήματα όπου η διάχυση του κύματος είναι σε 2 κατευθύνσεις αλλά είναι δύσκολα υλοποιήσιμα σε τρισδιάστατες έρευνες όπου υπάρχουν άπειρες κατευθύνσεις διάχυσης. Παράλληλα, η αποδοτικότητα τους εξαρτάται από τη συχνότητα εκπομπής καθότι ο σχεδιασμός τους στηρίζεται σε συγκεκριμένη -κάθε φορά- υπόθεση για τη συμπεριφορά του κύματος. Αντίστοιχα, ο σχεδιασμός PMLs στον υπολογιστικό χώρο του μοντέλου περιλαμβάνει την προσθήκη τεχνητών υλικών με αναγκαίες κατάλληλα επιλεγμένες ανισοτροπικές ιδιότητες με αποτέλεσμα την αύξηση της πολυπλοκότητας ενώ στην περίπτωση χρήσης πεπερασμένων διαφορών επιφέρει και σημαντική αύξηση του υπολογιστικού φόρτου και των απαιτήσεων σε υπολογιστικούς πόρους ([54], [55], [57]).

- Χρήση Συνθήκης Διόρθωσης της Απόκλισης του ηλεκτρικού πεδίου σε κάθε προσέγγιση του (static divergence-free constraint).

Ο περιορισμός στηρίζεται στην παραδοχή -από τις εξισώσεις του Maxwell- ότι δεν υπάρχει απώλεια/διαρροή ή εισροή ηλεκτρικού πεδίου

$$\nabla \cdot \sigma E = 0 \quad (2.4)$$

οπότε σε χωρίο όπου υφίσταται πηγή με πυκνότητα J_s , η σχέση πρέπει να διορθωθεί σε

$$\nabla \cdot (\sigma E + J_s) = 0 \quad (2.5)$$

Αν λοιπόν $\phi = \nabla \cdot (\sigma E)$ η απόκλιση της πυκνότητας, μπορεί να θεωρηθεί η διαφορική εξίσωση $\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) = \phi$ (με συνοριακές συνθήκες Neumann) η οποία επιλύεται ως προς ϕ για κάθε βήμα προσέγγισης του E οπότε και βάσει της $E_{corrected} = E_{old} - \nabla \phi$ προκύπτει η διορθωμένη προσέγγιση του E . Είναι σαφές, ότι πρόκειται για διαδικασία που μπαίνει επιπρόσθετα για κάθε επανάληψη της αριθμητικής επίλυσης, επιβαρύνοντας υπολογιστικά με την επίλυση ενός νέου γραμμικού συστήματος αλλά, όπως αναφέρεται, η κατάλληλη ρύθμιση της διαδικασίας επιφέρει μείωση του χρόνου εκτέλεσης και αριθμητική ευστάθεια, ειδικά σε περιπτώσεις εκπομπής χαμηλών συχνοτήτων ([23],[24]), ενώ έχει χρησιμοποιηθεί και σε περιπτώσεις μη ομοιόμορφων πλεγμάτων ([46]).

Όπως προκύπτει από το σύνολο όλων των παραπάνω, η βασική επιδίωξη είναι η βελτίωση της ακρίβειας της προσέγγισης της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου στο ευθύ πρόβλημα σε ισορροπία με το υπολογιστικό κόστος και το χρόνο υλοποίησης. Ειδικά για τον τελευταίο παράγοντα, υπάρχουν περιορισμένες αναφορές με σαφή χρονικά αποτελέσματα σε 3-διάστατες υλοποιήσεις στο πεδίο των συχνοτήτων, παρόλο που είναι ξεκάθαρη η σχεδόν αποκλειστική εφαρμογή παράλληλων αρχιτεκτονικών. Στην [28] αναφέρονται ρητά χρόνοι παραγοντοποίησης και υλοποίησης σε πολυεπεξεργαστικό σύστημα. Στις [50] και [90] γίνεται αναλυτική αναφορά σε χρόνους σε ηλεκτρομαγνητική εφαρμογή με υλοποίηση σε διανεμημένα συστήματα με χρήση πρωτοκόλλου ανταλλαγής μηνυμάτων ενώ στην [91] σε εφαρμογή με χρήση CUDA σε κάρτες γραφικών.

Στην παρούσα διατριβή επιχειρήθηκε η ανάπτυξη επιλυτή για την προσέγγιση του ηλεκτρικού πεδίου **Ε** στο πεδίο των συχνοτήτων στο ευθύ πρόβλημα της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης, στηριζόμενου σε αριθμητικό σχήμα υψηλής τάξης ακρίβειας αριθμητικού σχήματος πεπερασμένων διαφορών επί κλιμακωτού πλέγματος στις 3 χωρικές διαστάσεις. Ο επιλυτής, η ανάπτυξη του οποίου παρουσιάζεται στην επόμενη ενότητα, έχει ως βασικά χαρακτηριστικά

1. τη χρήση τέταρτης τάξης συμπαγούς αριθμητικού σχήματος πεπερασμένων διαφορών στις 3 διαστάσεις **καθώς και**
2. την επίλυση σε όλη την έκταση του τρισδιάστατου υπολογιστικού χώρου αλλά με τη δυνατότητα διαφοροποίησης του πλήθους - μήκους κελιών σε κάθε διάσταση. Οι παραπάνω επιλογές προσφέρουν τα πλεονεκτήματα της επίλυσης στις τρεις διαστάσεις (υψηλότερη ακρίβεια αριθμητικής λύσης και ρεαλιστική μοντελοποίηση του προβλήματος με πυκνότερη διαμέριση στη γραμμή ελέγχου) με μικρότερο υπολογιστικό φόρτο. **Επιπλέον,**
3. την εφαρμογή hard-wall συνοριακών συνθηκών (θεωρώντας μηδενικές τιμές στο σύνορο για τις τιμές των συνιστωσών του E καθώς και των παραγώγων δεύτερης τάξης όπως περιγράφεται στην 3.1) στο μοντέλο και, παράλληλα, τη μη χρήση απορροφητικών οριακών συνθηκών ABC ή προσαρμοσμένων στρωμάτων PML προκειμένου αφενός να αποφευχθεί στο μεγαλύτερο δυνατό βαθμό η περαιτέρω πολυπλοκότητα, λόγω υλοποίησης στις 3 διαστάσεις, αφετέρου να ελεγχθεί η επίδοση του προτεινόμενου αριθμητικού σχήματος, **καθώς και**
4. τη μη ενσωμάτωση static divergence-free συνθήκης για τον περιορισμό του επιπλέον υπολογιστικού φόρτου. **Επίσης,**
5. τη διαμόρφωση του ως προς τα παράλληλα χαρακτηριστικά για υπολογιστικά περιβάλλοντα κοινής μνήμης με περιορισμένες απαιτήσεις υπολογιστικών πόρων (τοπικά συστήματα ή κατά παραγγελία συστήματα νέφους), **και τέλος,**
6. τη χρήση κατακόρυφου μαγνητικού διπόλου και τον έλεγχο των επιδόσεων όταν η διασκόπηση πραγματοποιείται από εναέριο μέσο και δη όταν φέρεται σε πολύ χαμηλό ή χαμηλό ύψος.

2.2 Η εξίσωση του προβλήματος

2.2.1 Εξισώσεις Maxwell

Οι **εξισώσεις του Maxwell** πάνω στην οποία βασίζεται η ηλεκτρομαγνητική θεωρία και κατά συνέπεια οι ηλεκτρομαγνητικές μέθοδοι διασκόπησης είναι τέσσερις θεμελιώδεις

φυσικοί νόμοι. Οι εξισώσεις μπορούν να γραφούν σε διαφορική ή ολοκληρωτική μορφή, στο πεδίο της συχνότητας (FD) ή στο πεδίο του χρόνου (TD) και περιγράφουν τη συμπεριφορά του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου καθώς και τις αλληλεπιδράσεις τους με την ύλη. Στο πεδίο του χρόνου, η διαφορική μορφή των εξισώσεων του Maxwell σε μέσο με παρουσία πηγής ρεύματος είναι η παρακάτω

$$\text{Νόμος του Gauss για το ηλεκτρικό πεδίο:} \quad \nabla \cdot \mathbf{d} = \rho \quad (2.6)$$

η οποία περιγράφει την ηλεκτρική μετατόπιση \mathbf{d} που προκύπτει (σε C/m^2) από ηλεκτρικό φορτίο πυκνότητας ρ (σε C/m^3).

$$\text{Νόμος του Gauss για το μαγνητικό πεδίο:} \quad \nabla \cdot \mathbf{b} = 0 \quad (2.7)$$

στην οποία δηλώνεται ότι μαγνητική επαγωγή \mathbf{b} (σε Tesla) δεν υφίσταται σε απομονωμένα μαγνητικά μονόπολα στη φύση και ότι οι μαγνητικές δυναμικές γραμμές είναι κλειστοί βρόχοι

$$\text{Νόμος του Faraday για την ηλεκτρομαγνητική επαγωγή:} \quad \nabla \times \mathbf{e} = -\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} \quad (2.8)$$

που περιγράφει πώς ένα μεταβαλλόμενο ως προς το χρόνο μαγνητικό πεδίο παράγει ένα ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{e} .

$$\text{Νόμος των Ampere-Maxwell:} \quad \nabla \times \mathbf{h} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial t} \quad (2.9)$$

είναι η εξίσωση της παραγωγής μαγνητικού πεδίου \mathbf{h} (σε A/m) από χρονικά μεταβαλλόμενο ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{e} που προέρχεται από πηγή με πυκνότητα ρεύματος \mathbf{j} (σε A/m^2).

Οι παραπάνω εξισώσεις περιγράφουν τη συμπεριφορά των θεμελιωδών πεδίων $\mathbf{e}, \mathbf{h}, \mathbf{b}, \mathbf{d}$ και \mathbf{j} ([31]). Σε γεωφυσικές έρευνες και τη μελέτη της γεωηλεκτρικής δομής του υπεδάφους όμως, είναι απαραίτητη η ενσωμάτωση σημαντικών ιδιοτήτων των υλικών μέσων, ηλεκτρικών -όταν πολώνονται- και μαγνητικών -όταν μαγνητίζονται. Σε ισότροπα υλικά (υλικά στα οποία διατηρούνται αμετάβλητες το σύνολο των ιδιοτήτων τους σε όλο τον όγκο τους) οι σχέσεις που συνδέουν τα $\mathbf{e}, \mathbf{d}, \mathbf{j}$ και \mathbf{b}, \mathbf{h} είναι

$$\mathbf{d} = \epsilon \mathbf{e} \quad (2.10)$$

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{e} \quad (2.11)$$

$$\mathbf{b} = \mu \mathbf{h} \quad (2.12)$$

όπου ϵ η ηλεκτρική επιτρεπτότητα (permittivity) και μ η μαγνητική διαπερατότητα (magnetic permeability) του υλικού. Η βασικότερη ιδιότητα στην περίπτωση εφαρμογών ηλεκτρομαγνητικών μεθόδων διασκόπησης είναι η **ειδική ηλεκτρική αγωγιμότητα** σ (specific electrical conductivity, σε Siemens/m), η οποία χαρακτηρίζει την ευκολία κίνησης του ηλεκτρικού φορτίου σε υλικό μέσο όταν αυτό βρεθεί εντός ηλεκτρικού πεδίου -σε εφαρμογές γεωφυσικής χρησιμοποιείται επίσης και η ειδική αντίσταση ρ (specific resistivity), η οποία σε υλικά αγωγία προς όλες τις κατευθύνσεις ισούται με την αντίστροφη ειδική αγωγιμότητα.

Οι λύσεις στις εξισώσεις Maxwell είναι αρμονικές στο χρόνο σε μορφή $e^{i\omega t}$ με ω τη γωνιακή συχνότητα. Η εφαρμογή μετασχηματισμού Fourier

$$f(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt \quad (2.13)$$

στις εξισώσεις 2.6, 2.7, 2.8 και 2.9 και συγκεκριμένα σε όλες τις εξαρτώμενες από το χρόνο ποσότητες $\mathbf{e}, \mathbf{b}, \mathbf{j}, \rho$ επιτρέπει τη μετάβαση στο πεδίο της συχνότητας και σε μια απλούστερη

μορφή των εξισώσεων καθότι τα πεδία σε αυτές διατηρούν τη χωρική αλλά απολλύουν τη χρονική τους εξάρτηση και μπορούν να θεωρηθούν $\mathbf{F} = F(x, \omega)$. Για την εφαρμογή του μετασχηματισμού Fourier υπενθυμίζεται η ιδιότητα

$$\mathcal{F}\left\{\frac{\partial f(t)}{\partial t}\right\} = i\omega \mathcal{F}\{f(t)\} \quad (2.14)$$

Θεωρώντας $e^{i\omega t}$ τη χρονική εξάρτηση, ισχύει ότι $\frac{\partial e^{i\omega t}}{\partial t} = i\omega e^{i\omega t}$, κατά συνέπεια με αντικατάσταση της $\frac{\partial}{\partial t}$ με $i\omega$ και αντίστοιχα της $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$ με $-\omega^2$, η διαφορική μορφή των εξισώσεων του Maxwell στο πεδίο της συχνότητας είναι η ακόλουθη

$$\nabla \cdot (\epsilon \mathbf{E}) = \rho \quad (2.15) \quad \nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.16)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -i\omega \mu_0 \mathbf{H} \quad (2.17) \quad \nabla \times \mathbf{H} = (\sigma + i\omega \epsilon) \mathbf{E} \quad (2.18)$$

2.2.2 Κατασκευή της κυματικής εξίσωσης

Με συνδυασμό των εξισώσεων 2.8 και 2.9

$$\nabla \times \mathbf{e} = -\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t} \text{ και } \nabla \times \mathbf{h} = \mathbf{j} + \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial t} \quad (2.19)$$

στο πεδίο του χρόνου είναι εφικτή η αποσύζευξη ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου έτσι ώστε να προκύψει κυματική εξίσωση που να περιέχει μόνο το \mathbf{e} (ή μόνο το \mathbf{h} αντίστοιχα).

Θεωρώντας ομοιογενές και ισοτροπικό μέσο, με εφαρμογή του τελεστή $\nabla \times$ στις εξισώσεις της 2.19, προκύπτει

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{e}) = -\nabla \times \left(\frac{\partial \mathbf{b}}{\partial t}\right) \quad (2.20)$$

και

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{h}) = \nabla \times \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial t}\right) + \nabla \times \mathbf{j} \quad (2.21)$$

Οι καταστατικές σχέσεις με τα σ, μ και ϵ ανεξάρτητα του χρόνου είναι

$$\mathbf{d} = \epsilon \mathbf{e}, \quad \mathbf{b} = \mu \mathbf{h}, \quad \mathbf{j} = \sigma \mathbf{e},$$

Θεωρώντας δε μη μαγνητικό το μέσο, η αντικατάσταση τους στις εξισώσεις 2.20 και 2.21 οδηγεί στις

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{e} = -\mu \nabla \times \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} \quad (2.22)$$

και

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{h} = \epsilon \nabla \times \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} + \sigma \nabla \times \mathbf{e} \quad (2.23)$$

Τονίζεται ότι τα μ, σ και ϵ υπό την παραπάνω συνθήκη (ομοιογενούς, ισοτροπικού και μη μαγνητικού μέσου) είναι ανεξάρτητα και της χωρικής θέσης. Με δεδομένο ότι οι διανυσματικές συναρτήσεις \mathbf{e} και \mathbf{h} έχουν συνεχείς τις πρώτες και δεύτερες παραγώγους τους, η παραπάνω σχέσεις γράφονται ισοδύναμα

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{e} = -\mu \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{h}) \quad (2.24)$$

και

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{h} = \epsilon \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{e}) + \sigma \nabla \times \mathbf{e} \quad (2.25)$$

Αντικαθιστώντας εκ νέου τις $\nabla \times \mathbf{h}$ και $\nabla \times \mathbf{e}$ καταλήγουν

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{e} = -\mu\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{e}}{\partial t^2} - \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} \quad (2.26)$$

και

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{h} = -\mu\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{h}}{\partial t^2} - \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial t} \quad (2.27)$$

2.2.3 Η εξίσωση Helmholtz για το ηλεκτρικό πεδίο

Ομοιογενές και ιστροπικό μέσο

Προκειμένου να επιβεβαιωθεί η ομογενής μορφή Helmholtz στην εξίσωση της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου, αρκεί η εφαρμογή της ταυτότητας

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{V} = \nabla \nabla \cdot \mathbf{V} - \nabla^2 \mathbf{V} \quad (2.28)$$

και της συνθήκης $\nabla \cdot \mathbf{e} = 0$. Αυτό, καθότι στον ημιχώρο συνδυάζοντας τις 2.15 και 2.10 προκύπτει ότι

$$\nabla \cdot \epsilon \mathbf{e} = \rho$$

και για βαθμωτό ϵ σε θέσεις μακριά από την πηγή, όπου η πυκνότητα του φορτίου $\rho \rightarrow 0$, είναι

$$\nabla \cdot \epsilon \mathbf{e} = 0 \Leftrightarrow \epsilon \nabla \cdot \mathbf{e} = 0 \Leftrightarrow \nabla \cdot \mathbf{e} = 0$$

Κατά συνέπεια, η εξίσωση 2.26 γράφεται

$$\nabla^2 \mathbf{e} - \mu\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{e}}{\partial t^2} - \mu\sigma \frac{\partial \mathbf{e}}{\partial t} = 0 \quad (2.29)$$

συνεπώς, με εκ νέου χρήση μετασχηματισμού Fourier, στο πεδίο των συχνοτήτων καταλήγει

$$\nabla^2 \mathbf{E} + (\mu\epsilon\omega^2 - i\mu\sigma\omega)\mathbf{E} = 0 \quad (2.30)$$

η οποία είναι μορφής ομογενούς Helmholtz με κυματαριθμό $k = \sqrt{\mu\epsilon\omega^2 - i\mu\sigma\omega}$. Στην εξίσωση 2.30, όπως και στην αντίστοιχη εξίσωση που προκύπτει για το μαγνητικό πεδίο, μπορεί να γίνει η ακόλουθη παρατήρηση με το αντίστοιχο άμεσο συμπέρασμα: για συχνότητες εκπομπής $< 10^5 \text{ Hz}$ το ρεύμα μετατόπισης θεωρείται αμελητέο οπότε και το ηλεκτρομαγνητικό πεδίο αντίστοιχα θεωρείται σε σχεδόν-στατική κατάσταση (quasi-static regime). Κατά συνέπεια, η αγωγιμότητα υπερισχύει με τάξεις μεγέθους των τιμών μαγνητικής διαπερατότητας και διηλεκτρικής σταθεράς, δηλαδή $\mu\epsilon\omega^2 \ll \mu\sigma\omega$ για υλικά του υπεδάφους της γης ([31]), οπότε και η εξίσωση μπορεί να γραφτεί σε απλούστερη μορφή:

$$\nabla^2 \mathbf{E} - i\omega\mu\sigma\mathbf{E} = 0 \quad (2.31)$$

Ανομοιογενές μη μαγνητικό μέσο

Η εξίσωση 2.31 είναι η εξίσωση διάδοσης του ηλεκτρικού πεδίου στον ομοιογενή χώρο. Σε μη μαγνητικό μέσο και σε ημιχώρο, προκύπτει με ανάλογο τρόπο η κυματική εξίσωση η οποία και επιλύεται στη διατριβή σε αντίστοιχο μοντέλο ελέγχου. Σημειώνεται ότι, σε μη μαγνητικό μέσο, η μαγνητική διαπερατότητα μ θεωρείται ίση με αυτήν του κενού, οπότε $\mu = \mu_0 = 4\pi 10^{-7}$ (H/m), καθότι αυτό δεν αποκρίνεται σε μαγνητικά πεδία αλλά διατηρεί τις ηλεκτρικές του ιδιότητες. Έτσι, συνδυάζοντας την 2.17

$$\nabla \times \mathbf{E} = -i\omega\mu_0\mathbf{H}$$

με εφαρμογή του $\nabla \times$

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) = -i\omega\mu_0(\nabla \times \mathbf{H})$$

και την 2.18

$$\nabla \times \mathbf{H} = (\sigma + i\omega\epsilon)\mathbf{E}$$

και με την παραδοχή, εκ νέου, ότι $\mu\omega^2 \ll \mu\sigma\omega$ για υλικά του υπεδάφους της γης σε συχνότητες εκπομπής $< 10^5$ Hz προκύπτει η εξίσωση

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} + i\omega\mu_0\sigma\mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (2.32)$$

Η παρουσία πηγής πυκνότητας ρεύματος \mathbf{J}_s δε στο χώρο διαμορφώνει την εξίσωση ως

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E} + i\omega\mu_0\sigma\mathbf{E} = -i\omega\mu_0\mathbf{J}_s \quad (2.33)$$

Ο όρος \mathbf{J}_s αναφέρεται στην πυκνότητα του ρεύματος της πηγής και καθορίζεται ανάλογα το πεδίο \mathbf{E} που περιγράφει η εξίσωση 2.33. Όταν η εξίσωση αναφέρεται στο δευτερεύον ηλεκτρικό πεδίο, τότε το \mathbf{E} αναφέρεται στο \mathbf{E}_s (και αντικαθίσταται συμβολικά στην εξίσωση) και για τον πηγείο όρο ισχύει ότι με

$$\mathbf{J}_s = (\sigma - \sigma_p)\mathbf{E}^p + \nabla \times \frac{\mu - \mu_0}{\mu}\mathbf{H}_p \quad (2.34)$$

Στην περίπτωση δε μη μαγνητικού μέσου, η 2.34 απλοποιείται στη μορφή

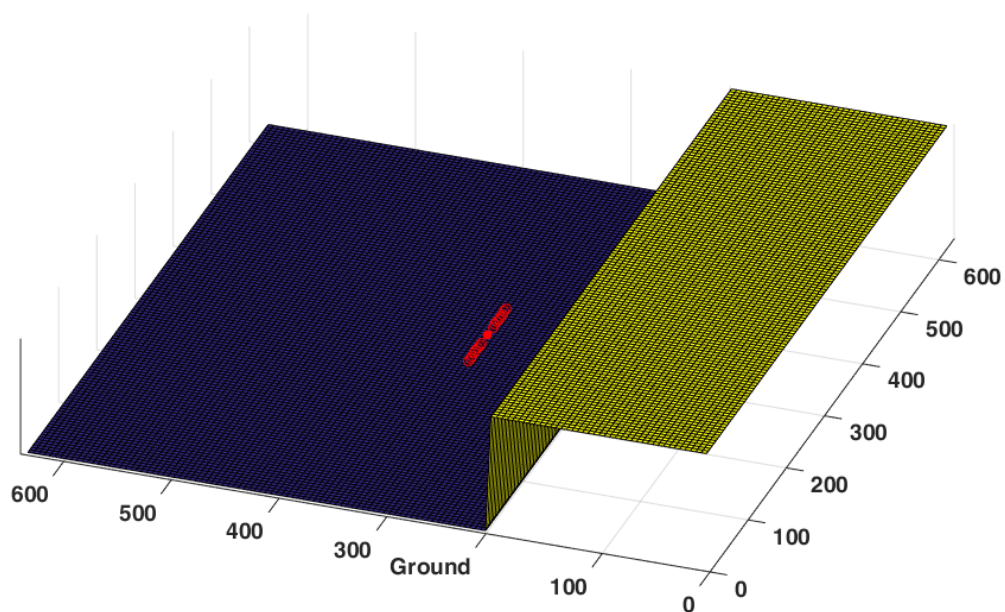
$$\mathbf{J}_s = (\sigma - \sigma_p)\mathbf{E}^p \quad (2.35)$$

Με αντικατάσταση της 2.35 στην 2.33 προκύπτει η εξίσωση

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{E}^s + i\omega\mu_0\sigma\mathbf{E}^s = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_p)\mathbf{E}^p \quad (2.36)$$

Η διαφορική εξίσωση 2.36 αναφέρεται στην ένταση του δευτερεύοντος ηλεκτρικού πεδίου \mathbf{E}_s που διαχέεται σε 3-διάστατο χώρο Ω ηλεκτρικής αγωγιμότητας σ , όπου πηγείος όρος εκπέμπει ρεύμα πυκνότητας \mathbf{J}_s , με \mathbf{E}^p την ένταση του προερχόμενου από την πηγή πρωτεύοντος ηλεκτρικού πεδίου και σ_p την ηλεκτρική αγωγιμότητα του υποβάθρου (στο οποίο θεωρείται ότι εκπέμπει ο πηγείος όρος) ενώ ω είναι η συχνότητα εκπομπής και μ_0 η μαγνητική διαπερατότητα του κενού ([21], [23]). Όπως ήδη έχει ειπωθεί, η ηλεκτρική αγωγιμότητα σ διαφοροποιείται ανάλογα το μέσο διάδοσης. Στην περίπτωση του ημιχώρου (αέρας-γη), η μοναδική διεπαφή είναι κατά μήκος της γραμμής του εδάφους, με την τιμή της αγωγιμότητας

στον αέρα να έχει εξαιρετικά μικρή τιμή, της τάξης του 10^{-8} , ενώ στο υπέδαφος καθορίζεται βάσει του επιλεγθέντος μοντέλου επίλυσης του ευθέος προβλήματος (σχήμα 2.9).



Σχήμα 2.9: Αναπαράσταση τιμών αγωγιμότητας στο xz -επίπεδο

Η εξίσωση 2.36 αναπτύσσεται με εφαρμογή του $\nabla \times$ στο διανυσματικό πεδίο \mathbf{E}^s στον καρτεσιανό χώρο. Εξ' ορισμού, για διανυσματικό πεδίο $\mathbf{V} = (V_1, V_2, V_3)$ ισχύει

$$\nabla \times \mathbf{V} = \text{curl} \mathbf{V} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ V_1 & V_2 & V_3 \end{vmatrix} = \left(\frac{\partial V_3}{\partial y} - \frac{\partial V_2}{\partial z} \right) i + \left(\frac{\partial V_1}{\partial z} - \frac{\partial V_3}{\partial x} \right) j + \left(\frac{\partial V_2}{\partial x} - \frac{\partial V_1}{\partial y} \right) k \quad (2.37)$$

κατά συνέπεια, με διαδοχικές εφαρμογές του τελεστή και για την περίπτωση χρήσης κατακόρυφου μαγνητικού διπόλου (VMD) στη διασκόπηση, όπως θεωρείται στην παρούσα διατριβή, δεν υπάρχει κατακόρυφη διάδοση πρωτεύοντος ηλεκτρικού πεδίου αφού λόγω συμμετρίας η ροή είναι μόνο οριζόντια, άρα δεν υπάρχει κατακόρυφη συνιστώσα E_z (TE mode¹) ([21], [31]). Συνεπώς, αν οι συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου είναι

$$\mathbf{E}^p : (E_x^p, E_y^p, 0), \mathbf{E}^s : (E_x^s, E_y^s, E_z^s)$$

η εξίσωση διάδοσης 2.36 μπορεί να γραφτεί σε μορφή συστήματος διαφορικών εξισώσεων

$$i : \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial E_y^s}{\partial x} - \frac{\partial E_x^s}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial E_x^s}{\partial z} - \frac{\partial E_z^s}{\partial x} \right) + i\omega\mu_0\sigma E_x^s = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_p)E_x^p \quad (2.38)$$

$$j : \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial E_z^s}{\partial y} - \frac{\partial E_y^s}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_y^s}{\partial x} - \frac{\partial E_x^s}{\partial y} \right) + i\omega\mu_0\sigma E_y^s = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_p)E_y^p \quad (2.39)$$

$$k : \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_x^s}{\partial z} - \frac{\partial E_z^s}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial E_z^s}{\partial y} - \frac{\partial E_y^s}{\partial z} \right) + i\omega\mu_0\sigma E_z^s = 0 \quad (2.40)$$

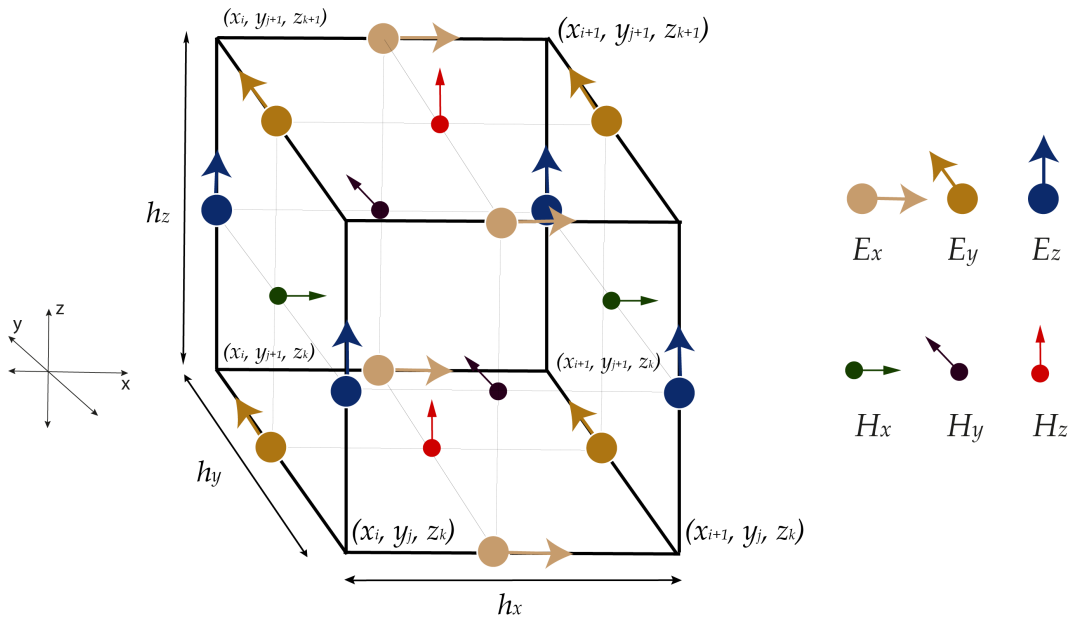
¹Ο όρος TE mode (Transverse Electric mode) αναφέρεται σε ηλεκτρικό πεδίο παράλληλο στο επίπεδο πρόσπτωσης, οπότε η κάθετη σε αυτό συνιστώσα δεν υφίσταται

Κεφάλαιο 3

Αριθμητική Επίλυση Προβλήματος Γεωφυσικής

3.1 Διακριτοποίηση του Χωρίου με Συμπαγές Σχήμα Πεπερασμένων Διαφορών

Για την επίλυση του συστήματος των διαφορικών εξισώσεων, η διακριτοποίηση του χωρίου πραγματοποιείται με χρήση καρτεσιανού κλιμακωτού (staggered) πλέγματος (1.3.1) στις τρεις χωρικές διαστάσεις, γνωστού και ως Yee lattice (σχήμα 3.1). Στον συγκεκριμένο τύπο πλέγματος, ο οποίος αποτελεί βασική επιλογή για τη διακριτοποίηση των εξισώσεων του Maxwell, οι συνιστώσες του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου προσεγγίζονται σε διαφορετικές θέσεις. Συγκεκριμένα, αυτές της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου $\mathbf{E} = (E_x^s, E_y^s, E_z^s) \equiv (E_x, E_y, E_z)$ προσεγγίζονται στα μέσα των ακμών κάθε υπολογιστικού κελιού $C_{i,j,k}$ ενώ αυτές της έντασης του μαγνητικού πεδίου $\mathbf{H} = (H_x, H_y, H_z)$ στο κέντρο των εδρών του υπολογιστικού κελιού ([32]) - ή και ανάποδα, σε εργασίες όπως της Streich ([28]).



Σχήμα 3.1: Οι θέσεις όπου υπολογίζονται οι συνιστώσες της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου E σε ένα υπολογιστικό κελί $C_{i,j,k}$ του κλιμακωτού πλέγματος Yee

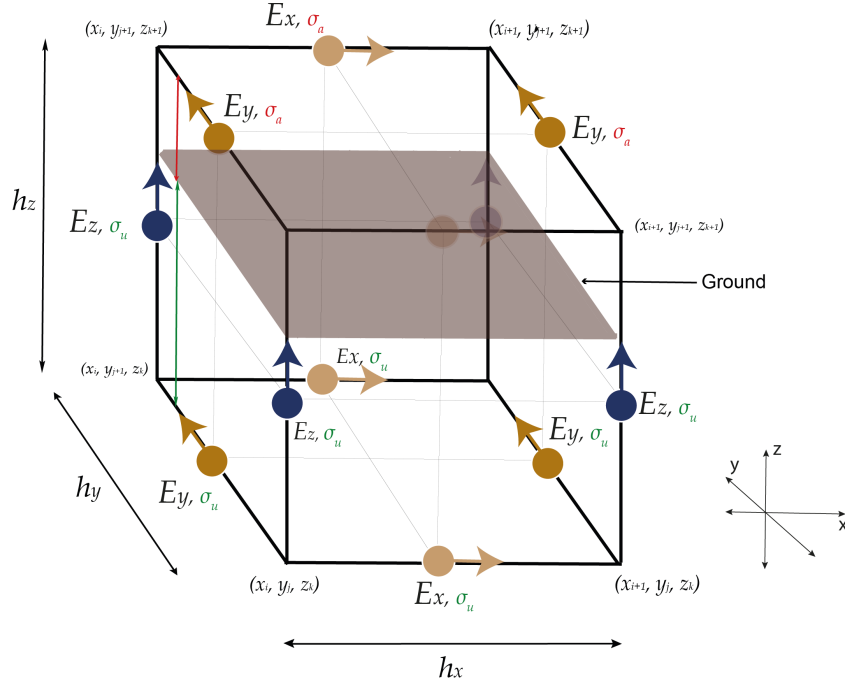
Ο συγκεκριμένος τύπος πλέγματος είναι ιδιαίτερα διαδεδομένος στη διακριτοποίηση εξισώσεων ηλεκτρομαγνητικών πεδίων στο πεδίο των συχνοτήτων (FD) καθότι

1. είναι δομημένο πλέγμα καρτεσιανών συντεταγμένων, μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε μη ομοιόμορφες διαμερίσεις και είναι ενδεδειγμένο για ευθύγραμμα στερεά, γεγονός που απλοποιεί τη διαδικασία κατασκευής του πίνακα συντελεστών, ειδικά κατά την εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών (στην περίπτωση συνοριακών συνθηκών Dirichlet μάλιστα, όπως στην παρούσα διατριβή θεωρήθηκαν, η εφαρμογή είναι άμεση)
2. είναι κλιμακωτό, οπότε οι συνιστώσες ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου προσεγγίζονται σε διαφορετικές θέσεις κάθε κελιού εξομοιώνοντας την φυσική ορθογώνια σχέση των πεδίων ([3])
3. αναπαριστά με ακρίβεια τα ηλεκτρομαγνητικά φαινόμενα ως περιγράφονται από τις εξισώσεις του Maxwell καθώς ικανοποιούνται σε αυτό όπως αποδεικνύεται οι αποκλίσεις του ηλεκτρικού και του μαγνητικού πεδίου ([29], [3])

Σημειώνεται ότι στο σχήμα 3.1 εμφανίζονται και οι θέσεις προσέγγισης του μαγνητικού πεδίου για λόγους συνολικής παρουσίασης ενός κελιού του Yee αλλά η επίλυση (2.36) θα πραγματοποιηθεί μόνο για το ηλεκτρικό πεδίο στις θέσεις που αυτό προσεγγίζεται.

Επιπλέον, πρέπει να τονιστεί ότι καθότι στο Yee οι συνιστώσες των πεδίων βρίσκονται σε διαφορετικές 'φυσικές' θέσεις, μπορεί μεν να αποτυπώνονται στο ίδιο υπολογιστικό κελί αλλά μπορεί να βρίσκονται εντός διαφορετικού μέσου. Αυτό συμβαίνει όταν η διεπαφή μέσων με διαφορετικές φυσικές ιδιότητες διαπερνά ένα υπολογιστικό κελί του Yee, και για το λόγο αυτό σε κάθε θέση όπου ορίζεται κάθε συνιστώσα εκχωρείται δική της τιμή για κάθε φυσική ιδιότητα ([45]).

Στον επιλυτή που σχεδιάστηκε στη διατριβή βρίσκεται εφαρμογή αυτή η συνθήκη. Όπως παρουσιάζεται στο σχήμα 3.2, σε κάθε δοκιμή και ανεξαρτήτως ύψους πομπού, η θέση του εδάφους θεωρήθηκε τέτοια ώστε να διαπερνά τα υπολογιστικά κελιά (και όχι να εφάπτεται στην ακμή τους). Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τα υπολογιστικά κελιά τα οποία βρίσκονται σε αυτές τις θέσεις να έχουν συνιστώσες με διαφορετική τιμή αγωγιμότητας (στο 3.2 οι E_x, E_y του z_{i+1} xy -επιπέδου έχουν αγωγιμότητα σ_a ενώ οι E_x, E_y του z_i xy -επιπέδου έχουν αγωγιμότητα σ_u). Υπενθυμίζεται ότι η μαγνητική διαπερατότητα διατηρείται σταθερή σε όλο τον ημιχώρο και ίση με την τιμή της στο κενό, συνεπώς η ηλεκτρική αγωγιμότητα είναι ο μοναδικός διαφοροποιούμενος μεταξύ χωρίων συντελεστής στην 2.36. Επίσης, όπως ήδη έχει αναφερθεί στην περιγραφή του προβλήματος, το ηλεκτρικό πεδίο \mathbf{E} θεωρείται συνεχές μεταξύ χωρίων με διαφορετική ηλεκτρική αγωγιμότητα ([31]).



Σχήμα 3.2: Υπολογιστικό κελί στη διεπαφή του εδάφους

Στον υπολογιστικό χώρο του φυσικού προβλήματος

$$\Omega \equiv \left[-\frac{L_x}{2}, \frac{L_x}{2}\right] \times \left[-\frac{L_y}{2}, \frac{L_y}{2}\right] \times \left[-\frac{L_z}{2}, \frac{L_z}{2}\right] \quad (3.1)$$

επιλέγονται σε κάθε κατεύθυνση n_x, n_y και n_z αντίστοιχα, υποδιαστήματα, έτσι ώστε

$$h_x = \frac{L_x}{n_x}, h_y = \frac{L_y}{n_y}, h_z = \frac{L_z}{n_z} \quad (3.2)$$

τα βήματα διακριτοποίησης σε κάθε κατεύθυνση. Κατά συνέπεια, οι κορυφές σε κάθε υπολογιστικό κελί $C_{i,j,k}$ έχουν συντεταγμένες (x_i, y_j, z_k) όπου $x_i = ih_x$, $y_j = jh_y$ και $z_k = kh_z$ για $0 \leq i \leq n_x$, $0 \leq j \leq n_y$ και $0 \leq k \leq n_z$. Αντίστοιχα, τα μέσα των ακμών κάθε κελιού έχουν συντεταγμένες $(x_{i-\frac{1}{2}}, y_j, z_k)$ στην x -κατεύθυνση, $(x_i, y_{j-\frac{1}{2}}, z_k)$ στην y -κατεύθυνση και $(x_i, y_j, z_{k-\frac{1}{2}})$ στην z -κατεύθυνση, όπου $x_{i-\frac{1}{2}} = (i - \frac{1}{2})h_x$, $y_{j-\frac{1}{2}} = (j - \frac{1}{2})h_y$ και $z_{k-\frac{1}{2}} = (k - \frac{1}{2})h_z$ για $0 < i \leq n_x$, $0 < j \leq n_y$ και $0 < k \leq n_z$.

Καθεμία από τις τρεις διαφορικές εξισώσεις 2.38, 2.39, 2.40 περιλαμβάνει τις συνιστώσες E_x, E_y, E_z του ηλεκτρικού πεδίου και τις μερικές παραγώγους δεύτερης τάξης αυτών. Δεδομένου ότι κάθε εξίσωση ορίζεται στους κόμβους όπου ορίζεται και η αντίστοιχη συνιστώσα - η πρώτη εξίσωση ορίζεται στις θέσεις του E_x , η δεύτερη στις θέσεις του E_y , η τρίτη στις θέσεις του E_z - οι μερικές παράγωγοι δεύτερης τάξης των E_x, E_y, E_z θα πρέπει να προσεγγιστούν στις κατάλληλες θέσεις.

Το αριθμητικό σχήμα που προτείνεται για το σκοπό αυτό είναι συμπαγές, τέταρτης τάξης ακρίβειας, με τύπο

$$h(\alpha\phi'_{i-\frac{1}{2}} + \phi'_{i+\frac{1}{2}} + \alpha\phi'_{i+\frac{3}{2}}) = a(\phi_{i+1} - \phi_i) + \frac{b}{3}(\phi_{i+2} - \phi_{i-1}) + O(h^4) \quad (3.3)$$

όπου

$$a = \frac{9 - 6\alpha}{8}, b = \frac{-1 + 22\alpha}{8}$$

για τις μερικές παραγώγους πρώτης τάξης, που εφαρμόζεται διαδοχικά σε κάθε περίπτωση ώστε να προσεγγιστεί η κάθε δεύτερης τάξης μερική παράγωγος μέσω πεπερασμένων διαφορών ([7], [14], [18]). Πρέπει να σημειωθεί ότι στον παραπάνω τύπο, είναι η -ελεύθερη- επιλογή της πραγματικής παραμέτρου α που διαμορφώνει το σχήμα διακριτοποίησης σε ρητό ή συμπαγές ([7]).

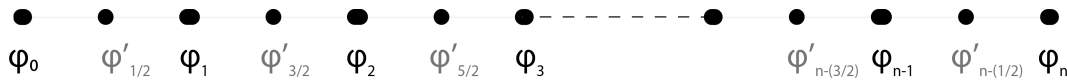
Επιλέγοντας $\alpha = \frac{1}{22}$ προκύπτει $b = 0$ και με βήμα διακριτοποίησης h , η παραπάνω σχέση γράφεται

$$h(\frac{1}{22}\phi'_{i-\frac{1}{2}} + \phi'_{i+\frac{1}{2}} + \frac{1}{22}\phi'_{i+\frac{3}{2}}) = \frac{24}{22}(\phi_{i+1} - \phi_i), i = 1, \dots, n$$

ή

$$\phi'_{i-\frac{1}{2}} + 22\phi'_{i+\frac{1}{2}} + \phi'_{i+\frac{3}{2}} = \frac{24}{h}(\phi_{i+1} - \phi_i), i = 1, \dots, n \quad (3.4)$$

και θα χρησιμοποιηθεί για την προσέγγιση τιμών παραγώγου από άκρα υποδιαστημάτων σε μέσα.



Σχήμα 3.3: Θέσεις προσέγγισης της ϕ' σε μονοδιάστατο πλέγμα βάσει της 3.4

Για τους κόμβους στο σύνορο του χωρίου μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο τύπος ([7]) για τους πρώτους (και αντίστοιχα τελευταίους κόμβους) στο μονοδιάστατο πλέγμα

$$h(\phi'_{\frac{1}{2}} + \tilde{\alpha}\phi'_{\frac{3}{2}}) = \hat{a}\phi_0 + \hat{b}\phi_1 + \hat{c}\phi_2 + \hat{d}\phi_3 + \hat{e}\phi_4 \quad (3.5)$$

$$h(\phi'_{n-\frac{1}{2}} + \tilde{\alpha}\phi'_{n+\frac{1}{2}}) = \bar{a}\phi_n + \bar{b}\phi_{n-1} + \bar{c}\phi_{n-2} + \bar{d}\phi_{n-3} + \bar{e}\phi_{n-4} \quad (3.6)$$

Οι τιμές των παραμέτρων $\bar{a} = \frac{\bar{\alpha}-22}{24}$, $\bar{b} = \frac{17-27\bar{\alpha}}{24}$, $\bar{c} = \frac{9+27\bar{\alpha}}{24}$, $\bar{d} = \frac{-5-\bar{\alpha}}{24}$ προκύπτουν μετά την ελεύθερη επιλογή της παραμέτρου $\bar{\alpha}$ ενώ η παράμετρος \bar{e} είναι σταθερά ίση με $\frac{1}{24}$ ([7]). Οι παράμετροι $\hat{a}, \hat{b}, \hat{c}, \hat{d}, \hat{e}$ έχουν αντίθετες τιμές των $\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}, \bar{d}$ και \bar{e} αντίστοιχα. Επιπλέον, επιβάλλονται συνοριακές συνθήκες τύπου Dirichlet με $\phi_0 = \phi_n = 0$ στους συνοριακούς κόμβους και ενσωματώνονται στις παραπάνω ισότητες.

Για $\bar{\alpha} = 1$, οι 3.5 και 3.6 γράφονται

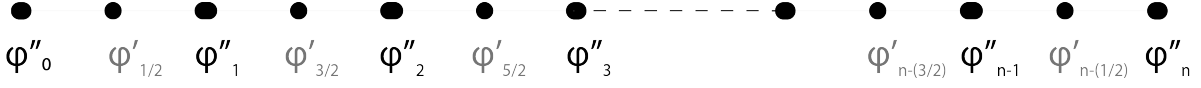
$$h(\phi'_{\frac{1}{2}} + \phi'_{\frac{3}{2}}) = \frac{1}{h}(-\frac{10}{24}\phi_1 + \frac{36}{24}\phi_2 - \frac{6}{24}\phi_3 + \frac{1}{24}\phi_4)$$

και

$$h(\phi'_{n-\frac{1}{2}} + \phi'_{n-\frac{3}{2}}) = \frac{1}{h}(\frac{10}{24}\phi_{n-1} - \frac{36}{24}\phi_{n-2} + \frac{6}{24}\phi_{n-3} - \frac{1}{24}\phi_{n-4})$$

Αντίστοιχα, για την προσέγγιση της ϕ' της συνάρτησης ϕ στα άκρα υποδιαστημάτων με χρήση τιμών της ϕ στα μέσα, με βήμα διακριτοποίησης h , το σχήμα διαμορφώνεται για κόμβους $i = 1, \dots, n-1$ ως

$$h(\frac{1}{22}\phi'_{i-1} + \phi'_{i+1} + \frac{1}{22}\phi'_{i+1}) = \frac{24}{22}(\phi_{i+\frac{1}{2}} - \phi_{i-\frac{1}{2}}), i = 1, \dots, n \quad (3.7)$$



Σχήμα 3.4: Θέσεις προσέγγισης της ϕ'' σε μονοδιάστατο πλέγμα βάσει της 3.8

Για τον υπολογισμό τιμών της ϕ'' το σχήμα διατυπώνεται ως

$$\phi''_{i-1} + 22\phi''_i + \phi''_{i+1} = \frac{24}{h}(\phi'_{i+\frac{1}{2}} - \phi'_{i-\frac{1}{2}}), i = 1, \dots, n \quad (3.8)$$

Όπως προκύπτει από την εφαρμογή του σχήματος επί του πλέγματος Yee, οι τιμές της ϕ' δεν είναι αναγκαίες στο σύνορο, αντιθέτως είναι απαραίτητες οι τιμές της ϕ'' . Για τη συγκεκριμένη υλοποίηση, θεωρείται $\phi''_0 = \phi''_{n+1} = 0$. Με το μηδενισμό των τιμών της ϕ'' στο σύνορο του υπολογιστικού χωρίου στο πλαίσιο της επίλυσης της μη-ομογενούς Helmholtz ουσιαστικά επιχειρείται στην προσομοίωση η ελάχιστη διαφοροποίηση του ηλεκτρικού πεδίου κοντά σε αυτό. Η επιλογή του μηδενισμού της ϕ'' επιβάλλει ότι ο ρυθμός μεταβολής του πεδίου κοντά στο σύνορο θα παραμένει σταθερός ώστε το πεδίο, θεωρητικά, να εξομαλύνεται σε αυτό.

Συνοψίζοντας, η 3.4 συνδυαστικά με τις 3.5, 3.6, μπορούν να γραφούν στη μορφή

$$(\mathcal{P}_1\phi')_{i-\frac{1}{2}} = (\mathcal{Q}_2\phi)_i, i = 1, \dots, n \quad (3.9)$$

με χρήση των τελεστών \mathcal{P}_1 και \mathcal{Q}_1 όπου

$$(\mathcal{P}_1\phi'')_i = \begin{cases} 24\phi'_{\frac{1}{2}} + 24\phi'_{\frac{3}{2}}, & i = 1 \\ \phi'_{i-\frac{1}{2}} + 22\phi'_{i+\frac{1}{2}} + \phi'_{i+\frac{3}{2}}, & i = 2, \dots, n-1 \\ 24\phi'_{n-\frac{1}{2}} + 24\phi'_{n-\frac{3}{2}}, & i = n \end{cases}$$

και

$$(\mathcal{Q}_1\phi')_i = \begin{cases} -10\phi_1 + 36\phi_2 - 6\phi_3 + \phi_4, & i = 1 \\ \frac{24}{h}(\phi_{i+1} - \phi_i), & i = 2, \dots, n-1 \\ 10\phi_1 - 36\phi_2 + 6\phi_3 - \phi_4, & i = n \end{cases}$$

ενώ η 3.8 μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$(\mathcal{P}_2\phi'')_i = (\mathcal{Q}_2\phi')_{i-\frac{1}{2}}, i = 1, \dots, n \quad (3.10)$$

με χρήση των τελεστών \mathcal{P}_2 και \mathcal{Q}_2 όπου

$$(\mathcal{P}_2\phi'')_i = \begin{cases} 22\phi''_1 + \phi''_2, & i = 1 \\ \phi''_{i-1} + 22\phi''_i + \phi''_{i+1}, & i = 2, \dots, n-1 \\ \phi''_{n-1} + 22\phi''_n, & i = n \end{cases}$$

και

$$(\mathcal{Q}_2\phi')_i = \frac{24}{h} \begin{cases} (\phi'_{\frac{3}{2}} - \phi'_{\frac{1}{2}}), & i = 1 \\ (\phi'_{i+\frac{1}{2}} - \phi'_{i-\frac{1}{2}}), & i = 2, \dots, n-1 \\ (\phi'_{n-\frac{3}{2}} - \phi'_{n-\frac{1}{2}}), & i = n \end{cases}$$

3.2 Εφαρμογή του Σχήματος Διακριτοποίησης

Με διαδοχική εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος 3.3 στις εξισώσεις 2.38, 2.39, 2.40 προκύπτουν οι γραμμικές εξισώσεις του γραμμικού συστήματος. Οι όροι κάθε εξίσωσης θα διακριτοποιηθούν σε όλους τους υπολογιστικούς κόμβους στους οποίους ορίζεται και η αντίστοιχη συνιστώσα του \mathbf{E} στην εξίσωση.

Συγκεκριμένα, η συνιστώσα E_x διακριτοποιείται στους κόμβους με συντεταγμένες (x_i, y_j, z_k) όπου,

$$x_i = (i - \frac{1}{2})h_x, i = 1, \dots, n_x$$

$$y_j = jh_y, j = 1, \dots, n_y - 1$$

$$z_k = kh_z, k = 1, \dots, n_z - 1$$

δηλαδή θα προσεγγιστεί σε συνολικά $n_x \cdot (n_y - 1) \cdot (n_z - 1)$ σημεία.

Αντίστοιχα, η συνιστώσα E_y διακριτοποιείται στους κόμβους με συντεταγμένες (x_i, y_j, z_k) όπου,

$$x_i = ih_x, i = 1, \dots, n_x - 1$$

$$y_j = (j - \frac{1}{2})h_y, j = 1, \dots, n_y$$

$$z_k = kh_z, k = 1, \dots, n_z - 1$$

οπότε θα προσεγγιστεί σε συνολικά $(n_x - 1) \cdot n_y \cdot (n_z - 1)$ σημεία, ενώ, τέλος, η συνιστώσα E_z διακριτοποιείται στους κόμβους με συντεταγμένες (x_i, y_j, z_k) όπου,

$$x_i = ih_x, i = 1, \dots, n_x - 1$$

$$y_j = jh_y, j = 1, \dots, n_y - 1$$

$$z_k = (k - \frac{1}{2})h_z, k = 1, \dots, n_z$$

Οι όροι που περιέχουν μικτή παράγωγο κατά συνέπεια, θα προσεγγιστούν ανάλογα με την κατεύθυνση της παραγώγου σε κόμβους με τις παραπάνω συντεταγμένες.

Ακολουθεί η εφαρμογή του κατάλληλου σχήματος διακριτοποίησης σε κάθε εξίσωση, καθώς και η τελική μορφή του συστήματος. Για λόγους ευκολίας στην ανάγνωση -και για το διακριτό χώρο- θεωρούνται οι παρακάτω συμβολισμοί

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} \right) \rightarrow \mathbf{E}_y^{xy}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \rightarrow \mathbf{E}_x^{yy},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \rightarrow \mathbf{E}_x^{zz}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} \right) \rightarrow \mathbf{E}_z^{xz},$$

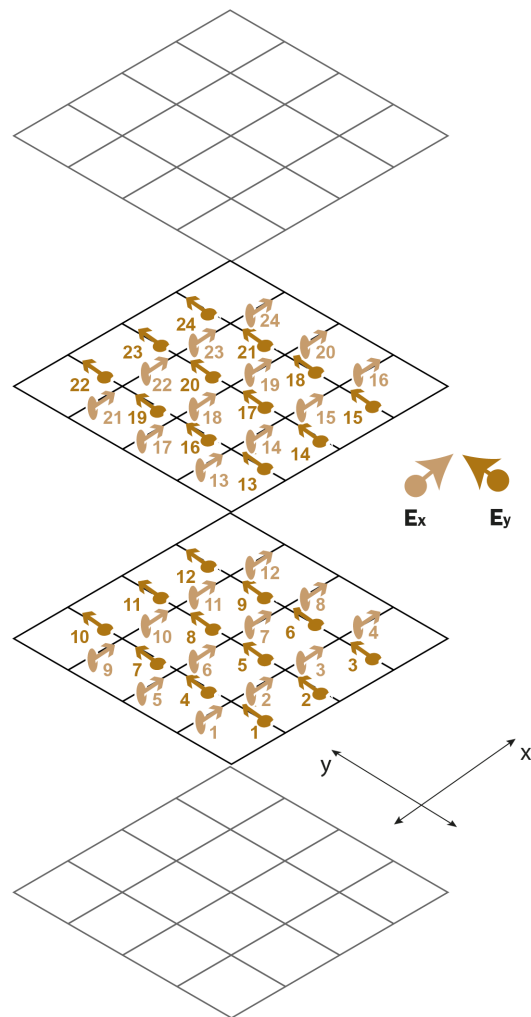
$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial E_z}{\partial z} \right) \rightarrow \mathbf{E}_z^{yz}, \quad \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \rightarrow \mathbf{E}_y^{zz},$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} \right) \rightarrow \mathbf{E}_y^{xx}, \quad \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \rightarrow \mathbf{E}_x^{yx},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial E_x}{\partial x} \right) \rightarrow \mathbf{E}_x^{zx}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_z}{\partial x} \right) \rightarrow \mathbf{E}_z^{xx},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \rightarrow \mathbf{E}_z^{yy}, \quad \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial E_y}{\partial y} \right) \rightarrow \mathbf{E}_y^{zy},$$

Για τη σειρά αρίθμησης των αγνώστων χρησιμοποιείται η λεξικογραφική προσέγγιση (1.2), η οποία στις 3 διαστάσεις και με δεδομένη την εφαρμογή Dirichlet συνθηκών στο $\partial\Omega$ ακολουθεί το μοτίβο όπως ενδεικτικά παρουσιάζεται στα 3.5, 3.6, 3.7.

Σχήμα 3.7: Αρίθμηση αγνώστων στο xy -επίπεδο

Εξίσωση I

Η πρώτη εξίσωση (2.38) έχει τη μορφή

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) + i\omega\mu_0\sigma E_x = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_p)E_x^p$$

ή

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial y^2} - \frac{\partial^2 E_x}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 E_z}{\partial z \partial x} + i\omega\mu_0\sigma E_x = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_p)E_x^p \quad (3.11)$$

Το σ στην 3.11 θα αναφέρεται στις τιμές της αγωγιμότητας στις θέσεις της συνιστώσας E_x στο διακριτό χώρο, οπότε θεωρείται για την παραπάνω εξίσωση ότι

$$\sigma = \begin{cases} \sigma_{\text{air}}, \text{ για κόμβους της } E_x \text{ πάνω από τη διεπαφή του εδάφους} \\ \sigma_{\text{underground}}, \text{ για κόμβους της } E_x \text{ κάτω από τη διεπαφή του εδάφους} \end{cases} = \sigma_x \quad (3.12)$$

Ομοίως το σ_p αναφέρεται στις τιμές της αγωγιμότητας του υποβάθρου στις θέσεις της συνιστώσας E_x^p οπότε και η εξίσωση 3.11 γράφεται

$$\mathbf{E}_y^{xy} - \mathbf{E}_x^{yy} - \mathbf{E}_x^{zz} + \mathbf{E}_z^{zx} + \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{E}_x = \mathbf{F}_1 \quad (3.13)$$

όπου $\mathbf{e}_1 = i\omega\mu_0\sigma_x$ και $\mathbf{F}_1 = -i\omega\mu_0(\sigma_x - \sigma_p) \cdot \mathbf{E}_x^p$.

Τονίζεται, ότι στην 3.12 το $\sigma_{\text{underground}}$ μπορεί να αναφέρεται σε διαφορετικές τιμές αγωγιμότητας σε περιοχές του υπεδάφους (όχι μόνο στην περίπτωση ομοιογενούς ημιχώρου).

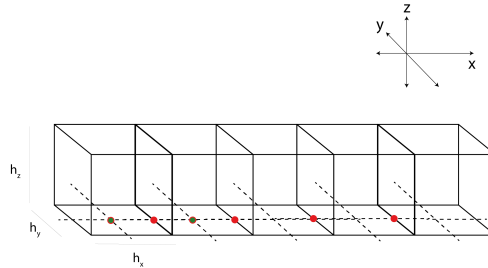
Ακολουθεί αναλυτικά η προσέγγιση κάθε όρου της εξίσωσης 3.13 με εφαρμογή των αριθμητικών σχημάτων 3.4 και 3.8.

 \mathbf{E}_y^{xy}

Ο όρος \mathbf{E}_y^{xy} προσεγγίζεται σε δύο βήματα, με αντίστοιχη εφαρμογή των σχημάτων διακριτοποίησης, στις θέσεις όπου ορίζεται και η συνιστώσα \mathbf{E}_y στο πλέγμα διακριτοποίησης. Αρχικά, η \mathbf{E}_y^x προσεγγίζεται για κάθε κόμβο i των πρώτων n_x υπολογιστικών κελιών, στο πρώτο επίπεδο κόμβων ως προς την κατεύθυνση y και ως προς την κατεύθυνση z δηλαδή για $i = 1, \dots, n_x$, $j = 1$ και $k = 1$, με χρήση των τιμών της \mathbf{E}_y .

- Για τον πρώτο κόμβο, δηλαδή για $i = 1$ (σχήμα 3.8), η εξίσωση γράφεται

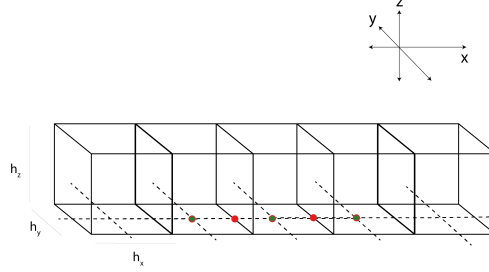
$$24(E_{y_1}^x + E_{y_2}^x) = \frac{1}{h_x}(-10E_{y_1} + 36E_{y_2} - 6E_{y_3} + E_{y_4})$$



Σχήμα 3.8: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την \mathbf{E}_y^x στον κόμβο $i = 1$

- για τους επόμενους $n_x - 2$, δηλαδή για $i = 2, \dots, n_x - 1$ (σχήμα 3.9), με την εξίσωση

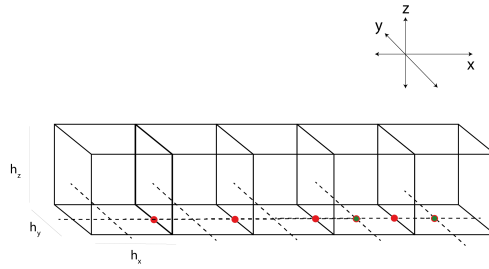
$$E_{y_{i-1}}^x + 22E_{y_i}^x + E_{y_{i+1}}^x = \frac{1}{h_x}(-24E_{y_{i-1}} + 24E_{y_i})$$



Σχήμα 3.9: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την \mathbf{E}_y^x στους κόμβους με $i = 2, \dots, n_x - 2$

- και για τον τελευταίο, δηλαδή για $i = n_x$ (σχήμα 3.10), με την εξίσωση

$$24(E_{y_{n_x-1}}^x + E_{y_{n_x}}^x) = \frac{1}{h_x}(-E_{y_{n_x-3}} + 6E_{y_{n_x-2}} - 36E_{y_{n_x-1}} + 10E_{y_{n_x}})$$



Σχήμα 3.10: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την \mathbf{E}_y^x στον κόμβο $i = n_x$

Οι παραπάνω εξισώσεις μπορούν να γραφτούν σε μορφή γραμμικού συστήματος ως

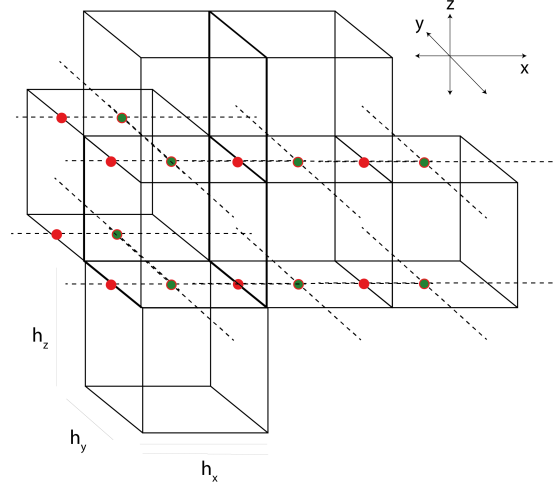
$$S_1^* E_{y_i}^x = \frac{1}{h_x} B_1^* E_{y_i}, i = 1, \dots, n_x$$

όπου

$$S_1^* = \begin{pmatrix} 24 & 24 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24 & 24 \end{pmatrix} B_1^* = \begin{pmatrix} -10 & 36 & -6 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -24 & 24 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -24 & 24 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -24 & 24 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -24 & 24 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 6 & -36 & 10 \end{pmatrix}$$

με $S_1^* \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, $B_1^* \in \mathbb{R}^{n_x \times (n_x-1)}$, $\mathbf{E}_y^x \in \mathbb{C}^{n_x \times 1}$, $E_y \in \mathbb{C}^{(n_x-1) \times 1}$.

Οι ίδιες εξισώσεις επαναλαμβάνονται για τις επόμενες σειρές κόμβων στις οποίες ορίζεται η \mathbf{E}_y^x - σε κάθε επόμενο επίπεδο ως προς τη κατεύθυνση z - κατά συνέπεια για $i = 1, \dots, n_x$, $j = 2, \dots, n_y$ και $k = 2, \dots, n_z - 1$ (σχήμα 3.11)



Σχήμα 3.11: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την \mathbf{E}_y^x σε κόμβους στα ενδιάμεσα xy -επίπεδα

Οι εξισώσεις που προκύπτουν από το σύνολο του πλέγματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^x , μπορούν να γραφτούν σε μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_1 \mathbf{E}_y^x = \frac{1}{h_x} B_1 \mathbf{E}_y \quad (3.14)$$

όπου

$$S_1 = \text{diag}(S_1^*, \dots, S_1^*), S_1 \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z - 1) \times n_x n_y (n_z - 1)}$$

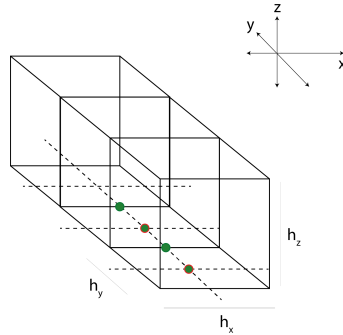
$$B_1 = \text{diag}(B_1^*, \dots, B_1^*), B_1 \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z - 1) \times (n_x - 1) n_y (n_z - 1)}$$

Για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} εφαρμόζεται το σχήμα 3.4 με χρήση των τιμών της \mathbf{E}_y^x στην κατεύθυνση y .

Οι εξισώσεις των κόμβων στο πρώτο επίπεδο ως προς z γράφονται:

- για τους πρώτους n_x κόμβους, δηλαδή για $i = 1, \dots, n_x$ (σχήμα 3.12)

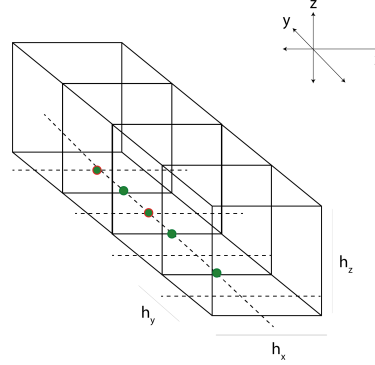
$$22E_{y_i}^{xy} + E_{y_{i+n_x}}^{xy} = \frac{24}{h_y} (E_{y_{i+n_x}}^x - E_{y_i}^x)$$



Σχήμα 3.12: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} για τους κόμβους $i = 1, \dots, n_x$

- για τους κόμβους με αρίθμηση από $n_x + 1$ μέχρι $n_x n_y - 2n_x$ (σχήμα 3.13)

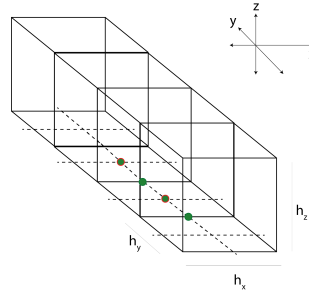
$$E_{y_{i-n_x}}^{xy} + 22E_{y_i}^{xy} + E_{y_{i+n_x}}^{xy} = \frac{24}{h_y}(E_{y_{i+n_x}}^x - E_{y_i}^x)$$



Σχήμα 3.13: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} για τους κόμβους $i = n_x + 1, \dots, n_x n_y - 2n_x$

- και για κόμβους από $n_x n_y - 2n_x + 1$ μέχρι $n_x(n_y - 1)$ (σχήμα 3.14)

$$E_{y_{i-n_x}}^{xy} + 22E_{y_i}^{xy} = \frac{24}{h_y}(E_{y_{i+n_x}}^x - E_{y_i}^x)$$



Σχήμα 3.14: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} για τους κόμβους $i = n_x n_y - 2n_x + 1, \dots, n_x(n_y - 1)$

Οι παραπάνω εξισώσεις μπορούν να γραφτούν σε μορφή συστήματος

$$S_2^* E_{y_i}^{xy} = \frac{24}{h_y} B_2^* E_{y_i}^x, i = 1, \dots, n_x(n_y - 1)$$

όπου

$$S_2^* = \begin{pmatrix} 22I & I & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ I & 22I & I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & 22I & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & I & 22I & I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & I & 22I & I \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & I & 22I \end{pmatrix} \quad B_2^* = \begin{pmatrix} -I & I & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -I & I & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -I & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -I & I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -I & I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -I & I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, $S_2^* \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1) \times n_x(n_y-1)}$ και $B_2^* \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1) \times n_x n_y}$.

Για κάθε k επίπεδο ως προς τη z -κατεύθυνση λοιπόν, οι εξισώσεις των αντίστοιχων κόμβων γράφονται:

- για τους πρώτους n_x κόμβους, δηλαδή για $i = 1, \dots, n_x$

$$22E_{y_{i+l_k}}^{xy} + E_{y_{i+n_x+l_k}}^{xy} = \frac{24}{h_y}(E_{y_{i+n_x+l_k}}^x - E_{y_{i+l_k}}^x)$$

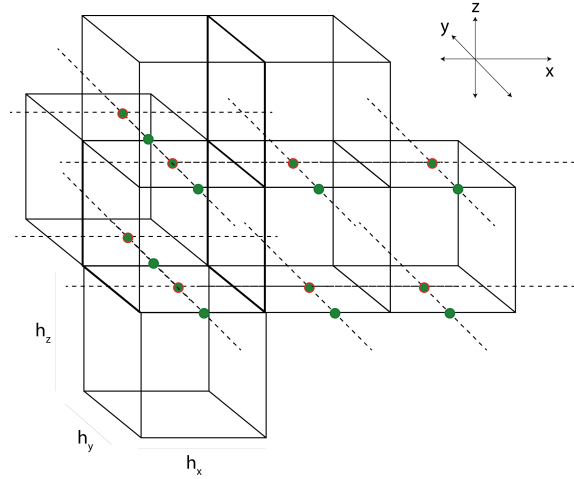
- για τους κόμβους με αρίθμηση από $n_x + 1$ μέχρι $n_x n_y - 2n_x$

$$E_{y_{i-n_x+l_k}}^{xy} + 22E_{y_i}^{xy} + E_{y_{i+n_x+l_k}}^{xy} = \frac{24}{h_y}(E_{y_{i+n_x+l_k}}^x - E_{y_{i+l_k}}^x)$$

- και για κόμβους από $n_x n_y - 2n_x + 1$ μέχρι $n_x(n_y - 1)$

$$E_{y_{i-n_x+l_k}}^{xy} + 22E_{y_{i+l_k}}^{xy} = \frac{24}{h_y}(E_{y_{i-n_x+l_k}}^x - E_{y_{i+l_k}}^x)$$

όπου $l_k = (k - 1)n_x n_y$ (σχήμα 3.15).



Σχήμα 3.15: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} στα xy -επίπεδα

Οι παραπάνω εξισώσεις από το σύνολο του πλέγματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xy} , μπορούν να γραφτούν σε μορφή πινάκων

$$S_2 \mathbf{E}_y^{xy} = \frac{24}{h_y} B_2 \mathbf{E}_y^x \quad (3.15)$$

όπου

$$S_2 = \underbrace{\text{diag}(S_2^*, \dots, S_2^*)}_{n_z - 1}, S_2 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times n_x(n_y-1)(n_z-1)}$$

$$B_2 = \underbrace{\text{diag}(B_2^*, \dots, B_2^*)}_{n_z - 1}, B_2 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times n_x n_y (n_z-1)}$$

$$\mathbf{E}_y^{xy} \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times 1}, \mathbf{E}_y^x \in \mathbb{C}^{n_x n_y (n_z-1) \times 1}$$

\mathbf{E}_x^{yy}

Για τον όρο \mathbf{E}_x^{yy} , αρχικά προσεγγίζεται η \mathbf{E}_x^y στα μέσα των υποδιαστημάτων ως προς την y κατεύθυνση με χρήση του σχήματος 3.8.

Για κάθε k επίπεδο ως προς τη z κατεύθυνση, οι εξισώσεις των κόμβων έχουν ως εξής:

- Οι πρώτοι n_x κόμβοι, δηλαδή για $i = 1, \dots, n_x$

$$24E_{x_{i+l_k}}^y + 24E_{x_{i+n_x+l_k}}^y = \frac{1}{h_y}(-10E_{x_{i+l_k}} + 36E_{x_{i+n_x+l_k}} - 6E_{x_{i+2n_x+l_k}} + E_{x_{i+3n_x+l_k}})$$

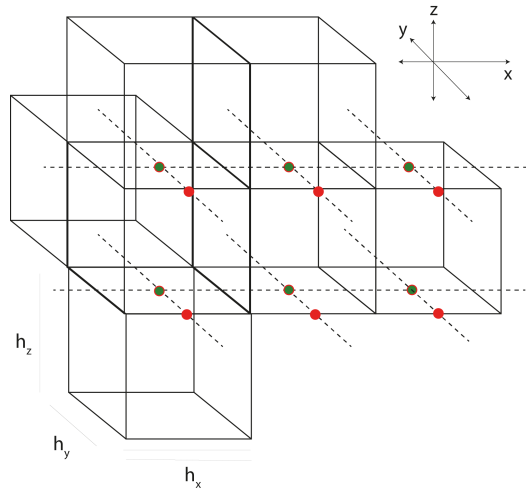
- για τους επόμενους $n_x + 1$, μέχρι $n_x n_y - 2n_x$

$$E_{x_{i-n_x+l_k}}^y + 22E_{x_{i+l_k}}^x + E_{x_{i+n_x+l_k}}^x = \frac{1}{h_y}(-24E_{x_{i-n_x+l_k}} + 24E_{x_{i+l_k}})$$

- και για τους τελευταίους, από $n_x n_y - 2n_x + 1$ μέχρι $n_x(n_y - 1)$, με την εξίσωση

$$24E_{x_{i-n_x+l_k}}^y + 24E_{x_{i+l_k}}^y = \frac{1}{h_y}(-E_{x_{i-3n_x+l_k}} + 6E_{x_{i-2n_x+l_k}} - 36E_{x_{i-n_x+l_k}} + 10E_{x_{i+l_k}})$$

όπου $l_k = (k - 1)n_x n_y$ (σχήμα 3.16).



Σχήμα 3.16: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^y στα xy -επίπεδα

Ισοδύναμα, σε μορφή πινάκων

$$S_3 \mathbf{E}_x^y = \frac{1}{h_y} B_3 \mathbf{E}_x \quad (3.16)$$

όπου

$$S_3 = \text{diag}(\underbrace{S_3^*, \dots, S_3^*}_{n_z - 1}), S_3 \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z - 1) \times n_x n_y (n_z - 1)}$$

$$B_3 = \text{diag}(\underbrace{B_3^*, \dots, B_3^*}_{n_z - 1}), B_3 \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z - 1) \times n_x (n_y - 1) (n_z - 1)}$$

$$\mathbf{E}_x^y \in \mathbb{C}^{n_x n_y (n_z-1) \times 1}, \mathbf{E}_x \in \mathbb{C}^{n_x (n_y-1)(n_z-1) \times 1}$$

με

$$S_3^* = \begin{pmatrix} 24I & 24I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & I & 22 & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & 0 \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

και

$$B_3^* = \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & O & \dots & O \\ -24I & 24I & O & O & O & \dots & O \\ O & -24I & 24I & O & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & O & -24I & 24I & O \\ O & \dots & O & O & O & -24I & 24I \\ O & \dots & O & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}$$

$$\text{με } I \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}, S_3^* \in \mathbb{R}^{n_x n_y \times n_x n_y} \text{ και } B_3^* \in \mathbb{R}^{n_x n_y \times n_x (n_y-1)}.$$

Για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^{yy} στα άκρα των υποδιαστημάτων του πλέγματος ως προς την κατεύθυνση y , μπορεί να χρησιμοποιηθούν οι εξισώσεις που χρησιμοποιήθηκαν για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^y στις κατάλληλες θέσεις, κατά συνέπεια η δομή και η διάσταση των πινάκων S_4^* , B_4^* ταυτίζεται με αυτήν των S_2^* και B_2^* αντίστοιχα. Συνεπώς,

$$S_4^* = \begin{pmatrix} 22I & I & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ I & 22I & I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & 22I & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & I & 22I & I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & I & 22I & I \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & I & 22I \end{pmatrix} \quad B_4^* = \begin{pmatrix} -I & I & O & \dots & O & O & O \\ O & -I & I & \dots & O & O & O \\ O & O & -I & \dots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & \dots & -I & I & O & O \\ O & O & \dots & O & -I & I & O \\ O & O & \dots & O & O & -I & I \end{pmatrix}$$

$$\text{με } I \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}, S_4^* \in \mathbb{R}^{n_x (n_y-1) \times n_x (n_y-1)} \text{ και } B_4^* \in \mathbb{R}^{n_x (n_y-1) \times (n_x-1) n_y}.$$

Εφαρμόζοντας σε όλο το πλέγμα, προκύπτει το συμπέρασμα ότι η \mathbf{E}_x^{yy} προσεγγίζεται με τη βοήθεια των τιμών της \mathbf{E}_x^y στις θέσεις της \mathbf{E}_x με το σύνολο των εξισώσεων υπό τη μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_4 \mathbf{E}_x^{yy} = \frac{1}{h_y} B_4 \mathbf{E}_x^y \quad (3.17)$$

όπου

$$S_4 = \text{diag}(\underbrace{S_4^*, \dots, S_4^*}_{n_z-1}), S_4 \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z-1) \times n_x n_y (n_z-1)}$$

$$B_4 = \text{diag}(\underbrace{B_4^*, \dots, B_4^*}_{n_z-1}), B_4 \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z-1) \times n_x (n_y-1)(n_z-1)}$$

$$\mathbf{E}_x^{yy} \in \mathbb{C}^{n_x (n_y-1)(n_z-1) \times 1}, \mathbf{E}_x^y \in \mathbb{C}^{n_x n_y (n_z-1) \times 1}$$

\mathbf{E}_x^{zz}

Η προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_x^{zz} πραγματοποιείται αρχικά με την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^z με χρήση του σχήματος 3.4 σε κάθε επίπεδο k ως προς την κατεύθυνση z του πλέγματος.

- Οι πρώτοι κόμβοι για $i = 1, \dots, n_x(n_y - 1)$ δηλαδή το πρώτο επίπεδο ως προς τη z -κατεύθυνση

$$24E_{x_i}^z + 24E_{x_{i+k}}^z = \frac{1}{h_z}(-10E_{x_i} + 36E_{x_{i+k}} - 6E_{x_{i+2k}} + E_{x_{i+3k}})$$

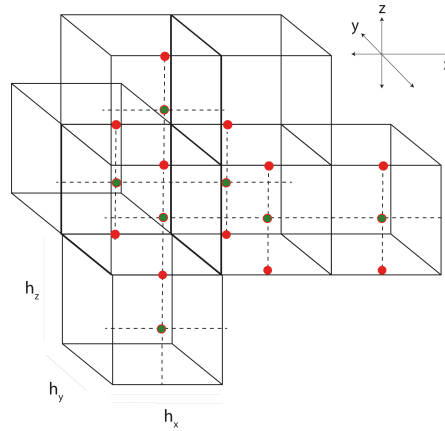
- οι επόμενοι κόμβοι από $n_x(n_y - 1) + 1$ μέχρι $n_x(n_y - 1)(n_z - 2)$

$$E_{x_{i-k}}^z + 22E_{x_i}^z + E_{x_{i+k}}^z = \frac{1}{h_z}(-24E_{x_{i-k}} + 24E_{x_{i+k}})$$

- και οι τελευταίοι, από $n_x(n_y - 1)(n_z - 2) + 1$ μέχρι $n_x(n_y - 1)(n_z - 1)$, με την εξίσωση

$$24E_{x_i}^z + 24E_{x_{i-k}}^z = \frac{1}{h_z}(-E_{x_{i-3k}} + 6E_{x_{i-2k}} - 36E_{x_{i-k}} + 10E_{x_i})$$

με $l_k = n_x(n_y - 1)$ (σχήμα 3.17).



Σχήμα 3.17: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^z στα xy -επίπεδα

Σε μορφή γραμμικού συστήματος, οι παραπάνω εξισώσεις γράφονται

$$S_5 \mathbf{E}_x^z = \frac{1}{h_z} B_5 \mathbf{E}_x \quad (3.18)$$

όπου

$$S_5 = \begin{pmatrix} 24I & 24I & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ I & 22I & I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & 22I & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & I & 22I & I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & I & 22I & I \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

και

$$B_5 = \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & 0 & \dots & 0 \\ -24I & 24I & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -24I & 24I & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -24I & 24I & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -24I & 24I \\ 0 & \dots & 0 & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1) \times n_x(n_y-1)}$, $S_5 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)n_z \times n_x(n_y-1)n_z}$, $B_5^* \in \mathbb{R}^{n_z \times n_z}$ και $\mathbf{E}_x^z \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_x \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times 1}$.

Ακολουθώντας, για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^{zz} με εφαρμογή του σχήματος 3.8 και χρήση των κατά προσέγγιση τιμών της \mathbf{E}_x^z , προκύπτουν οι εξισώσεις

- για τους πρώτους $n_x(n_y - 1)$ κόμβους στο πρώτο επίπεδο ως προς τη z -κατεύθυνση, δηλαδή για $i = 1, \dots, n_x(n_y - 1)$

$$22E_{x_i}^{zz} + E_{x_{i+k}}^{zz} = \frac{24}{h_z}(E_{x_{i+k}}^z - E_{x_i}^z)$$

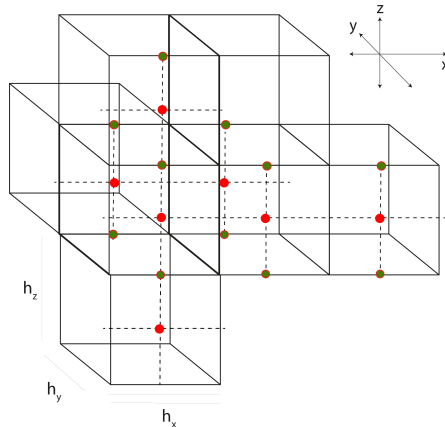
- για τους κόμβους με αρίθμηση από $n_x(n_y - 1) + 1$ μέχρι $n_x(n_y - 1)(n_z - 2)$

$$E_{x_{i-k}}^{zz} + 22E_{x_i}^{zz} + E_{x_{i+k}}^{zz} = \frac{24}{h_z}(E_{x_{i+k}}^z - E_{x_i}^z)$$

- και για τους τελευταίους $n_x(n_y - 1)$ κόμβους

$$E_{x_{i-k}}^{zz} + 22E_{x_i}^{zz} = \frac{24}{h_z}(E_{x_{i+k}}^z - E_{x_i}^z)$$

όπου $k = n_x(n_y - 1)$ (σχήμα 3.18).



Σχήμα 3.18: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^{zz} στα xy -επίπεδα

Οι εξισώσεις σε μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_6 \mathbf{E}_x^{zz} = \frac{1}{h_z} B_6 \mathbf{E}_x^z \quad (3.19)$$

όπου

$$S_6 = \begin{pmatrix} 22I & I & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ I & 22I & I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & 22I & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & I & 22I & I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & I & 22I & I \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & I & 22I \end{pmatrix} B_6 = \begin{pmatrix} -I & I & O & \dots & O & O & O \\ O & -I & I & \dots & O & O & O \\ O & O & -I & \dots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & \dots & -I & I & O & O \\ O & O & \dots & O & -I & I & O \\ O & O & \dots & O & O & -I & I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1) \times n_x(n_y-1)}$, $S_6 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)n_z \times n_x(n_y-1)n_z}$, $B_6 \in \mathbb{R}^{n_z \times n_z}$, $\mathbf{E}_x^{zz} \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times 1}$, $\mathbf{E}_x^z \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}$.

\mathbf{E}_z^{xz}

Αρχικά προσεγγίζεται η \mathbf{E}_z^x με χρήση των τιμών της \mathbf{E}_z και εφαρμογή του σχήματος 3.8 προς την κατεύθυνση x . Μπορούν να χρησιμοποιηθούν οι εξισώσεις που προκύπτουν για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^x στον πρώτο όρο της εξίσωσης 3.13 στις κατάλληλες θέσεις κόμβων. Οπότε, για τον πρώτο κόμβο, δηλαδή για $i = 1$, η εξίσωση γράφεται

$$24(E_{z_1}^x + E_{z_2}^x) = \frac{1}{h_x}(-10E_{z_1} + 36E_{z_2} - 6E_{z_3} + E_{z_4})$$

για τους επόμενους $n_x - 2$, δηλαδή για $i = 2, \dots, n_x - 1$, με την εξίσωση

$$E_{z_{i-1}}^x + 22E_{z_i}^x + E_{z_{i+1}}^x = \frac{1}{h_x}(-24E_{z_{i-1}} + 24E_{z_i})$$

και για τον τελευταίο, δηλαδή για $i = n_x$, με την εξίσωση

$$24(E_{z_{n_x-1}}^x + E_{z_{n_x}}^x) = \frac{1}{h_x}(-E_{z_{n_x-3}} + 6E_{z_{n_x-2}} - 36E_{z_{n_x-1}} + 10E_{z_{n_x}})$$

Οι παραπάνω εξισώσεις μπορούν να γραφούν υπό τη μορφή γραμμικού συστήματος ως

$$S_7^* \mathbf{E}_z^x = \frac{1}{h_x} B_7^* \mathbf{E}_z$$

όπου

$$S_7^* = \begin{pmatrix} 24 & 24 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24 & 24 \end{pmatrix} B_7^* = \begin{pmatrix} -10 & 36 & -6 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -24 & 24 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ +0 & -24 & 24 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -24 & 24 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -24 & 24 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 6 & -36 & 10 \end{pmatrix}$$

με $S_7^* \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, $B_7^* \in \mathbb{R}^{n_x \times (n_x-1)}$.

Οι ίδιες εξισώσεις, επαναλαμβάνονται για τις επόμενες σειρές κόμβων στις οποίες ορίζεται η E_z^x - σε κάθε επόμενη γραμμή κόμβων στην κατεύθυνση y και σε κάθε επόμενο επίπεδο ως προς τη κατεύθυνση z - κατά συνέπεια για $i = 1, \dots, n_x$, $j = 2, \dots, n_y - 1$ και $k = 2, \dots, n_z$, οπότε και προκύπτει το γραμμικό σύστημα

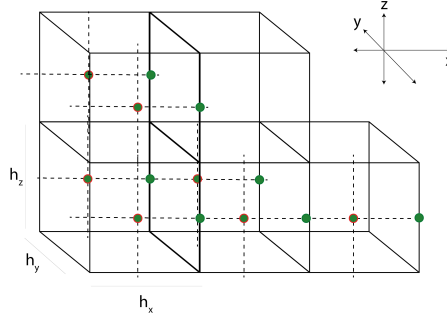
$$S_7 \mathbf{E}_z^x = \frac{1}{h_x} B_7 \mathbf{E}_z \quad (3.20)$$

όπου

$$S_7 = \text{diag}(\underbrace{S_7^*, \dots, S_7^*}_{(n_y-1)n_z}), S_7 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)n_z \times n_x(n_y-1)n_z}$$

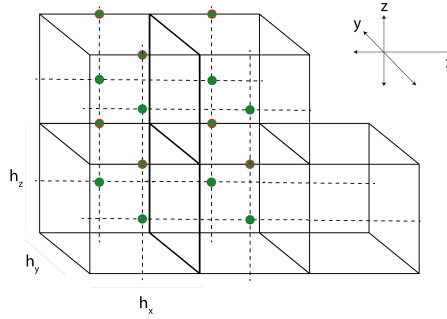
$$B_7 = \text{diag}(\underbrace{B_7^*, \dots, B_7^*}_{(n_y-1)n_z}), B_7 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)n_z \times (n_x-1)(n_y-1)n_z}$$

$$\mathbf{E}_z^x \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}, \mathbf{E}_z \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times 1}$$



Σχήμα 3.19: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_z^x

Στη συνέχεια, για την προσέγγιση της \mathbf{E}_z^{xz} , με εφαρμογή του σχήματος 3.4 στο σύνολο του πλέγματος χρησιμοποιούνται οι εξισώσεις που προέκυψαν κατά την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^{zz} , κατά συνέπεια, οι πίνακες S_8 και B_8 ταυτίζονται με τους S_6 και B_6 αντίστοιχα.



Σχήμα 3.20: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_z^{xz}

$$S_8 \mathbf{E}_z^{xz} = \frac{1}{h_z} B_8 \mathbf{E}_z^x \quad (3.21)$$

όπου

$$S_8 = \begin{pmatrix} 22I & I & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ I & 22I & I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & 22I & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & I & 22I & I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & I & 22I & I \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & I & 22I \end{pmatrix} \quad B_8 = \begin{pmatrix} -I & I & O & \dots & O & O & O \\ O & -I & I & \dots & O & O & O \\ O & O & -I & \dots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & \dots & -I & I & O & O \\ O & O & \dots & O & -I & I & O \\ O & O & \dots & O & O & -I & I \end{pmatrix}$$

για $I \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1) \times n_x(n_y-1)}$, $S_8 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times n_x(n_y-1)(n_z-1)}$,
 $B_8 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times n_x(n_y-1)n_z}$, $\mathbf{E}_x^{zz} \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times 1}$, $\mathbf{E}_x^z \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}$.

Εξίσωση II

Η δεύτερη εξίσωση (2.39) έχει τη μορφή

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) + i\omega\mu_0\sigma E_y = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_p)E_y^p$$

όπως έχει ήδη τεθεί παραπάνω, ή, ισοδύναμα,

$$\frac{\partial^2 E_z}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 E_x}{\partial y \partial x} + i\omega\mu_0\sigma E_y = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_p)E_y^p \quad (3.22)$$

Με δεδομένο ότι το σ της 3.22, στο διακριτό χώρο, θα αναφέρεται στις τιμές της αγωγιμότητας -και κατ' επέκτασιν στην επιρροή του μέσου διάδοσης- στις θέσεις της συνιστώσας E_y , θεωρείται για την παραπάνω εξίσωση ότι

$$\sigma = \begin{cases} \sigma_{\text{air}}, \text{ για κόμβους της } E_y \text{ πάνω από τη διεπαφή του εδάφους} \\ \sigma_{\text{underground}}, \text{ για κόμβους της } E_y \text{ κάτω από τη διεπαφή του εδάφους} \end{cases} = \sigma_y \quad (3.23)$$

Ομοίως το σ_p αναφέρεται στις τιμές της αγωγιμότητας του υποβάθρου στις θέσεις της συνιστώσας E_y^p . Η εξίσωση 3.22 μπορεί εν τέλει να γραφεί

$$\mathbf{E}_z^{yz} - \mathbf{E}_y^{zz} - \mathbf{E}_y^{xx} + \mathbf{E}_x^{yx} + \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{E}_y = \mathbf{F}_2 \quad (3.24)$$

όπου $\mathbf{e}_2 = i\omega\mu_0\sigma_y$ και $\mathbf{F}_2 = -i\omega\mu_0(\sigma_y - \sigma_p) \cdot \mathbf{E}_y^p$.

Σημειώνεται δε ότι, στην 3.23, το $\sigma_{\text{underground}}$ μπορεί να αναφέρεται σε διαφορετικές τιμές αγωγιμότητας σε περιοχές του υπεδάφους (π.χ. σε υλοποίηση διαστρωμάτωσης ή αγωγίμου μέσου εντός του ημιχώρου).

Όπως έγινε και για την πρώτη εξίσωση (3.13) του αρχικού συστήματος, ακολουθεί η προσέγγιση των όρων της εξίσωσης 3.24 με εφαρμογή των αριθμητικών σχημάτων.

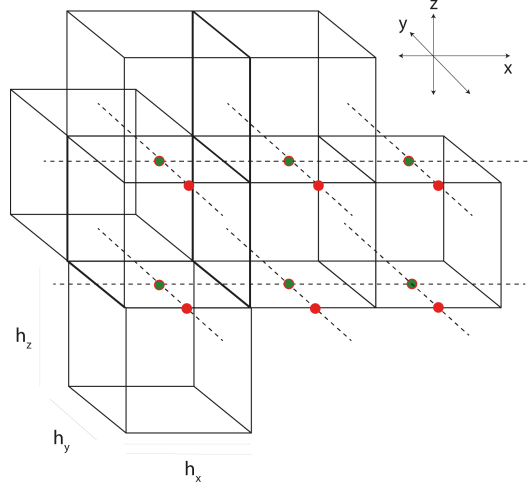
\mathbf{E}_x^{yx}

Για την προσέγγιση των τιμών του όρου \mathbf{E}_x^{yx} , αρχικά προσεγγίζεται ο όρος \mathbf{E}_x^y με χρήση των τιμών της \mathbf{E}_x κατά την εφαρμογή του σχήματος 3.8. Συγκεκριμένα, οι εξισώσεις που προκύπτουν είναι αντίστοιχες με αυτές που παρουσιάστηκαν νωρίτερα κατά την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_y^y της εξίσωσης 3.13 στις κατάλληλες θέσεις. Κατά συνέπεια, η προσέγγιση των τιμών της \mathbf{E}_x^y θα γίνει με την επίλυση του γραμμικού συστήματος

$$S_9 \mathbf{E}_x^y = \frac{1}{h_y} B_9 \mathbf{E}_x \quad (3.25)$$

όπου

$$\begin{aligned} S_9 &= \text{diag}(\underbrace{S_9^*, \dots, S_9^*}_{n_z - 1}), S_9 \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z - 1) \times n_x n_y (n_z - 1)} \\ B_9 &= \text{diag}(\underbrace{B_9^*, \dots, B_9^*}_{n_z - 1}), B_9 \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z - 1) \times n_x (n_y - 1)(n_z - 1)} \\ \mathbf{E}_x^y &\in \mathbb{C}^{n_x n_y (n_z - 1) \times 1}, \mathbf{E}_x \in \mathbb{C}^{n_x (n_y - 1)(n_z - 1) \times 1} \end{aligned}$$



Σχήμα 3.21: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_x^y

όπου

$$S_9^* = \begin{pmatrix} 24I & 24I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & I & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

και

$$B_9^* = \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & O & \dots & O \\ -24I & 24I & O & O & O & \dots & O \\ O & -24I & 24I & O & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & O & -24I & 24I & O \\ O & \dots & O & O & O & -24I & 24I \\ O & \dots & O & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, $S_9^* \in \mathbb{R}^{n_x n_y \times n_x n_y}$, $B_9^* \in \mathbb{R}^{n_x n_y \times n_x (n_y - 1)}$.

Ακολουθώντας, για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_x^{yx} με χρήση του σχήματος 3.4 στις θέσεις όπου ορίζεται η συνιστώσα \mathbf{E}_x , οι εξισώσεις που προκύπτουν για την πρώτη σειρά κόμβων στην x -κατεύθυνση:

- Για τον πρώτο κόμβο, δηλαδή για $i = 1$, η εξίσωση γράφεται

$$22E_{x_1}^{yx} + E_{x_2}^{yx} = \frac{24}{h_x}(-E_{x_1}^y + E_{x_2}^y)$$

- για τους επόμενους $n_x - 2$, δηλαδή για $i = 2, \dots, n_x - 1$, με την εξίσωση

$$E_{x_{i-1}}^{yx} + 22E_{x_i}^{yx} + E_{x_{i+1}}^{yx} = \frac{24}{h_x}(-E_{x_{i-1}}^y + E_{x_i}^y)$$

- και για τον τελευταίο, δηλαδή για $i = n_x - 1$, με την εξίσωση

$$E_{x_{n_x-1}}^{yx} + E_{x_{n_x}}^{yx} = \frac{24}{h_x}(-E_{x_{n_x-1}}^y + E_{x_{n_x}}^y)$$

Αντίστοιχα διαμορφώνονται οι εξισώσεις και για τις υπόλοιπες ως προς την y -κατεύθυνση σειρές κόμβων, οπότε και προκύπτει ένα σύνολο εξισώσεων, οι συντελεστές του οποίου μπορούν να περιγραφούν με τους ακόλουθους πίνακες:

$$S_{10}^* = \begin{pmatrix} 22 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 22 \end{pmatrix}, B_{10}^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

με $S_{10}^* \in \mathbb{R}^{n_x n_y \times n_x n_y}$, $B_{10}^* \in \mathbb{R}^{n_x n_y \times n_x (n_y - 1)}$, $\mathbf{E}_x^{yx} \in \mathbb{C}^{(n_x - 1)n_y (n_z - 1) \times 1}$, $\mathbf{E}_x^y \in \mathbb{C}^{n_x n_y (n_z - 1) \times 1}$. Με εφαρμογή σε κάθε επίπεδο κόμβων ως προς τη z -κατεύθυνση δηλαδή σε όλο το εύρος του πλέγματος προκύπτει το σύνολο των εξισώσεων υπό τη μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_{10} \mathbf{E}_x^{yx} = \frac{24}{h_x} B_{10} \mathbf{E}_x^y \quad (3.26)$$

όπου

$$S_{10} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{10}^*, \dots, S_{10}^*}_{n_y (n_z - 1)}), S_{10} \in \mathbb{R}^{(n_x - 1)n_y (n_z - 1) \times (n_x - 1)n_y (n_z - 1)}$$

$$B_{10} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{10}^*, \dots, B_{10}^*}_{n_y (n_z - 1)}), B_{10} \in \mathbb{R}^{(n_x - 1)n_y (n_z - 1) \times n_x n_y (n_z - 1)}$$

όπου $S_{10} \in \mathbb{R}^{(n_x - 1)n_y (n_z - 1) \times (n_x - 1)n_y (n_z - 1)}$, $B_{10} \in \mathbb{R}^{(n_x - 1)n_y (n_z - 1) \times n_x n_y (n_z - 1)}$, $\mathbf{E}_x^{yx} \in \mathbb{C}^{(n_x - 1)n_y (n_z - 1) \times 1}$, $\mathbf{E}_x^y \in \mathbb{C}^{n_x n_y (n_z - 1) \times 1}$.

\mathbf{E}_y^{xx}

Για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_y^{xx} , αρχικά προσεγγίζεται ο όρος \mathbf{E}_y^x με την εφαρμογή του σχήματος 3.8. Οι εξισώσεις που προκύπτουν είναι αυτές που παρουσιάστηκαν για την προσέγγιση αυτής της παραγώγου στον πρώτο όρο της εξίσωσης 3.13. Κατά συνέπεια,

$$S_{11} \mathbf{E}_y^x = \frac{1}{h_z} B_{11} \mathbf{E}_y \quad (3.27)$$

όπου

$$S_{11} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{11}^*, S_{11}^*, S_{11}^*, \dots}_{n_y (n_z - 1)}), B_{11} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{11}^*, B_{11}^*, B_{11}^*, \dots}_{n_y (n_z - 1)})$$

με

$$S_{11}^* = \begin{pmatrix} 24 & 24 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24 & 24 \end{pmatrix}, B_{11}^* = \begin{pmatrix} -10 & 36 & -6 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -24 & 24 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -24 & 24 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -24 & 24 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -24 & 24 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 6 & -36 & 10 \end{pmatrix}$$

με $S_{11} \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z - 1) \times n_x n_y (n_z - 1)}$, $B_{11} \in \mathbb{R}^{n_x n_y (n_z - 1) \times (n_x - 1)n_y (n_z - 1)}$, $S_{11}^* \in \mathbb{R}^{(n_x - 1) \times (n_x - 1)}$, $B_{11}^* \in \mathbb{R}^{(n_x - 1) \times n_x}$, $\mathbf{E}_y^x \in \mathbb{C}^{n_x n_y (n_z - 1) \times 1}$, $\mathbf{E}_y \in \mathbb{C}^{n_x (n_y - 1) (n_z - 1) \times 1}$.

Ακολουθώντας, για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{xx} στις θέσεις όπου ορίζεται η συνιστώσα \mathbf{E}_y με εφαρμογή του σχήματος 3.4

$$S_{12}\mathbf{E}_y^{xx} = \frac{24}{h_x}B_{12}\mathbf{E}_y^x \quad (3.28)$$

όπου

$$S_{12} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{12}^*, S_{12}^*, S_{12}^*, \dots}_{n_y(n_z-1)}), B_{12} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{12}^*, B_{12}^*, B_{12}^*, \dots}_{n_y(n_z-1)})$$

με $S_{12} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$, $B_{12} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times n_x n_y(n_z-1)}$ και

$$S_{12}^* = \begin{pmatrix} 22 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 22 \end{pmatrix}, B_{12}^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

με $S_{12}^* \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times (n_x-1)}$, $B_{12}^* \in \mathbb{R}^{n_x \times (n_x-1)}$, $\mathbf{E}_x^{yx} \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times 1}$, $\mathbf{E}_x^y \in \mathbb{C}^{n_x n_y(n_z-1) \times 1}$.

\mathbf{E}_y^{zz}

Για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_y^{zz} , αρχικά προσεγγίζεται η παράγωγος \mathbf{E}_y^z με την εφαρμογή του σχήματος 3.4. Οι εξισώσεις που προκύπτουν είναι:

- Οι πρώτοι κόμβοι για $i = 1, \dots, (n_x - 1)n_y$ δηλαδή το πρώτο επίπεδο ως προς τη z -κατεύθυνση

$$24E_{y_i}^z + 24E_{y_{i+k}}^z = \frac{1}{h_z}(-10E_{y_i} + 36E_{y_{i+k}} - 6E_{y_{i+2k}} + E_{y_{i+3k}})$$

- οι επόμενοι κόμβοι από $(n_x - 1)n_y + 1$ μέχρι $(n_x - 1)n_y(n_z - 2)$

$$E_{y_{i-k}}^z + 22E_{y_i}^z + E_{y_{i+k}}^x = \frac{1}{h_z}(-24E_{y_{i-k}} + 24E_{y_{i+k}})$$

- και οι τελευταίοι, από $(n_x - 1)n_y(n_z - 1) + 1$ μέχρι $(n_x - 1)n_y n_z$, με την εξίσωση

$$24E_{y_i}^z + 24E_{y_{i-k}}^z = \frac{1}{h_z}(-E_{y_{i-3k}} + 6E_{y_{i-2k}} - 36E_{y_{i-k}} + 10E_{y_i})$$

με $k = n_x(n_y - 1)$. Με τη μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_{13}\mathbf{E}_y^z = \frac{1}{h_z}B_{13}\mathbf{E}_y \quad (3.29)$$

όπου

$$S_{13} = \begin{pmatrix} 24I & 24I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & O & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

και

$$B_{13} = \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & O & \dots & O \\ -24I & 24I & O & O & O & \dots & O \\ O & -24I & 24I & O & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & O & -24I & 24I & O \\ O & \dots & O & O & O & -24I & 24I \\ O & \dots & O & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y \times (n_x-1)n_y}$, $S_{13} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y n_z \times (n_x-1)n_y n_z}$, $B_{13} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y n_z \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$, $\mathbf{E}_y^z \in \mathbb{C}^{n_x n_y(n_z-1) \times 1}$, $\mathbf{E}_y \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times 1}$.

Ακολουθώντας, για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_y^{zz} στις θέσεις όπου ορίζεται η συνιστώσα \mathbf{E}_y με εφαρμογή του σχήματος 3.8, οι εξισώσεις που θα χρησιμοποιηθούν είναι:

- Οι πρώτοι κόμβοι για $i = 1, \dots, (n_x - 1)n_y$ δηλαδή το πρώτο επίπεδο ως προς τη z -κατεύθυνση

$$22E_y^z z_i + E_y^z z_{i+k} = \frac{1}{h_z}(-E_{y_i}^z + E_{y_{i+1}}^z)$$

- οι επόμενοι κόμβοι από $(n_x - 1)n_y + 1$ μέχρι $(n_x - 1)n_y(n_z - 2)$

$$E_y^z z_{i-k} + 22E_y^z z_i + E_{y_{i+k}}^z = \frac{1}{h_z}(-E_{y_{i-k}}^z + E_{y_i}^z)$$

- και οι τελευταίοι, από $(n_x - 1)n_y(n_z - 2) + 1$ μέχρι $(n_x - 1)n_y(n_z - 1)$, με την εξίσωση

$$E_y^z z_i + 22E_y^z z_{i-k} = \frac{1}{h_z}(-E_{y_{i-k}}^z + E_{y_i}^z)$$

με $k = (n_x - 1)n_y$. Με τη μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_{14}\mathbf{E}_y^{zz} = \frac{24}{h_z}B_{14}\mathbf{E}_y^z \quad (3.30)$$

όπου

$$S_{14} = \begin{pmatrix} 22I & I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & I & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & I & 22I \end{pmatrix}, B_{14} = \begin{pmatrix} -I & I & O & \dots & O & O & O \\ O & -I & I & \dots & O & O & O \\ O & O & -I & \dots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & \dots & -I & I & O & O \\ O & O & \dots & O & -I & I & O \\ O & O & \dots & O & O & -I & I \end{pmatrix}$$

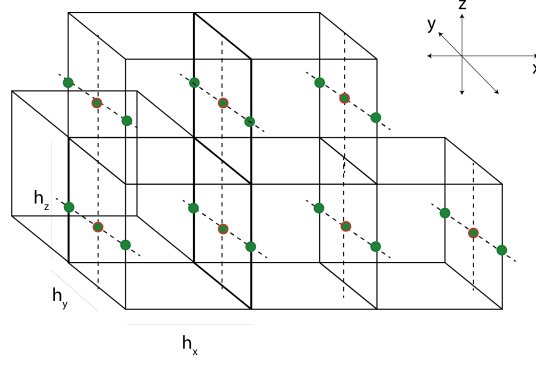
και $I \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y \times (n_x-1)n_y}$, $S_{14} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$, $B_{14} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times (n_x-1)n_y n_z}$, $\mathbf{E}_y^{zz} \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times 1}$, $\mathbf{E}_y^z \in \mathbb{C}^{n_x n_y(n_z-1) \times 1}$.

\mathbf{E}_z^{yz}

Για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_z^{yz} , αρχικά προσεγγίζεται ο όρος \mathbf{E}_z^y με την εφαρμογή του σχήματος 3.8 (σχήμα 3.22). Οι εξισώσεις των κόμβων έχουν ως εξής για κάθε επίπεδο στη z -κατεύθυνση:

- Οι πρώτοι $n_x - 1$ κόμβοι, δηλαδή για $i = 1, \dots, n_x - 1$

$$24E_{z_i}^y + 24E_{z_{i+(n_x-1)}}^y = \frac{1}{h_y}(-10E_{z_i}^y + 36E_{z_{i+(n_x-1)}}^y - 6E_{z_{i+2(n_x-1)}}^y + E_{z_{i+3(n_x-1)}}^y)$$



Σχήμα 3.22: Εφαρμογή του αριθμητικού σχήματος για την προσέγγιση της \mathbf{E}_z^y

- για τους επόμενους, από n_x μέχρι $(n_x - 1)(n_y - 1) - 2(n_x - 1)$

$$E_{z_{i-(n_x-1)}}^y + 22E_{z_i}^x + E_{z_{i+(n_x-1)}}^x = \frac{1}{h_y}(-24E_{z_{i-n_x}} + 24E_{z_i})$$

- και για τους τελευταίους, από $(n_x - 1)(n_y - 2) + 1$ μέχρι $(n_x - 1)(n_y - 1)$, με την εξίσωση

$$24E_{z_{i-(n_x-1)}}^y + 24E_{z_i}^y = \frac{1}{h_y}(-E_{z_{i-3(n_x-1)}} + 6E_{z_{i-2(n_x-1)}} - 36E_{z_{i-(n_x-1)}} + 10E_{z_i})$$

Με τη μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_{15}\mathbf{E}_z^y = \frac{1}{h_y}B_{15}\mathbf{E}_z \quad (3.31)$$

όπου

$$S_{15} = \text{diag}(\underbrace{S_{15}^*, S_{15}^*, S_{15}^*, \dots}_{n_z}), B_{15} = \text{diag}(\underbrace{B_{15}^*, B_{15}^*, B_{15}^*, \dots}_{n_z})$$

με

$$S_{15} = \begin{pmatrix} 24I & 24I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & O & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & 24I & 24I \end{pmatrix},$$

και

$$B_{15} = \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & O & \dots & O \\ -24I & 24I & O & O & O & \dots & O \\ O & -24I & 24I & O & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & O & -24I & 24I & O \\ O & \dots & O & O & O & -24I & 24I \\ O & \dots & O & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{n_x-1 \times n_x-1}$, $S_{15} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y n_z \times (n_x-1)n_y n_z}$, $B_{15} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y n_z \times (n_x-1)(n_y-1)n_z}$, $\mathbf{E}_z^y \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_z \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times 1}$.

Στη συνέχεια, με εφαρμογή του σχήματος 3.4 για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_z^{yz} στις θέσεις όπου ορίζεται η συνιστώσα \mathbf{E}_z , προκύπτει η ισότητα

$$S_{16}\mathbf{E}_z^{yz} = \frac{24}{h_z}B_{16}\mathbf{E}_z^y \quad (3.32)$$

με

$$S_{16} = \begin{pmatrix} 22I & I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & I & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & I & 22I \end{pmatrix}, B_{16} = \begin{pmatrix} -I & I & O & \dots & O & O & O \\ O & -I & I & \dots & O & O & O \\ O & O & -I & \dots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & \dots & -I & I & O & O \\ O & O & \dots & O & -I & I & O \\ O & O & \dots & O & O & -I & I \end{pmatrix}$$

και $I \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y \times (n_x-1)n_y}$, $S_{16} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$, $B_{16} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times (n_x-1)n_y n_z}$, $\mathbf{E}_y^{zz} \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times 1}$, $\mathbf{E}_y^z \in \mathbb{C}^{n_x n_y(n_z-1) \times 1}$. Οι εξισώσεις είναι ίδιες με την περίπτωση προσέγγισης του όρου \mathbf{E}_y^{zz} (συνεπώς $S_{14} \equiv S_{16}$ και $B_{14} \equiv B_{16}$).

Εξίσωση III

Η τρίτη εξίσωση (2.40) έχει τη μορφή

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) + e_3 E_z = 0$$

όπως έχει ήδη τεθεί παραπάνω, ή ισοδύναμα,

$$\frac{\partial^2 E_x}{\partial x \partial z} - \frac{\partial^2 E_z}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 E_z}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 E_y}{\partial y \partial z} + i\omega\mu_0\sigma E_z = 0 \quad (3.33)$$

Με δεδομένο ότι το σ της 3.33, στο διακριτό χώρο, θα αναφέρεται στις τιμές της αγωγιμότητας -και κατ' επέκτασιν στην επιρροή του μέσου διάδοσης- στις θέσεις της συνιστώσας E_z , θεωρείται για την παραπάνω εξίσωση ότι

$$\sigma = \begin{cases} \sigma_{\text{air}}, \text{ για κόμβους της } E_z \text{ πάνω από τη διεπαφή του εδάφους} \\ \sigma_{\text{underground}}, \text{ για κόμβους της } E_z \text{ κάτω από τη διεπαφή του εδάφους} \end{cases} = \sigma_z \quad (3.34)$$

Η εξίσωση 3.33 μπορεί εν τέλει να γραφεί

$$\mathbf{E}_x^{xz} - \mathbf{E}_z^{xx} - \mathbf{E}_z^{yy} + \mathbf{E}_y^{zy} + \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{E}_z = 0 \quad (3.35)$$

όπου $\mathbf{e}_3 = i\omega\mu_0\sigma_z$.

Υπενθυμίζεται ότι, όπως και στις 3.12, 3.23, αντίστοιχα και στην 3.34, το $\sigma_{\text{underground}}$ μπορεί να αναφέρεται σε διαφορετικές τιμές αγωγιμότητας σε περιοχές του υπεδάφους.

Όπως έγινε και για τις 3.13, 3.24 του αρχικού συστήματος, ακολουθεί η προσέγγιση των όρων της εξίσωσης 3.35 με εφαρμογή των αριθμητικών σχημάτων.

\mathbf{E}_z^{xx}

Αρχικά προσεγγίζεται ο όρος \mathbf{E}_z^x με την εφαρμογή του σχήματος 3.8, διαδικασία που έχει ήδη πραγματοποιηθεί για τον όρο \mathbf{E}_z^{xz} της εξίσωσης II. Κατά συνέπεια,

$$S_{17}\mathbf{E}_z^x = \frac{1}{h_x}B_{11}\mathbf{E}_z \quad (3.36)$$

όπου

$$S_{17} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{17}^*, S_{17}^*, S_{17}^*, \dots}_{(n_y-1)n_z}), B_{17} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{17}^*, B_{17}^*, B_{17}^*, \dots}_{(n_y-1)n_z})$$

με

$$S_{17}^* = \begin{pmatrix} 24 & 24 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24 & 24 \end{pmatrix}, B_{17}^* = \begin{pmatrix} -10 & 36 & -6 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -24 & 24 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -24 & 24 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -24 & 24 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -24 & 24 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 6 & -36 & 10 \end{pmatrix}$$

με $S_{17}^* \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, $B_{17}^* \in \mathbb{R}^{n_x \times (n_x-1)}$, $\mathbf{E}_z^x \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_z \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times 1}$.

Ακολούθως, για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_z^{xx} στις θέσεις όπου ορίζεται η συνιστώσα \mathbf{E}_z με εφαρμογή του σχήματος 3.4, οι αντίστοιχες εξισώσεις με αυτές για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_x^{yx} της εξίσωσης II, οπότε και

$$S_{18}\mathbf{E}_z^{xx} = \frac{24}{h_x}B_{18}\mathbf{E}_z^x \quad (3.37)$$

όπου

$$S_{18} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{18}^*, S_{18}^*, S_{18}^*, \dots}_{(n_y-1)n_z}), B_{18} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{18}^*, B_{18}^*, B_{18}^*, \dots}_{(n_y-1)n_z, \dots})$$

με

$$S_{18}^* = \begin{pmatrix} 22 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 22 \end{pmatrix}, B_{18}^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

και $S_{18}^* \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times (n_x-1)}$, $B_{18}^* \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times n_x}$, $\mathbf{E}_z^{xx} \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_z^x \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}$.

\mathbf{E}_z^{yy}

Αρχικά προσεγγίζεται ο όρος \mathbf{E}_z^y με τις εξισώσεις που προέκυψαν και κατά την προσέγγιση του \mathbf{E}_z^{yz} της εξίσωσης II. Με τη μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_{19}\mathbf{E}_z^y = \frac{1}{h_y}B_{19}\mathbf{E}_z \quad (3.38)$$

όπου

$$S_{19} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{19}^*, S_{19}^*, S_{19}^*, \dots}_{n_z}), B_{19} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{19}^*, B_{19}^*, B_{19}^*, \dots}_{n_z})$$

με

$$S_{19}^* = \begin{pmatrix} 24I & 24I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & I & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & 0 & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

και

$$B_{19}^* = \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & O & \dots & O \\ -24I & 24I & O & O & O & \dots & O \\ O & -24I & 24I & O & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & O & -24I & 24I & O \\ O & \dots & O & O & O & -24I & 24I \\ O & \dots & O & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times (n_x-1)}$, $S_{19}^* \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, $B_{19}^* \in \mathbb{R}^{n_x \times (n_x-1)}$, $\mathbf{E}_z^y \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_z \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times 1}$.

Ακολουθώντας, για την προσέγγιση της \mathbf{E}_z^{yy} στις θέσεις όπου ορίζεται η συνιστώσα \mathbf{E}_z , με εφαρμογή του σχήματος 3.4 και χρήση των τιμών \mathbf{E}_y^y προκύπτουν οι εξισώσεις

Οι εξισώσεις των κόμβων στο πρώτο επίπεδο ως προς z γράφονται:

- για τους πρώτους $n_x - 1$ κόμβους, δηλαδή για $i = 1, \dots, n_x - 1$

$$22E_{z_i}^{yy} + E_{z_{i+(n_x-1)}}^{yy} = \frac{24}{h_y}(E_{z_{i+(n_x-1)}}^y - E_{z_i}^y)$$

- για τους κόμβους με αρίθμηση από n_x μέχρι $(n_x - 1)n_y - 2(n_x - 1)$

$$E_{z_{i-(n_x-1)}}^{yy} + 22E_{z_i}^{yy} + E_{z_{i+(n_x-1)}}^{yy} = \frac{24}{h_y}(E_{z_{i+(n_x-1)}}^y - E_{z_i}^y)$$

- και για κόμβους από $(n_x - 1)n_y - 2(n_x - 1) + 1$ μέχρι $(n_x - 1)(n_y - 1)$

$$E_{z_{i-(n_x-1)}}^{yy} + 22E_{z_i}^{yy} = \frac{24}{h_y}(E_{z_{i+(n_x-1)}}^y - E_{z_i}^y)$$

Με τη μορφή γραμμικού συστήματος

$$S_{20}\mathbf{E}_z^{yy} = \frac{24}{h_y}B_{20}\mathbf{E}_z^y \quad (3.39)$$

όπου

$$S_{20} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{20}^*, S_{20}^*, S_{20}^*, \dots}_{n_z}), B_{20} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{20}^*, B_{20}^*, B_{20}^*, \dots}_{n_z})$$

με

$$S_{20}^* = \begin{pmatrix} 22I & I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & 0 & \dots & O & O \\ O & I & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & 0 & I & 22I & I & O \\ O & 0 & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & I & 22I \end{pmatrix}, B_{20}^* = \begin{pmatrix} -I & I & O & \dots & O & O & O \\ O & -I & I & \dots & O & O & O \\ O & O & -I & \dots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & \dots & -I & I & O & O \\ O & O & \dots & O & -I & I & O \\ O & O & \dots & O & O & -I & I \end{pmatrix}$$

και $I \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times (n_x-1)}$, $S_{20}^* \in \mathbb{R}^{(n_y-1)(n_x-1) \times (n_y-1)(n_x-1)}$, $B_{20}^* \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times n_x}$, $\mathbf{E}_z^{xx} \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_z^x \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}$.

\mathbf{E}_x^{zx}

Για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_x^{zx} , αρχικά προσεγγίζεται ο όρος \mathbf{E}_x^z με την εφαρμογή του σχήματος 3.8

$$S_{21}\mathbf{E}_x^z = \frac{1}{h_z}B_{21}\mathbf{E}_x \quad (3.40)$$

όπου

$$S_{21} = \begin{pmatrix} 24I & 24I & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ I & 22I & I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & 22I & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & I & 22I & I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & I & 22I & I \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

και

$$B_{21} = \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & 0 & \dots & 0 \\ -24I & 24I & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -24I & 24I & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -24I & 24I & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & -24I & 24I \\ 0 & \dots & 0 & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1) \times n_x(n_y-1)}$, $S_5 \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)n_z \times n_x(n_y-1)n_z}$, $B_5^* \in \mathbb{R}^{n_z \times n_z}$, $\mathbf{E}_x^z \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_x \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times 1}$.

Ακολούθως, για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_x^{zx} στις θέσεις όπου ορίζεται η συνιστώσα \mathbf{E}_x , η ισότητα

$$S_{22}\mathbf{E}_x^{zx} = \frac{24}{h_x}B_{22}\mathbf{E}_x^z \quad (3.41)$$

όπου

$$S_{22} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{22}^*, S_{22}^*, S_{22}^*, \dots}_{(n_y-1)n_z}), B_{22} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{22}^*, B_{22}^*, B_{22}^*, \dots}_{(n_y-1)n_z})$$

με

$$S_{22}^* = \begin{pmatrix} 22 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 22 \end{pmatrix}, B_{22}^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

και $S_{22}^* \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times (n_x-1)}$, $B_{22}^* \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times n_x}$, $\mathbf{E}_x^{zx} \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_x^z \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)n_z \times 1}$.

\mathbf{E}_y^{zy}

Για την προσέγγιση του όρου \mathbf{E}_y^{zy} , αρχικά προσεγγίζεται ο όρος \mathbf{E}_y^z με την εφαρμογή του σχήματος

$$S_{23}\mathbf{E}_y^z = \frac{1}{h_z}B_{23}\mathbf{E}_y \quad (3.42)$$

όπου

$$S_{23} = \begin{pmatrix} 24I & 24I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & O & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

και

$$B_{23} = \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & O & \dots & O \\ -24I & 24I & O & O & O & \dots & O \\ O & -24I & 24I & O & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & O & -24I & 24I & O \\ O & \dots & O & O & O & -24I & 24I \\ O & \dots & O & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}$$

με $I \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y \times (n_x-1)n_y}$, $S_{23} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y n_z \times (n_x-1)n_y n_z}$, $B_{13} \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y n_z \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$, $\mathbf{E}_y^z \in \mathbb{C}^{n_x n_y(n_z-1) \times 1}$, $\mathbf{E}_y \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times 1}$.

Ακολούθως, για την προσέγγιση της \mathbf{E}_y^{zy} στις θέσεις όπου ορίζεται η συνιστώσα \mathbf{E}_y ,

$$S_{24}\mathbf{E}_y^{zy} = \frac{24}{h_y}B_{24}\mathbf{E}_y^z \quad (3.43)$$

όπου

$$S_{24} = \mathbf{diag}(\underbrace{S_{24}^*, S_{24}^*, S_{24}^*, \dots}_{n_z}), B_{24} = \mathbf{diag}(\underbrace{B_{24}^*, B_{24}^*, B_{24}^*, \dots}_{n_z})$$

με

$$S_{24}^* = \begin{pmatrix} 22I & I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & 0 & \dots & O & O \\ O & I & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & 0 & I & 22I & I & O \\ O & 0 & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & I & 22I \end{pmatrix}, B_{24}^* = \begin{pmatrix} -I & I & O & \dots & O & O & O \\ O & -I & I & \dots & O & O & O \\ O & O & -I & \dots & O & O & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & O & \dots & -I & I & O & O \\ O & O & \dots & O & -I & I & O \\ O & O & \dots & O & O & -I & I \end{pmatrix}$$

και $I \in \mathbb{R}^{(n_x-1) \times (n_x-1)}$, $S_{24}^* \in \mathbb{R}^{(n_x-1)(n_y-1) \times (n_x-1)(n_y-1)}$, $B_{24}^* \in \mathbb{R}^{(n_x-1)(n_y-1) \times n_x n_y}$, $\mathbf{E}_y^{zy} \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times 1}$, $\mathbf{E}_y^z \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y n_z \times 1}$.

Οι πίνακες S_i^* , $i = 1, \dots, 24$ που προκύπτουν από την εφαρμογή του αριθμητικών σχημάτων μπορούν συγκεντρωτικά να παρασταθούν ως

$$S_* = \begin{pmatrix} 22 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 22 \end{pmatrix}, S_*^I = \begin{pmatrix} 22I & I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & I & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & I & 22I \end{pmatrix},$$

$$S_{**} = \begin{pmatrix} 24 & 24 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24 & 24 \end{pmatrix} S_{**}^I = \begin{pmatrix} 24I & 24I & O & \dots & \dots & O & O \\ I & 22I & I & O & \dots & O & O \\ O & I & 22I & I & O & \dots & O \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & \dots & O & I & 22I & I & O \\ O & O & \dots & O & I & 22I & I \\ O & O & \dots & \dots & O & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

με τη διάσταση του πίνακα να διαφοροποιείται σε κάθε περίπτωση ανάλογα την κατεύθυνση εφαρμογής του κάθε σχήματος.

Με βάση τη δομή των πινάκων αυτών μπορούν να γίνουν οι εξής παρατηρήσεις

- Οι τριδιαγώνιοι πίνακες της μορφής $S_* \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι συμμετρικοί και αυστηρά διαγωνίως ενισχυμένοι καθότι $|S_{*ii}| > \sum_{j \neq i} |S_{*ij}|, i = 1, \dots, n$, συνεπώς ομαλοί ([47]).
- Οι πίνακες της μορφής $S_*^I \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι συμμετρικοί block τριδιαγώνιοι πίνακες των οποίων τα διαγώνια block είναι διαγώνιοι πίνακες με μη μηδενικά διαγώνια στοιχεία ενώ επιπλέον παρατηρείται για κάθε block ότι ισχύει

$$(\|S_{*,j}^I\|)^{-1} \geq \sum_{k \neq j}^n \|S_{*,k}^I\|, 1 \leq j \leq n$$

όπου

$$\|S_{*,j}^I\| = \sup_{x \in \Omega, x \neq 0} \frac{\|S_{*,j}^I x\|}{\|x\|}$$

συνεπώς οι S_*^I είναι block αυστηρά διαγωνίως ενισχυμένοι [49], οπότε είναι ομαλοί πίνακες.

- Για τους τριδιαγώνιους πίνακες της μορφής $S_{**} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, προκύπτει άμεσα ότι για $n \in \mathbb{N}$, η $\det(S_{**}) \neq 0$ με υπολογισμό μέσω της αναδρομικής ακολουθίας τριών όρων. Υπενθυμίζεται ότι για κάθε τριδιαγώνιο πίνακα

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_3 & b_3 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & c_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & c_{n-1} & a_n \end{pmatrix}, S_{**} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

η ακολουθία (f_i) ικανοποιεί τη σχέση $f_n = a_n f_{n-1} - c_{n-1} b_{n-1} a_{n-2}$ όπου

$$f_n = \begin{vmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & c_2 & a_3 & b_3 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & c_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & c_{n-1} & a_n \end{vmatrix}, S_{**} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

και $f_0 = 1, f_{-1} = 0$, όπως αποδεικνύεται στην [11].

- Αντίστοιχη παρατήρηση για την ορίζουσα (και κατά συνέπεια την ομαλότητα) μπορεί να γίνει και για τους block πίνακες S_{**}^I , όπως αποδεικνύεται στην [11]. Με χρήση αντίστοιχης αναδρομικής σχέσης υπολογισμού της $\det(S_{**}^I)$ προκύπτει ότι είναι $\neq 0$ για $n \in \mathbb{N}$.

Η ομαλότητα σε κάθε περίπτωση επιβεβαιώνει την υπόθεση ότι, κάθε ένας από τους πίνακες $S_i, i = 1, \dots, 24$ έχει αντίστροφο, καθώς, κάθε ένας εξ' αυτών είναι είτε διαγώνιος με διαγώνια block έναν πίνακα με δομή S_*^I, S_{**}^I, S_* ή S_{**} είτε έχει ο ίδιος αντίστοιχη δομή. Οπότε και από τις σχέσεις που προέκυψαν παραπάνω και εξισώνουν προσεγγίσεις τιμών των παραγώγων των αρχικών εξισώσεων με τιμές των $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y, \mathbf{E}_z$ μπορούν να προκύψουν νέες ισότητες, συγκεκριμένα:

- από τις 3.14 και 3.15

$$\mathbf{E}_y^x = \frac{1}{h_x} S_1^{-1} B_1 \mathbf{E}_y, \quad \mathbf{E}_y^{xy} = \frac{24}{h_y} S_2^{-1} B_2 \mathbf{E}_y^x$$

προκύπτει ότι

$$\mathbf{E}_y^{xy} = \frac{24}{h_x h_y} S_2^{-1} B_2 S_1^{-1} B_1 \mathbf{E}_y \quad (3.44)$$

- από τις 3.16 και 3.17

$$\mathbf{E}_x^y = \frac{1}{h_y} S_3^{-1} B_3 \mathbf{E}_x, \quad \mathbf{E}_x^{yy} = \frac{24}{h_y} S_4^{-1} B_4 \mathbf{E}_x^y$$

προκύπτει ότι

$$\mathbf{E}_x^{yy} = \frac{24}{h_y^2} S_4^{-1} B_4 S_3^{-1} B_3 \mathbf{E}_x \quad (3.45)$$

- από τις 3.18 και 3.19

$$\mathbf{E}_x^z = \frac{1}{h_z} S_5^{-1} B_5 \mathbf{E}_x, \quad \mathbf{E}_x^{zz} = \frac{24}{h_z} S_6^{-1} B_6 \mathbf{E}_x^z$$

προκύπτει ότι

$$\mathbf{E}_x^{zz} = \frac{24}{h_z^2} S_6^{-1} B_6 S_5^{-1} B_5 \mathbf{E}_x \quad (3.46)$$

- από τις 3.20 και 3.21 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_z^x = \frac{1}{h_x} S_7^{-1} B_7 \mathbf{E}_z, \quad \mathbf{E}_z^{xz} = \frac{24}{h_z} S_8^{-1} B_8 \mathbf{E}_z^x$$

οπότε

$$\mathbf{E}_z^{xz} = \frac{24}{h_x h_z} S_8^{-1} B_8 S_7^{-1} B_7 \mathbf{E}_z \quad (3.47)$$

- από τις 3.25 και 3.26 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_x^y = \frac{1}{h_y} S_9^{-1} B_9 \mathbf{E}_x, \quad \mathbf{E}_x^{yx} = \frac{24}{h_x} S_{10}^{-1} B_{10} \mathbf{E}_x^y$$

οπότε

$$\mathbf{E}_x^{yx} = \frac{24}{h_x h_y} S_{10}^{-1} B_{10} S_9^{-1} B_9 \mathbf{E}_x \quad (3.48)$$

- από τις 3.27 και 3.28 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_y^x = \frac{1}{h_x} S_{11}^{-1} B_{11} \mathbf{E}_y, \quad \mathbf{E}_y^{xx} = \frac{24}{h_x} S_{12}^{-1} B_{12} \mathbf{E}_y^x$$

οπότε

$$\mathbf{E}_y^{xx} = \frac{24}{h_x^2} S_{12}^{-1} B_{12} S_{11}^{-1} B_{11} \mathbf{E}_y \quad (3.49)$$

- από τις 3.29 και 3.30 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_y^z = \frac{1}{h_z} S_{13}^{-1} B_{13} \mathbf{E}_y, \quad \mathbf{E}_y^{zz} = \frac{24}{h_z} S_{14}^{-1} B_{14} \mathbf{E}_y^z$$

οπότε

$$\mathbf{E}_y^{zz} = \frac{24}{h_z^2} S_{14}^{-1} B_{14} S_{13}^{-1} B_{13} \mathbf{E}_y \quad (3.50)$$

- από τις 3.31 και 3.32 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_z^y = \frac{1}{h_y} S_{15}^{-1} B_{15} \mathbf{E}_z, \quad \mathbf{E}_z^{yz} = \frac{24}{h_z} S_{16}^{-1} B_{16} \mathbf{E}_z^y$$

οπότε

$$\mathbf{E}_z^{yz} = \frac{24}{h_y h_z} S_{16}^{-1} B_{16} S_{15}^{-1} B_{15} \mathbf{E}_z \quad (3.51)$$

- από τις 3.36 και 3.37 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_z^x = \frac{1}{h_x} S_{17}^{-1} B_{17} \mathbf{E}_z, \quad \mathbf{E}_z^{xx} = \frac{24}{h_x} S_{18}^{-1} B_{18} \mathbf{E}_z^x$$

οπότε

$$\mathbf{E}_z^{xx} = \frac{24}{h_x^2} S_{18}^{-1} B_{18} S_{17}^{-1} B_{17} \mathbf{E}_z \quad (3.52)$$

- από τις 3.38 και 3.39 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_z^y = \frac{1}{h_y} S_{19}^{-1} B_{19} \mathbf{E}_z, \quad \mathbf{E}_z^{yy} = \frac{24}{h_y} S_{20}^{-1} B_{20} \mathbf{E}_z^y$$

οπότε

$$\mathbf{E}_z^{yy} = \frac{24}{h_y^2} S_{20}^{-1} B_{20} S_{19}^{-1} B_{19} \mathbf{E}_z \quad (3.53)$$

- από τις 3.40 και 3.41 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_x^z = \frac{1}{h_x} S_{21}^{-1} B_{21} \mathbf{E}_x, \quad \mathbf{E}_x^{zx} = \frac{24}{h_z} S_{22}^{-1} B_{22} \mathbf{E}_x^z$$

οπότε

$$\mathbf{E}_x^{zx} = \frac{24}{h_x h_z} S_{22}^{-1} B_{22} S_{21}^{-1} B_{21} \mathbf{E}_x \quad (3.54)$$

- από τις 3.42 και 3.43 αντίστοιχα

$$\mathbf{E}_y^z = \frac{1}{h_z} S_{23}^{-1} B_{23} \mathbf{E}_y, \quad \mathbf{E}_y^{zy} = \frac{24}{h_y} S_{24}^{-1} B_{24} \mathbf{E}_y^z$$

οπότε

$$\mathbf{E}_y^{zy} = \frac{24}{h_z h_y} S_{24}^{-1} B_{24} S_{23}^{-1} B_{23} \mathbf{E}_y \quad (3.55)$$

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση 3.13 τις 3.44, 3.45, 3.46 και 3.47 προκύπτει η ισότητα

$$\frac{24}{h_x h_y} S_2^{-1} B_2 S_1^{-1} B_1 \mathbf{E}_y - \frac{24}{h_y^2} S_4^{-1} B_4 S_4^{-3} B_3 \mathbf{E}_x -$$

$$\frac{24}{h_z^2} S_6^{-1} B_6 S_5^{-1} B_5 \mathbf{E}_x + \frac{24}{h_x h_z} S_8^{-1} B_8 S_7^{-1} B_7 \mathbf{E}_z + \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{E}_x = \mathbf{F}_1$$

ή, ισοδύναμα,

$$(\mathbf{e}_1 I - \frac{24}{h_y^2} S_4^{-1} B_4 S_4^{-1} B_3 - \frac{24}{h_z^2} S_6^{-1} B_6 S_5^{-1} B_5) \mathbf{E}_x +$$

$$\frac{24}{h_x h_y} S_2^{-1} B_2 S_1^{-1} B_1 \mathbf{E}_y + \frac{24}{h_x h_z} S_8^{-1} B_8 S_7^{-1} B_7 \mathbf{E}_z = \mathbf{F}_1$$

Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφτεί

$$A \mathbf{E}_x + B \mathbf{E}_y + C \mathbf{E}_z = \mathbf{F}_1 \quad (3.56)$$

όπου

$$A = \mathbf{e}_1 I - \frac{24}{h_y^2} S_4^{-1} B_4 S_3^{-1} B_3 - \frac{24}{h_z^2} S_6^{-1} B_6 S_5^{-1} B_5, \quad (3.57)$$

$$A \in \mathbb{C}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times n_x(n_y-1)(n_z-1)}$$

$$B = \frac{24}{h_x h_y} S_2^{-1} B_2 S_1^{-1} B_1, \quad (3.58)$$

$$B \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$$

$$C = \frac{24}{h_x h_z} S_8^{-1} B_8 S_7^{-1} B_7, \quad (3.59)$$

$$C \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times (n_x-1)(n_y-1)n_z}$$

$$I \in \mathbb{R}^{n_x(n_y-1)(n_z-1) \times n_x(n_y-1)(n_z-1)}, \mathbf{e}_1 \in \mathbb{C}^{1 \times n_x(n_y-1)(n_z-1)}$$

Αντικαθιστώντας τις 3.48, 3.49, 3.50 και 3.51 στην εξίσωση 3.24 προκύπτει η ισότητα

$$\frac{24}{h_y h_z} S_{16}^{-1} B_{16} S_{15}^{-1} B_{15} \mathbf{E}_z - \frac{24}{h_z^2} S_{14}^{-1} B_{14} S_{13}^{-1} B_{13} \mathbf{E}_y -$$

$$\frac{24}{h_x^2} S_{12}^{-1} B_{12} S_{11}^{-1} B_{11} \mathbf{E}_y + \frac{24}{h_x h_y} S_{10}^{-1} B_{10} S_9^{-1} B_9 \mathbf{E}_x + \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{E}_y = \mathbf{F}_2$$

ή, ισοδύναμα,

$$\frac{24}{h_x h_y} S_{10}^{-1} B_{10} S_9^{-1} B_9 \mathbf{E}_x + (\mathbf{e}_2 I - \frac{24}{h_x^2} S_{12}^{-1} B_{12} S_{11}^{-1} B_{11} -$$

$$\frac{24}{h_z^2} S_{14}^{-1} B_{14} S_{13}^{-1} B_{13}) \mathbf{E}_y + \frac{24}{h_y h_z} S_{16}^{-1} B_{16} S_{15}^{-1} B_{15} \mathbf{E}_z = \mathbf{F}_2$$

Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφτεί

$$D\mathbf{E}_x + Z\mathbf{E}_y + K\mathbf{E}_z = \mathbf{F}_2 \quad (3.60)$$

όπου

$$D = \frac{24}{h_x h_y} S_{10}^{-1} B_{10} S_9^{-1} B_9, \quad (3.61)$$

$$D \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times n_x(n_y-1)(n_z-1)}$$

$$Z = \mathbf{e}_2 I - \frac{24}{h_x^2} S_{12}^{-1} B_{12} S_{11}^{-1} B_{11} - \frac{24}{h_z^2} S_{14}^{-1} B_{14} S_{13}^{-1} B_{13}, \quad (3.62)$$

$$Z \in \mathbb{C}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$$

$$K = \frac{24}{h_y h_z} S_{16}^{-1} B_{16} S_{15}^{-1} B_{15}, \quad (3.63)$$

$$K \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times (n_x-1)(n_y-1)n_z}$$

$$I \in \mathbb{R}^{(n_x-1)n_y(n_z-1) \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}, \mathbf{e}_2 \in \mathbb{C}^{1 \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$$

Αντικαθιστώντας δε διαδοχικά τους όρους από 3.47 έως και 3.55 στην εξίσωση 3.35, αυτή μπορεί να γραφεί

$$\begin{aligned} & \frac{24}{h_x h_z} S_{22}^{-1} B_{22} S_{21}^{-1} B_{21} \mathbf{E}_x - \frac{24}{h_x^2} S_{18}^{-1} B_{18} S_{17}^{-1} B_{17} \mathbf{E}_z - \\ & \frac{24}{h_y^2} S_{20}^{-1} B_{20} S_{19}^{-1} B_{19} \mathbf{E}_z + \frac{24}{h_z h_y} S_{24}^{-1} B_{24} S_{23}^{-1} B_{23} \mathbf{E}_y + \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{E}_z = 0 \end{aligned}$$

ή, ισοδύναμα,

$$\begin{aligned} & \frac{24}{h_x h_z} S_{22}^{-1} B_{22} S_{21}^{-1} B_{21} \mathbf{E}_x + \frac{24}{h_z h_y} S_{24}^{-1} B_{24} S_{23}^{-1} B_{23} \mathbf{E}_y + \\ & (\mathbf{e}_3 I - \frac{24}{h_x^2} S_{18}^{-1} B_{18} S_{17}^{-1} B_{17} - \frac{24}{h_y^2} S_{20}^{-1} B_{20} S_{19}^{-1} B_{19}) \mathbf{E}_z = \mathbf{0} \end{aligned}$$

Η παραπάνω εξίσωση μπορεί να γραφτεί

$$M\mathbf{E}_x + N\mathbf{E}_y + P\mathbf{E}_z = \mathbf{0} \quad (3.64)$$

όπου

$$M = \frac{24}{h_x h_z} S_{22}^{-1} B_{22} S_{21}^{-1} B_{21}, \quad (3.65)$$

$$M \in \mathbb{R}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times n_x(n_y-1)(n_z-1)}$$

$$N = \frac{24}{h_z h_y} S_{24}^{-1} B_{24} S_{23}^{-1} B_{23}, \quad (3.66)$$

$$N \in \mathbb{R}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times (n_x-1)n_y(n_z-1)}$$

$$P = \mathbf{e}_3 I - \frac{24}{h_x^2} S_{18}^{-1} B_{18} S_{17}^{-1} B_{17} - \frac{24}{h_y^2} S_{20}^{-1} B_{20} S_{19}^{-1} B_{19}, \quad (3.67)$$

$$P \in \mathbb{C}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times (n_x-1)(n_y-1)n_z}$$

$$I \in \mathbb{R}^{(n_x-1)(n_y-1)n_z \times (n_x-1)(n_y-1)n_z}, \mathbf{e}_3 \in \mathbb{C}^{1 \times (n_x-1)(n_y-1)n_z}$$

Συμπερασματικά, το γραμμικό σύστημα των εξισώσεων 3.56, 3.60 και 3.64

$$\left. \begin{aligned} A\mathbf{E}_x + B\mathbf{E}_y + C\mathbf{E}_z &= \mathbf{F}_1 \\ D\mathbf{E}_x + Z\mathbf{E}_y + K\mathbf{E}_z &= \mathbf{F}_2 \\ M\mathbf{E}_x + N\mathbf{E}_y + P\mathbf{E}_z &= \mathbf{0} \end{aligned} \right\} \quad (3.68)$$

μπορεί να γραφτεί στη μορφή

$$U\mathbf{E} = \mathbf{b} \quad (3.69)$$

$$\text{όπου } U = \begin{bmatrix} A & B & C \\ D & Z & K \\ M & N & P \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{\bar{N} \times \bar{N}}, \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_x \\ \mathbf{E}_y \\ \mathbf{E}_z \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{\bar{N} \times 1} \text{ και } \mathbf{b} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_1 \\ \mathbf{F}_2 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{C}^{\bar{N} \times 1}$$

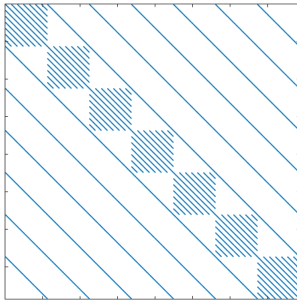
με

$$\mathbf{F}_1 = -i\omega\mu_0(\boldsymbol{\sigma}_x - \boldsymbol{\sigma}_p) \cdot \mathbf{E}_x^p, \mathbf{F}_2 = -i\omega\mu_0(\boldsymbol{\sigma}_y - \boldsymbol{\sigma}_p) \cdot \mathbf{E}_y^p$$

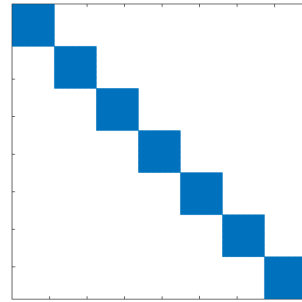
και

$$\bar{N} = \underbrace{n_x(n_y - 1)(n_z - 1)}_{n_1} + \underbrace{(n_x - 1)n_y(n_z - 1)}_{n_2} + \underbrace{(n_x - 1)(n_y - 1)n_z}_{n_3}$$

Η ενδεικτική δομή των block του πίνακα U ακολουθεί στα σχήματα 3.23α'-3.27.

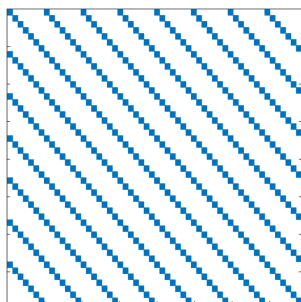
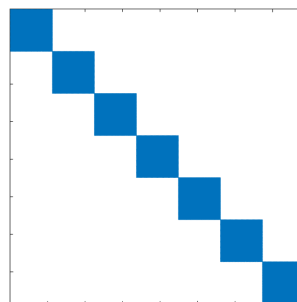
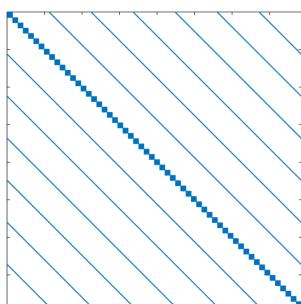
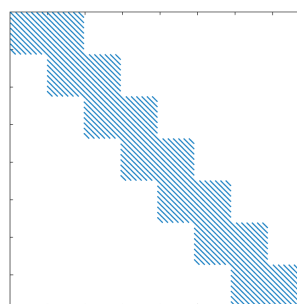
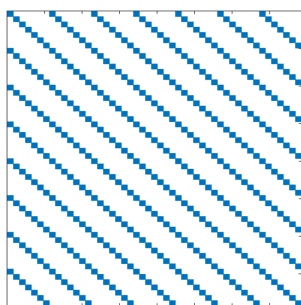
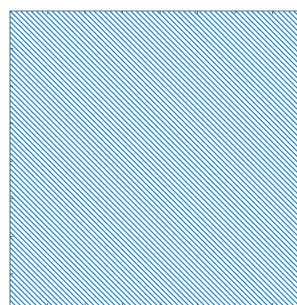


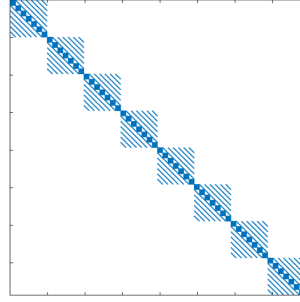
(α') Δομή του block A



(β') Δομή του block B

Σχήμα 3.23: Δομή των block του πίνακα συντελεστών U

(α') Δομή του block C (β') Δομή του block D Σχήμα 3.24: Δομή των block του πίνακα συντελεστών U (α') Δομή του block Z (β') Δομή του block K Σχήμα 3.25: Δομή των block του πίνακα συντελεστών U (α') Δομή του block M (β') Δομή του block N Σχήμα 3.26: Δομή των block του πίνακα συντελεστών U

Σχήμα 3.27: Δομή του block P

3.3 Επίλυση Γραμμικού Συστήματος

Προκειμένου να αιτιολογηθεί η διαδρομή επίλυσης του συστήματος 3.69 θα πραγματοποιηθεί μια αναφορά στα χαρακτηριστικά του. Αρχικά, πρόκειται για μιγαδικό σύστημα συνεπώς για την υπολογιστική υλοποίηση του επιλυτή του υπάρχουν οι εξής επιλογές:

- Το σύστημα διατηρείται στη μιγαδική του μορφή και ο επιλυτής υλοποιείται με αριθμητική μιγαδικών αριθμών (complex number arithmetic) καθότι αυτή υποστηρίζεται εκτενώς με αρκετούς ενσωματωμένους τύπους από τις γλώσσες προγραμματισμού που χρησιμοποιούνται σε επιστημονικούς υπολογισμούς, μεταξύ των οποίων και η γλώσσα Fortran στην οποία υλοποιήθηκε ο επιλυτής στη διατριβή
- Το $n \times n$ μιγαδικό σύστημα μετασχηματίζεται σε ένα $2n \times 2n$ πραγματικό σύστημα. Συγκεκριμένα, είναι γνωστό ότι το σύστημα $\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ με $\mathbf{U}, \mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{C}$ μπορεί ισοδύναμα να γραφτεί ως

$$(U + i\hat{U})(x + i\hat{x}) = (b + i\hat{b}) \Leftrightarrow \begin{bmatrix} U & -\hat{U} \\ \hat{U} & U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \hat{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ \hat{b} \end{bmatrix}$$

ή σε άλλες ισοδύναμες αυτού εκφράσεις, με επιλογή της κατάλληλης βάσει των ιδιοτήτων των πινάκων U και \hat{U} και την εφαρμογή του τρόπου επίλυσης. Το νέο block σύστημα που προκύπτει έχει διπλάσια διάσταση του αρχικού και επιλύεται με διάφορες τεχνικές επίλυσης [38], [39]. Χαρακτηριστική εφαρμογή της παραπάνω προσέγγισης, η διάσπαση των Sasaki et al ([23]) όπου ο πίνακας U είναι συμμετρικός και ο \hat{U} διαγώνιος έτσι ώστε να εξαρτώνται από διαφορετικές φυσικές παραμέτρους.

Στην παρούσα διατριβή επελέγη η προσέγγιση της διατήρησης του γραμμικού συστήματος 3.69 στη μιγαδική του μορφή χωρίς μετασχηματισμό και η αντίστοιχη υλοποίηση του επιλυτή σε μιγαδική αριθμητική. Περισσότερες λεπτομέρειες σχετικά με τα χαρακτηριστικά των μιγαδικών μεταβλητών στον επιλυτή ακολουθούν στην παράγραφο 4.1.2.

Επιπλέον βασική παράμετρος στη διαδικασία αριθμητικής επίλυσης είναι η διαχείριση του πίνακα συντελεστών U . Ο U είναι αραιός, μη συμμετρικός, εξαιρετικά μεγάλης διάστασης σε ρεαλιστικές - από μεριάς διαμέρισης - υλοποιήσεις, με δείκτη κατάστασης η τιμή του οποίου αυξάνεται εκθετικά με την αύξηση της διάστασης του. Ενδεικτικά, στα σχήματα 3.26, 3.27 παρουσιάζεται η δομή των block του πίνακα U σε περίπτωση συχνότητας $f =$

3000 και αγωγιμότητας υποβάθρου $\sigma = 0.001$ που προκύπτει με ομοιόμορφη διαμέριση $40m$ σε κάθε κατεύθυνση - σε αυτήν την περίπτωση ο δείκτης κατάστασης είναι της τάξης του 10^2 ενώ στην ενδεικτική ανομοιόμορφη διαμέριση $20m - 80m - 20m$ είναι $\approx 10^3$. Πυκνότερες διαμερίσεις οδηγούν εκ των πραγμάτων σε μεγαλύτερη διάσταση του U και αδυναμία περαιτέρω άμεσου υπολογισμού του δείκτη κατάστασης λόγω ανεπάρκειας μνήμης του υπολογιστικού συστήματος. Σε κάθε περίπτωση, είναι βάσιμη η υπόθεση για δείκτη κατάστασης της τάξης $> 10^5$ για πλέγματα με ρεαλιστικές διαμερίσεις (π.χ. $5m$).

Λόγω μεγέθους και δομής του πίνακα U λοιπόν, η αναλυτική κατασκευή και αποθήκευση των στοιχείων των επιμέρους block κρίνεται υπολογιστικά ασύμφορη - ουσιαστικά αδύνατη. Αντί αυτού, κάθε βασική διαδικασία που εμπλέκει στοιχεία (block) του πίνακα U στο πλαίσιο της επίλυσης του 3.69, υλοποιείται στη διατριβή ως πράξη πολλαπλασιασμού πίνακα με διάνυσμα όπου αφενός συμμετέχει ο κατάλληλος κάθε φορά πίνακας B_i και αφετέρου πραγματοποιείται επίλυση ενός γραμμικού συστήματος με τον αντίστοιχο πίνακα S_i . Η ανάπτυξη αλγορίθμων με τη συγκεκριμένη τεχνική επιτρέπει τη συνολική υλοποίηση του επιλυτή - υπολογιστικά- χωρίς ρητή κατασκευή του πίνακα και μόνιμη αποθήκευση των στοιχείων του (matrix-free computations). Καθώς δε η δομή των πινάκων S_i^* διαφοροποιείται ανάλογα με τη εφαρμογή των αριθμητικών σχημάτων, η επίλυση των γραμμικών συστημάτων υλοποιείται με διαφορετική προσέγγιση. Συγκεκριμένα, τα γραμμικά συστήματα $S_{**}x = t$ και $S_{**}^I x = t$ όπου συμμετέχουν οι πίνακες S_{**} και S_{**}^I με γενική μορφή

$$S_{**} = \begin{pmatrix} 24 & 24 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24 & 24 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

και

$$S_{**}^I = \begin{pmatrix} 24I & 24I & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ I & 22I & I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & 22I & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & I & 22I & I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & I & 22I & I \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 24I & 24I \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

λύνονται με εφαρμογή του αλγορίθμου 2 σύμφωνα και με την περιγραφή της κλασικής μεθόδου αναγωγής μονών-ζυγών όπως παρουσιάστηκε στην υποενότητα 1.4.1. Αντίστοιχα, για τους πίνακες S_* και S_*^I με γενική μορφή

$$S_* = \begin{pmatrix} 22 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 22 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 22 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

και

$$S_*^I = \begin{pmatrix} 22I & I & 0 & \dots & \dots & 0 & 0 \\ I & 22I & I & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & I & 22I & I & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & I & 22I & 22I & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & I & 22I & I \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & I & 2I \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

η επίλυση κάθε συστήματος $S_*x = t$ και $S_*^I x = t$ πραγματοποιείται με τη εφαρμογή του αλγορίθμου Fourier, ο οποίος περιγράφεται στην 1.4.1.

Σε κάθε επίλυση συστήματος με τη μέθοδο CR εξασφαλίζεται ότι

$$\frac{\|\tilde{x} - x\|_\infty}{\|\tilde{x}\|_\infty} \leq \underbrace{10\kappa(S)\epsilon \log_2 n}_{u_b} \quad (3.70)$$

όπου \tilde{x} η αριθμητική προσέγγιση της λύσης, ϵ ο αριθμός μηχανής και $\kappa(S)$ ο δείκτης κατάστασης του S στη $\|\cdot\|_\infty$, όπως αποδεικνύεται στην [1] για κάθε διαγωνίως ενισχυμένο $n \times n$ πίνακα S . Ενδεικτικά, ανάλογα τη διάσταση των S_* και S_{**} , είναι $\kappa(S_*) \approx 1$, $\kappa(S_{**}) \approx 4$ οπότε το $u_b < 10^{-13}$, Για την επίλυση του συστήματος 3.69 αναπτύχθηκαν δύο μέθοδοι για υλοποίηση σε παράλληλα υπολογιστικά συστήματα:

1. με εφαρμογή της επαναληπτικής μεθόδου BiCGSTAB
2. με εφαρμογή απαλοιφής

η περιγραφή και οι αλγόριθμοι των οποίων ακολουθούν στις επόμενες ενότητες ενώ τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν στο κεφάλαιο 4.

3.3.1 Επίλυση με BiCGSTAB

Η μια προσέγγιση για την επίλυση του 3.69 ήταν αυτή της άμεσης εφαρμογής της επαναληπτικής μεθόδου Krylov BiCGSTAB, κατάλληλα υλοποιημένης ώστε να εξυπηρετεί τη block μορφή του υφιστάμενου γραμμικού συστήματος. Η μέθοδος έχει χρησιμοποιηθεί γενικότερα με επιτυχία σε προσπάθειες επίλυσης της εξίσωσης Helmholtz, όπως στην [27], καθώς και πιο συγκεκριμένα, σε περιπτώσεις εφαρμογών όπως η ηλεκτρομαγνητική επαγωγή ή ηλεκτρομαγνητική σκέδαση (electromagnetic scattering), όπου απαιτείται η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος με συναφή με το 3.69 χαρακτηριστικά (π.χ. εφαρμογή της Block-BiCGSTAB στην [35] ή στις [40], [41]).

Procedure GAIA-Solver(F_1, F_2)
 $b \leftarrow \text{assemble-b}(F_1, F_2)$
 $E \leftarrow \text{BiCGSTAB-U}(b)$
 $[E_x, E_y, E_z] \leftarrow \text{disassemble-E}(E)$
return E_x, E_y, E_z

Algorithm 3: Ο αλγόριθμος του επιλυτή με BiCGSTAB

Για την επίλυση κατασκευάζεται πρώτα το δεύτερο μέλος του 3.69 το οποίο και τροφοδοτείται στην επαναληπτική μέθοδο BiCGSTAB-U. Για την κατασκευή του γίνεται ανάγνωση των τιμών της έντασης του πρωτεύοντος ηλεκτρικού πεδίου από αρχεία που δημιουργεί η MATLAB καθώς και ανάθεση τιμών αγωγιμότητας στους κόμβους του πλέγματος. Στη συνέχεια, η μέθοδος παράγει την προσέγγιση της έντασης του πεδίου σε ένα διάνυσμα, το οποίο κατόπιν χωρίζεται στις τρεις συνιστώσες E_x, E_y, E_z , όπως παρουσιάζει ο αλγόριθμος 3.

Procedure BiCGSTAB-U(b)
 $x \leftarrow b$
 $r \leftarrow b - U \cdot \text{Mult}(x)$
 $p \leftarrow r$
 $r' \leftarrow r$
while $\|r\|$ *not small enough* **do**
 $v \leftarrow U \cdot \text{Mult}(p)$ $\underline{v = Up}$
 $\alpha \leftarrow \frac{\langle r, r' \rangle}{\langle v, r' \rangle}$
 $s \leftarrow r - \alpha v$
 $t \leftarrow U \cdot \text{Mult}(s)$ $\underline{t = Us}$
 $\omega \leftarrow \frac{\langle s, t \rangle}{\langle t, t \rangle}$
 $x \leftarrow x + \alpha p + \omega s$
 $r_0 \leftarrow r$
 $r \leftarrow s - \omega t$
 $p \leftarrow r_0 + \frac{a \langle r, r' \rangle}{\omega \langle r_0, r \rangle} (p - \omega v)$
end
return x

Στην επαναληπτική μέθοδο πραγματοποιούνται τα συνήθη βήματα του αλγορίθμου της BiCGSTAB αλλά σε κάθε ένα από αυτά, για τους πολλαπλασιασμούς όπου εμπλέκεται ο πίνακας συντελεστών U , καλείται η εσωτερική διαδικασία U-Mult πολλαπλασιασμού των block του με τα κατάλληλα διανύσματα.

Η διαδικασία μπορεί να υλοποιηθεί παράλληλα σε 3 διαφορετικές ομάδες νημάτων (ή πυρήνες με νήματα εκτέλεσης) για κάθε έναν από τους 3 πολλαπλασιασμούς που εμπλέκουν τα τμήματα του t : από $1 : n_1$, από $n_1 + 1 : n_2$ και $n_2 + 1 : n_3$, όπου $n_1 = n_x(n_y - 1)(n_z - 1)$, $n_2 = (n_x - 1)n_y(n_z - 1)$ και $n_3 = (n_x - 1)(n_y - 1)n_z$

Algorithm 4: Η διαδικασία BiCGSTAB-U

Procedure U-Mult(t)

$g_{x_1} \leftarrow \text{matrixVector} - A(t_{1:n_1})$	$g_{x_1} = At_1$
$g_{y_1} \leftarrow \text{matrixVector} - B(t_{n_1+1:n_2})$	$g_{y_1} = Bt_2$
$g_{z_1} \leftarrow \text{matrixVector} - C(t_{n_2+1:n_3})$	$g_{z_1} = Ct_3$
$g_{x_2} \leftarrow \text{matrixVector} - D(t_{1:n_1})$	$g_{x_2} = Dt_1$
$g_{y_2} \leftarrow \text{matrixVector} - Z(t_{n_1+1:n_2})$	$g_{y_2} = Zt_2$
$g_{z_2} \leftarrow \text{matrixVector} - K(t_{n_2+1:n_3})$	$g_{z_2} = Kt_3$
$g_{x_3} \leftarrow \text{matrixVector} - M(t_{1:n_1})$	$g_{x_3} = Mt_1$
$g_{y_3} \leftarrow \text{matrixVector} - N(t_{n_1+1:n_2})$	$g_{y_3} = Nt_2$
$g_{z_3} \leftarrow \text{matrixVector} - P(t_{n_2+1:n_3})$	$g_{z_3} = Pt_3$
$g_{1:N_1} \leftarrow g_{x_1} + g_{x_2} + g_{x_3}$	
$g_{N_1+1:N_2} \leftarrow g_{y_1} + g_{y_2} + g_{y_3}$	
$g_{N_2+1:N_3} \leftarrow g_{z_1} + g_{z_2} + g_{z_3}$	
return g	

Algorithm 5: Ο αλγόριθμος της διαδικασίας U-Mult

Κάθε πολλαπλασιασμός της διαδικασίας U-Mult περιλαμβάνει υπολογισμούς γινομένων του κατάλληλου πίνακα B_i με αντίστοιχο διάνυσμα, οι οποίοι ακολουθούνται από την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος με τον κατάλληλο πίνακα S_i (βάσει των πράξεων που απαρτίζουν τους πίνακες όπως περιγράφονται στις 3.57, 3.58, 3.59, 3.61, 3.62, 3.63, 3.65, 3.66, 3.67). Οι διαδικασίες των πολλαπλασιασμών περιγράφονται από τους αλγόριθμους 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, και 14.

Procedure MatrixVector-A(t)

$s_{1:n_x(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)}, 5)$	υπολογισμός $s = B_5t$ επίλυση $S_5t = s$
$t_{1:n_x(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{1:n_x(n_y-1)n_z}, 5)$	
$s_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)}, 6)$	υπολογισμός $s = B_6t$ επίλυση $S_6t = s$
$t_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)}, 6)$	
$s_1 \leftarrow \frac{24}{h_z^2}t$	υπολογισμός $s = B_3t$ επίλυση $S_3t = s$ υπολογισμός $s = B_4t$ επίλυση $S_4t = s$
$s_{1:n_x n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)}, 3)$	
$t_{1:n_x n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{1:n_x n_y(n_z-1)}, 3)$	
$s_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x n_y(n_z-1)}, 4)$	
$t_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s, 4)$	
$s_2 \leftarrow \frac{24}{h_y^2}t$	
$s \leftarrow s_1 + s_2$	
return s	

Algorithm 6: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα A **Procedure MatrixVector-B(t)**

$s_{1:n_x n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 1)$	υπολογισμός $s = B_1t$ επίλυση $S_1t = s$
$t_{1:n_x n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-CR}(t_{1:n_x n_y(n_z-1)}, 1)$	
$s_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x n_y(n_z-1)}, 2)$	υπολογισμός $s = B_2t$ επίλυση $S_2t = s$
$t_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(t_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)}, 2)$	
$s \leftarrow \frac{24}{h_x h_y}t$	
return s	

Algorithm 7: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα B

Procedure MatrixVector-C(t)

$s_{1:n_x(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z}, 7)$ $t_{1:n_x(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{1:n_x(n_y-1)n_z}, 7)$ $s_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x(n_y-1)n_z}, 8)$ $t_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{1:n_x(n_y-1)(n_z-1)}, 8)$ $s \leftarrow \frac{24}{h_x h_z} t$ return s	υπολογισμός $s = B_7 t$ επίλυση $S_7 t = s$ υπολογισμός $s = B_8 t$ επίλυση $S_8 t = s$
---	--

Algorithm 8: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα C **Procedure** MatrixVector-D(t)

$s_{1:n_x n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 9)$ $t_{1:n_x n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{1:n_x n_y(n_z-1)}, 9)$ $s_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x n_y(n_z-1)}, 10)$ $t_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 10)$ $s \leftarrow \frac{24}{h_x h_y} t$ return s	$s = B_9 t$ $S_9 t = s$ $s = B_{10} t$ $S_{10} t = s$
---	--

Algorithm 9: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα D **Procedure** MatrixVector-Z(t)

$s_{1:(n_x-1)n_y n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 13)$ $t_{1:(n_x-1)n_y n_z} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{(n_x-1)n_y n_z}, 13)$ $s_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{(n_x-1)n_y n_z}, 14)$ $t_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 14)$ $s_1 \leftarrow \frac{24}{h_z^2} t$ $s_{1:n_x n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 11)$ $t_{1:n_x n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-CR}(t_{1:n_x n_y(n_z-1)}, 11)$ $s_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x n_y(n_z-1)}, 12)$ $t_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{1:(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 12)$ $s_2 \leftarrow \frac{24}{h_x^2} t$ $s \leftarrow s_1 + s_2$ return s	$s = B_{13} t$ $S_{13} t = s$ $s = B_{14} t$ $S_{14} t = s$ $s = B_{11} t$ $S_{11} t = s$ $s = B_{12} t$ $S_{12} t = s$
---	--

Algorithm 10: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα Z **Procedure** MatrixVector-K(t)

$s_{1:(n_x-1)n_y n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z}, 15)$ $t_{1:(n_x-1)n_y n_z} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{1:(n_x-1)n_y n_z}, 15)$ $s_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:(n_x-1)n_y n_z}, 16)$ $t_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z}, 16)$ $s \leftarrow \frac{24}{h_y h_z} t$ return s	$s = B_{15} t$ $S_{15} t = s$ $s = B_{16} t$ $S_{16} t = s$
---	--

Algorithm 11: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα K **Procedure** MatrixVector-M(t)

$s_{n_x(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{n_x(n_y-1)(n_z-1)}, 5)$ $t_{n_x(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{n_x(n_y-1)n_z}, 5)$ $s_{(n_x-1)(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{n_x(n_y-1)n_z}, 18)$ $t_{(n_x-1)(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{(n_x-1)(n_y-1)n_z}, 18)$ $s \leftarrow \frac{24}{h_x h_z} t$ return s	$s = B_5 t$ $S_5 t = s$ $s = B_{18} t$ $S_{18} t = s$
---	--

Algorithm 12: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα M

Procedure MatrixVector-N(t)

$s \leftarrow \text{Mult-B}(t_{(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 13)$ $t \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 13)$ $s \leftarrow \text{Mult-B}(t_{(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 20)$ $t_{(n_x-1)n_y(n_z-1)} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{(n_x-1)n_y(n_z-1)}, 24)$ $s \leftarrow \frac{24}{h_y h_z}$ return s	$s = B_{13}t$ $S_{13}t = s$ $s = B_{20}t$ $S_{20}t = s$
---	--

Algorithm 13: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα N **Procedure** MatrixVector-P(t)

$s_{1:(n_x-1)n_y n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z}, 19)$ $t_{1:(n_x-1)n_y n_z} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{1:(n_x-1)n_y n_z}, 19)$ $s_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:(n_x-1)n_y n_z}, 20)$ $t_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z}, 20)$ $s_1 \leftarrow \frac{24}{h_y^2} t$ $s_{1:n_x(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z}, 17)$ $t_{1:n_x(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Solve-CR}(s_{1:n_x(n_y-1)n_z}, 17)$ $s_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Mult-B}(t_{1:n_x(n_y-1)n_z}, 18)$ $t_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z} \leftarrow \text{Solve-Fourier}(s_{1:(n_x-1)(n_y-1)n_z}, 18)$ $s_2 \leftarrow \frac{24}{h_x^2} t$ $s \leftarrow s_1 + s_2$ return s	$s = B_{19}t$ $S_{19}t = s$ $s = B_{20}t$ $S_{20}t = s$ $s = B_{17}t$ $S_{17}t = s$ $s = B_{18}t$ $S_{18}t = s$
---	--

Algorithm 14: Ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού με τον πίνακα P

Ο υπολογισμός του γινομένου του κατάλληλου πίνακα B_i εντός των παραπάνω διαδικασιών με το αντίστοιχο διάνυσμα πραγματοποιείται από τη διαδικασία B-Mult, η οποία αποτελεί την πλέον εύκολα παραλληλοποιήσιμη διαδικασία λόγω των στοιχειωδών πράξεων που εκτελούνται σε αυτήν. Τον υπολογισμό ακολουθεί η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος με τον αντίστοιχο πίνακα S_i . Όπως αναφέρθηκε και νωρίτερα, λόγω της διαφορετικής δομής των πινάκων S_i , είναι διαφορετική η προσέγγιση στην επιλογή της μεθόδου επίλυσης των παραπάνω γραμμικών συστημάτων. Στην περίπτωση πινάκων της μορφής S_{**} ή S_{**}^I εφαρμόζεται η μέθοδος Cyclic-Reduction (CR) ενώ στην περίπτωση πινάκων της μορφής S_* ή S_*^I η παραλλαγή η μέθοδος Fourier. Οι αλγόριθμοι που περιγράφουν τις διαδικασίες επίλυσης γραμμικών συστημάτων με εφαρμογή των CR και Fourier ακολουθούν στους αλγόριθμους 17 και 16 αντίστοιχα.

```

Procedure B-Mult( $t, k, n$ )
if  $k$  even then
  for  $i$  to  $n$  do in parallel
     $s_i \leftarrow t_{i+1} - t_i$ 
  end
else
   $s_i \leftarrow -10t_1 + 36t_2 - 6t_3 + t_4$ 
  for  $i = 2$  to  $n - 1$  do in parallel
     $s_i \leftarrow 24(t_i - t_{i-1})$ 
  end
   $s_n \leftarrow 10t_{n-1} - 36t_{n-2} + 6t_{n-3} - t_{n-4}$ 
end
return  $s$ 

```

Algorithm 15: Πολλαπλασιασμοί διανύσματος με πίνακα B_k με τη διαδικασία B-Mult

Ειδικά στην περίπτωση της CR, λόγω της πολυπλοκής υλοποίησης παρατίθεται ξεχωριστά ο αλγόριθμος της αναγωγής και κατόπιν ο αλγόριθμος της οπισθοδρόμησης που αποτελούν τα δύο τμήματα της διαδικασίας.

```

Procedure Solve-Fourier( $t, k, n$ )
 $\rho \leftarrow \sqrt{\frac{2}{n+1}}$ 
for  $i$  to  $n$  do
  for  $j = 1$  to  $n$  do
     $q_j \leftarrow \sin(\frac{ij\pi}{n+1}) \cdot \rho \cdot t_j$ 
  end
   $q_i \leftarrow \frac{1}{22+2\cos(\frac{i\pi}{n+1})} \cdot q_i$ 
  for  $j = 1$  to  $n$  do in parallel
     $x_j \leftarrow \sin(\frac{ij\pi}{n+1}) \cdot \rho q_i$ 
  end
end
return  $x$ 

```

Algorithm 16: Επίλυση με τη μέθοδο Fourier με τη διαδικασία Solve-Fourier

```

Procedure Solve-CR( $t, n, l, m_1$ )
 $[r, val] \leftarrow \text{Forward-CR}(t, n, l, m_1)$ 
 $x \leftarrow \text{Backward-CR}(r, n, l, m_1, val)$ 
return  $x$ 

```

Algorithm 17: Επίλυση με Cyclic Reduction με τη διαδικασία Solve-CR

```

Procedure Forward-CR( $q, n, l, m_1$ )
 $k \leftarrow 5 \log_2 l$ 
for  $i = 1$  to  $n$  do in parallel
   $r_i \leftarrow q_i$ 
end
for  $is = 1$  to  $n$  do in parallel
   $a_1 \leftarrow 24, b_1 \leftarrow 24, c_1 \leftarrow 0, a_l \leftarrow 24, b_l \leftarrow 0, c_l \leftarrow 24$ 
  for  $j = 2$  to  $l - 1$  do in parallel
     $a_j \leftarrow 24, b_j \leftarrow 1, c_j \leftarrow 1$ 
  end
  for  $j = 1$  to  $k$  do
     $j_1 \leftarrow \frac{2^j-1}{2^{j-1}}, j_2 \leftarrow \frac{2^j-1}{2^{j-2}}, j_2 \leftarrow \lfloor \frac{l}{2^j} \rfloor$ 
    for  $i = 1$  to  $m$  do
       $s \leftarrow \frac{c_{2i}}{a_{2i-1}}$ 
      if  $i = m$  then
         $t \leftarrow 0, val_{5(j-1)+3} \leftarrow a_{2i} - sb_{2i-1}$ 
      else
         $t \leftarrow \frac{b_{2i}}{a_{2i+1}}$ 
        if  $i = 1$  or  $i = 2$  and  $j \neq k$  then
           $ip \leftarrow 5(j-1) + i$ 
           $val_{ip} \leftarrow a_{2i} - sb_{2i-1} - tc_{2i+1}$ 
        end
      if  $i = 1$  then
         $val_{5(j-1)+4} \leftarrow -tb_{2i+1}, c_i \leftarrow 0$ 
         $a_i \leftarrow val_{5(j-1)+1}, b_i \leftarrow val_{5(j-1)+4}$ 
      else if  $i = m$  then
         $val_{5(j-1)+5} \leftarrow -sb_{2i+1}, b_i \leftarrow 0$ 
         $a_i \leftarrow val_{5(j-1)+3}, b_i \leftarrow val_{5(j-1)+5}$ 
      else
         $a_i \leftarrow val_{5(j-1)+2}, b_i \leftarrow val_{5(j-1)+4}, c_i \leftarrow b_i$ 
      end
      if  $i=m$  then
         $r_{j_1 l + \frac{l}{2^j} + (is-1)(2l-1)-1)m_1+1} \leftarrow$ 
         $r_{j_1 l + (is-1)(2l-1)-1)m_1+1} - sr_{j_1 l + (is-1)(2l-1)-2)m_1+1}$ 
      else
         $r_{j_1 l + i + (is-1)(2l-1)-1)m_1+1} \leftarrow r_{j_1 l + 2i-1 + (is-1)(2l-1)-1)m_1+1} -$ 
         $sr_{j_1 l + 2i-2 + (is-1)(2l-1)-2)m_1+1} - tr_{j_1 l + 2i + (is-1)(2l-1)-2)m_1+1}$ 
      end
    end
  end
   $val_{5(k-1)+1} \leftarrow val_{5(k-1)+3}, val_{5(k-1)+3} \leftarrow 0$ 
end
end
return  $r, val$ 

```

Algorithm 18: Διαδικασία αναγωγής της μεθόδου Cyclic Reduction

Procedure Backward-CR(r, n, l, m_1, val)
 $k \leftarrow 5 \log_2 l$
for $is = 1$ **to** n **do** in parallel
 $x_{(is \cdot l - 1)m_1 + 1} \leftarrow \frac{1}{val_{5(k-1)+1}} r_{is(2i-1)}$
 for $j = k$ **to** 1 **do**
 $j_2 \leftarrow \frac{2^{j-1}-1}{2^{j-1}}$
 $ik \leftarrow 0$
 end
 for $i = 2^{j-1}$ **to** $l - 2^{j-1}$ **do** with step 2^j
 $ik \leftarrow ik + 1$
 $ix \leftarrow ((is - 1)l + i - 1)m_1 + 1$
 $iv \leftarrow 5(j - 2) + 1$ **if** $i = 1$ **or** $j = 1$ **then**
 $x_{ix} \leftarrow r_{(2l-1)(is-1)m_1+1} - x_{(is-1)l+2m_1+1}$
 else if $i = 2^{j-1}$ **then**
 $x_{ix} \leftarrow \frac{1}{val_{iv}} (r_{(j_2 \cdot l + ik - 1 + (is-1)(2l-1)) \cdot m_1 + 1} - val_{iv+3} x_{(i-1+(is-1)l+2^{j-1}) \cdot m_1 + 1})$
 else if $i = l - 2^{j-1}$ **and** $j = 2$ **then**
 $x_{ix} \leftarrow \frac{1}{val_2} (r_{(j_2 \cdot l + ik - 1 + (is-1)(2l-1)) \cdot m_1 + 1} - val_4 (x_{(i-3+(is-1)l)m_1+1} - x_{(i+1+(is-1)l)m_1+1}))$
 else if $j = 1$ **then**
 $x_{ix} \leftarrow \frac{1}{22} (r_{(i-1+(is-1)(2l-1))m_1+1} - x_{(i-2+(is-1)l)m_1+1} - x_{(i+(is-1)l)m_1+1})$
 else
 $x_{ix} \leftarrow \frac{1}{val_{iv+1}} (r_{(j_2 \cdot l + (is-1)(2l-1) + 2(ik-1))m_1+1} - val_{iv+3} (x_{(i-1-2^{j-1}+(is-1)l)m_1+1} - x_{(i-1-2^{j-1}+(is-1)l)m_1+1}))$
 end
end
return x

Algorithm 19: Διαδικασία οπισθοδρόμησης της μεθόδου Cyclic Reduction

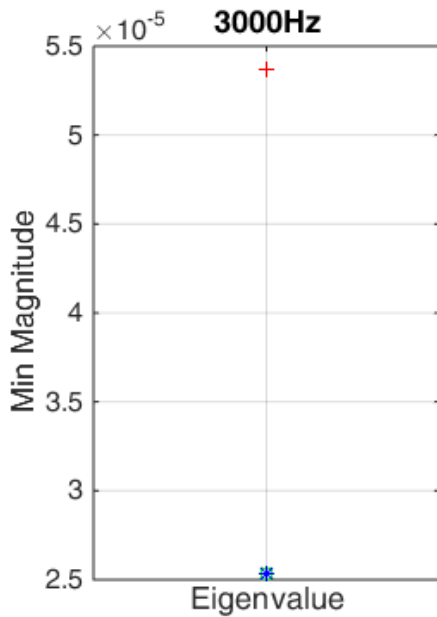
Η διαδικασία της οπισθοδρόμησης Backward-CR σε κάθε περίπτωση υλοποιείται παράλληλα από το πλήθος νημάτων εκτέλεσης, που διατηρούν ιδιωτικές τιμές των βαθμωτών μεταβλητών και των δεικτών και έχουν κοινή πρόσβαση στο τμήμα της μνήμης με τις διανυσματικές μεταβλητές, τροποποιώντας διαφορετικά, βάσει δεικτών, στοιχεία τους. Αντίστοιχα, οι εκχωρήσεις τιμών και το τμήμα του εξωτερικού βρόγχου εκτέλεσης είναι παραλληλοποιήσιμα μέρη στη διαδικασία αναγωγής Forward-CR. Στη διαδικασία Solve-Fourier, όπως αναφέρεται και στον έλεγχο του χρόνου υλοποίησης, παρουσιάστηκε αδυναμία περαιτέρω παραλληλοποίησης, πέραν των πράξεων μεταξύ διανυσματικών μεταβλητών και της εκχώρησης τιμών.

3.3.2 Επίλυση με απαλοιφή

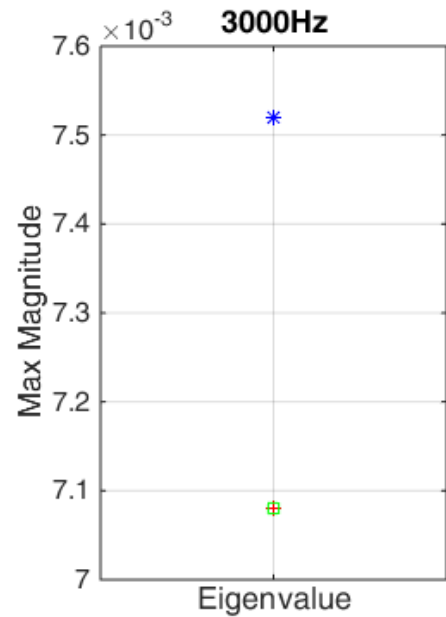
Αρχική προσέγγιση επίλυσης του 3.69 ήταν αυτή της εφαρμογής απαλοιφής. Από τις εξισώσεις 3.56, 3.60 και 3.64, με τις κατάλληλες πράξεις και αντικαταστάσεις όρων μπορούν να προκύψουν κατάλληλες σχέσεις για τον υπολογισμό των συνιστωσών της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου \mathbf{E}_x , \mathbf{E}_y και \mathbf{E}_z . Ξεκινώντας από την εξίσωση 3.64:

$$M\mathbf{E}_x + N\mathbf{E}_y + P\mathbf{E}_z = \mathbf{0} \Leftrightarrow P\mathbf{E}_z = -M\mathbf{E}_x - N\mathbf{E}_y \quad (3.71)$$

Ο μιγαδικός πίνακας P είναι τετραγωνικός, διάστασης $(n_x - 1)(n_y - 1)n_z$, και περιέχει μεταξύ άλλων στοιχεία, οι τιμές των οποίων διαφοροποιούνται κατά περίπτωση, ανάλογα την επιλεγμένη κατά την εκτέλεση του πειράματος συχνότητα εκπομπής του ηλεκτρομαγνητικού κύματος f και την αγωγιμότητα του μέσου διάδοσης στο υπέδαφος σ . Είναι συνεπώς ιδιαίτερα δύσκολη αναλυτικά η αναζήτηση ενός κλειστού τύπου για την επιβεβαίωση της ύπαρξης του P^{-1} . Ο υπολογισμός των ιδιοτιμών του πίνακα P για διάφορα πλέγματα -αραιής διακριτοποίησης ώστε να αυτό να είναι υπολογιστικά εφικτό- τιμές συχνότητας και αγωγιμότητας επιτρέπει την υπόθεση, για τις συγκεκριμένες περιπτώσεις, της ύπαρξης αντιστρόφου, καθώς οι ιδιοτιμές που προκύπτουν έχουν στο σύνολο τους μη μηδενικό μέτρο 3.28α', 3.28β'.



(α') Ελάχιστο μέτρο ιδιοτιμών πινάκων P, V και U



(β') Μέγιστο μέτρο ιδιοτιμών πινάκων P, V και U

Σχήμα 3.28: Έλεγχος ιδιοτιμών πινάκων P, V και U , $n_x = n_y = n_z = 16$, $f = 3000Hz$

Δεδομένου ότι $\exists P^{-1} \in \mathbb{C}$ η 3.71 μπορεί να γραφεί

$$P^{-1}P\mathbf{E}_z = P^{-1}(-M\mathbf{E}_x - N\mathbf{E}_y) \Leftrightarrow \mathbf{E}_z = -P^{-1}M\mathbf{E}_x - P^{-1}N\mathbf{E}_y \quad (3.72)$$

Με αντικατάσταση του \mathbf{E}_z από την 3.72 στην 3.60

$$\begin{aligned} D\mathbf{E}_x + Z\mathbf{E}_y + K\mathbf{E}_z &= \mathbf{F}_2 \Leftrightarrow \\ D\mathbf{E}_x + Z\mathbf{E}_y + K(-P^{-1}M\mathbf{E}_x - P^{-1}N\mathbf{E}_y) &= \mathbf{F}_2 \Leftrightarrow \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} D\mathbf{E}_x + Z\mathbf{E}_y - KP^{-1}M\mathbf{E}_x - KP^{-1}N\mathbf{E}_y &= \mathbf{F}_2 \Leftrightarrow \\ (Z - KP^{-1}N)\mathbf{E}_y &= \mathbf{F}_2 - (D - KP^{-1}M)\mathbf{E}_x \end{aligned}$$

και για $V = Z - KP^{-1}N, V_1 = D - KP^{-1}M$

$$V\mathbf{E}_y = \mathbf{F}_2 - V_1\mathbf{E}_x \quad (3.73)$$

Ο μιγαδικός πίνακας V είναι τετραγωνικός, διάστασης $(n_x - 1)n_y(n_z - 1)$. Υποθέτοντας εκ νέου την ύπαρξη του $V^{-1} \in \mathbb{C}$ με βάση τον έλεγχο των ιδιοτιμών του (3.28) Με δεδομένο ότι $\exists V^{-1} \in \mathbb{C}$ η 3.64 μπορεί να γραφτεί

$$\begin{aligned} V^{-1}V\mathbf{E}_y &= V^{-1}(\mathbf{F}_2 - V_1\mathbf{E}_x) \Leftrightarrow \\ \mathbf{E}_y &= V^{-1}(\mathbf{F}_2 - V_1\mathbf{E}_x) \end{aligned} \quad (3.74)$$

Αντικαθιστώντας τις 3.72 και 3.74 στην εξίσωση 3.56

$$\begin{aligned} A\mathbf{E}_x + B\mathbf{E}_y + C\mathbf{E}_z &= \mathbf{F}_1 \Leftrightarrow \\ A\mathbf{E}_x + BV^{-1}[\mathbf{F}_2 - V_1\mathbf{E}_x] + C(-P^{-1}M\mathbf{E}_x - P^{-1}N\mathbf{E}_y) &= \mathbf{F}_1 \Leftrightarrow \\ A\mathbf{E}_x + BV^{-1}\mathbf{F}_2 - BV^{-1}V_1\mathbf{E}_x & \\ -CP^{-1}M\mathbf{E}_x - CP^{-1}NV^{-1}(\mathbf{F}_2 - V_1\mathbf{E}_x) &= \mathbf{F}_1 \Leftrightarrow \\ (A - BV^{-1}V_1 - CP^{-1}M + CP^{-1}NV^{-1}V_1)\mathbf{E}_x &= \\ CP^{-1}NV^{-1}\mathbf{F}_2 - BV^{-1}\mathbf{F}_2 + \mathbf{F}_1 &\Leftrightarrow \\ [A - CP^{-1}M - (B - CP^{-1}N)V^{-1}V_1]\mathbf{E}_x &= \mathbf{F}_1 - (B - CP^{-1}N)V^{-1}\mathbf{F}_2 \Leftrightarrow \end{aligned}$$

Θεωρώντας επιπλέον $V_2 = B - CP^{-1}N$ και $V_3 = A - CP^{-1}M$ καθώς και $U = V_3 - V_2V^{-1}V_1$, προκύπτει το γραμμικό σύστημα

$$U\mathbf{E}_x = \mathbf{F}_1 - V_2V^{-1}\mathbf{F}_2 \quad (3.75)$$

Συνοψίζοντας, οι τρεις συνιστώσες του ηλεκτρικού πεδίου $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y$ και \mathbf{E}_z μπορούν να προσεγγιστούν με την επίλυση των τριών γραμμικών συστημάτων

$$\begin{aligned} U \cdot \mathbf{E}_x &= \mathbf{b}_1 \\ V \cdot \mathbf{E}_y &= \mathbf{b}_2 \\ P \cdot \mathbf{E}_z &= \mathbf{b}_3 \end{aligned}$$

όπου

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \mathbf{F}_1 - V_2V^{-1}\mathbf{F}_2 \\ \mathbf{b}_2 &= \mathbf{F}_2 - V_1\mathbf{E}_x \\ \mathbf{b}_3 &= -(M\mathbf{E}_x + N\mathbf{E}_y) \end{aligned}$$

με

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_1 &= -i\omega\mu_0(\sigma_x - \sigma_p)\mathbf{E}_x^p \\ \mathbf{F}_2 &= -i\omega\mu_0(\sigma_y - \sigma_p)\mathbf{E}_y^p \end{aligned}$$

επιλύοντας, για κάθε έναν από τους αγνώστους $\mathbf{E}_x, \mathbf{E}_y$ και \mathbf{E}_z ένα γραμμικό σύστημα με τους πίνακες U, V και P αντίστοιχα. Η επίλυση πραγματοποιείται διαδοχικά με τον υπολογισμό του \mathbf{E}_x , κατόπιν του \mathbf{E}_y και καταλήγει με αυτόν του \mathbf{E}_z όπως παρουσιάζεται

στον αλγόριθμο 20. Κατά τη σειριακή αυτή διαδικασία κατασκευάζεται αρχικά το δεύτερο μέλος του κάθε συστήματος και ακολουθεί η επίλυση του με την επαναληπτική μέθοδο BiCGSTAB.

Procedure GAIA-Solver(F_1, F_2)	
$b_1 \leftarrow \text{compute-}b_1(F_2)$	compute $\mathbf{b}_1 = \mathbf{F}_1 - V_2 V^{-1} \mathbf{F}_2$
$E_x \leftarrow \text{BiCGSTAB-U}(b_1)$	solve $U \mathbf{E}_x = \mathbf{b}_1$
$b_2 \leftarrow \text{compute-}b_3(E_x, E_y)$	compute $\mathbf{b}_2 = \mathbf{F}_2 - V_1 \mathbf{E}_x$
$E_y \leftarrow \text{BiCGSTAB-V}(b_2)$	solve $V \mathbf{E}_y = \mathbf{b}_2$
$b_3 \leftarrow \text{compute-}b_3(E_x, E_y)$	compute $\mathbf{b}_3 = -(M \mathbf{E}_x + N \mathbf{E}_y)$
$E_z \leftarrow \text{BiCGSTAB-MGP}(b_3)$	solve $P \mathbf{E}_z = \mathbf{b}_3$
return E_x, E_y, E_z	

Algorithm 20: Ο αλγόριθμος της επίλυσης με απαλοιφή

Είναι σαφές από τη δομή των πινάκων U και V ότι η βασική διαδικασία κατά την επίλυση των γραμμικών συστημάτων στα οποία εμπλέκονται είναι η επίλυση ενός γραμμικού συστήματος $Pq = t$, δεδομένου ότι αποτελεί εσωτερική διεργασία για την επίλυση των επιμέρους συστημάτων $V_1 q_1 = t_1$, $V_2 q_2 = t_2$ και $V_3 q_3 = t_3$. Συγκεκριμένα, η επίλυση με τον P εμφανίζεται από μια φορά σε κάθε επίλυση των V_1 , V_2 , V_3 και συνολικά $3v_{iter}$ φορές όπου v_{iter} το πλήθος των επαναλήψεων της επαναληπτικής μεθόδου επίλυσης του γραμμικού συστήματος όπου εμπλέκεται ο V , συνολικά $3v_{iter}u_{iter}$ μόνο για την προσέγγιση του E_x (για u_{iter} επαναλήψεις της επαναληπτικής μεθόδου επίλυσης του γραμμικού συστήματος όπου εμπλέκεται ο U). Δεδομένης της δομής του P και του πλήθους των φορών που η επίλυση του απαιτείται, κρίθηκε χρήσιμη η πιθανή προρύθμιση του. Λόγω της αδυναμίας κατασκευής ικανοποιητικού πίνακα προρύθμισης μέσω κλασικών μεθόδων όπως η Jacobi και Gauss-Seidel, θεωρήθηκε χρήσιμη η προσέγγιση εφαρμογής της Τεχνικής Πολυπλέγματος, όπως περιγράφηκε στην υποενότητα 1.4.3, ως προρρυθμιστής του πίνακα P . Η εφαρμογή κατά την διαδικασία της ηλεκτρομαγνητικών προσομοιώσεων προτάθηκε στην [15] σε πλέγμα Lebedev. Στην προσπάθεια που πραγματοποιήθηκε στη διατριβή, θεωρήθηκε συμβατή η στρατηγική ημι-εκτράχυνσης (semi-coarsening) για τις δύο διαστάσεις του πλέγματος. Αυτό, καθότι οι υπολογισμοί οι οποίοι πραγματοποιούνται στον πίνακα P , όπως φαίνεται και από την 3.67, εμπλέκουν τα h_x και h_y στις x - και y - κατεύθυνση αντίστοιχα. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιήθηκαν ο πλήρους στάθμισης (Full Weighting (FW) restriction) τελεστής παρεμβολής I_h^{2h} από το πυκνό στο αραιό πλέγμα και αντίστοιχα ο διγραμμικός (Bi-linear interpolation) τελεστής παρεμβολής I_{2h}^h από το αραιό στο πυκνό με

$$I_h^{2h} = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}_h^{2h}, I_{2h}^h = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}_{2h}^h$$

Επιπλέον, επιλέχθηκε ο V -κύκλος ως αλγόριθμος διόρθωσης και η επαναληπτική μέθοδος BiCGSTAB ως εξομαλυντής (smoother) της διαδικασίας. Συμπληρώνοντας τις πολυπλεγματικές παραμέτρους καθορίστηκαν επίσης οι αριθμοί επαναλήψεων πρότερης και ύστερης χαλάρωσης της διαδικασίας, αμφότεροι με τιμή 2. Οι αλγόριθμοι που χρησιμοποιήθηκαν για τα επιμέρους βήματα της επίλυσης (βάσει του αλγορίθμου 20) ακολουθούν:

Procedure compute- $b_1(F_1, F_2)$
 $c \leftarrow \text{BiCGSTAB-V}(F_2)$
 $b_1 \leftarrow \text{MatrixVector-B}(c)$
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-N}(c)$
 $t_2 \leftarrow \text{BiCGSTAB-MGP}(t_1)$
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-C}(t_2)$
 $b_1 \leftarrow b_1 - t_1$
 $b_1 \leftarrow F_1 - t_1$
return b_1

Algorithm 21: Διαδικασία υπολογισμού b_1

Procedure compute- $b_2(E_x, F_2)$
 $b_2 \leftarrow \text{MatrixVector-D}(E_x)$
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-N}(E_x)$
 $t_2 \leftarrow \text{BiCGSTAB-MGP}(t_1)$
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-K}(t_2)$
 $b_2 \leftarrow b_2 - t_1$
 $b_2 \leftarrow F_2 - b_2$
return b_2

Algorithm 22: Διαδικασία υπολογισμού b_2

Procedure BiCGSTAB-*(b)
 $x \leftarrow b$
 $\hat{r} \leftarrow b - \text{MatrixVector-} * (x)$
 $p \leftarrow \hat{r}$
 $r' \leftarrow r$
while $\|r\|$ *not small enough* **do**
 $v \leftarrow \text{MatrixVector-} * (p)$
 $\alpha \leftarrow \frac{\langle r, r' \rangle}{\langle v, r' \rangle}$
 $s \leftarrow r - \alpha v$
 $t \leftarrow \text{MatrixVector-} * (s)$
 $\omega \leftarrow \frac{\langle s, t \rangle}{\langle t, t \rangle}$
 $x \leftarrow x + \alpha p + \omega s$
 $r_0 \leftarrow r$
 $r \leftarrow s - \omega t$
 $p \leftarrow r_0 + \frac{\alpha \langle r, r' \rangle}{\omega \langle r_0, r' \rangle} (p - \omega v)$
end
return x

Algorithm 23: Διαδικασία επίλυσης με τη BiCGSTAB

Τα βήματα της επίλυσης με BiCGSTAB στον αλγόριθμο 23 παραμένουν ίδια για κάθε πίνακα εκ των U, V, P , οπότε εκτός του διανύσματος b και των διαστάσεων των τοπικών διανυσμάτων, μεταβάλλεται μόνο η συνάρτηση $\text{MatrixVector-}*$ για κάθε πίνακα. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιούνται οι MatrixVector-U για την BiCGSTAB-U, MatrixVector-V για την BiCGSTAB-V και MatrixVector-P για την BiCGSTAB-P.

Procedure BiCGSTAB-MGP(b)
 $x \leftarrow b$
 $r \leftarrow b - \text{MatrixVector-P}(x)$
 $p \leftarrow r$
 $r' \leftarrow r$
while $\|r\|$ *is not small enough* **do**
 $s \leftarrow \text{MGP-P}(p)$
 $u \leftarrow \text{MatrixVector-P}(s)$
 $\alpha \leftarrow \frac{\langle r, r' \rangle}{\langle u, r' \rangle}$
 $t \leftarrow r - \alpha u$
 $q \leftarrow \text{MGP-P}(t)$
 $v \leftarrow \text{MatrixVector-P}(q)$
 $\omega \leftarrow \frac{\langle t, v \rangle}{\langle v, v \rangle}$
 $x \leftarrow x + \alpha s + \omega q$
 $r_0 \leftarrow r$
 $r \leftarrow t - \omega v$
 $p \leftarrow r_0 + \frac{\alpha \langle r, r' \rangle}{\omega \langle r_0, r' \rangle} (p - \omega u)$
end
return x

Algorithm 24: Η διαδικασία επίλυσης του $Px = b$

Procedure MGP-P(b)
 $r^{(0)} \leftarrow b - \text{MatrixVector-P}(x)$
while $\|r^{(0)}\|$ *not small enough* **do**
 for $l = 0, \dots, l_u - 1$ **do**
 $e^l \leftarrow \text{BiCGSTAB-P}(r^{(l)})$
 $r^{(l+1)} \leftarrow \text{Restrict}(r^{(l)})$
 end
 $e^{l_u} \leftarrow \text{BiCGSTAB-P}(r^{(l_u)})$
 for $l = l_u, -1, \dots, 0$ **do**
 $e^l \leftarrow \text{Interpolate}(e^{(l+1)})$
 $e^{(l)} \leftarrow \text{BiCGSTAB-P}(r^{(l)})$
 end
 $x \leftarrow x + e^{(0)}$
 $r^{(0)} \leftarrow b - \text{MatrixVector-P}(x)$
end
return x

Algorithm 25: Η διαδικασία προρύθμισης του P μέσω τεχνικής πολυπλέγματος με επίλυση με BiCGSTAB

Procedure MatrixVector- $U(t)$

```

 $s_1 \leftarrow \text{MatrixVector-A}(t)$ 
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-M}(t)$ 
 $t_2 \leftarrow \text{BiCGSTAB-MGP}(t_1)$ 
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-C}(t_2)$ 
 $s_1 \leftarrow s_1 - t_1$ 
 $s_2 \leftarrow \text{MatrixVector-D}(t)$ 
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-M}(t)$ 
 $t_2 \leftarrow \text{BiCGSTAB-MGP}(t_1)$ 
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-K}(t_2)$ 
 $s_2 \leftarrow s_2 - t_1$ 
 $s_3 \leftarrow \text{BiCGSTAB-MGP}(s_2)$ 
 $s_2 \leftarrow \text{MatrixVector-B}(s_3)$ 
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-N}(s_3)$ 
 $s_3 \leftarrow \text{BiCGSTAB-MGP}(t_1)$ 
 $s \leftarrow \text{MatrixVector-C}(s_3)$ 
 $s \leftarrow s_1 - s_2 + s$ 
return  $s$ 

```

Algorithm 26: Διαδικασία πολλαπλασιασμού $s = Ut$

Procedure MatrixVector- $V(t)$

```

 $s \leftarrow \text{MatrixVector-Z}(t)$ 
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-N}(t)$ 
 $t_2 \leftarrow \text{BiCGSTAB-MGP}(t_1)$ 
 $t_1 \leftarrow \text{MatrixVector-K}(t_2)$ 
 $s \leftarrow s - t_1$ 
return  $s$ 

```

Algorithm 27: Διαδικασία πολλαπλασιασμού $s = Vt$

Procedure compute- $b_3(E_x, E_y)$

```

 $b_3 \leftarrow -\text{MatrixVector-M}(E_x)$ 
 $b_1 \leftarrow \text{MatrixVector-N}(E_y)$ 
 $b_3 \leftarrow b_3 - b_1$ 
return  $b_1$ 

```

Algorithm 28: Διαδικασία υπολογισμού b_3

Το σύνολο των διαδικασιών πολλαπλασιασμού των πινάκων A, B, C, D, E, Z, K, M, N, P με διάνυσμα (MatrixVector-*) καθώς και οι εσωτερικές αυτών διαδικασίες που αφορούν πολλαπλασιασμούς με τους πίνακες B_i και επιλύσεις με τους S_i είναι ίδιες με αυτές που χρησιμοποιήθηκαν κατά την απευθείας επίλυση του 3.69 με BiCGSTAB και παρατίθενται στους αλγόριθμους 6, 7, 8, 9, 11, 10, 12, 13, 14 και 17, 18, 19, 16, 15 αντίστοιχα.

Κεφάλαιο 4

Αριθμητικά Αποτελέσματα Προβλήματος Γεωφυσικής

Στο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα αριθμητικά αποτελέσματα των προσεγγίσεων επίλυσης με χρήση του προτεινόμενου αριθμητικού σχήματος και επίλυση με εφαρμογή απαλοιφής (υποενότητα 4.1.1) και BiCGSTAB (υποενότητα 4.1.2) αντίστοιχα στο πρόβλημα της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης στις 3 χωρικές διαστάσεις. Μέσω υλοποιήσεων με διαφορετικά χαρακτηριστικά ως προς τη διακριτοποίηση και τις φυσικές παραμέτρους τεκμηριώνεται η αποτελεσματικότητα της αριθμητικής μεθόδου με χρήση του επιλυτή με BiCGSTAB στην προσέγγιση της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου στο μοντέλο του ομοιογενούς ημιχώρου.

Όλα τα αριθμητικά πειράματα που παρουσιάζονται στην ενότητα 4.1 πραγματοποιήθηκαν σε πολυπύρρηνο (multicore) μηχάνημα με δυνατότητα πολυνηματικών (multithreaded) διεργασιών -αρχιτεκτονική κοινής μνήμης- του Εργαστηρίου Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Ηλεκτρονικών Υπολογιστών (ΕΕΜΗΥ) του Πολυτεχνείου Κρήτης, τα κυριότερα χαρακτηριστικά του οποίου είναι τα εξής:

1. Υλικό

- Intel Xeon CPU E5-2630 v3 @ 2.4 GHz
- Σύνολο πυρήνων 8
- Νήματα εκτέλεσης ανά πυρήνα 2
- 16 GB RAM

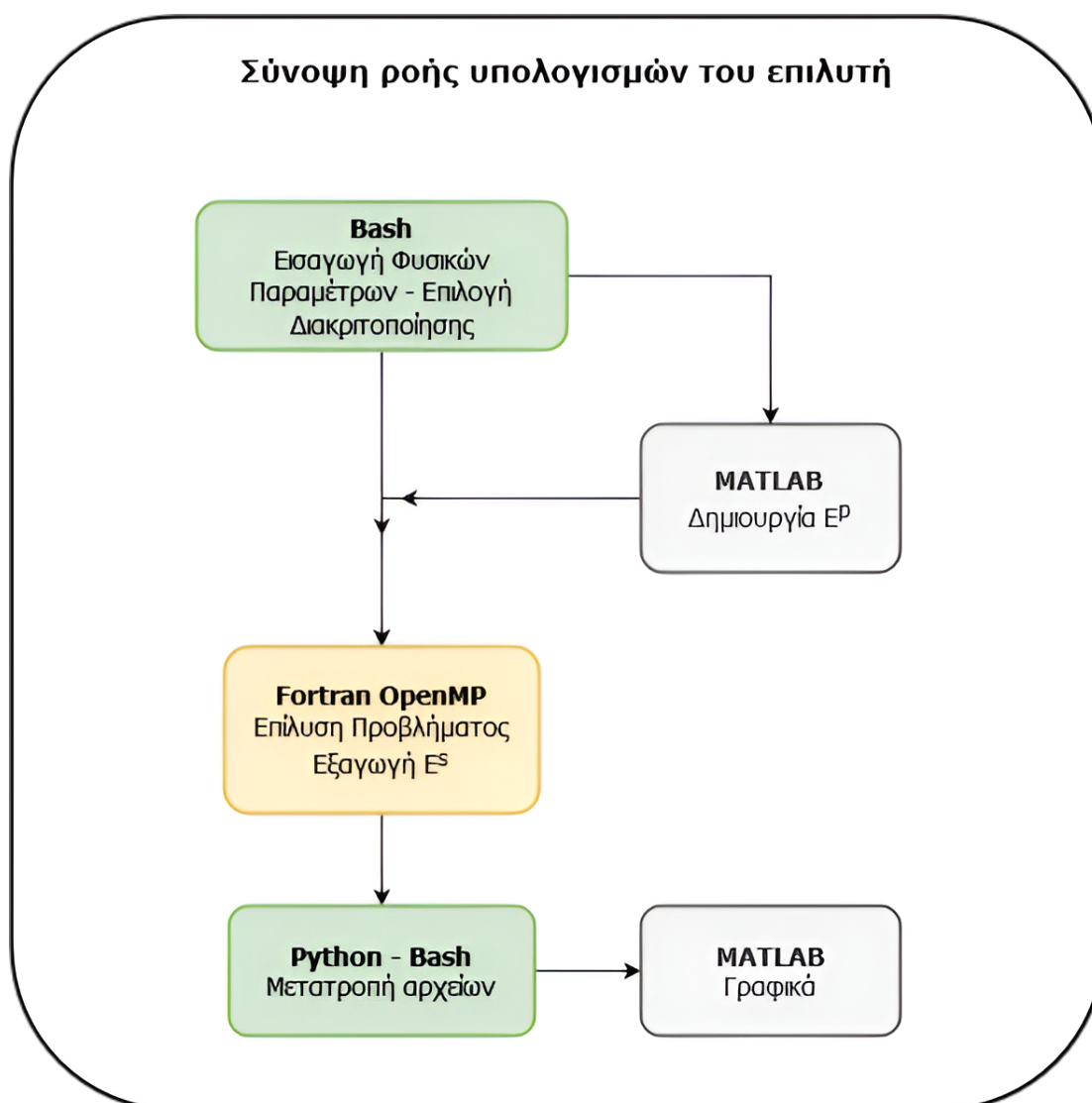
2. Λογισμικό

- Fortran 90
Compiler: pgf90 - HPC SDK NVIDIA
- Matlab 2014Rb
- Python 3.6

Ο κώδικας που παράγει την ένταση του πρωτεύοντος ηλεκτρικού πεδίου στην προσομοίωση του μοντέλου έχει γραφτεί σε προγραμματιστικό περιβάλλον Matlab. Το κύριο πρόγραμμα καθώς και το σύνολο των υποπρογραμμάτων του επιλυτή μέσω του οποίου υπολογίζεται η ένταση του δευτερεύοντος ηλεκτρικού πεδίου έχουν συνταχθεί σε γλώσσα Fortran 90 ενώ για τη διαχείριση των αρχείων των αποτελεσμάτων και την γραφική αναπαράσταση τιμών χρησιμοποιούνται Matlab και Python scripts (σχήμα 4.1). Στον Fortran κώδικα υλοποίησης του επιλυτή έχουν ενσωματωθεί οι κατάλληλες οδηγίες OpenMP (1.5.1)

προς τον μεταγλωττιστή, οριοθετώντας τα προς παράλληλη επεξεργασία τμήματα του κώδικα με τις βέλτιστες (ως κρίθηκαν κατά τη σύνταξη του κώδικα) παραμέτρους. Οι δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν είχαν προφανή στόχο τον περιορισμό του χρόνου υλοποίησης, ως εκ τούτου, χρησιμοποιούνται πολλαπλά νήματα εκτέλεσης στο σύνολο αυτών. Οι χρονικές διαφοροποιήσεις μεταξύ διαφορετικού αριθμού νημάτων παρατίθενται σχηματικά στο τέλος της υποενότητας.

Στη συνέχεια, στην υποενότητα 4.2, παρουσιάζεται η διαδικασία υλοποίησης του επιλυτή με χρήση της BiCGSTAB σε υπερυπολογιστικό σύστημα με χρήση πολλαπλών υπολογιστικών κόμβων και τα αποτελέσματα που προκύπτουν σε συγκεκριμένες δοκιμές επαλήθευσης. Για την υλοποίηση χρησιμοποιήθηκε η υπολογιστική υποδομή του συστήματος ARIS, λεπτομέρειες για το οποίο ακολουθούν στη συγκεκριμένη υποενότητα.



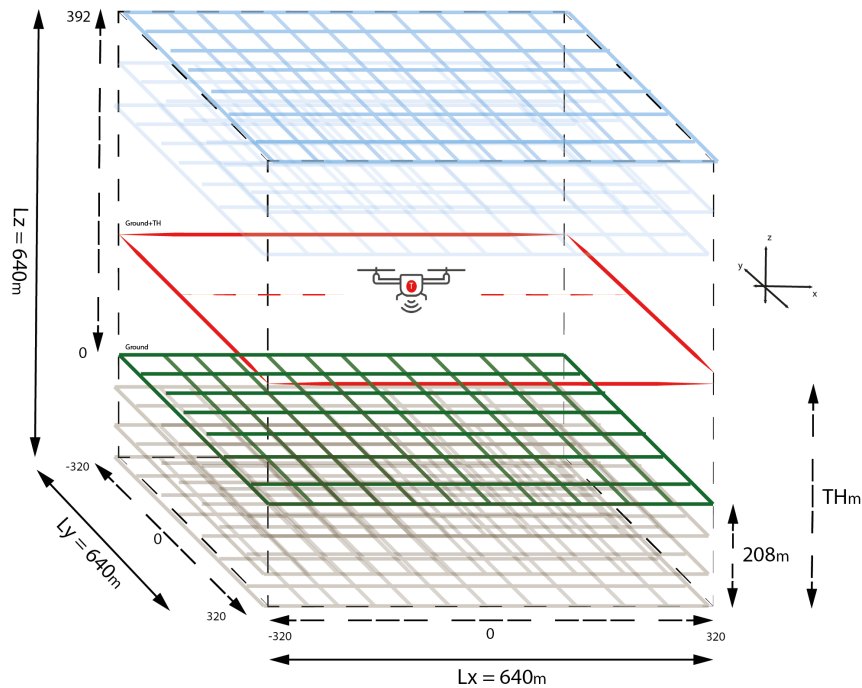
Σχήμα 4.1: Διάγραμμα ροής υπολογισμών του επιλυτή

4.0.1 Μοντέλο δοκιμών

Το μοντέλο του προβλήματος σε όλες τις δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν είναι μια περιοχή ομοιογενούς ημιχώρου σε μορφή κύβου με διαστάσεις $\underbrace{640}_{L_x} \times \underbrace{640}_{L_y} \times \underbrace{640}_{L_z}$ (σε μέτρα).

Υπενθυμίζεται ότι στον ομοιογενή ημιχώρο η περιοχή πάνω από την περιοχή του συνόρου αναπαριστά αέρα (με σχεδόν μηδενική αγωγιμότητα) ενώ η περιοχή κάτω από το σύνορο θεωρείται ως ένα ενιαίο μέσο στο υπέδαφος με ομοιογενής ηλεκτρικές ιδιότητες. Η νοητή γραμμή του εδάφους τέθηκε στη θέση $z = 0, 208m$ από την κάτω έδρα του κύβου (σχήμα 4.2). Το ύψος του πομπού είναι TH ($12m, 22m$ ή $42m$ ανάλογα τις δοκιμές) και η θέση του στο xy -επίπεδο η $(x = 0, y = 0)$. Συνεπώς, θεωρήθηκαν

$$-320 \leq x \leq 320, -320 \leq y \leq 320, \underbrace{-208 \leq z}_{\text{υπέδαφος}}, \underbrace{z < 432}_{\text{αέρας}}$$

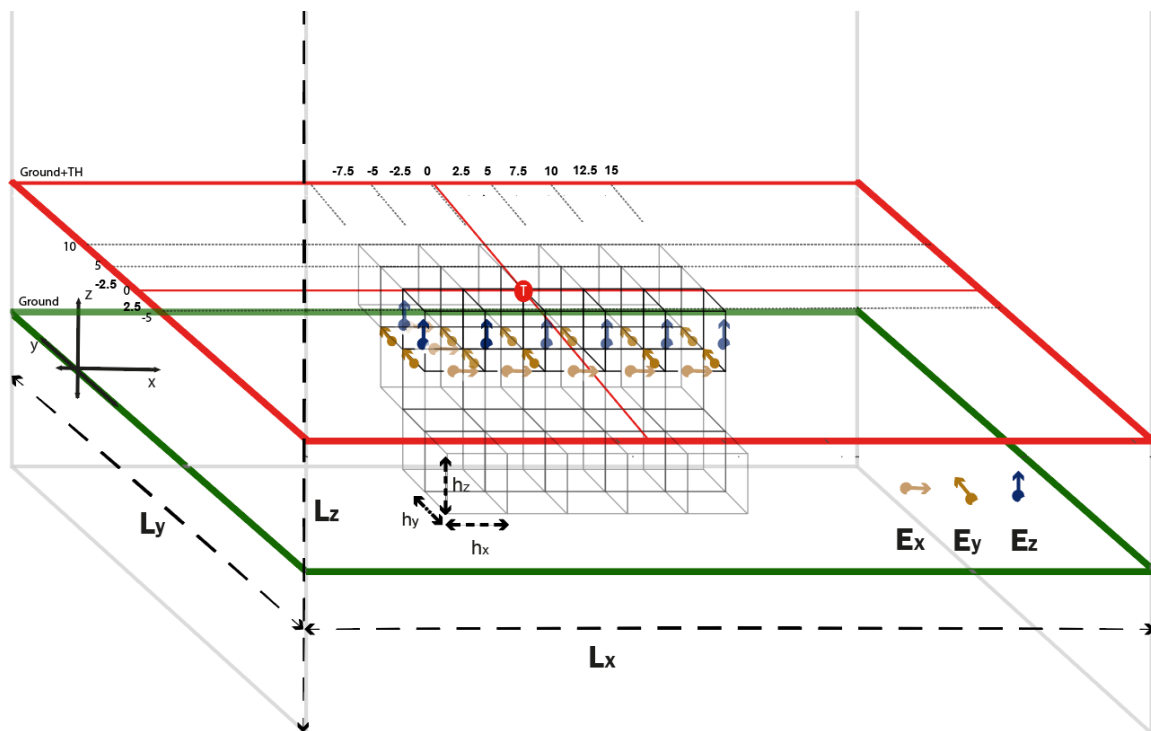


Σχήμα 4.2: Μοντέλο δοκιμών

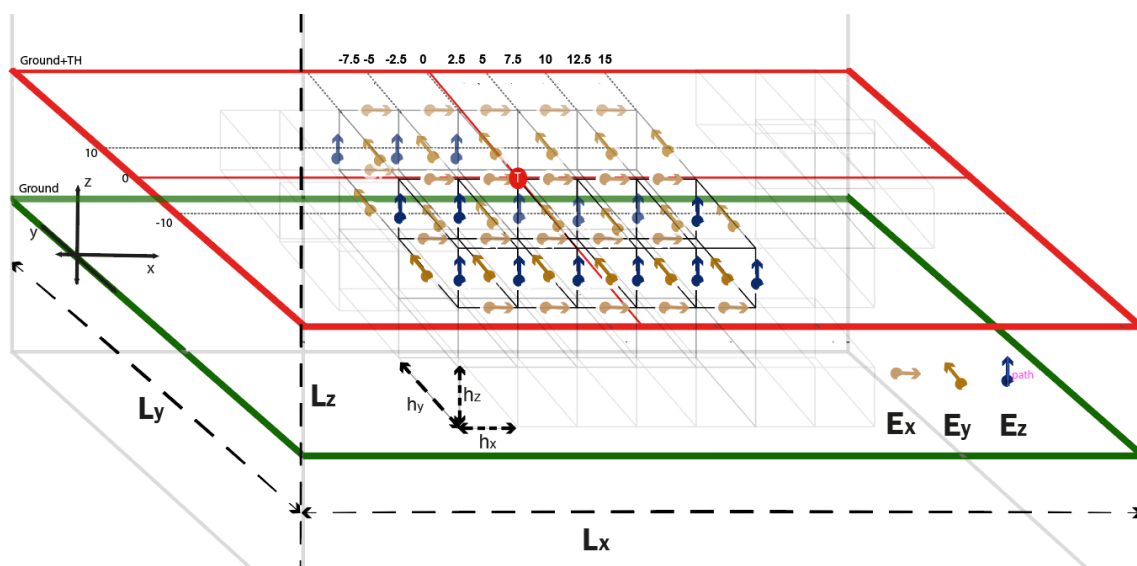
Όπως έχει ήδη αναφερθεί, ο επιλυτής έχει σχεδιαστεί ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί με διαφορετικό μήκος κελιού σε κάθε διάσταση (διαφορετικό h στην διακριτοποίηση κάθε διάστασης). Ως εκ τούτου, στην περίπτωση της επίλυσης με χρήση της BiCGSTAB όπου τα αρχικά αποτελέσματα κρίθηκαν ικανοποιητικά σε περιπτώσεις ομοιόμορφης διαμέρισης -με μειούμενο μήκος κελιού- πραγματοποιήθηκαν επιπλέον δοκιμές σε μη-ομοιόμορφα πλέγματα, συγκεκριμένα σε πλέγματα όπου το μήκος του κελιού ως προς τη διάσταση y είναι τετραπλάσιο αυτών στις δύο άλλες χωρικές διαστάσεις. Στην περίπτωση επίλυσης με απαλοιφή Gauss δεν πραγματοποιήθηκαν ανάλογες δοκιμές λόγω μη ικανοποιητικών αποτελεσμάτων (σε σχέση με το σφάλμα της προσέγγισης και το χρόνο υλοποίησης) σε περιπτώσεις ομοιόμορφης διαμέρισης.

Η διακριτοποίηση εφαρμόστηκε σε όλη την έκταση του μοντέλου, η επίλυση του προβλήματος πραγματοποιήθηκε σε όλη την περιοχή αυτού οπότε και η ένταση του δευτερεύοντος ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίστηκε σε κάθε σημείο του πλέγματος για την αντίστοιχη συνιστώσα.

Στα σχήματα 4.3 και 4.4 παρουσιάζεται ενδεικτικά η περιοχή ελέγχου με εφαρμογή του σχήματος διακριτοποίησης από την ενότητα 3.2 με ομοιόμορφη διαμέριση και μη-ομοιόμορφη διαμέριση αντίστοιχα.

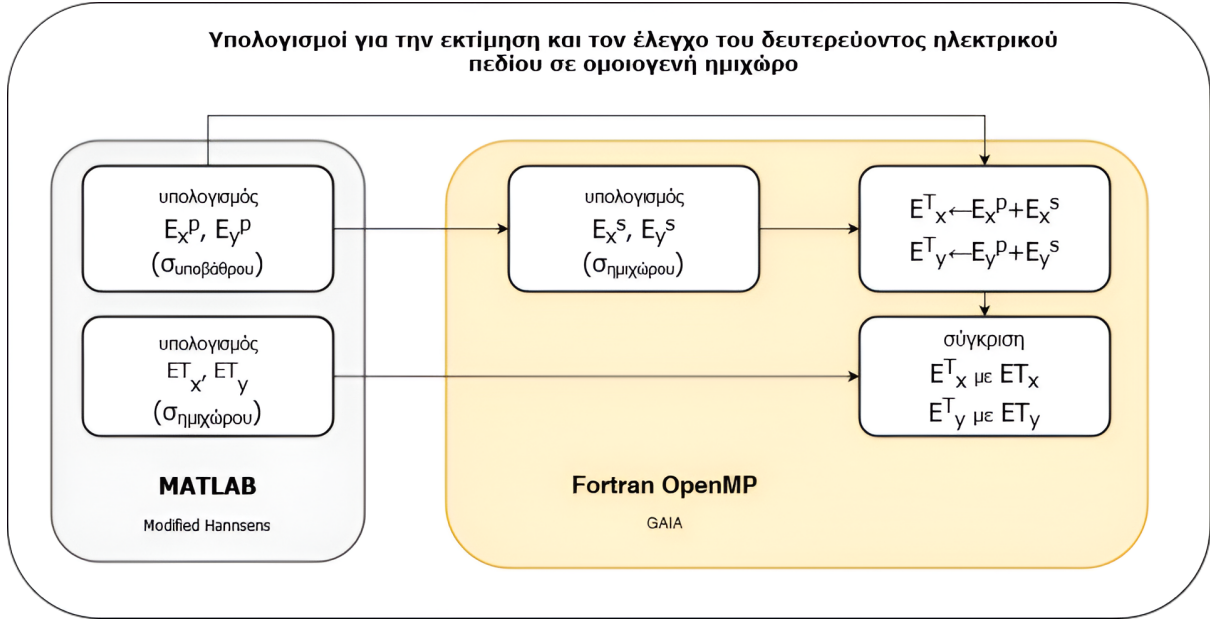


Σχήμα 4.3: Οι συνιστώσες E_x , E_y , E_z σε ομοιόμορφα διαμερισμένο πλέγμα. Το TH υποδηλώνει το ύψος του πομπού από το έδαφος, το T τη θέση του πομπού ενώ το Ground τη θέση του εδάφους. Το πλέγμα που εμφανίζεται ενδεικτικά μεταξύ εδάφους και πηγής είναι μέρος του συνολικού πλέγματος της διακριτοποίησης που εκτείνεται σε όλο το εύρος του μοντέλου.



Σχήμα 4.4: Οι συνιστώσες E_x , E_y , E_z σε μη-ομοιόμορφα διαμερισμένο πλέγμα. Το TH υποδηλώνει το ύψος του πομπού από το έδαφος, το T τη θέση του πομπού ενώ το Ground τη θέση του εδάφους. Το πλέγμα που εμφανίζεται ενδεικτικά μεταξύ εδάφους και πηγής είναι μέρος του συνολικού πλέγματος της διακριτοποίησης που εκτείνεται σε όλο το εύρος του μοντέλου.

Για τον έλεγχο των αριθμητικών αποτελεσμάτων της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου σε όλες τις δοκιμές χρησιμοποιήθηκαν, ως αναλυτική λύση, οι τιμές της έντασης του πεδίου που προκύπτουν από τον μετασχηματισμό Hankel ([19], [31]). Συγκεκριμένα, για την επαλήθευση των τιμών, υπολογίζονται οι τιμές του πρωτεύοντος πεδίου E_x^p και E_y^p για αγωγιμότητα σ_p (υπόβαθρο), προστίθενται στις τιμές του δευτερεύοντος πεδίου E_x^s και E_y^s που παράγει ο επιλυτής για αγωγιμότητα ημιχώρου σ και, κατόπιν, το άθροισμα τους E_x^T και E_y^T αντίστοιχα, συγκρίνεται με τις τιμές της έντασης του πεδίου που προκύπτουν αν στη διαδικασία υπολογισμού του πρωτεύοντος πεδίου ορισθεί αγωγιμότητα σ . Για να καταστεί εφικτός ο υπολογισμός των τιμών του πρωτεύοντος πεδίου και των τιμών επαλήθευσης, τροποποιήθηκε κατάλληλα ο αλγόριθμος του Hanssens ([13]) στο περιβάλλον της Matlab.



Σχήμα 4.5: Αναπαράσταση της διαδρομής των υπολογισμών προς την επαλήθευση της αριθμητικής λύσης

Το σχήμα 4.5 παρουσιάζει ενδεικτικά τη διαδρομή υπολογισμών προς τον έλεγχο των αριθμητικών τιμών της έντασης του δευτερεύοντος ηλεκτρικού πεδίου που υπολογίζει ο επιλυτής.

Κατά συνέπεια, ως αναλυτική λύση θεωρείται η ένταση του πεδίου που παράγεται από τη modified Hanssens για αγωγιμότητα σ και συγκρίνεται, στο σύνολο των δοκιμών, με τα E_x^T και E_y^T αντίστοιχα. Η σύγκριση πραγματοποιείται σε θέσεις πάνω από την επιφάνεια του εδάφους όπου αφενός υφίσταται η αναλυτική λύση για ομοιογενή ημιχώρο και αφετέρου λαμβάνονται, συνήθως, οι γεωφυσικές μετρήσεις. Προκειμένου δε να είναι εφικτός λεπτομερής έλεγχος παρατίθενται και διαγράμματα με το ποσοστιαίο σχετικό σφάλμα του πραγματικού και του φανταστικού μέρους της προσέγγισης σε κάθε κόμβο i των συνιστωσών E_x, E_y , σύμφωνα με τους τύπους

$$\%Error_{\Re(E_i^T)} = 100 \cdot \frac{|\Re(E_i^T) - \Re(ET_i)|}{|\Re(ET_i)|}$$

$$\%Error_{\Im(E_i^T)} = 100 \cdot \frac{|\Im(E_i^T) - \Im(ET_i)|}{|\Im(ET_i)|}$$

Επιπλέον, όπως αναφέρθηκε και στην εισαγωγική περιγραφή, οι δοκιμές εστιάζουν σε τεχνικές διασκόπησης από αέρος, δηλαδή θεωρούν το ύψος του διπόλου τέτοιο ώστε να φέρεται

από drone ή ελικόπτερο. Ο πομπός σε κάθε περίπτωση βρίσκεται στη θέση $x = y = 0$ στο επίπεδο xy και σε ύψος TH από το έδαφος εντός της περιοχής ελέγχου όπως φαίνεται και στα σχήματα 4.3 και 4.4. Στο σύνολο των δοκιμών η αγωγιμότητα του αέρα είναι 10^{-8} S/m.

4.1 Υλοποίηση σε αρχιτεκτονικές κοινής μνήμης

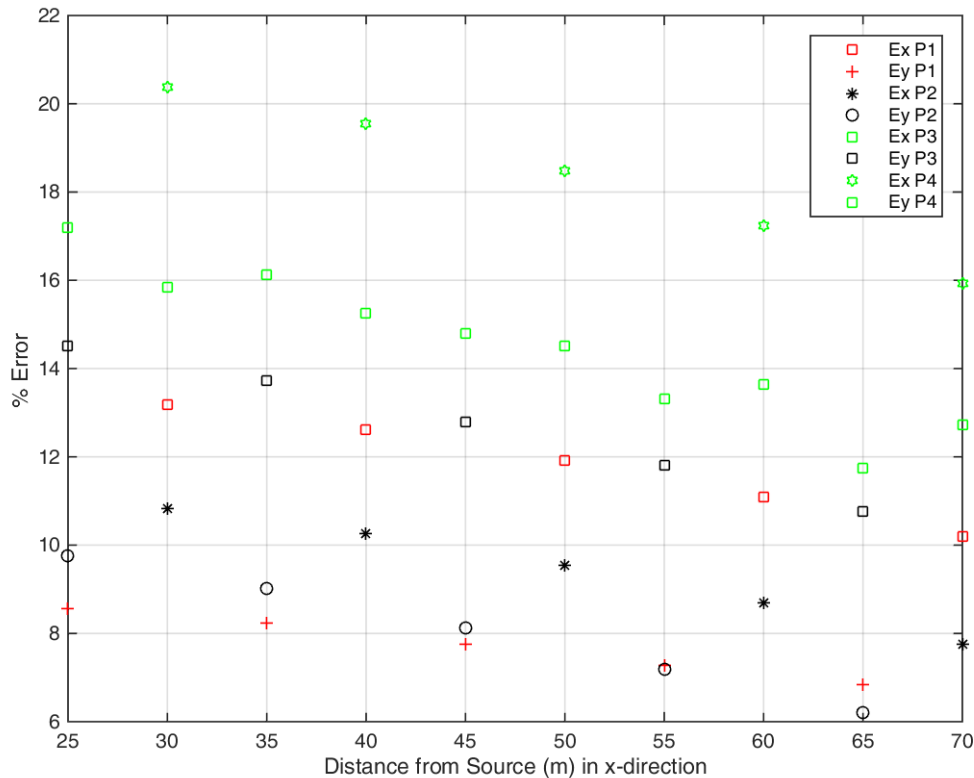
4.1.1 Αποτελέσματα υλοποίησης με επίλυση συστήματος με απαλοιφή

Η αρχική προσέγγιση για την επίλυση του γραμμικού συστήματος 3.69 ήταν αυτή της απαλοιφής όπως περιγράφηκε στην υποενότητα 3.3.2. Τα αρχικά αριθμητικά αποτελέσματα δεν κρίθηκαν ικανοποιητικά και παράλληλα οι χρόνοι υλοποίησης της μεθόδου ήταν ιδιαίτερα μεγάλοι για ρεαλιστικές εφαρμογές οπότε και θεωρήθηκε αναγκαία η διαφορετική προσέγγιση στην επίλυση του συστήματος από τις αρχικές βασικές δοκιμές ομοιόμορφων πλεγμάτων.

Για τον έλεγχο της επίδοσης του αλγορίθμου θεωρήθηκε ομοιόμορφη διαμέριση, αρχικά με $h = h_x = h_y = h_z = 20m$ και στη συνέχεια με $h = h_x = h_y = h_z = 10m$ στις 3 διαστάσεις σε όλη την έκταση του μοντέλου 4.2 του ομοιογενούς ημιχώρου. Χρησιμοποιήθηκαν συχνότητες από 900Hz μέχρι 30kHz και τυπικές για γεωφυσικές έρευνες τιμές αγωγιμότητας σε υπόβαθρο και ημιχώρο αντίστοιχα. Το ύψος του πομπού καθορίστηκε στα 22m.

Οι παράμετροι υλοποίησης του επιλυτή τέθηκαν ως εξής: Η ανοχή στο σφάλμα της επαναληπτικής μεθόδου BiCGSTAB στις παραλλαγές επιλύσεων με τους πίνακες U , V και P καθορίστηκε 10^{-6} με μέγιστο πλήθος 80 βημάτων, ενώ στην Τεχνική Πολυπλέγματος ορίστηκαν 2 βήματα εξομάλυνσης σε κάθε διαδρομή του V -κύκλου.

Ο πίνακας 4.1 παρουσιάζει τις περιπτώσεις δοκιμών σε πλέγμα ομοιόμορφης διαμέρισης με $h = h_x = h_y = h_z = 10m$ και εφαρμογή απαλοιφής στο 3.69, όπως περιγράφηκε στην 3.3.2 ενώ στο σχήμα 4.6 παρατίθενται τα σχετικά σφάλματα κάθε περίπτωσης.

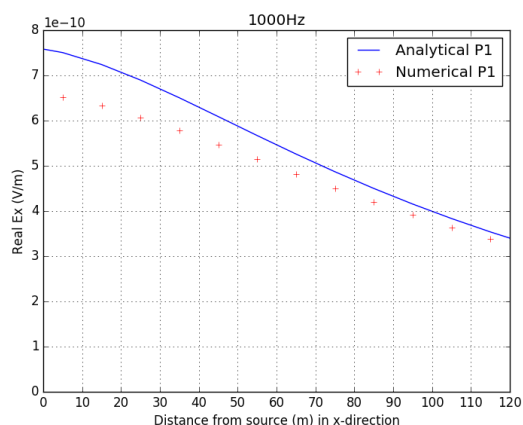


Σχήμα 4.6: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού μέρους των E_x και E_y στις περιπτώσεις P_1, P_2, P_3 και P_4

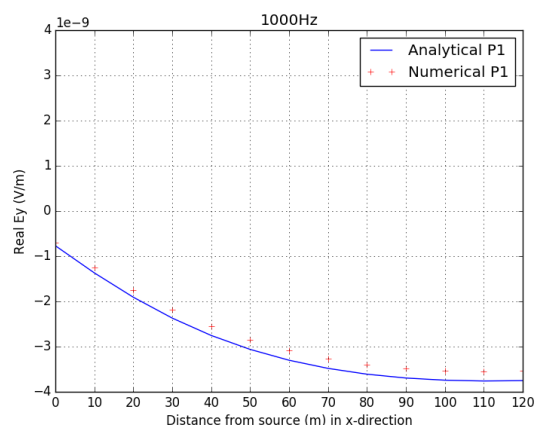
Περίπτωση	Συχνότητα	σ_0 -Υποβάθρου	σ -Ημιχώρου	Ύψος Πομπού
P_1	900	0.001	0.01	22
P_2	3000	0.001	0.01	22
P_3	10000	0.001	0.01	22
P_4	30000	0.001	0.01	22

Πίνακας 4.1: Περιπτώσεις δοκιμών για πλέγμα ομοιόμορφης διαμέρισης με $h = h_x = h_y = h_z = 10m$ με επίλυση του συστήματος με απαλοιφή

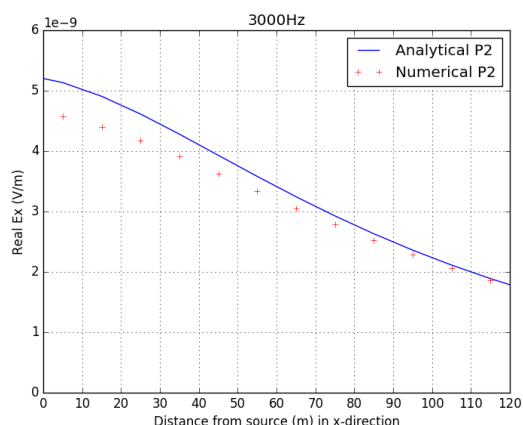
Στη συνέχεια ακολουθούν οι συγκρίσεις του πραγματικού μέρους των $\mathbf{E}_x^T, \mathbf{E}_y^T$ με τις αντίστοιχες αναλυτικές λύσεις για κάθε περίπτωση του πίνακα 4.1 (σχήματα 4.7, 4.8, 4.9, 4.10, 4.11, 4.12, 4.13, 4.14).



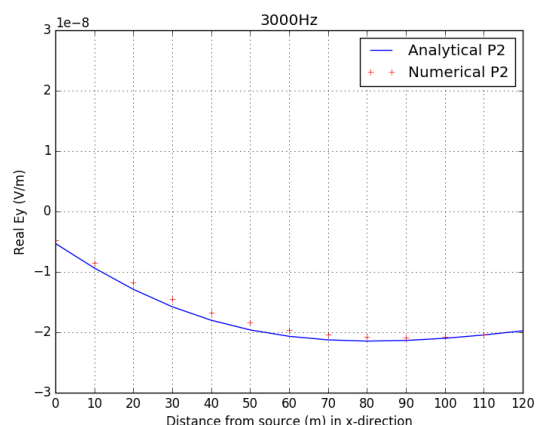
Σχήμα 4.7: Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 1000Hz



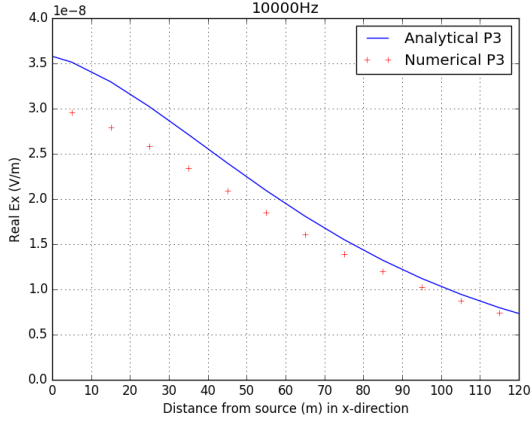
Σχήμα 4.8: Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 1000Hz



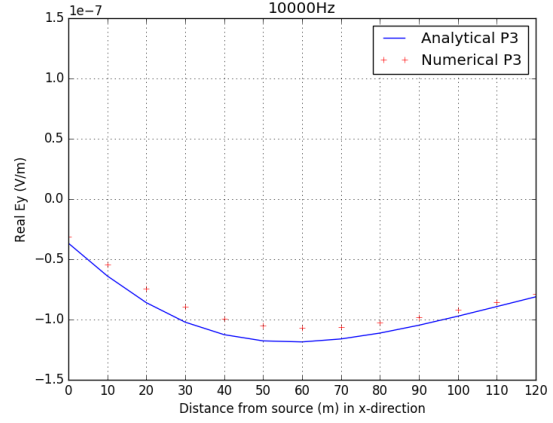
Σχήμα 4.9: Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_x^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz



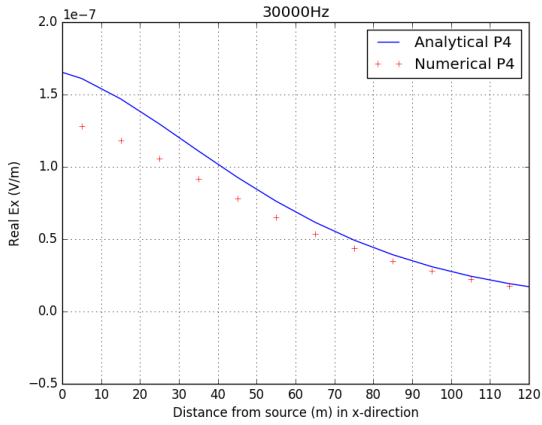
Σχήμα 4.10: Σύγκριση πραγματικού μέρους \mathbf{E}_y^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz



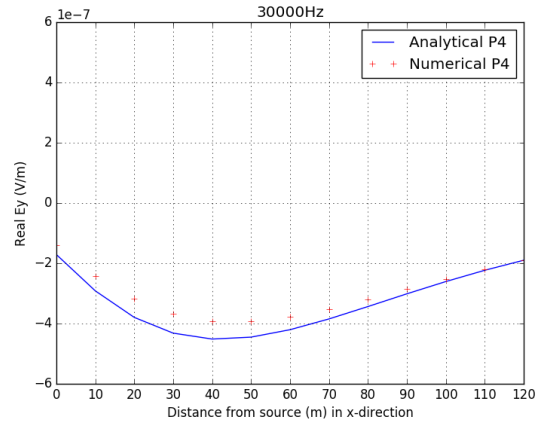
Σχήμα 4.11: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz



Σχήμα 4.12: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz



Σχήμα 4.13: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz



Σχήμα 4.14: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz

Με βάση τα παραπάνω σχήματα μπορούν να εξαχθούν τα εξής συμπεράσματα:

- Τα σφάλματα που παρουσιάζει η μέθοδος επίλυσης είναι εν γένει σημαντικά σε περιοχές κοντά στον πομπό. Σε υψηλές συχνότητες είναι άνω του 14%, σε περιπτώσεις χαμηλών συχνοτήτων περιορίζονται σε εύρος 6 – 12%, τιμές οι οποίες όμως δεν θεωρούνται ικανοποιητικές ώστε οι προσεγγίσεις του δευτερεύοντος πεδίου από το οποίο προκύπτουν να χρησιμοποιηθούν για την εκτίμηση του μαγνητικού πεδίου ώστε κατ'επέκτασιν να τροφοδοτήσουν τον αλγόριθμο στο πρόβλημα του αντιστρόφου (2.1). Σε περιοχές μεταξύ των 50 – 120m η απόκλιση των τιμών προσέγγισης και αναλυτικών λύσεων είναι μικρότερη, σε κάθε περίπτωση όμως υπερβαίνει τους στόχους που είχαν τεθεί.
- Η συνιστώσα E_x^T εμφανίζει σε κάθε περίπτωση μεγαλύτερο σφάλμα από την E_y^T . Αυτό παρότι η E_y^T υπολογίζεται χρησιμοποιώντας την προσέγγιση της E_x^T ο υπολογισμός της οποίας προηγείται στον αλγόριθμο 20. Μια εξήγηση που μπορεί να δοθεί είναι το πλήθος των υπολογισμών που απαιτούνται λόγω της δομής του πίνακα U (πολλαπλασιασμοί και επιλύσεις) με την επακόλουθη συσσώρευση αριθμητικών σφαλμάτων.

- Παρά το γεγονός ότι η ευστάθεια της διαδικασίας της Τεχνική Πολυπλέγματος επιβεβαιώθηκε σε πολλαπλές εξωτερικές δοκιμές, η εφαρμογή της ως προορυθμιστής του πίνακα P πιθανώς να λειτουργεί επιβαρυντικά συνολικά στον αλγόριθμο.

Επιπλέον των προαναφερόμενων συμπερασμάτων πρέπει να σημειωθεί ότι ο χρόνος υλοποίησης στο σύνολο των δοκιμών για την προαναφερόμενη διαμέριση ξεπερνούσε τα 90000 δευτερόλεπτα, καθιστώντας την παραπάνω προσέγγιση επίλυσης μη αξιοποιήσιμη σε πραγματικές εφαρμογές.

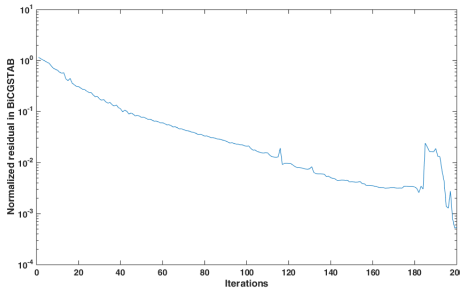
4.1.2 Αποτελέσματα υλοποίησης με BiCGSTAB

Εν συνεχεία πραγματοποιήθηκαν δοκιμές με εφαρμογή της μεθόδου BiCGSTAB στην επίλυση του 3.69 βάσει των αλγορίθμων που παρουσιάστηκαν στην υποενότητα 3.3.1. Η επίδοση του επιλυτή ελέγχθηκε προκαταρκτικά σε αραιά πλέγματα ομοιόμορφης διαμέρισης και κατόπιν σε πυκνά, μειώνοντας σταδιακά το μήκος του υπολογιστικού κελιού $h = h_x = h_y = h_z$ από $20m$ σε $10m$ και εν τέλει $5m$ και στις 3 διαστάσεις. Πραγματοποιήθηκαν επίσης δοκιμές με διαφορετικά ύψη πομπού, διατηρώντας όμως την αρχική προϋπόθεση ανάπτυξης επιλυτή για χαμηλά ή/και πολύ χαμηλά ύψη. Χρησιμοποιήθηκε ένα τυπικό εύρος συχνοτήτων εκπομπής κύματος από $900Hz$ μέχρι $30kHz$ και τυπικές για γεωφυσικές έρευνες τιμές αγωγιμότητας σε υπόβαθρο και ημιχώρο αντίστοιχα.

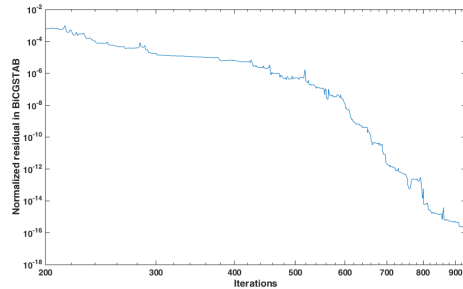
Θέτοντας παραμέτρους εκτέλεσης της BiCGSTAB, ανοχή στο σφάλμα υπολογισμών της τάξης του 10^{-6} με ανώτατο όριο τις 1000 επαναλήψεις, οι χρόνοι υλοποίησης σε πολυεπεξεργαστικό σύστημα με πολλαπλά νήματα εκτέλεσης κρίθηκαν ικανοποιητικοί και ενθαρρυντικοί για ρεαλιστική εφαρμογή. Η τιμή του κριτηρίου ανοχής για το υπόλοιπο $r = b - UE$ της επαναληπτικής μεθόδου καθορίστηκε μετά από σύνολο δοκιμών στις οποίες η τιμή ανοχής αυξανόταν διαδοχικά (10^{-15} , 10^{-12} , 10^{-9} , 10^{-6}) με παράλληλη σύγκριση του σχετικού σφάλματος προσεγγίσεων-αναλυτικής λύσης οπότε και παρατηρήθηκε ότι περαιτέρω επαναληπτικά βήματα έχουν αμελητέα επίδραση στο σφάλμα (4.15α', 4.15β'). Σημειώνεται ότι για τον παραπάνω έλεγχο της σύγκλισης χρησιμοποιήθηκε η Ευκλείδεια νόρμα του υπολοίπου $r \in \mathbb{C}$ σε κάθε επαναληπτικό βήμα i

$$\|r^{(i)}\| = \sqrt{\langle r^{(i)}, r^{(i)} \rangle} = \sqrt{r^{*(i)} r^{(i)}} = \sum_{k=1}^n \bar{r}^{(i)} r^{(i)} \quad (4.1)$$

σε σχέση με την Ευκλείδεια νόρμα του αρχικού υπολοίπου, συγκεκριμένα $\frac{\|r^{(i)}\|}{\text{inr}} < \epsilon$ όπου $\text{inr} = \|r^{(0)}\| = \|b\|$.



(α') Επανάληψη $i = 1 - 100$



(β') Επανάληψη $i = 101 - 930$

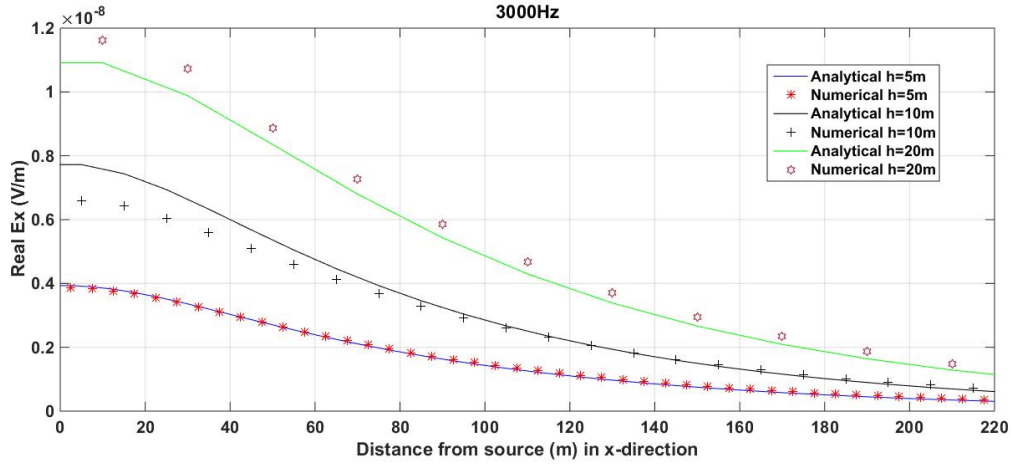
Σχήμα 4.15: Ευκλείδεια νόρμα υπολοίπου $\|r_i\| = \|b_i - UE_i\|$ κατά την επαναληπτική διαδικασία

Δοκιμές σε πολύ χαμηλό ύψος πομπού

Ομοιόμορφη διαμέριση

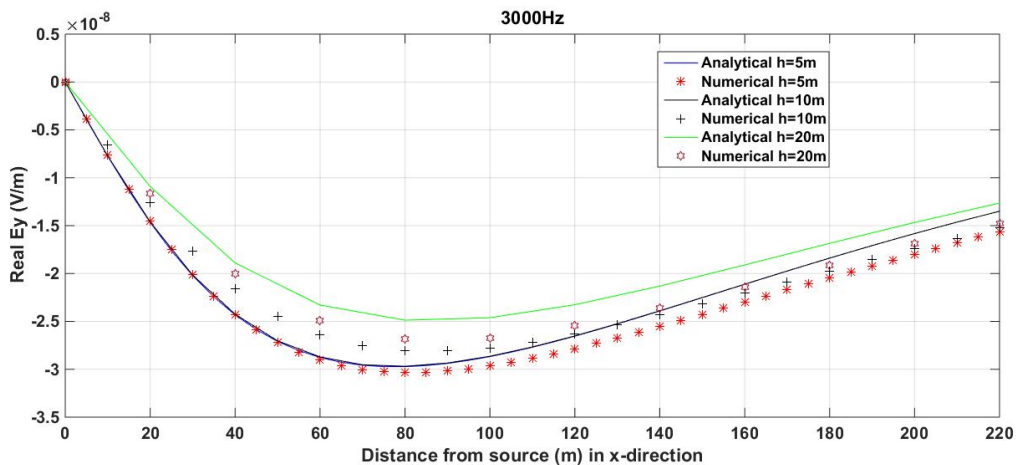
Καθορίζοντας το ύψος του πομπού στα **22m** από το έδαφος ελέγχεται η επίδοση του επιλυτή με σύγκριση του πραγματικού μέρους των συνιστωσών E_x^T και E_y^T της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου για συχνότητα εκπομπής $f = 3000Hz$ και αγωγιμότητα ημιχώρου $\sigma = 0.01S/m$ σε πλέγματα με ομοιόμορφη διαμέριση, όπως παρουσιάζεται στα σχήματα 4.16 και 4.17 για θέσεις του δέκτη στη x -κατεύθυνση και σε απόσταση μέχρι $200m$. Όπως αναφέρθηκε και στην περιγραφή του προβλήματος (υποενότητα 2.1.2), το πραγματικό μέρος της συνολικής

έντασης είναι εκείνο που επηρεάζεται κυρίως από το δευτερεύον ηλεκτρικό πεδίο. Σημειώνεται ότι η αναλυτική λύση διαφοροποιείται μεταβάλλοντας το μήκος h του υπολογιστικού κελιού καθώς υπολογίζεται σε διαφορετικές θέσεις ως προς την y -κατεύθυνση, συγκεκριμένα, για $h = 5m$ στις $(x, y = 2.5, z = 22)$, για $h = 10m$ στις $(x, y = 5, z = 22)$ και για $h = 20m$ $(x, y = 10, z = 22)$. Η σύγκριση αριθμητικής και αναλυτικής λύσης και στις δύο περιπτώσεις επιβεβαιώνει ότι η χρήση πυκνού πλέγματος οδηγεί σε καλύτερες προσεγγίσεις.

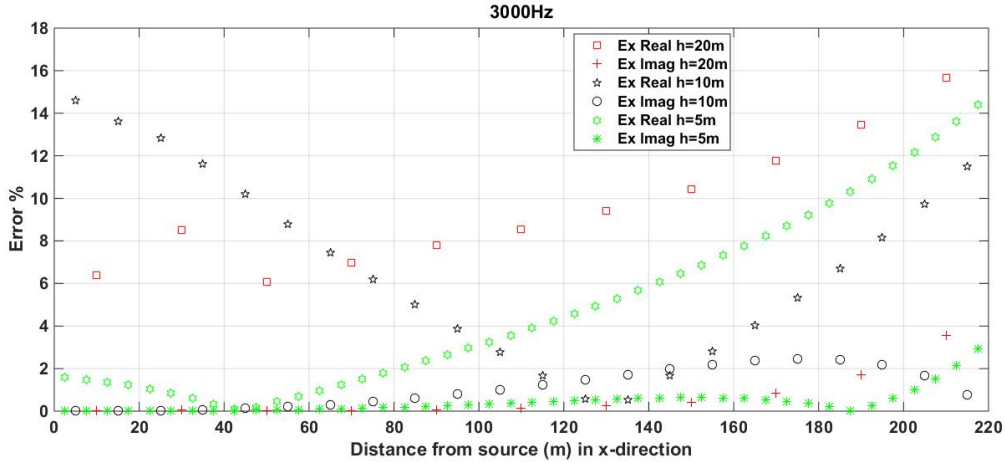


Σχήμα 4.16: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T με την αναλυτική λύση σε ομοιόμορφο πλέγμα με μήκος κελιού h . Η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζεται σε θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες $(x, y = 5, z = 22)$ για $h = 5m$ (ροζ *), $(x, y = 10, z = 22)$ για $h = 10m$ (μαύρο +) και $(x, y = 20, z = 22)$ για $h = 20m$ (μωβ 6-γωνο)

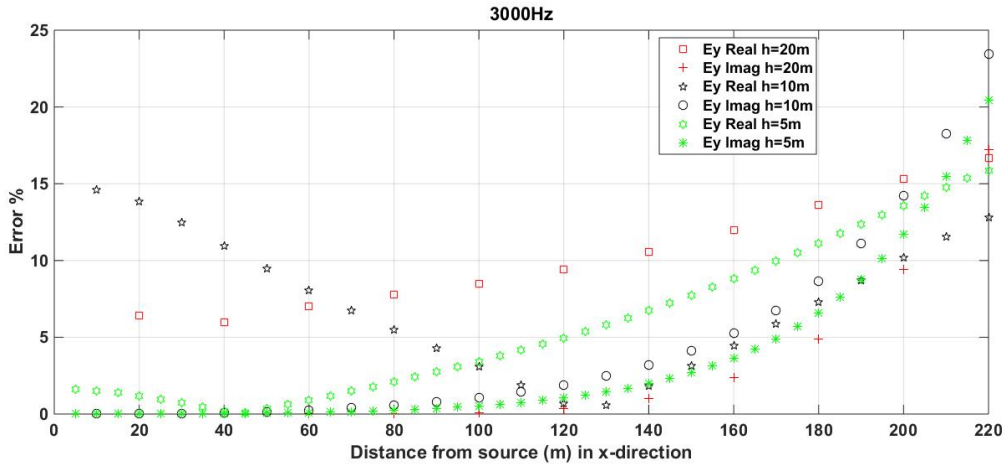
Ακολουθώντας, στα σχήματα 4.18 και 4.19 επιβεβαιώνεται, όπως ήταν αναμενόμενο, ότι το πυκνό πλέγμα οδηγεί σε χαμηλότερες τιμές σφάλματος μεταξύ αριθμητικών προσεγγίσεων και αναλυτικών λύσεων. Είναι επίσης εμφανές ότι το φανταστικό μέρος παρουσιάζει εξαιρετικά μικρό σφάλμα ($< 1\%$), το οποίο ερμηνεύεται από τη σχεδόν καθολική εξάρτηση του από την ένταση του πρωτεύοντος ηλεκτρικού πεδίου που παράγει ο πομπός και την ορθή αποτύπωση της φυσικής του προβλήματος από το αριθμητικό σχήμα.



Σχήμα 4.17: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T με την αναλυτική λύση σε ομοιόμορφο πλέγμα με μήκος κελιού h . Η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζεται σε θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες $(x, y = 2.5, z = 22)$ για $h = 5m$ (ροζ *), $(x, y = 5, z = 22)$ για $h = 10m$ (μαύρο +) και $(x, y = 10, z = 22)$ για $h = 20m$ (μωβ 6-γωνο)



Σχήμα 4.18: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους E_x^T - αναλυτικής λύσης



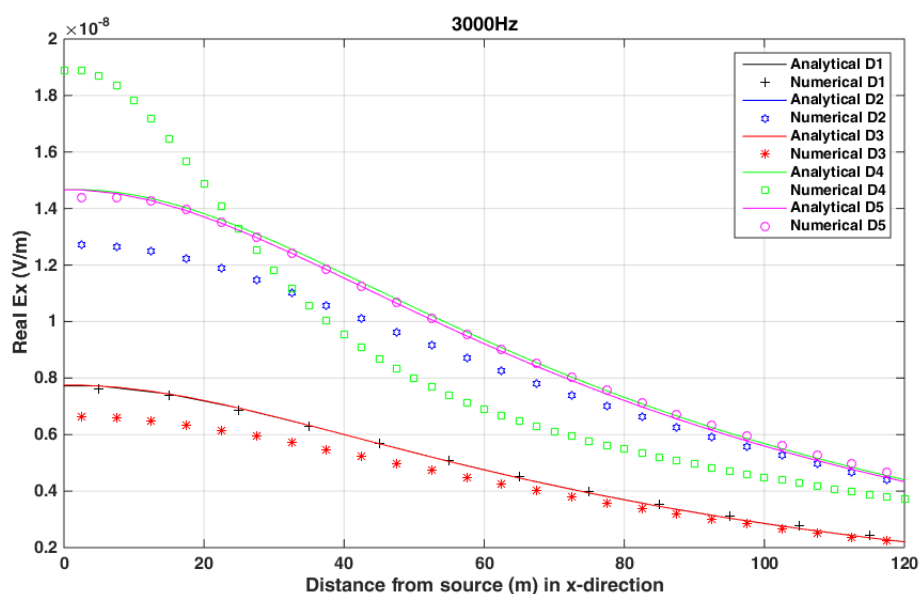
Σχήμα 4.19: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους E_y^T - αναλυτικής λύσης

Κατόπιν, ακολούθησαν δοκιμές σύγκρισης μεταξύ ομοιόμορφων και μη πλεγμάτων. Η επιλογή αραιότερου πλέγματος σε μια ή σε δύο κατευθύνσεις προφανώς περιορίζει τη διάσταση του προβλήματος και το πλήθος των υπολογισμών που απαιτούνται, κατ' επέκτασιν και το χρόνο επίλυσης. Αναζητώντας το βαθμό στον οποίο αυτή η διαφοροποίηση λειτουργεί σε βάρος της ακρίβειας της προσέγγισης, πραγματοποιήθηκαν δοκιμές ελέγχου ώστε να καθοριστούν τα χαρακτηριστικά της ανομοιομορφίας και να συγκριθούν σε σχέση με τις προσεγγίσεις στη βέλτιστη ομοιόμορφη διαμέριση που δοκιμάστηκε με το συγκεκριμένο σχήμα.

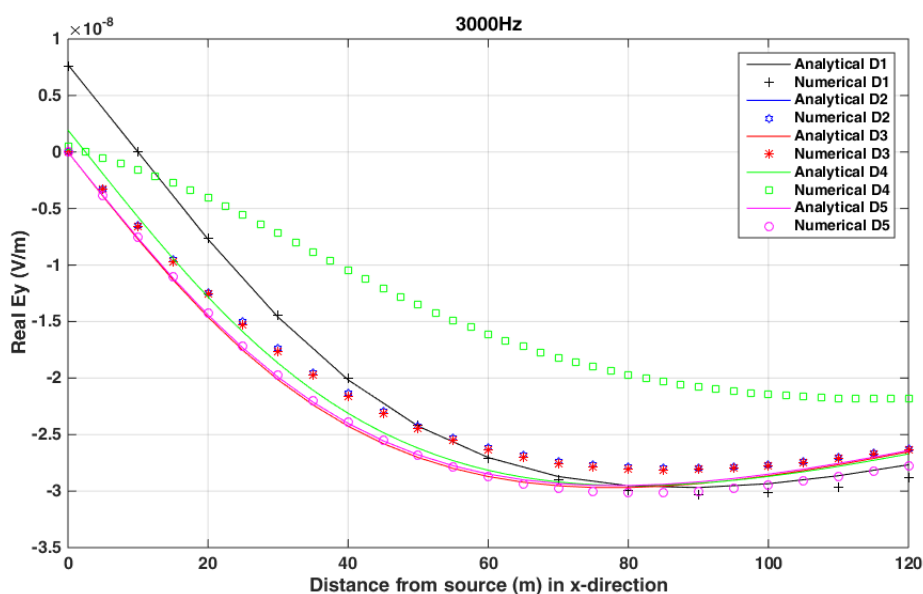
Στον πίνακα 4.2 εμφανίζονται τα πλέγματα με τις αντίστοιχες διαστάσεις όπως δοκιμάστηκαν ενώ τα σχήματα 4.20, 4.21 συγκρίνουν πραγματικά μέρη αριθμητικών προσεγγίσεων και αναλυτικών λύσεων των συνιστωσών E_x^T και E_y^T σε αυτά (η γραμμή της αναλυτικής λύσης της $D2$ επικαλύπτεται από αυτή της $D5$). Στο σύνολο αυτών των δοκιμών διατηρήθηκαν οι παράμετροι όπως αρχικά ετέθησαν, δηλαδή συχνότητα εκπομπής $f = 3000\text{Hz}$ και αγωγιμότητα ημιχώρου $\sigma = 0.01\text{S/m}$. Η διαμόρφωση του πλήθους των υποδιαστημάτων σε κάθε κατεύθυνση καθορίστηκε με βάση την πρόθεση για μέγιστο δυνατό περιορισμό του υπολογιστικού φόρτου και αντίστοιχη μείωση του χρόνου εκτέλεσης ώστε, παράλληλα, οι αποστάσεις μεταξύ των κόμβων να είναι κατάλληλες για ρεαλιστικές εφαρμογές.

Περίπτωση	n_x	h_x (m)	n_y	h_y (m)	n_z	h_z (m)	Πλήθος αγνώστων
D1	64	10	64	10	128	5	1532160
D2	128	5	32	20	64	10	757984
D3	128	5	64	10	64	10	1532160
D4	256	2.5	32	20	64	10	1519968
D5	128	5	32	20	128	5	1524000
-	128	5	128	5	128	5	6193536

Πίνακας 4.2: Υποδιαστήματα ανά κατεύθυνση για πλέγματα ανομοιόμορφης διαμέρισης που δοκιμάστηκαν

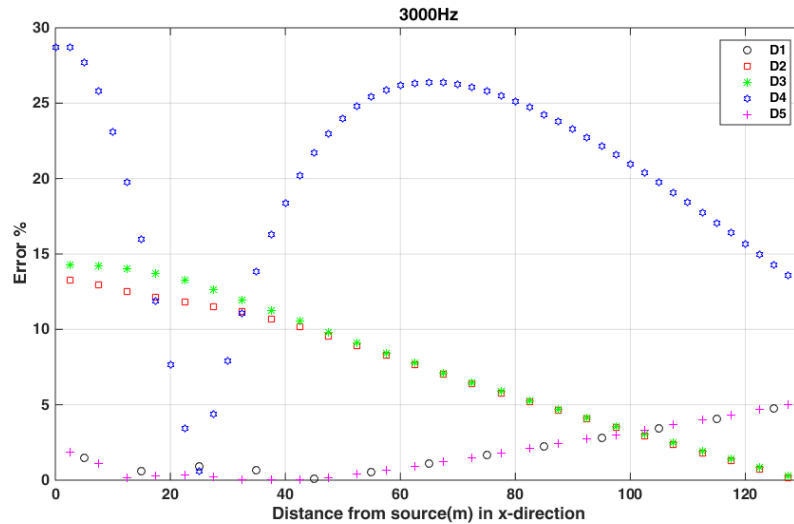


Σχήμα 4.20: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T με την αναλυτική λύση σε μη ομοιόμορφα πλέγματα με διαστάσεις κελιών όπως αναφέρονται στον πίνακα 4.2

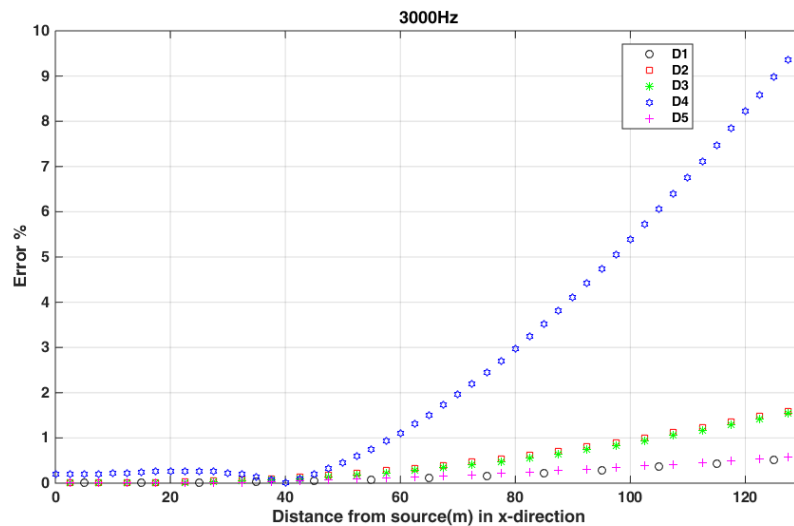


Σχήμα 4.21: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T με την αναλυτική λύση σε μη ομοιόμορφα πλέγματα με διαστάσεις κελιών όπως αναφέρονται στον πίνακα 4.2

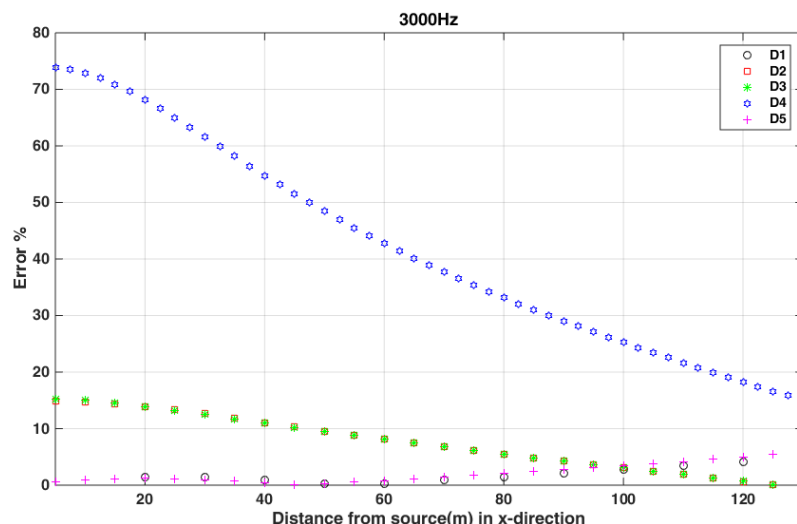
Όπως προκύπτει και από τη σύγκριση των τιμών του ποσοστιαίου σχετικού σφάλματος του πραγματικού μέρους των E_x^T και E_y^T στα σχήματα 4.22 και 4.24, οι D3 και D5 φέρονται να είναι οι καλύτερες δυνατές επιλογές (τα σχήματα 4.23 και 4.25 αφορούν το ποσοστιαίο σχετικό σφάλμα του φανταστικού μέρους των E_x^T και E_y^T στις διαφορετικές διαμερίσεις και επιβεβαιώνουν τη σταθερότητα του επιλυτή καθώς το σφάλμα διατηρείται κατά κανόνα σε ποσοστά $< 1\%$ σε απόσταση $< 100m$ από τον πομπό).



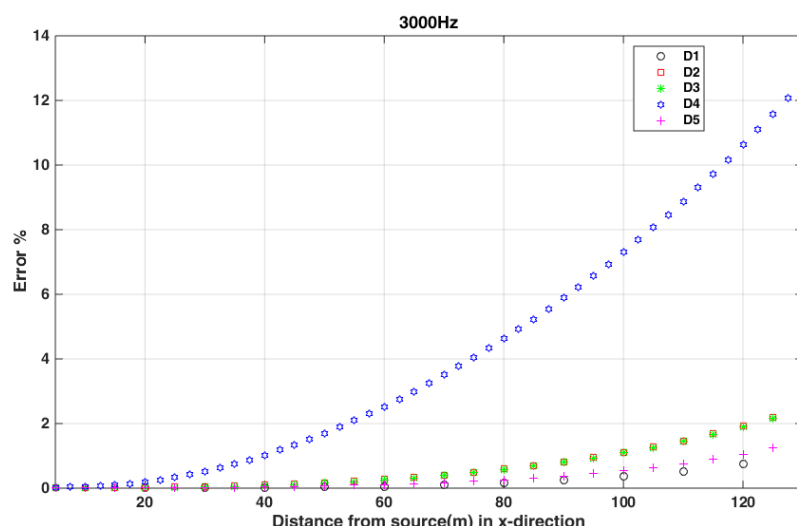
Σχήμα 4.22: Γράφημα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους του E_x^T στις περιπτώσεις από D1 μέχρι και D5. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %.



Σχήμα 4.23: Γράφημα σχετικού σφάλματος φανταστικού μέρους του E_x^T στις περιπτώσεις από D1 μέχρι και D5. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %.



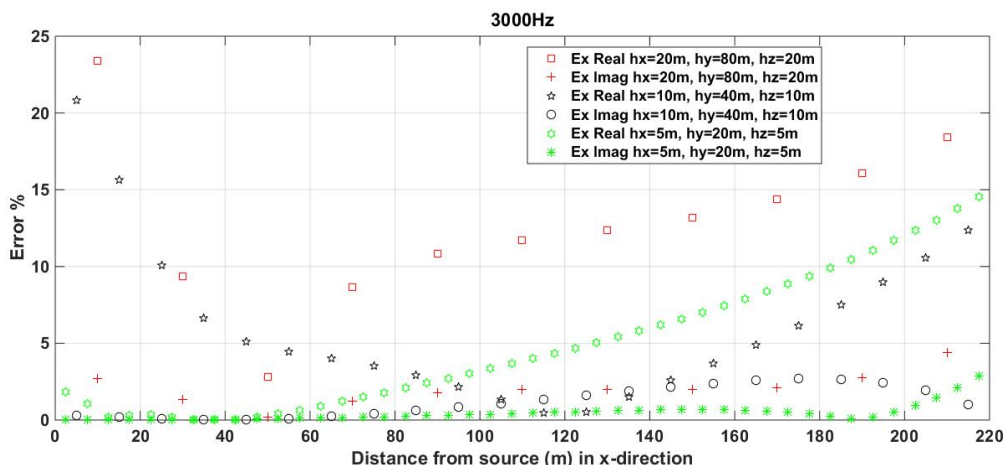
Σχήμα 4.24: Γράφημα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους του E_y^T στις περιπτώσεις από $D1$ μέχρι και $D5$. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα



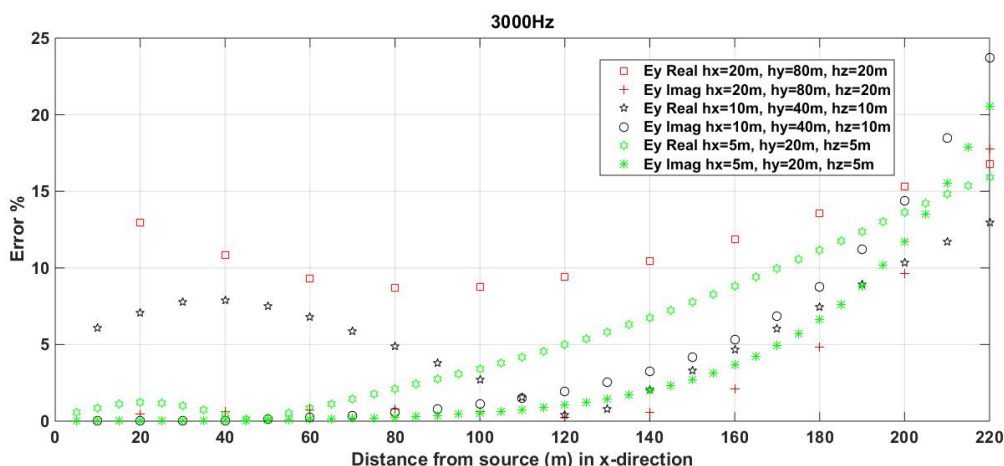
Σχήμα 4.25: Γράφημα σχετικού σφάλματος φανταστικού μέρους του E_y^T στις περιπτώσεις από $D1$ μέχρι και $D5$. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %.

Λαμβάνοντας υπόψιν το γεγονός ότι οι μετρήσεις συλλέγονται θεωρώντας το δέκτη κατά την x -κατεύθυνση (μήκος), οπότε εκεί είναι αναγκαίοι περισσότεροι υπολογιστικοί κόμβοι, και επιπλέον, ότι η αναζήτηση γεωηλεκτρικών δομών (με την απαιτούμενη ανάλυση) γίνεται κατά την z -κατεύθυνση (βάθος) για τις περαιτέρω δοκιμές επιλέχθηκε η διαμέριση $D5$ με $h_x = h_z = 5m$ και $h_y = 20m$, πυκνότερη (και ομοιόμορφη) κατά μήκος και βάθος και αραιότερη κατά πλάτος στην περιοχή του μοντέλου.

Προκαταρκτικά, πραγματοποιήθηκαν δοκιμές με αραιότερη διαμέριση με το χαρακτηριστικό της ανομοιομορφίας $h_x = h_z = \frac{1}{4}h_y$ στις 3 κατευθύνσεις, $h_x = h_z = 20m$ και $h_y = 80m$ και $h_x = h_z = 100m$ και $h_y = 40m$ και κατόπιν δοκιμές στην περίπτωση $h_x = h_z = 5m$ και $h_y = 20m$, προκειμένου να επιβεβαιωθεί η βελτίωση της προσέγγισης της αριθμητικής λύσης περνώντας από αραιό σε ενδιάμεσο και εν τέλει σε πυκνό μη ομοιόμορφο πλέγμα με αυτά τα χαρακτηριστικά. Στα σχήματα 4.26, 4.27 παρουσιάζονται τα σχετικά σφάλματα που προκύπτουν συγκρίνοντας αυτές τις δοκιμές, με ίδια χαρακτηριστικά ως προς συχνότητα και αγωγιμότητα ημιχώρου, μεταξύ ανομοιομορφων πλεγμάτων και επιβεβαιώνουν την παραπάνω υπόθεση.

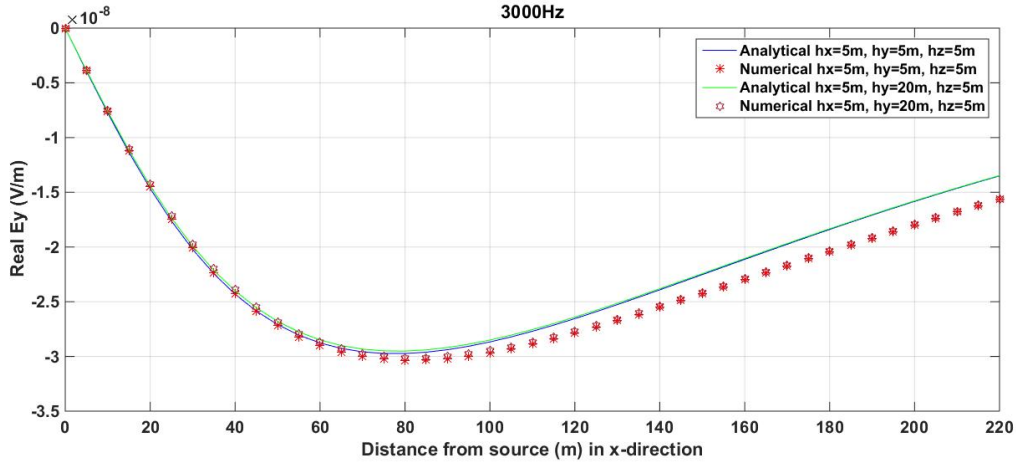


Σχήμα 4.26: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους E_x^T - αναλυτικής λύσης σε περιπτώσεις μη ομοιόμορφων πλεγμάτων

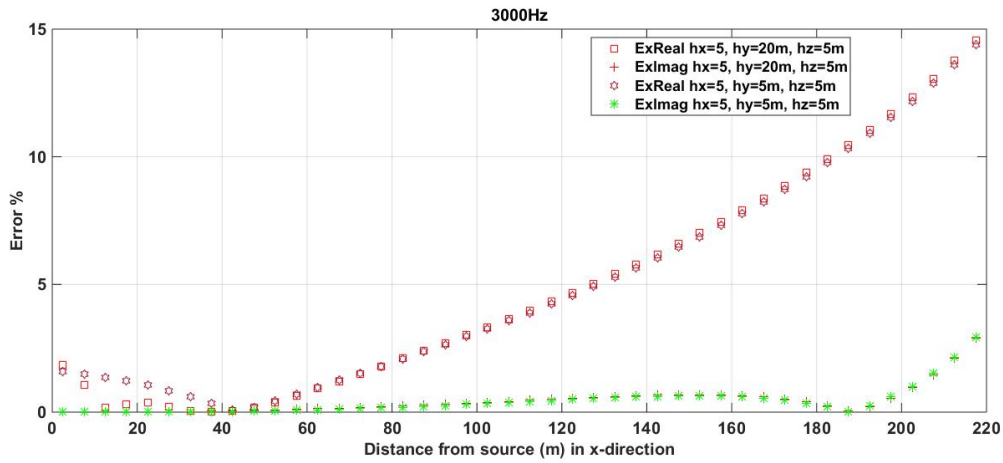


Σχήμα 4.27: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους E_y^T - αναλυτικής λύσης σε μη ομοιόμορφα πλέγματα

Στο σχήμα 4.28 δίνεται η σύγκριση των πραγματικών μερών της E_y^T συνιστώσας του πεδίου. Όπως μπορεί κανείς να συμπεράνει από τα παραπάνω σχήματα, από την υλοποίηση σε ομοιόμορφο πλέγμα προκύπτουν προσεγγίσεις με σφάλμα μικρότερο του 5% για θέσεις σε σχετικά μεγάλη απόσταση από τον πομπό ($\approx 170m$) ενώ σε υλοποίηση μη ομοιόμορφου πλέγματος το σφάλμα είναι εξίσου μικρό ($< 5\%$) σε σχετικά μικρότερη απόσταση από τον πομπό ($\approx 120m$), γεγονός που καθιστά ελκυστική την προοπτική χρήσης της μεθόδου σε εφαρμογές ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης.

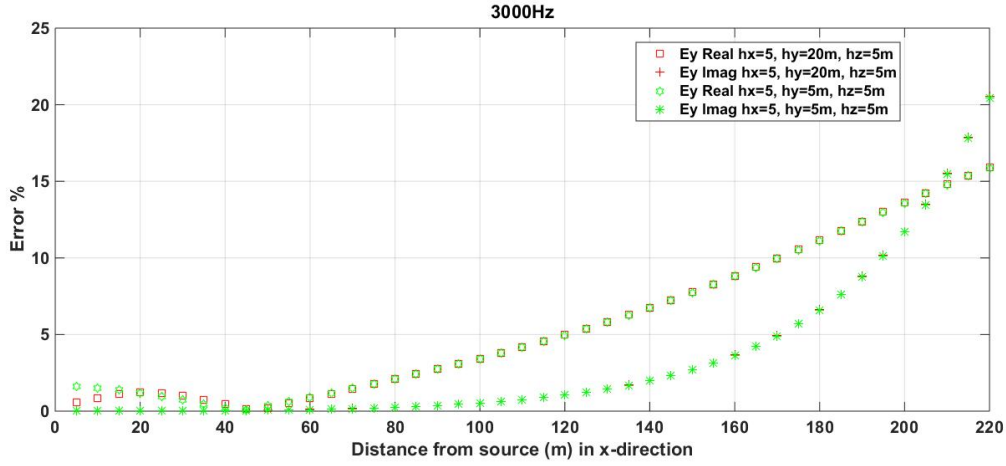


Σχήμα 4.28: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα

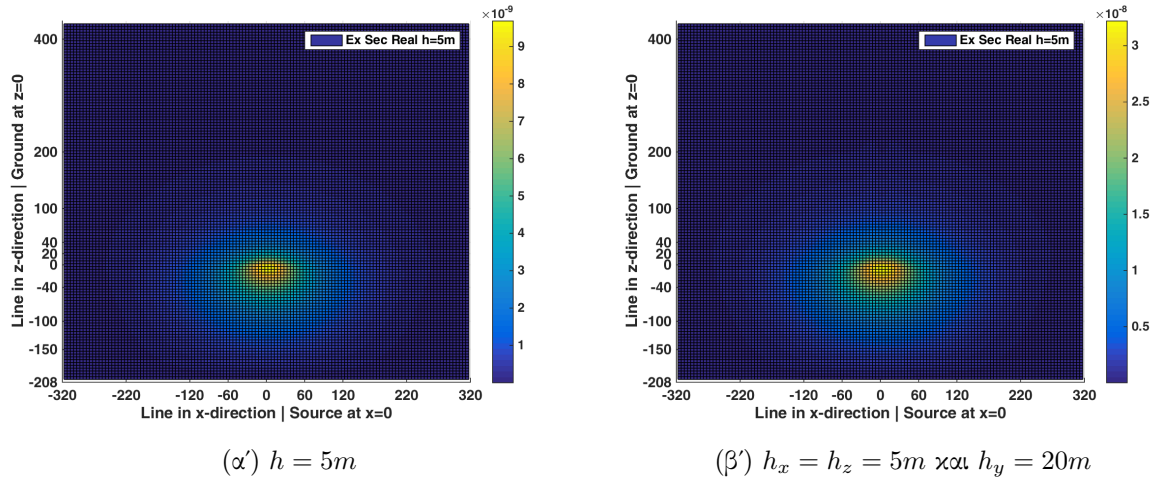


Σχήμα 4.29: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους E_x^T - αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα

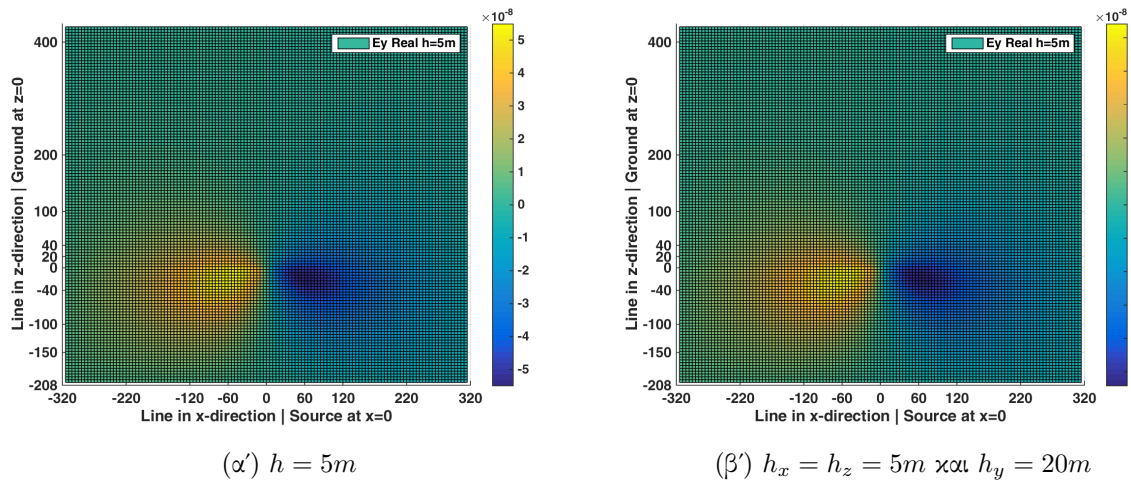
Τέλος, στα σχήματα 4.31, 4.32, 4.33, 4.34, 4.35, 4.36, 4.37, 4.38 παρατίθενται τα γραφήματα επιφανείας δευτερεύοντος (E_x, E_y) και συνολικού (E_x^T, E_y^T) ηλεκτρικού πεδίου στο xz -επίπεδο σε ομοιόμορφη (πυκνή) και ανομοιόμορφη-με τα προαναφερθέντα χαρακτηριστικά-διαμέριση αντίστοιχα καθώς και το διάγραμμα των ισοϋψών σε συνδυασμό με το διάγραμμα κλίσεων συνολικού (E_x^T, E_y^T) ηλεκτρικού πεδίου (υπενθυμίζεται ότι οι προκαταρκτικές δοκιμές πραγματοποιήθηκαν με ύψος πομπού στα $22m$, συχνότητα εκπομπής $f = 3000Hz$ και αγωγιμότητα ημιχώρου $\sigma = 0.01S/m$).



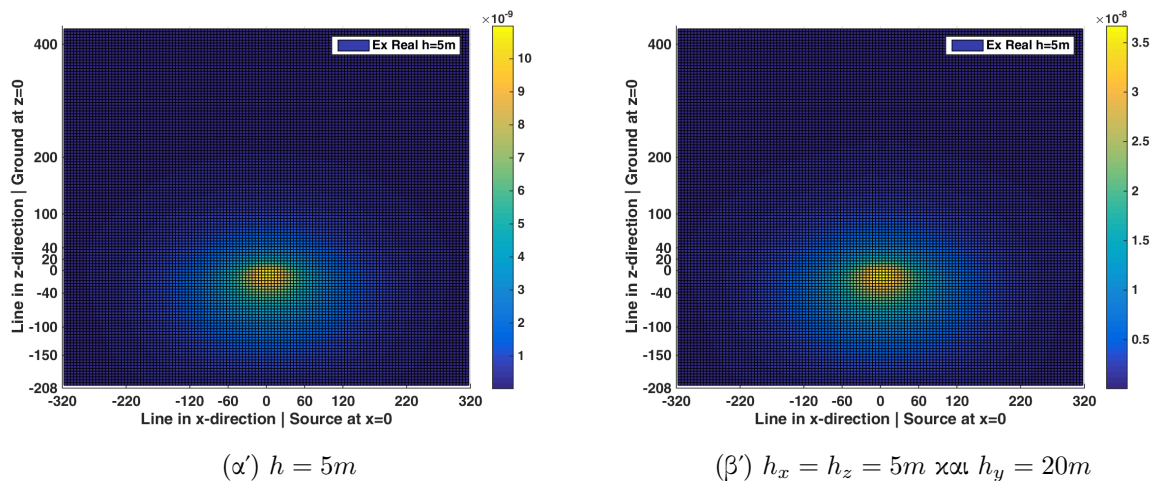
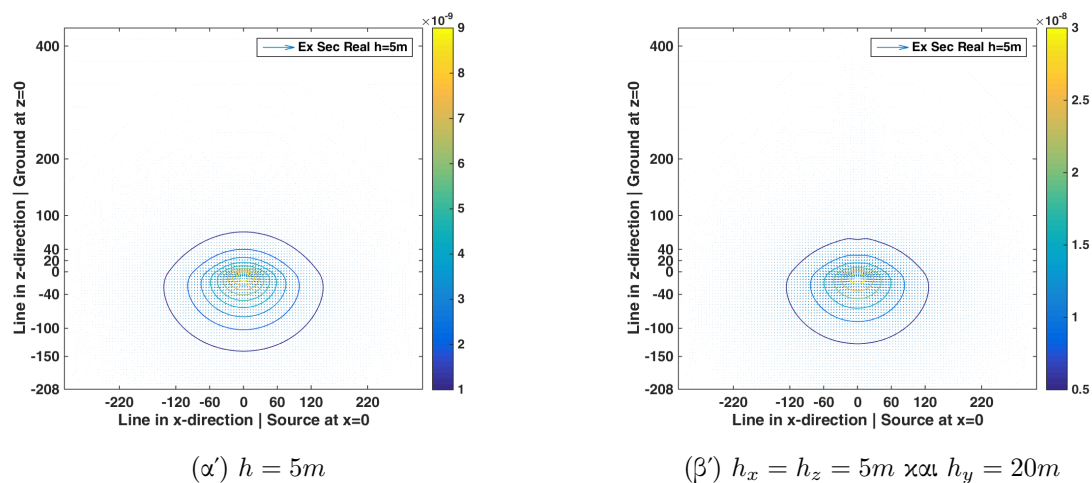
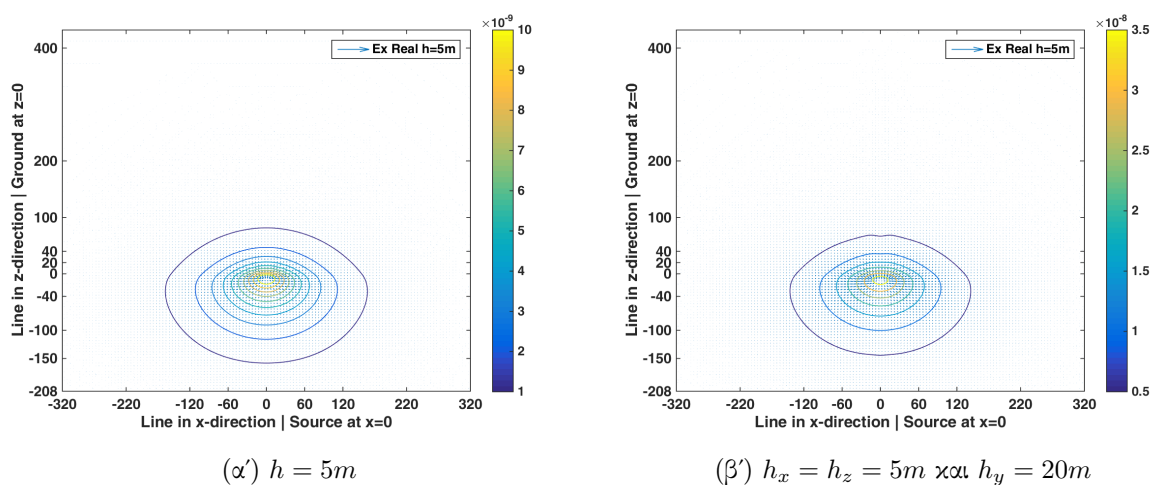
Σχήμα 4.30: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους E_y^T - αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα

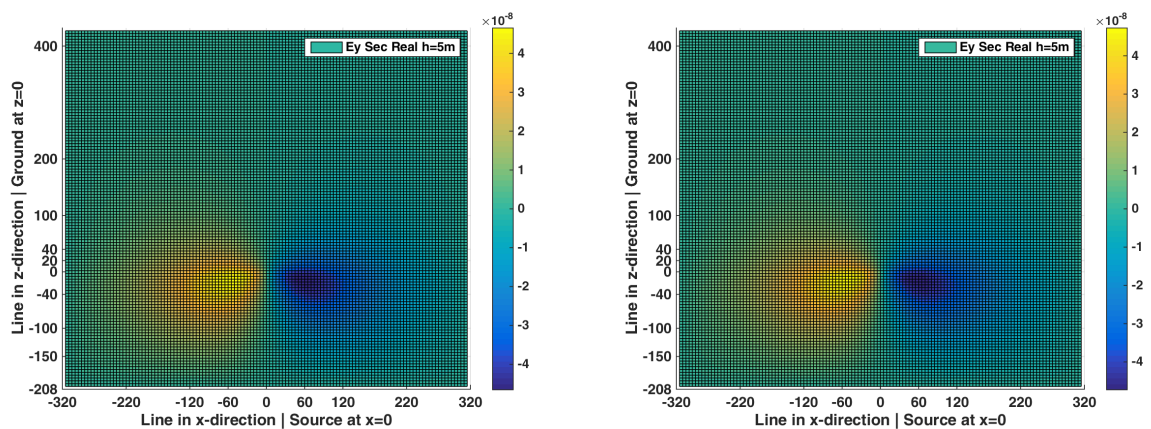
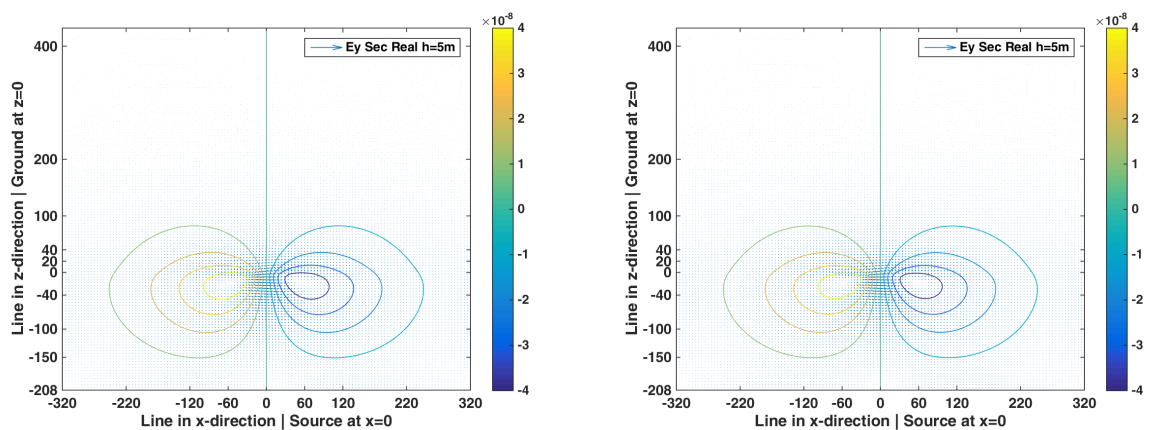
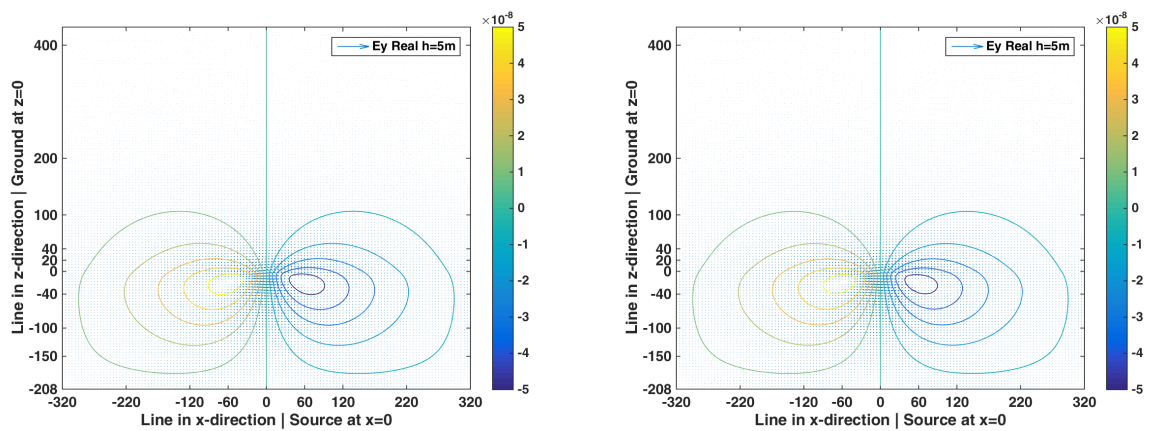


Σχήμα 4.31: Πραγματικό μέρος του δευτερεύοντος πεδίου E_x για $f = 3000Hz$ για $y = 0$



Σχήμα 4.36: Πραγματικό μέρος του συνολικού πεδίου E_y^T για $y = 0$

Σχήμα 4.32: Πραγματικό μέρος του συνολικού πεδίου E_x^T για $y = 0$ Σχήμα 4.33: Διάγραμμα ισοϋψών και κλίσεων πραγματικού μέρους δευτερεύοντος πεδίου E_x για $y = 0$ Σχήμα 4.34: Διάγραμμα ισοϋψών και κλίσεων πραγματικού μέρους συνολικού πεδίου E_x^T για $y = 0$

(α') $h = 5m$ (β') $h_x = h_z = 5m$ και $h_y = 20m$ Σχήμα 4.35: Πραγματικό μέρος του δευτερεύοντος πεδίου E_y για $y = 0$ (α') $h = 5m$ (β') $h_x = h_z = 5m$ και $h_y = 20m$ Σχήμα 4.37: Διάγραμμα ισοϋψών και κλίσεων πραγματικού μέρους δευτερεύοντος πεδίου E_y για $y = 0$ (α') $h = 5m$ (β') $h_x = h_z = 5m$ και $h_y = 20m$ Σχήμα 4.38: Διάγραμμα ισοϋψών και κλίσεων πραγματικού μέρους συνολικού πεδίου E_y^T για $f = 3000Hz$

Ανομοιόμορφη διαμέριση

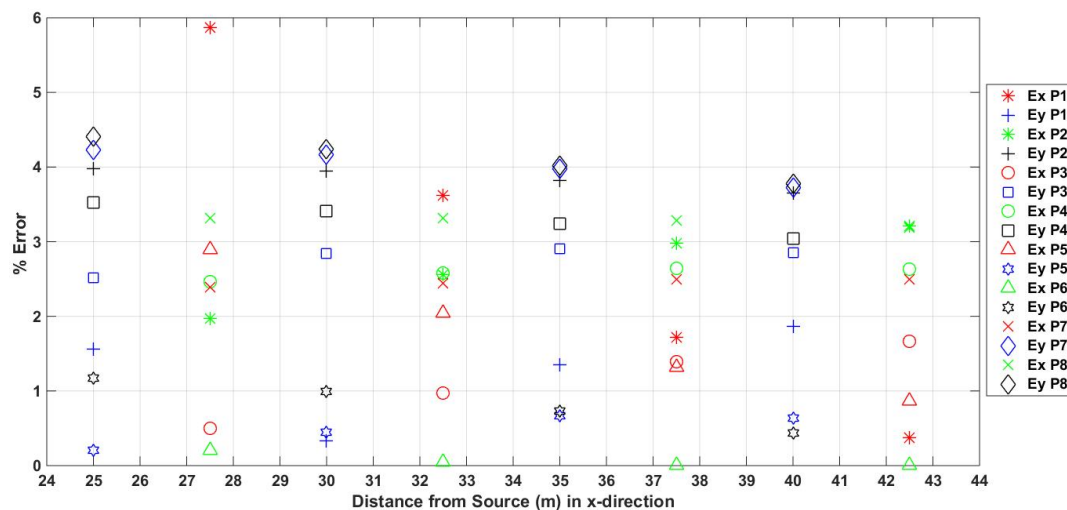
Στη συνέχεια, οι δοκιμές επικεντρώθηκαν σε διαφοροποιήσεις των φυσικών παραμέτρων στο ανομοιόμορφα διαμερισμένο πλέγμα, που ήταν και ένας από τους απώτερους στόχους της ερευνητικής εργασίας.

Μελετήθηκαν δεκαέξι (16) περιπτώσεις με διαφορετικές τιμές συχνότητας και αγωγιμότητας ημιχώρου στο πλέγμα με $h_x = 5m$, $h_y = 20m$, $h_z = 5m$, όπου πρότερα είχε επιβεβαιωθεί η ικανοποιητική επίδοση του επιλυτή, ενώ το ύψος του πομπού σε σχέση με το έδαφος διατηρήθηκε αρχικά στα $22m$ και στη συνέχεια μειώθηκε στα $12m$. Η πρόθεση ήταν αφενός ο έλεγχος ενός ικανοποιητικού εύρους συχνοτήτων αφετέρου η σύγκριση της συμπεριφοράς του επιλυτή σε διαφορετικά - πολύ χαμηλά- ύψη υπό τη συνθήκη της διαφορετικής διαμέρισης. Οι περιπτώσεις περιγράφονται στον πίνακα 4.3.

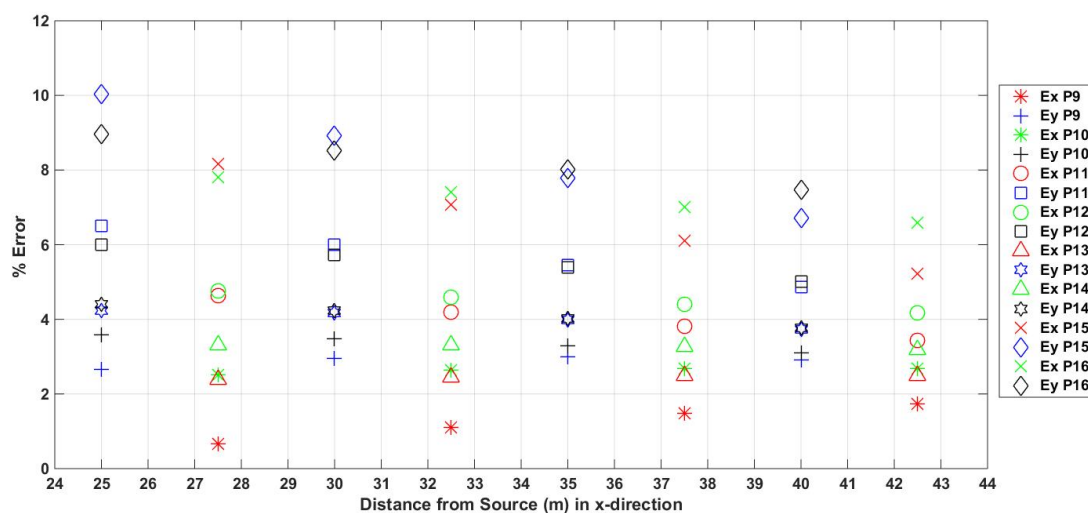
Περίπτωση	Συχνότητα	σ_0 -Υποβάθρου	σ -Ημιχώρου	Ύψος Πομπού
P_1	900	0.001	0.01	12
P_2				22
P_3		0.01	0.1	12
P_4				22
P_5	3000	0.001	0.01	12
P_6				22
P_7		0.01	0.1	12
P_8				22
P_9	10000	0.001	0.01	12
P_{10}				22
P_{11}		0.01	0.1	12
P_{12}				22
P_{13}	30000	0.001	0.01	12
P_{14}				22
P_{15}		0.01	0.1	12
P_{16}				22

Πίνακας 4.3: Περιπτώσεις δοκιμών για πλέγμα μη ομοιόμορφης διαμέρισης σε πολύ χαμηλά ύψη

Στα σχήματα 4.39 και 4.40 παρουσιάζεται ενδεικτικά το σχετικό σφάλμα % του πραγματικού μέρους της έντασης του συνολικού ηλεκτρικού πεδίου για τις δύο συνιστώσες για κάθε μια από τις περιπτώσεις. Το σφάλμα αναφέρεται σε θέσεις με απόσταση $27.5m$, $32.5m$, $37.5m$ και $42.5m$ αντίστοιχα από τον πομπό ως προς την x -κατεύθυνση για το \mathbf{E}_x^T και σε θέσεις $25m$, $30m$, $35m$ και $40m$ μακριά από τον πομπό ως προς την x -κατεύθυνση για το \mathbf{E}_y^T , με την διαφοροποίηση στις θέσεις των x και y να υφίσταται λόγω διακριτοποίησης. Σημειώνεται ότι τα αντίστοιχα διαγράμματα των περιπτώσεων του πίνακα 4.3 σε ομοιόμορφη διαμέριση είναι διαθέσιμα στο Παράρτημα Γ.

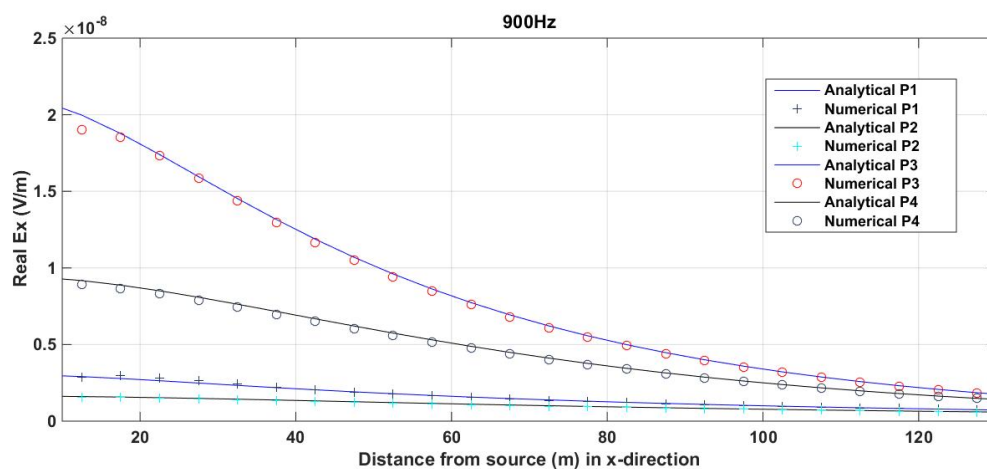


Σχήμα 4.39: Διάγραμμα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους των E_x^T , E_y^T στις περιπτώσεις από P_1 μέχρι και P_8 . Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %

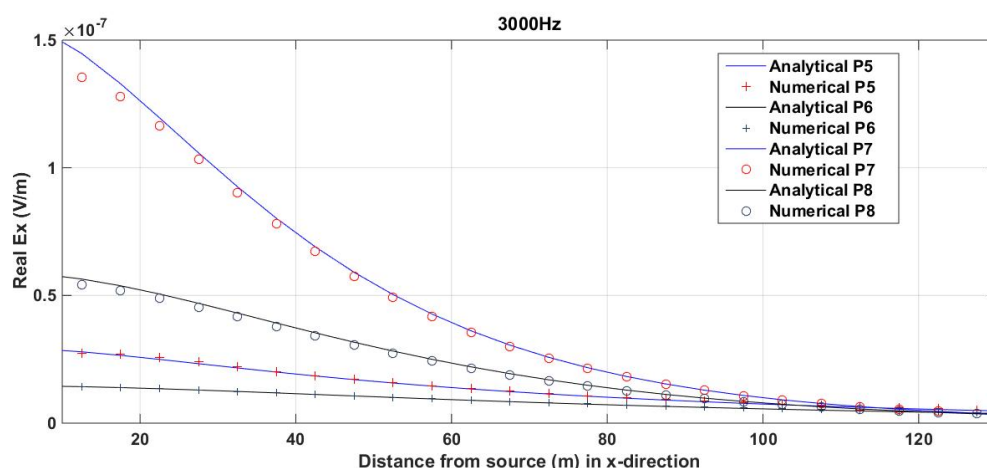


Σχήμα 4.40: Διάγραμμα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους των E_x^T , E_y^T στις περιπτώσεις από P_9 μέχρι και P_{16} . Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %

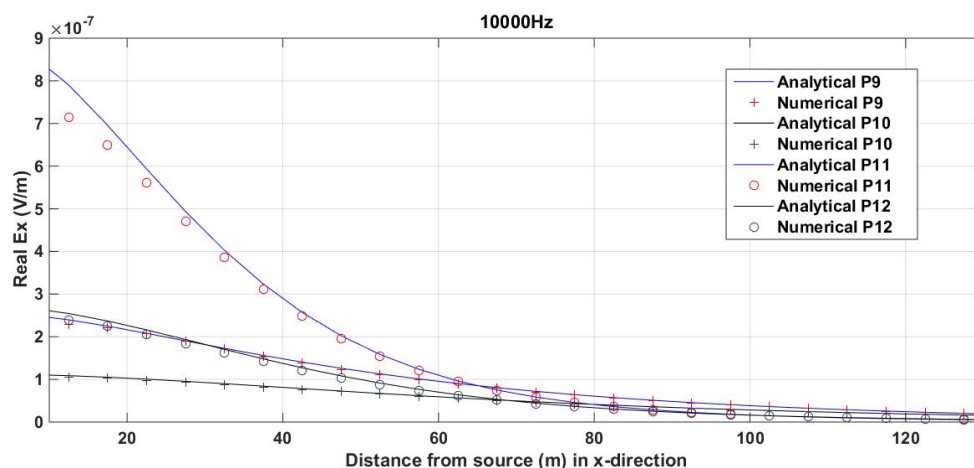
Ακολουθούν οι συγκρίσεις αριθμητικής και αναλυτικής λύσης στα σχήματα 4.41, 4.42, 4.43 και 4.44 (για τη συνιστώσα E_x) και 4.45, 4.46, 4.47 και 4.48 (για τη συνιστώσα E_y) για τις περιπτώσεις του πίνακα 4.3.



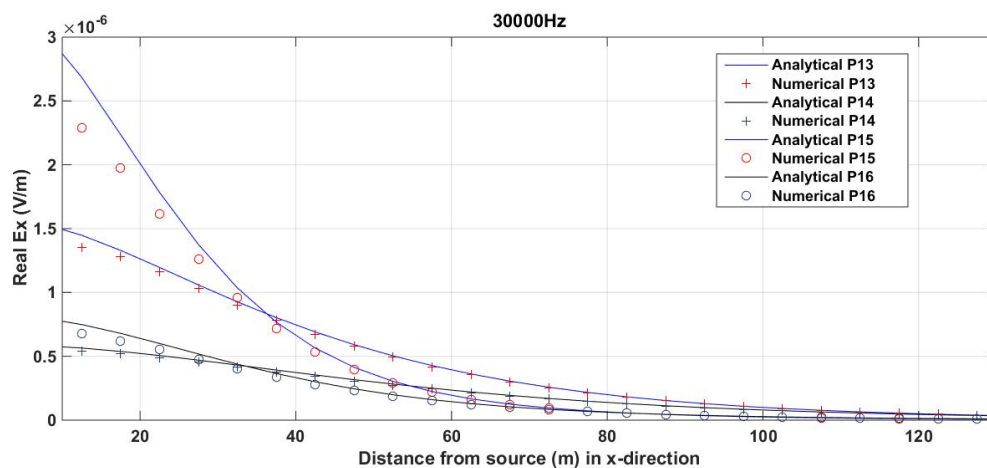
Σχήμα 4.41: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 900Hz



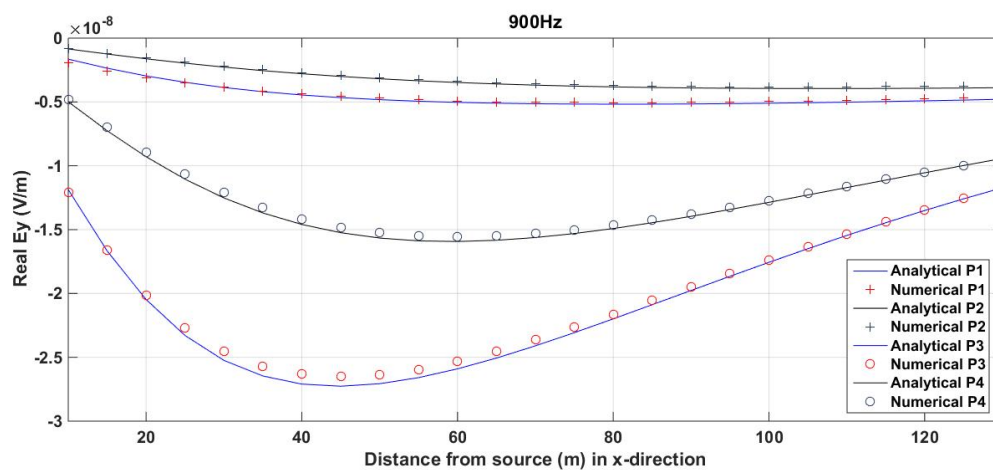
Σχήμα 4.42: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz



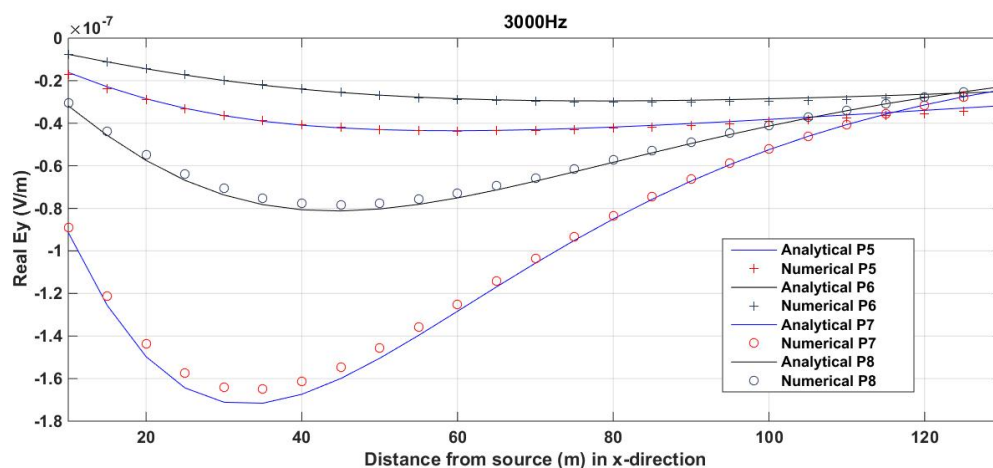
Σχήμα 4.43: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz



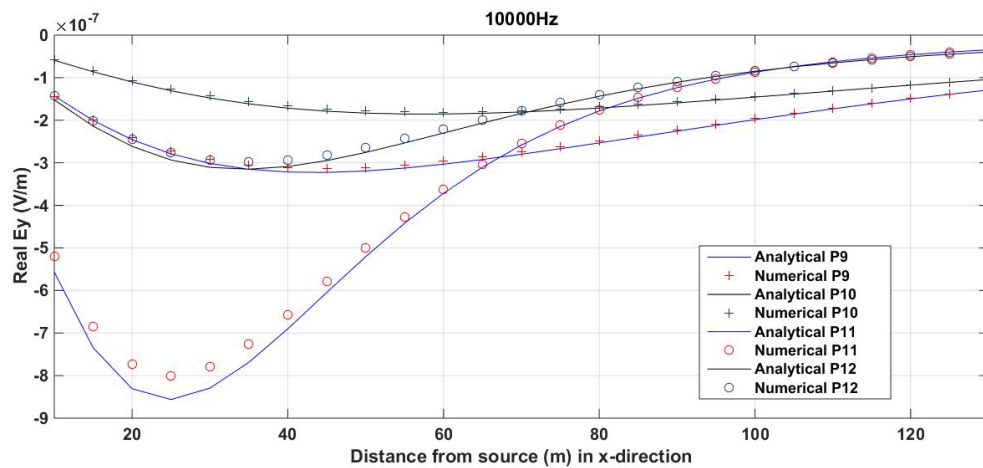
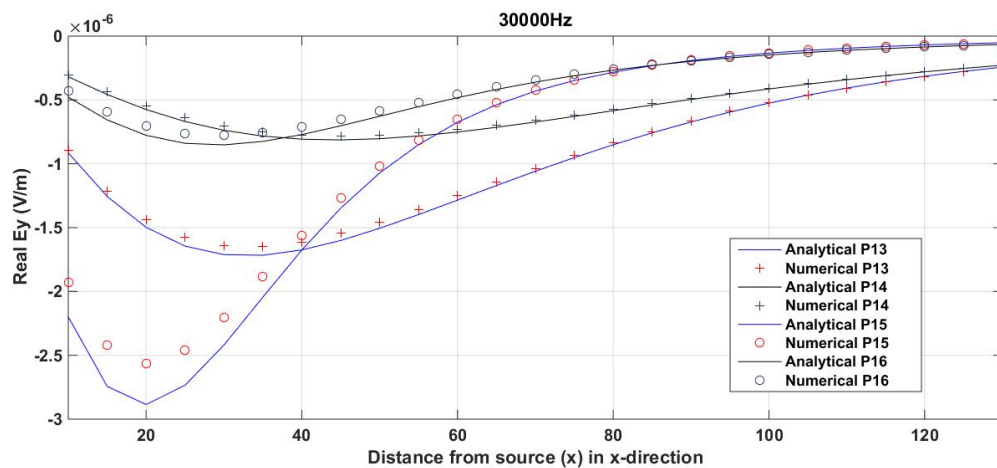
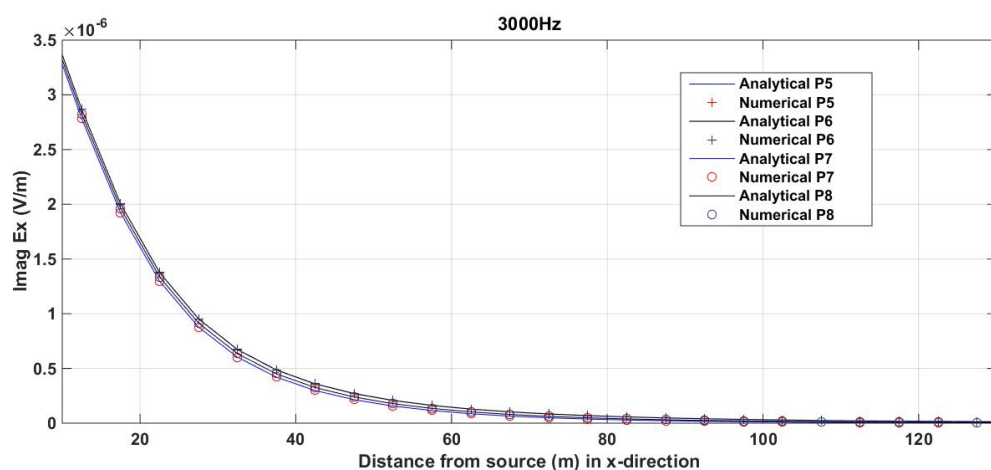
Σχήμα 4.44: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz



Σχήμα 4.45: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 900Hz



Σχήμα 4.46: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz

Σχήμα 4.47: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 10000HzΣχήμα 4.48: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 30000HzΣχήμα 4.49: Σύγκριση φανταστικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz

Με βάση τα παραπάνω σχήματα μπορούν να εξαχθούν τα εξής συμπεράσματα:

- Το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T προσεγγίζεται καλύτερα σε σχέση με το αντίστοιχο του \mathbf{E}_y^T πιθανόν λόγω της ανομοιομορφίας του πλέγματος (είναι 4 φορές πιο πυκνό στις x και z κατευθύνσεις).
- Η σύγκριση των αποτελεσμάτων των περιπτώσεων P_3, P_7, P_{11} και P_{15} , οι οποίες διαφοροποιούνται ως προς τη συχνότητα και μόνο, υποδεικνύει ότι το σχετικό σφάλμα των \mathbf{E}_x^T και \mathbf{E}_y^T αυξάνεται με την αύξηση της συχνότητας. Η ίδια παρατήρηση μπορεί να γίνει και στην περίπτωση των $P_1 - P_5 - P_9 - P_{13}$, $P_2 - P_6 - P_{10} - P_{14}$ και $P_4 - P_8 - P_{12} - P_{16}$
- Η σύγκριση των περιπτώσεων $P_9 - P_{11}$ και $P_{13} - P_{15}$, που διαφοροποιούνται ως προς την αγωγιμότητα του ημιχώρου και μόνο, φανερώνει τη μείωση του σχετικού σφάλματος των \mathbf{E}_x^T και \mathbf{E}_y^T με τη μείωση της αγωγιμότητας. Αντίστοιχη παρατήρηση μπορεί να γίνει και για τις περιπτώσεις $P_6 - P_8$, $P_{10} - P_{12}$, $P_{14} - P_{16}$ αντίστοιχα ενώ στις $P_1 - P_3$ και $P_5 - P_7$ μόνο για το \mathbf{E}_y^T
- Σε γενικές γραμμές, το σχετικό σφάλμα αυξάνεται με την αύξηση του ύψους του πομπού, εκτός των περιπτώσεων όπου η οριζόντια απόσταση πομπού-δέκτη είναι σχετικά μικρή και συγκεκριμένα στις $P_1 - P_2$ και $P_{15} - P_{16}$ για το \mathbf{E}_x^T , $P_{11} - P_{12}$ και $P_{15} - P_{16}$ για το \mathbf{E}_y^T
- Γενικά επίσης, παρατηρείται ότι το σχετικό σφάλμα είναι μικρότερο σε μικρές οριζόντιες αποστάσεις πομπού-δέκτη με εξαίρεση τις περιπτώσεις P_3 και για τις δύο συνιστώσες, P_5 μόνο για το \mathbf{E}_x^T και P_9 μόνο για το \mathbf{E}_y^T αντίστοιχα
- Η περίπτωση P_6 παρουσιάζει τα βέλτιστα αποτελέσματα και για τις δύο συνιστώσες. Στην P_3 συναντάται η καλύτερη προσέγγιση για το \mathbf{E}_x^T και στην P_5 αντίστοιχα για το \mathbf{E}_y^T .

Περαιτέρω παρατηρήσεις μπορούν να γίνουν με τη βοήθεια των σχημάτων 4.41, 4.42, 4.43, 4.44, 4.45, 4.46, 4.47 και 4.48 στα οποία εμφανίζεται αποκλειστικά το πραγματικό μέρος των \mathbf{E}_x^T και \mathbf{E}_y^T :

- Το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T παρουσιάζει εκθετική μείωση σε σχέση με την απόσταση πομπού-δέκτη, πιο αισθητή δε σε περιπτώσεις υψηλότερης αγωγιμότητας
- Η απόκλιση μεταξύ αριθμητικής προσέγγισης και αναλυτικής λύσης είναι πιο έντονη σε πολύ μικρές αποστάσεις πομπού-δέκτη για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T
- Το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T παρουσιάζει αρνητικές τιμές και ελάχιστη τιμή σε μεσαία απόσταση πομπού-δέκτη, η οποία εξαρτάται από την αγωγιμότητα του ημιχώρου, τη συχνότητα και το ύψος του πομπού

Η ανάγνωση των 4.42 και 4.49 στα οποία παρουσιάζονται το πραγματικό και φανταστικό μέρος αντίστοιχα της \mathbf{E}_x^T για συχνότητα 3000Hz , παρατηρείται ότι το φανταστικό μέρος είναι μια τάξη μεγέθους μεγαλύτερο από το πραγματικό και επιβεβαιώνεται ότι δεν παρουσιάζει την ίδια ευαισθησία σε αγωγιμότητα και ύψος πομπού όπως συμβαίνει με το πραγματικό μέρος. Επιπλέον δε των προαναφερθέντων, μπορούν να γίνουν οι εξής παρατηρήσεις:

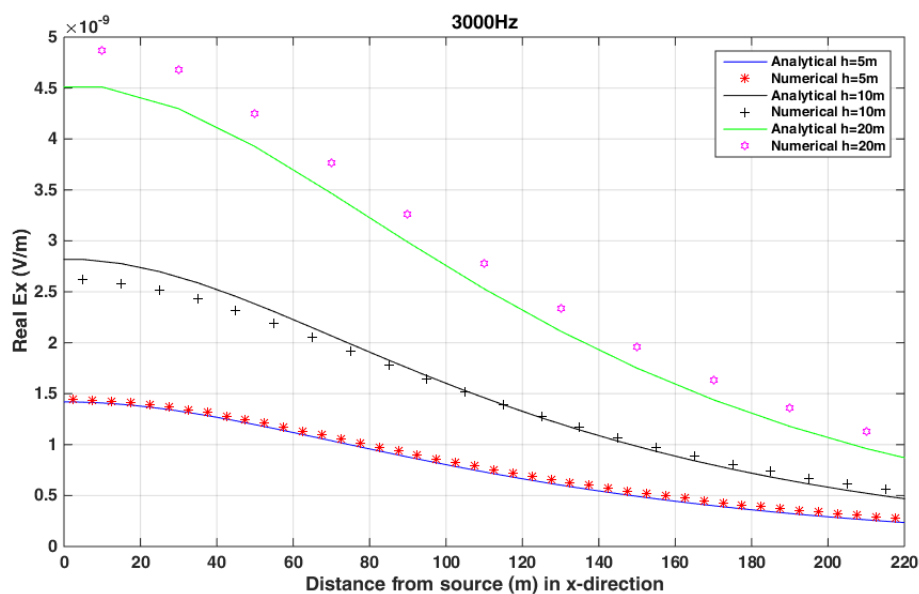
- Τα πυκνά πλέγματα επιβεβαιώνεται ότι συνεισφέρουν σε καλύτερες προσεγγίσεις και για το \mathbf{E}_x^T και για το \mathbf{E}_y^T όπως φαίνεται από τα σχήματα 4.16 και 4.17.
- Στην περίπτωση χρήσης μη ομοιόμορφου πλέγματος ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$) προκύπτει εξίσου ικανοποιητική προσέγγιση σε σχέση με τη χρήση ομοιόμορφου πλέγματος ($h_x = h_y = h_z = 5m$) για μικρή απόσταση πομπού-δέκτη (μικρότερη των $70m$) όπου το ποσοστιαίο σχετικό σφάλμα (και για πραγματικό και για φανταστικό μέρος) των $\mathbf{E}_x^T, \mathbf{E}_y^T$ είναι κάτω από 2% (σχήματα 4.29 και 4.30).
- Οι τιμές για τα γραφήματα του \mathbf{E}_y^T στο μη ομοιόμορφο πλέγμα, ελήφθησαν στις θέσεις $y = 10m$ (πυκνό), $y = 20m$ (ενδιάμεσο), $y = 40m$ (αραιό). Για τα γραφήματα του \mathbf{E}_x^T στις θέσεις $y = 20m$ (πυκνό), $y = 40m$ (ενδιάμεσο) και $y = 80m$ (αραιό) αντίστοιχα. Έτσι, ερμηνεύεται η ασυνέπεια μεταξύ των τιμών του \mathbf{E}_y^T για διαφορετικά μήκη κελιών σε μη ομοιόμορφα πλέγματα. Πιο συγκεκριμένα, η μέγιστη τιμή του \mathbf{E}_y^T μειώνεται όσο το πλέγμα γίνεται πιο αραιό καθώς μεγαλώνει η απόσταση πομπού-δέκτη.
- Για τα γραφήματα του \mathbf{E}_y^T στο ομοιόμορφο πλέγμα, οι τιμές υπολογίστηκαν στις θέσεις $y = 2.5m$ (πυκνό), $y = 5m$ (ενδιάμεσο) και $y = 10m$ (αραιό) αντίστοιχα, ενώ για το \mathbf{E}_x^T στις $y = 5m$ (πυκνό), $y = 10m$ (ενδιάμεσο) και $y = 20m$ (αραιό). Και εδώ, ερμηνεύεται κατ' αυτό τον τρόπο η διαφοροποίηση μεταξύ των τιμών του \mathbf{E}_y^T για διαφορετικά μήκη κελιών σε ομοιόμορφα πλέγματα.

Δοκιμές σε χαμηλό ύψος πομπού

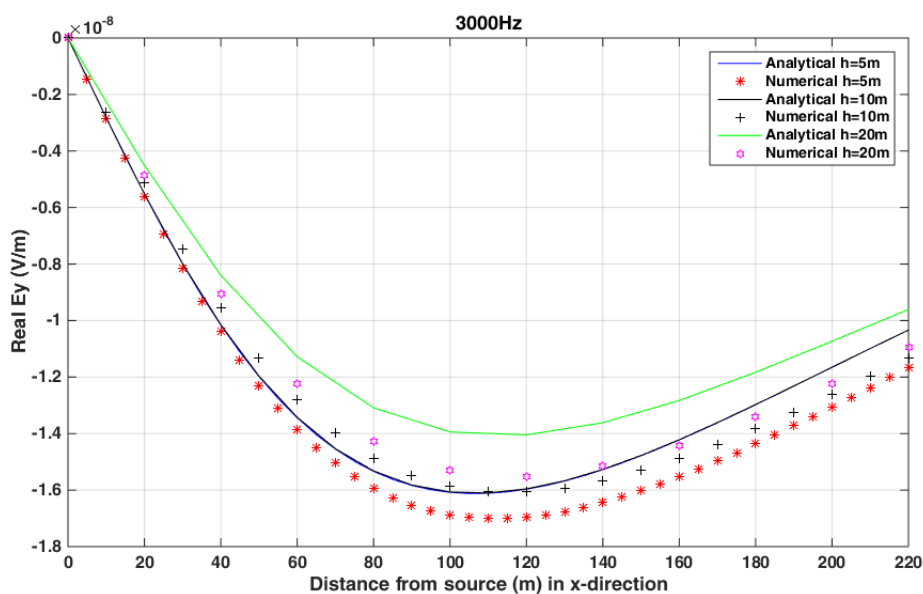
Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα δοκιμών του επιλυτή σε χαμηλό ύψος, καθορίζοντας τον πομπό στα $42m$ και διατηρώντας ίδια τα χαρακτηριστικά του μοντέλου ως προς τις διαστάσεις και τη θέση του εδάφους σε αυτό. Έτσι, μεταξύ της επιφάνειας του εδάφους και του πομποδέκτη μεσολαβούν πλέον, ανάλογα τη διαμέριση ως προς τη z -κατεύθυνση, περισσότερα υπολογιστικά κελιά με εξαιρετικά χαμηλές τιμές αγωγιμότητας αέρα επηρεάζοντας τη διάδοση πρωτεύοντος και δευτερεύοντος ηλεκτρικού πεδίου. Οι τιμές των παραμέτρων εκτέλεσης της BiCGSTAB διατηρούνται όπως στις προηγούμενες υλοποιήσεις.

Αρχικά, ελέγχονται ομοιόμορφες διαμερίσεις ($h = h_x = h_y = h_z$) με μήκος κελιού $20m$, $10m$ και $5m$ για τιμή συχνότητας $f = 3000Hz$ και αγωγιμότητα ημιχώρου $0.01S/m$ με το πραγματικό μέρος των \mathbf{E}_x^T και \mathbf{E}_y^T και αναλυτικών λύσεων στα σχήματα 4.50 και 4.51 αντίστοιχα. Όπως και στην περίπτωση πολύ χαμηλού ύψους πομπού, πυκνότερο πλέγμα -με αποστάσεις μεταξύ κόμβων $< 20m$ - και για αποστάσεις από τον πομπό από $10m$ μέχρι $200m$ εξασφαλίζει ικανοποιητικές προσεγγίσεις. Υπενθυμίζεται ότι λόγω διαφοροποίησης στη διαμέριση η ένταση του πεδίου προσεγγίζεται σε διαφορετικές θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες, συγκεκριμένα, στα σημεία $(x, 5)$ και $(x, 2.5)$ όταν $h = 5m$, $(x, 10)$ και $(x, 5)$ για $h = 10m$, $(x, 20)$ και $(x, 10)$ για $h = 20m$, για τις συνιστώσες \mathbf{E}_x^T και \mathbf{E}_y^T αντίστοιχα.

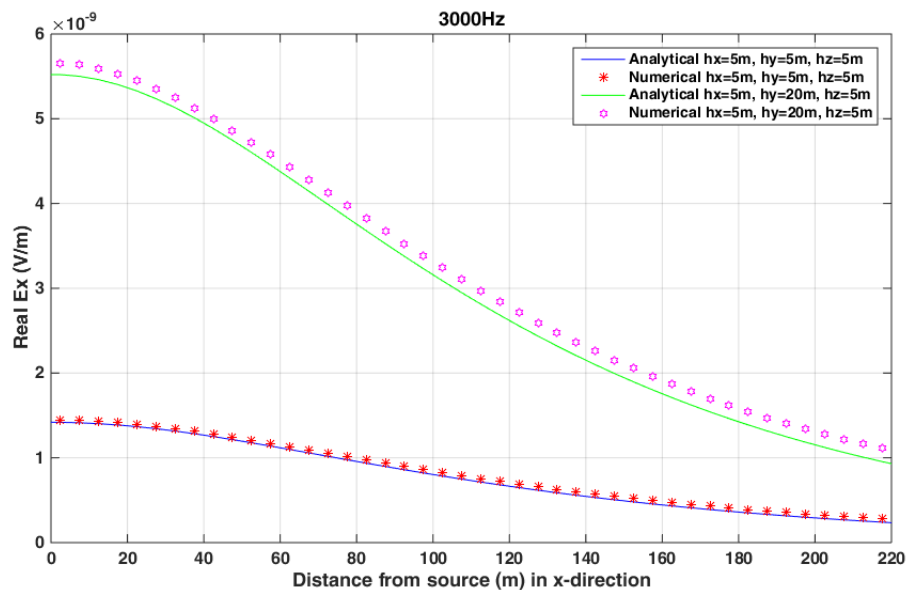
Στη συνέχεια, παρουσιάζεται απευθείας η σύγκριση πυκνής ομοιόμορφης ($h_x = h_y = h_z = 5m$) και μη-ομοιόμορφης διαμέρισης ($h_x = h_y = 5m = \frac{h_z}{4}$) για πραγματικά και φανταστικά μέρη των \mathbf{E}_x^T και \mathbf{E}_y^T (σχήματα 4.50 και 4.51) καθώς και τα σχετικά σφάλματα των παραπάνω περιπτώσεων σε σχέση με τις αναλυτικές λύσεις.



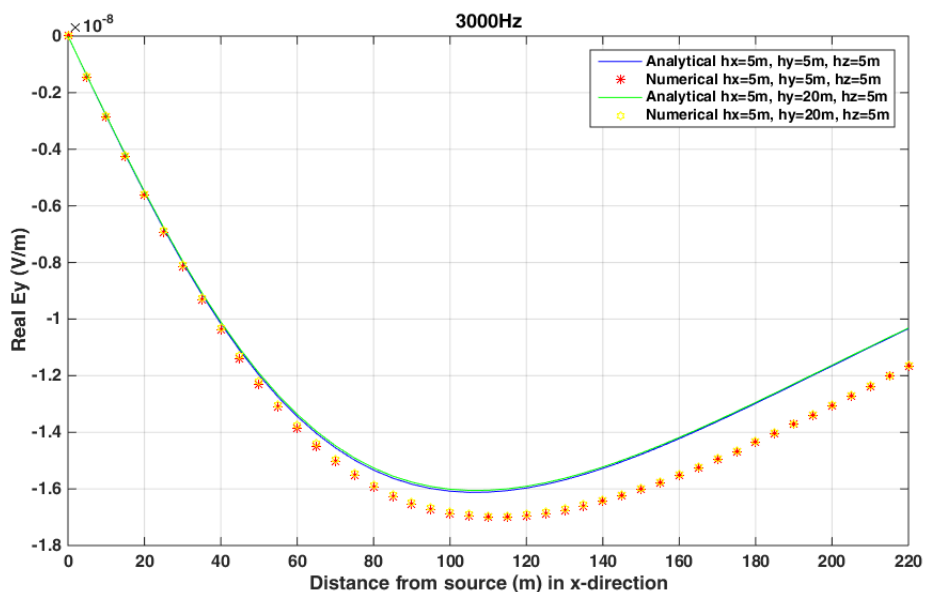
Σχήμα 4.50: Πραγματικό μέρος της E_x^T σε ομοιόμορφο πλέγμα με μήκος κελιού h . Η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζεται σε θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες $(x, y = 5, z = 42)$ για $h = 5m$ (ροζ *), $(x, y = 10, z = 42)$ για $h = 10m$ (μαύρο +) και $(x, y = 20, z = 42)$ για $h = 20m$ (μωβ 6-γωνο)



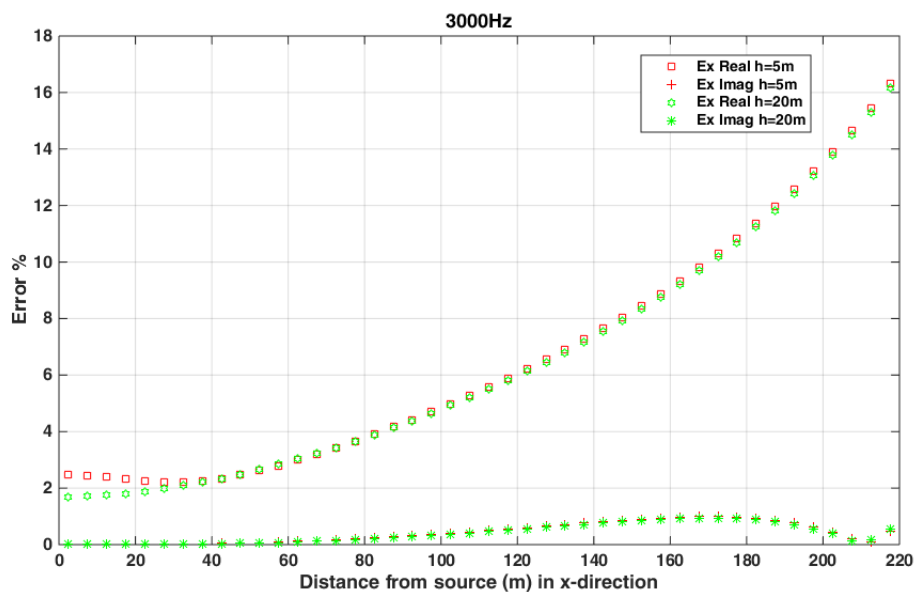
Σχήμα 4.51: Πραγματικό μέρος της E_y^T σε ομοιόμορφο πλέγμα με μήκος κελιού h . Η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου προσεγγίζεται σε θέσεις κατά μήκος του οριζόντιου άξονα με συντεταγμένες $(x, y = 2.5, z = 42)$ για $h = 5m$ (ροζ *), $(x, y = 5, z = 42)$ για $h = 10m$ (μαύρο +) και $(x, y = 10, z = 42)$ για $h = 20m$ (μωβ 6-γωνο)



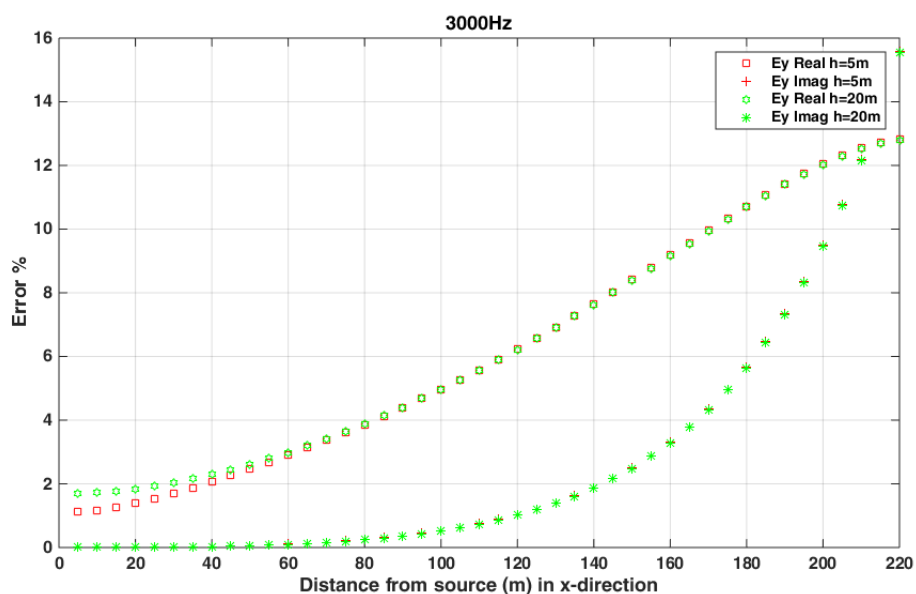
Σχήμα 4.52: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα στα 42m



Σχήμα 4.53: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα στα 42m



Σχήμα 4.54: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους E_x^T - αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα στα 42m

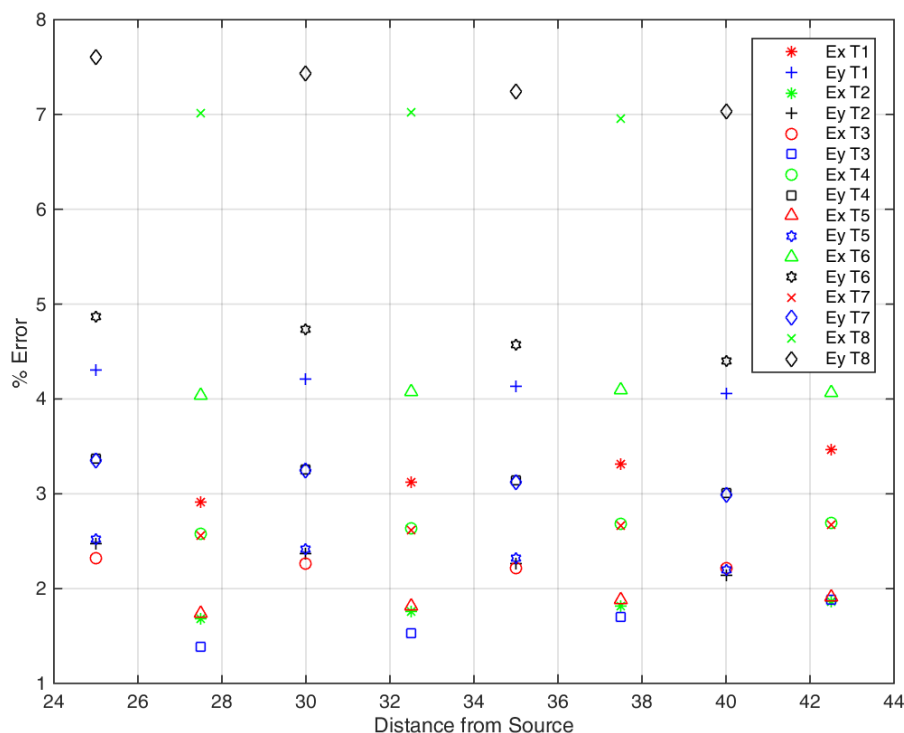


Σχήμα 4.55: Σχετικό σφάλμα % πραγματικού και φανταστικού μέρους E_y^T - αναλυτικής λύσης σε ομοιόμορφο και μη ομοιόμορφο πλέγμα στα 42m

Όπως και στις δοκιμές πολύ χαμηλού ύψους, πραγματοποιήθηκαν επιπλέον δοκιμές με διαφορετικές τιμές συχνότητας και αγωγιμότητας ημιχώρου. Συγκεκριμένα, ελέγχθηκε το ίδιο εύρος συχνοτήτων ($900\text{Hz} - 30\text{kHz}$) για αγωγιμότητα 0.01 και 0.1, με τις περιπτώσεις να συνοψίζονται στον πίνακα 4.4.

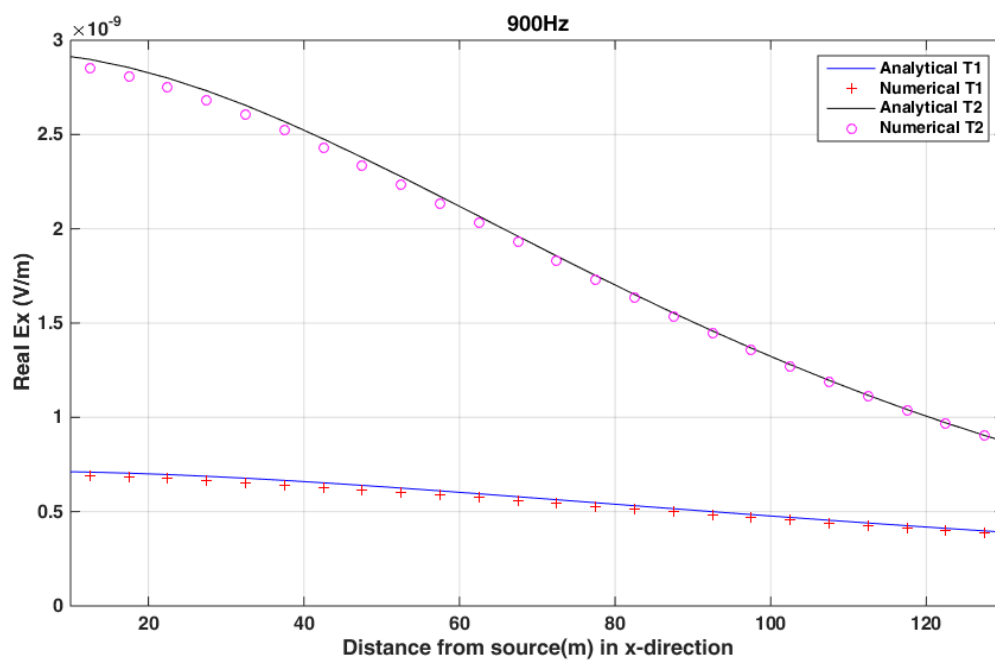
Περίπτωση	Συχνότητα	σ_p -Υποβάθρου	σ -Ημιχώρου	Ύψος Πομπού
T_1 T_2	900	0.001 0.01	0.01 0.1	42
T_3 T_4	3000	0.001 0.01	0.01 0.1	42
T_5 T_6	10000	0.001 0.01	0.01 0.1	42
T_7 T_8	30000	0.001 0.01	0.01 0.1	42

Πίνακας 4.4: Περιπτώσεις δοκιμών για πλέγμα μη ομοιόμορφης διαμέρισης σε χαμηλό ύψος

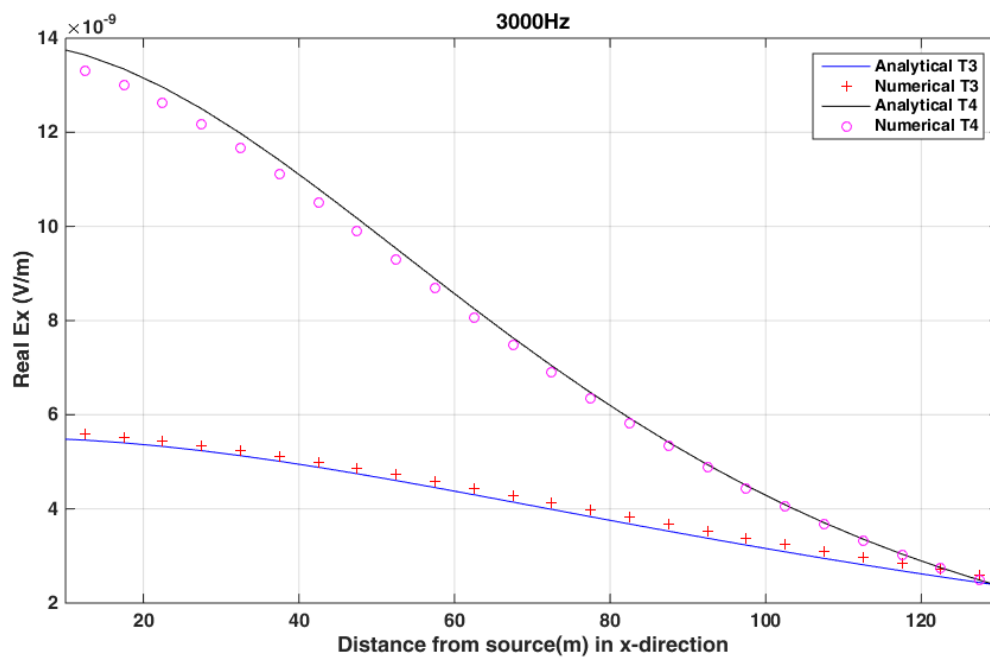


Σχήμα 4.56: Γράφημα σχετικού σφάλματος πραγματικού μέρους των \mathbf{E}_x^T , \mathbf{E}_y^T στις περιπτώσεις από T_1 μέχρι και T_8 του πίνακα 4.4. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %

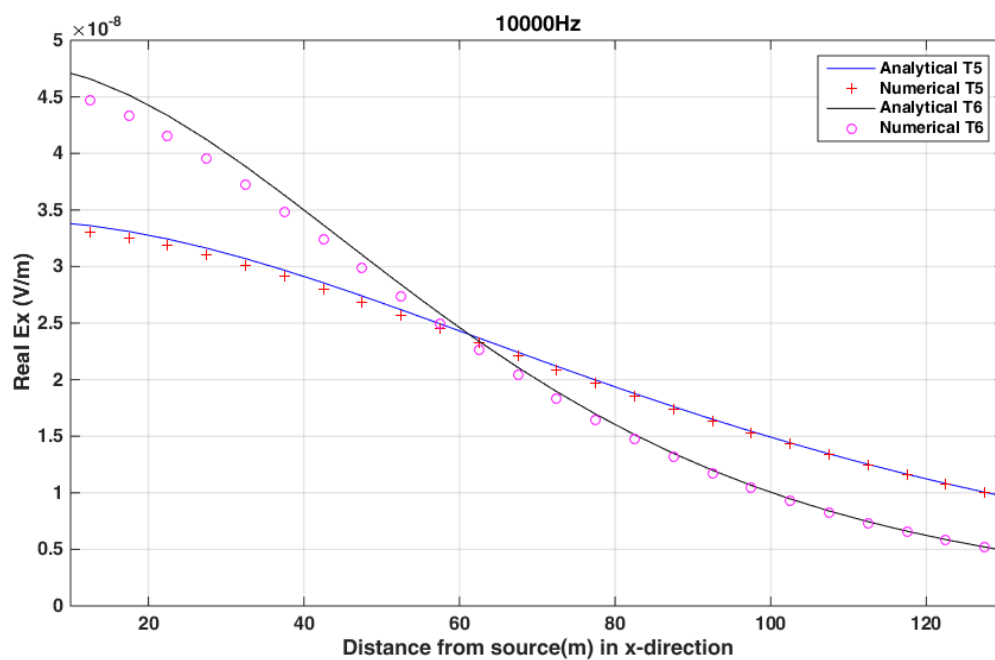
Στο σχήμα 4.56 εμφανίζεται το ποσοστιαίο σχετικό σφάλμα αριθμητικών προσεγγίσεων και αναλυτικών λύσεων των περιπτώσεων του πίνακα 4.4. Συγκρίνοντας με τα αντίστοιχα γραφήματα 4.39 και 4.40 των περιπτώσεων του πίνακα 4.3, επιβεβαιώνεται η απόδοση του επιλυτή αφού το ποσοστιαίο σφάλμα εμφανίζει αυξητική τάση σε μεγαλύτερο ύψος πομπού.



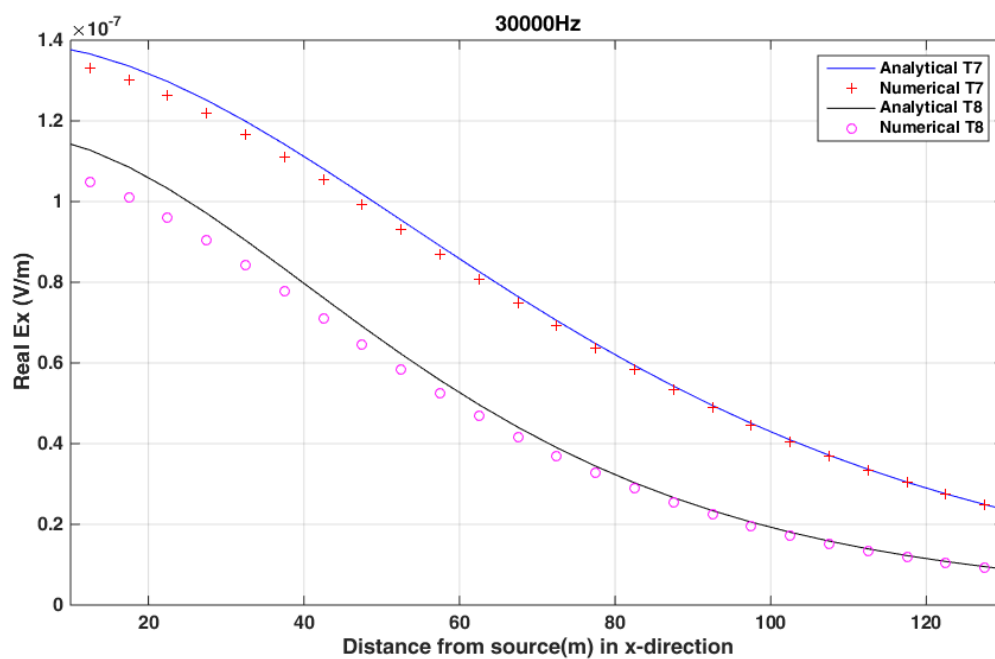
Σχήμα 4.57: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 900Hz στα 42m



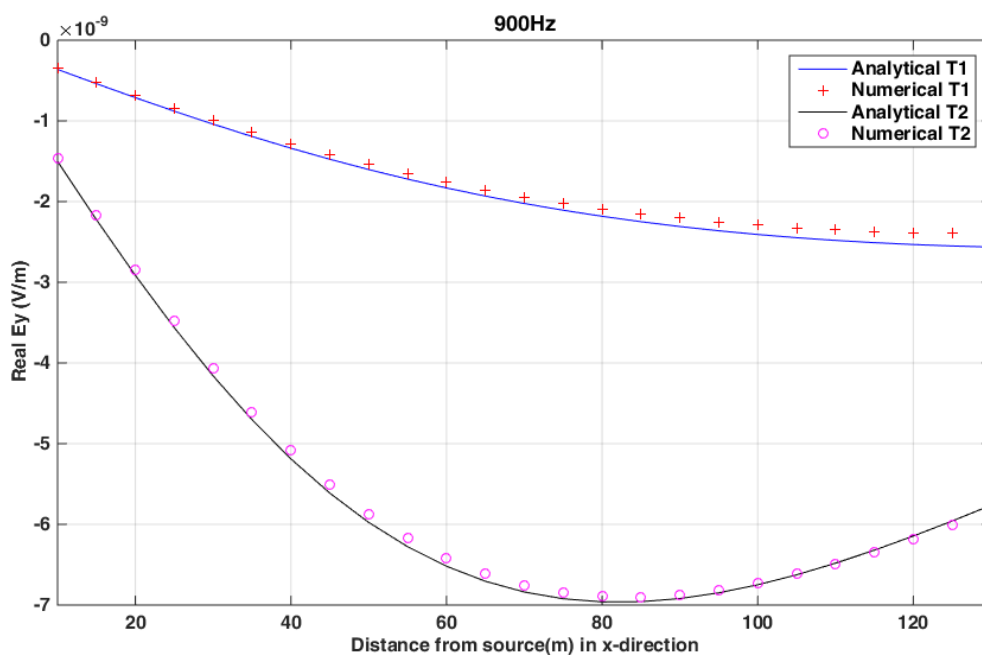
Σχήμα 4.58: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz στα 42m



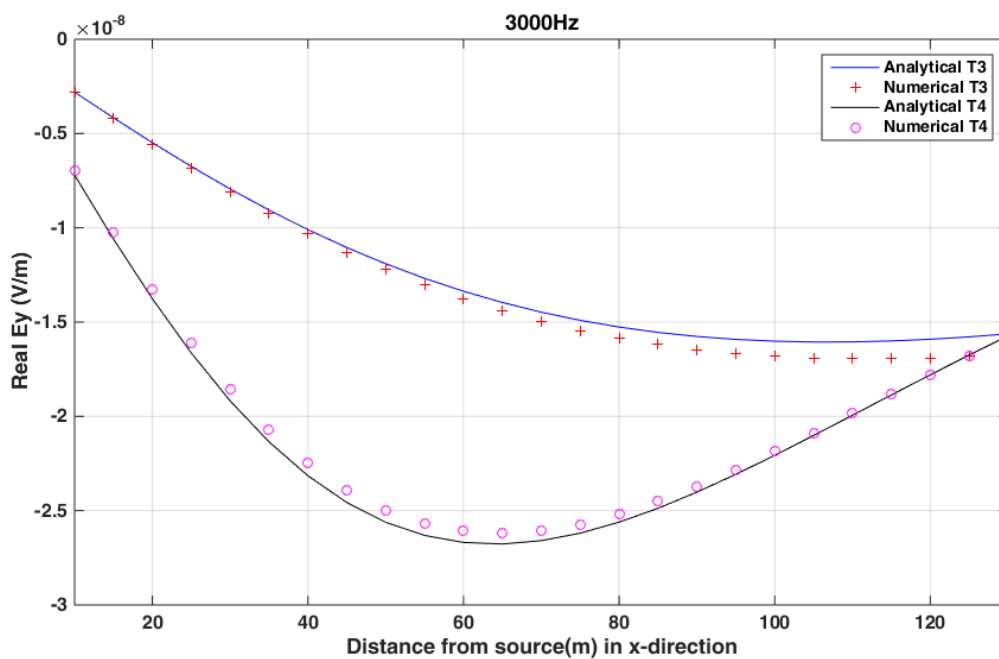
Σχήμα 4.59: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz στα 42m



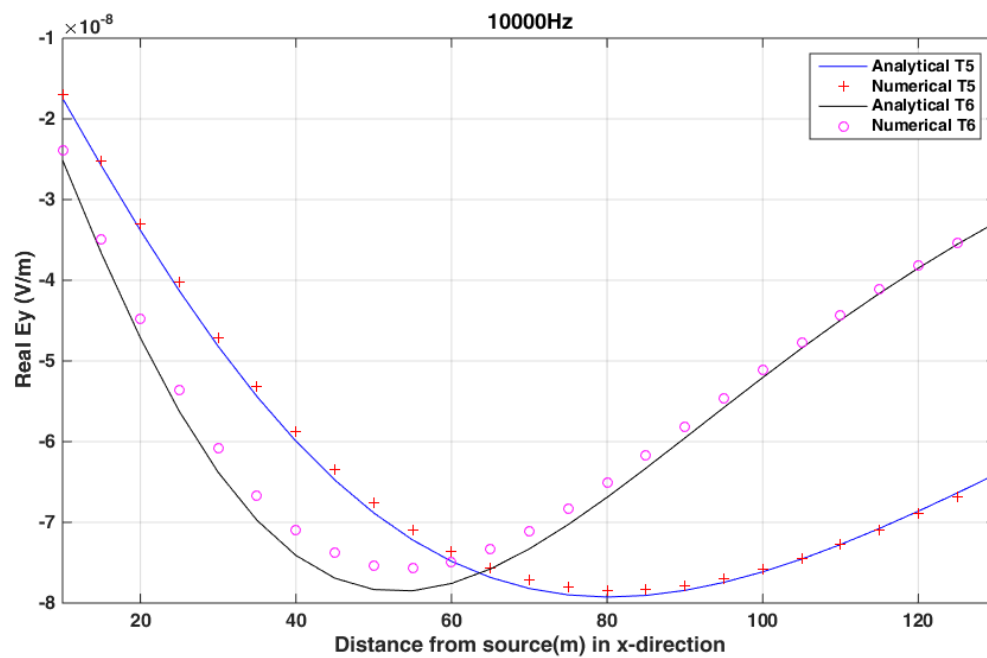
Σχήμα 4.60: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_x^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz στα 42m



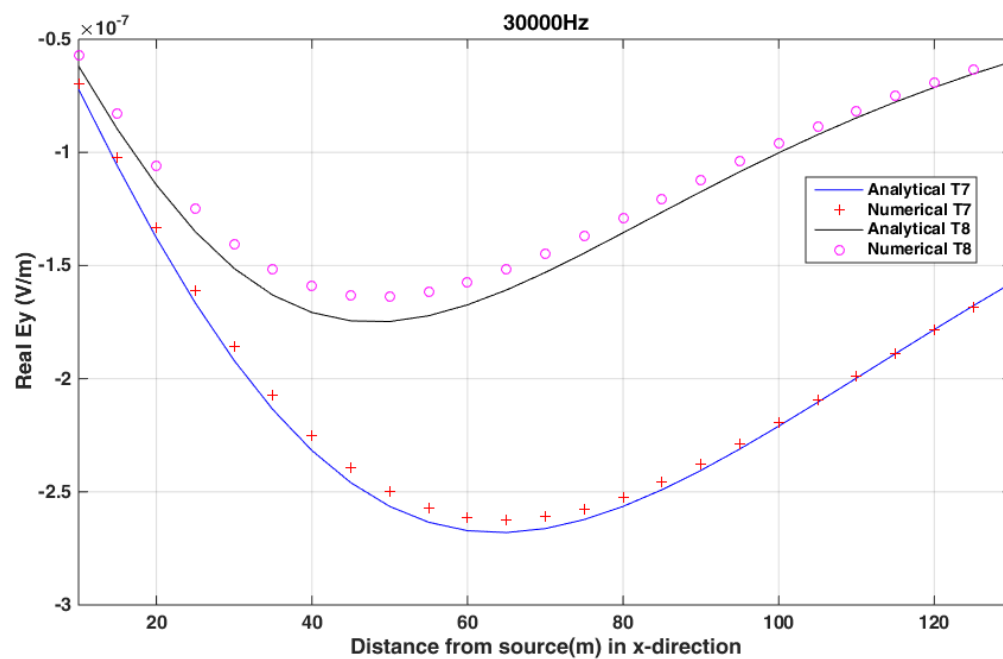
Σχήμα 4.61: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 900Hz στα 42m



Σχήμα 4.62: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 3000Hz στα 42m



Σχήμα 4.63: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 10000Hz στα 42m



Σχήμα 4.64: Σύγκριση πραγματικού μέρους E_y^T και αναλυτικής λύσης στα 30000Hz στα 42m

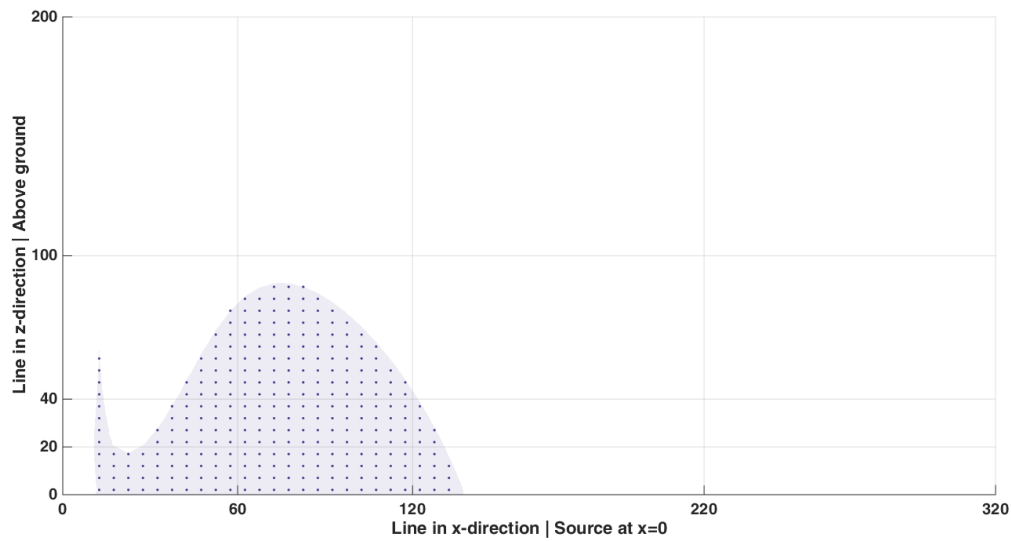
Σφάλμα κόμβων στο xz -επίπεδο

Προκειμένου να υπάρχει δυνατότητα ικανοποιητικής εκτίμησης του σφάλματος προσέγγισης και καθ' ύψος στη γραμμή ελέγχου, παρατίθενται στα σχήματα που ακολουθούν οι περιοχές του xz -επιπέδου στις οποίες το σφάλμα είναι μικρότερο του 5%. Συγκεκριμένα, στα σχήματα 4.65 μέχρι και 4.66 παρουσιάζονται ομαδοποιημένα ανά συχνότητα εκπομπής οι περιοχές με κόμβους με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος των E_x^T και E_y^T για τα ύψη δοκιμών που ήδη έχουν αναφερθεί ($12m$, $22m$, $42m$) σε υλοποίηση **ανομοιογενούς** διαμέρισης με τα χαρακτηριστικά που αναφέρθηκαν στον ομοιογενή ημιχώρο. Τα σχήματα από Γ'.8 μέχρι και Γ'.15 παρουσιάζουν τις αντίστοιχες περιοχές σε υλοποίηση **ομοιογενούς** διαμέρισης στο Παράρτημα Γ. Η αγωγιμότητα στον ημιχώρο σε όλες τις περιπτώσεις είναι $0.01S/m$.

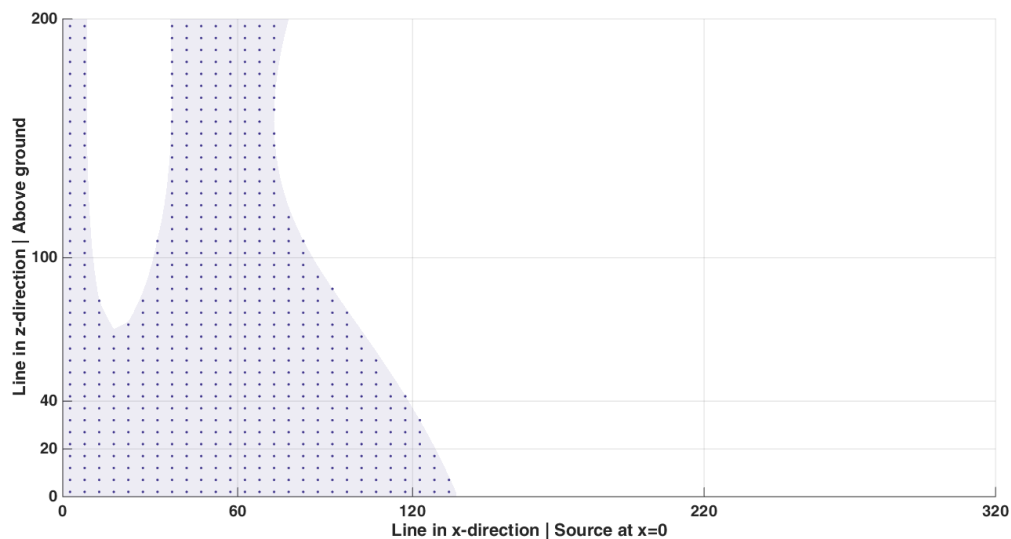
Από τα σχήματα προκύπτει το γενικό συμπέρασμα ότι θεωρώντας τον πομπό στα $22m$ ή στα $42m$ πάνω από την επιφάνεια της γης, τόσο το E_x^T όσο και E_y^T δίνουν αποδεκτά αποτελέσματα για όλες τις συχνότητες και για δέκτη σε παρόμοιο ή μικρότερο από αυτό του πομπού υψόμετρο.

Με πιο λεπτομερή παρατήρηση, στα $30000Hz$ για την ανομοιογενή διαμέριση και στα $10000Hz$, $30000Hz$ για την ομοιογενή διαμέριση (με ύψος πομπού $22m$) τα αποτελέσματα είναι ικανοποιητικότερα για υψόμετρο του δέκτη μεγαλύτερο από $20m$.

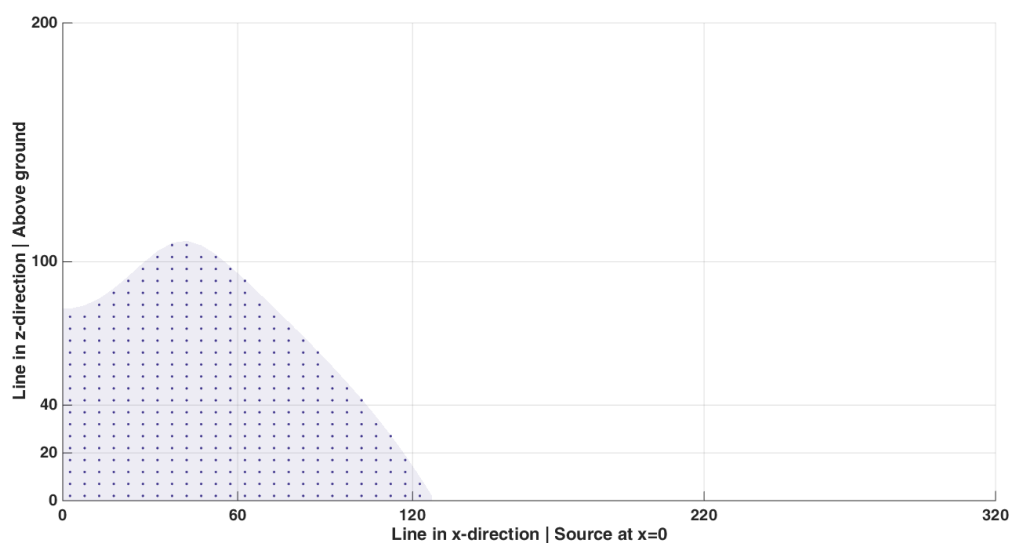
Θεωρώντας τον πομπό στα $12m$, φαίνεται ότι στην ομοιογενή διαμέριση προκύπτει μεγαλύτερο εύρος χαμηλών σφαλμάτων καθώς δίνει αποδεκτά αποτελέσματα και σε χαμηλότερες συχνότητες ($< 3000Hz$) τόσο το E_x^T όσο και E_y^T και υψόμετρο του δέκτη μεγαλύτερο από $10m$, καθώς και σε υψηλότερες συχνότητες ($> 10000Hz$) και υψόμετρο του δέκτη μεγαλύτερο από $40m$.



(α') Πομπός σε ύψος 12m

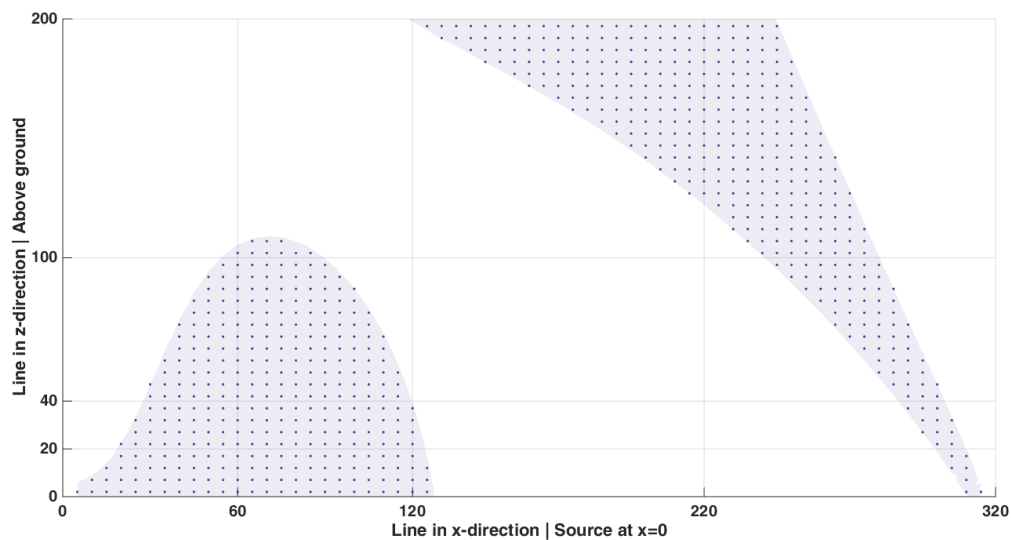


(β') Πομπός σε ύψος 22m

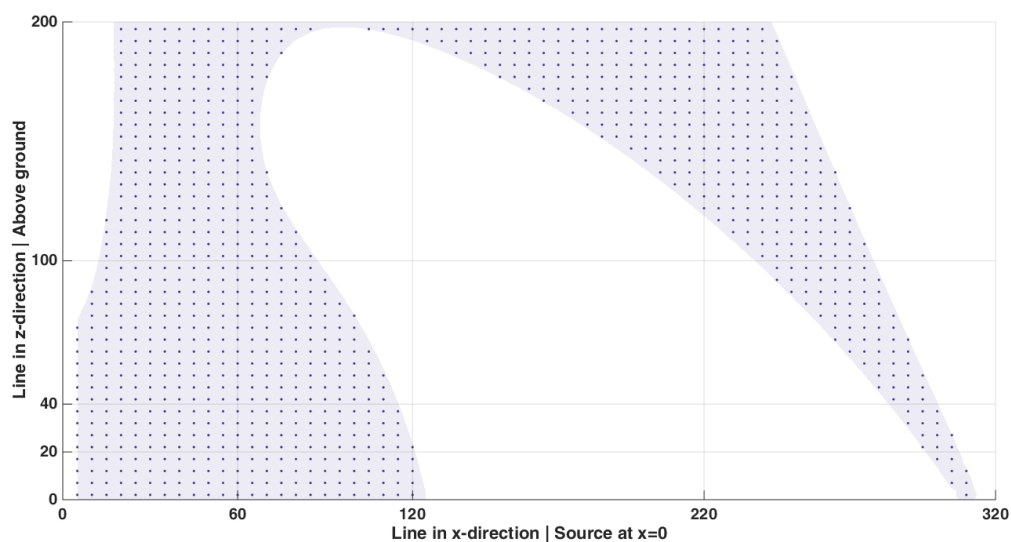


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

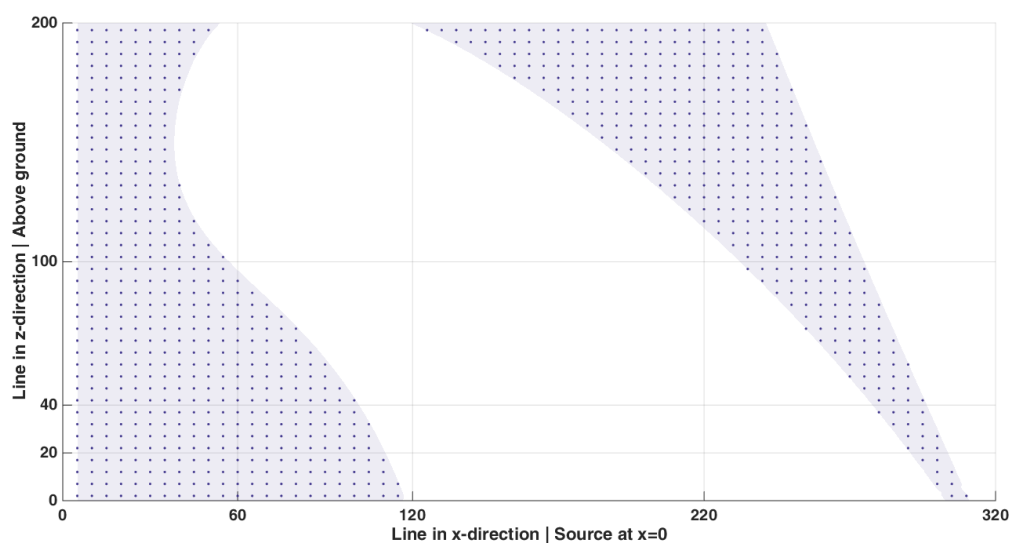
Σχήμα 4.65: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $3000Hz$ ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m



(β') Πομπός σε ύψος 22m



(γ') Πομπός σε ύψος 42m

Σχήμα 4.66: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_y^T στα $3000Hz$ ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)

Χρόνοι υλοποίησης και διαχείριση μνήμης

Όπως επισημάνθηκε και νωρίτερα, για την παρούσα διατριβή θεωρήθηκε η προσέγγιση της μιγαδικής αριθμητικής στη δημιουργία του κώδικα του επιλυτή με χρήση του τύπου μεταβλητής **double complex** στη Fortran για κάθε μιγαδική μεταβλητή. Ο συγκεκριμένος τύπος μεταβλητής αποθηκεύει κάθε μιγαδικό αριθμό ως ένα διατεταγμένο ζεύγος πραγματικών αριθμών διπλής ακρίβειας της μορφής (c, d) , όπου c είναι το πραγματικό και d το φανταστικό μέρος του μιγαδικού αριθμού αντίστοιχα, διατηρώντας 15 σημαντικά ψηφία για κάθε έναν από αυτούς. Κάθε βαθμωτή μεταβλητή του παραπάνω τύπου χρησιμοποιεί 16 bytes μνήμης, 8 για το πραγματικό μέρος και 8 για το φανταστικό, ενώ αντίστοιχα κάθε διάνυσμα διάστασης n χρησιμοποιεί $16n$. Επιπλέον, κάθε πραγματική μεταβλητή αποθηκεύεται ως πραγματικός διπλής ακρίβειας **double precision** χρησιμοποιώντας 8 bytes μνήμης.

Κατά την επίλυση απαιτείται η κατανομή αριθμού βασικών και βοηθητικών διανυσμάτων το πλήθος των οποίων παρουσιάζεται βάσει διάστασης στον πίνακα 4.4. Όπως προκύπτει, είναι απαραίτητη η αρχική δέσμευση (α) 0.75 GB διαθέσιμης μνήμης στην περίπτωση ανομοιόμορφης διαμέρισης $h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$, ενώ στην περίπτωση ομοιόμορφης διαμέρισης (β) $h = h_x = h_y = h_z = 5m$ απαιτούνται αρχικά 3 GB. Με τη βοήθεια κατάλληλου λογισμικού συγκέντρωσης πληροφορίας διαχείρισης μνήμης καταγράφηκε συνολική χρήση $\approx 3.5GB$ κατά την εκτέλεση του προγράμματος επίλυσης με τα χαρακτηριστικά (α) και $\approx 6GB$ στην περίπτωση (β) . Οι περιορισμένες απαιτήσεις του επιλυτή σε μνήμη στην προτεινόμενη εκδοχή της ανομοιόμορφης διαμέρισης, τον καθιστούν επιλέξιμο και σε υπολογιστική υποδομή με περιορισμένους πόρους αλλά κυρίως σε κατά παραγγελία υπολογιστικά περιβάλλοντα νέφους όπου -και- η παρεχόμενη για υπολογισμούς στο χρήστη μνήμη προσφέρεται με σχετικό κόστος.

Τονίζεται ότι στην περίπτωση εφαρμογής ομοιόμορφης διαμέρισης το πλήθος των αγνώστων που υπολογίζεται είναι $N_1 + N_2 + N_3$. Για την προαναφερόμενη ομοιόμορφη προκύπτουν 6,193,536 άγνωστοι ενώ στην προτεινόμενη παραπάνω ανομοιόμορφη 1,524,000. Το πλήθος των αγνώστων σε μια τέτοια περίπτωση καθορίζεται από την επιλογή πλήθους κελιών διαμέρισης n_x, n_y, n_z στην κάθε διάσταση με το άθροισμα των αγνώστων να είναι $n_x(n_y - 1)(n_z - 1) + (n_x - 1)n_y(n_z - 1) + (n_x - 1)(n_y - 1)n_z$.

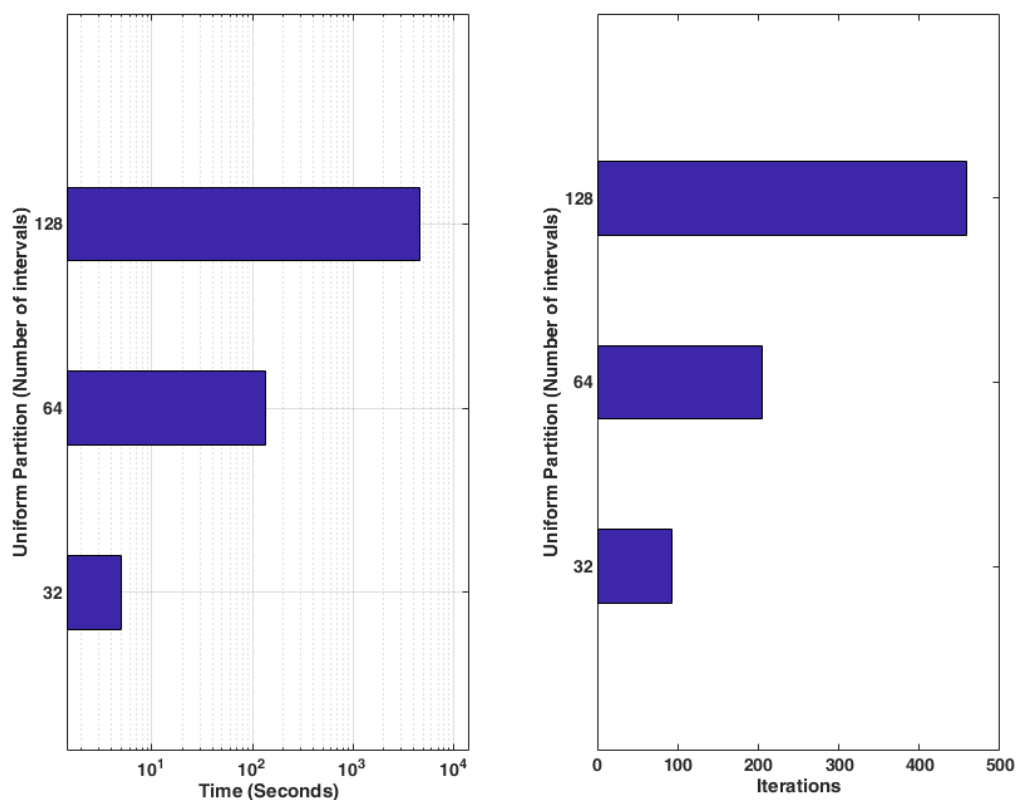
Διάσταση	$\in \mathbb{C}$	$\in \mathbb{R}$
$n_1 = n_x(n_y - 1)(n_z - 1)$	15	6
$n_2 = (n_x - 1)n_y(n_z - 1)$	15	6
$n_3 = (n_x - 1)(n_y - 1)n_z$	15	1
$(2n_x - 1)n_y(n_z - 1)$	1	-
$(2n_x - 1)(n_y - 1)n_z$	1	-
$(n_x - 1)(2n_y - 1)n_z$	1	-
$n_x(2n_y - 1)(n_z - 1)$	1	-
$n_x(n_y - 1)(2n_z - 1)$	1	-
$(n_x - 1)n_y(2n_z - 1)$	1	-
$n_x(n_y - 1)n_z$	2	-
$(n_x - 1)n_y n_z$	2	-
$n_x n_y(n_z - 1)$	2	-
$(n_x - 1)n_y$	1	-
$n_x(n_y - 1)$	1	-
n_x	-	3
n_y	-	3
n_z	-	3
$N = n_1 + n_2 + n_3$	9	-

Πίνακας 4.5: Πλήθος αναγκαίων βασικών και βοηθητικών μονοδιάστατων διατάξεων βάσει διάστασης στον επιλυτή

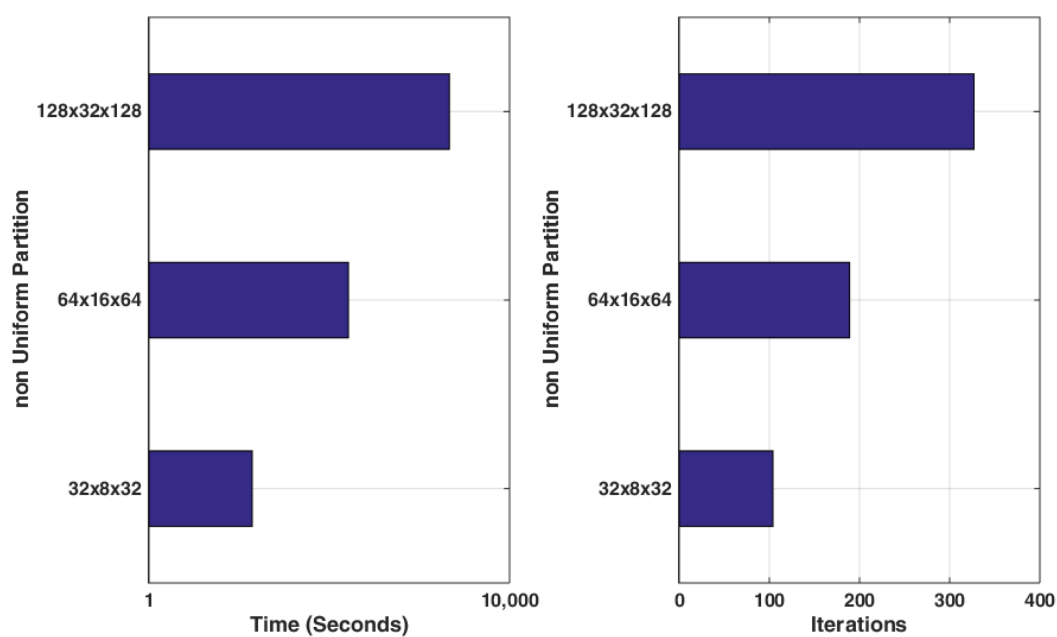
Συγκριτικά, στην [21] αναζητούνται 328,770 τιμές αγνώστων σε περιοχή δοκιμών με συναφή ογκομετρικά χαρακτηριστικά. Ο συνολικός χρόνος υλοποίησης παρουσιάζεται στα σχήματα 4.67 και 4.68 για δοκιμές με ομοιόμορφη και μη-ομοιόμορφη διαμέριση αντίστοιχα, διατηρώντας ίδια τα χαρακτηριστικά φυσικών παραμέτρων ($f = 3000\text{Hz}$, $TH = 22m$, $\sigma_p = 0.001\text{S/m}$ και $\sigma = 0.01\text{S/m}$) και παραμέτρων εκτέλεσης (ανοχή σφάλματος BiCG-STAB 10^{-6} και μέγιστο πλήθος βημάτων 1000). Για το σύνολο των περιπτώσεων οι δοκιμές πραγματοποιήθηκαν με εφαρμογή παράλληλων υπολογισμών χρησιμοποιώντας μέσω του προτύπου OpenMP 16 νήματα εκτέλεσης σε μια μονάδα επεξεργασίας. Όπως αναμένετο, εφαρμόζοντας ανομοιόμορφη διαμέριση με τα χαρακτηριστικά που προτάθηκαν νωρίτερα, ο συνολικός χρόνος επίλυσης περιορίζεται στο 1/4 αυτού της ομοιόμορφης. Η διαφοροποίηση των φυσικών παραμέτρων στις δοκιμές που πραγματοποιήθηκαν δε φάνηκε να επηρεάζει σημαντικά εν γένει το χρόνο επίλυσης.

Συγκεκριμένα,

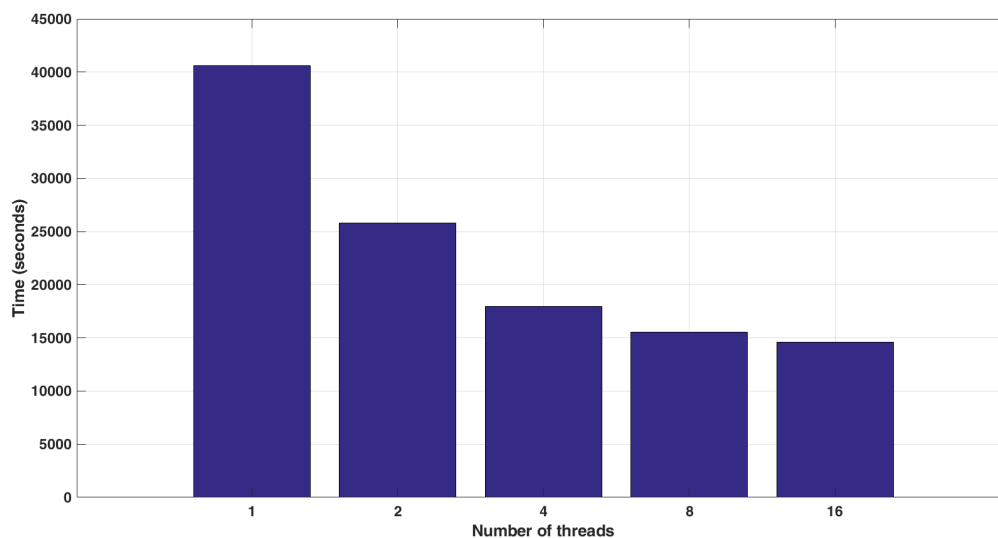
- σε σχέση με το ύψος του πομπό, παρατηρήθηκε ότι η επίλυση με τον πομπό σε χαμηλό ύψος ($42m$) πραγματοποιείται σε χρόνους αντίστοιχους αυτής με τον πομπό σε πολύ χαμηλό ύψος ($12m, 22m$) με τη διαφοροποίηση να είναι $\pm 5\%$
- σχετικά με τη συχνότητα εκπομπής παρατηρήθηκε ότι σε περίπτωση εκπομπής $< 1\text{kHz}$ ο χρόνος εκτέλεσης είναι ελάχιστα λιγότερος ($\approx 2\%$) σε σχέση με εκπομπές υψηλότερων συχνοτήτων
- οι τιμές αγωγιμότητας σ του ημιχώρου που χρησιμοποιήθηκαν σε συνδυασμό με τις τιμές αγωγιμότητας του υποβάθρου σ_p (υπενθυμίζεται η εξίσωση 2.36 σύμφωνα με την οποία η τιμή της διαφοράς $\sigma - \sigma_p$ συμμετέχει στο δεύτερο μέλος) δεν επέφεραν διαφορές ως προς το χρόνο επίλυσης.



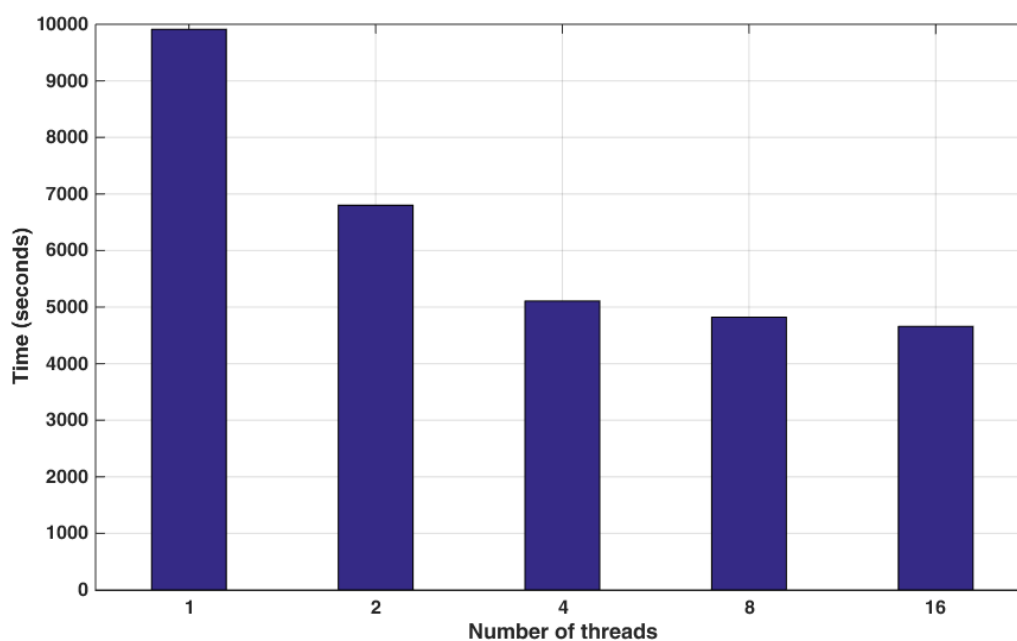
Σχήμα 4.67: Χρόνος υλοποίησης και επαναλήψεις της BiCGSTAB σε ομοιόμορφη διαμέριση με χρήση 16 νημάτων εκτέλεσης και ανοχή σφάλματος της μεθόδου 10^{-6}



Σχήμα 4.68: Χρόνος υλοποίησης και επαναλήψεις της BiCGSTAB σε ανομοιόμορφη διαμέριση με χρήση 16 νημάτων εκτέλεσης και ανοχή σφάλματος της μεθόδου 10^{-6}

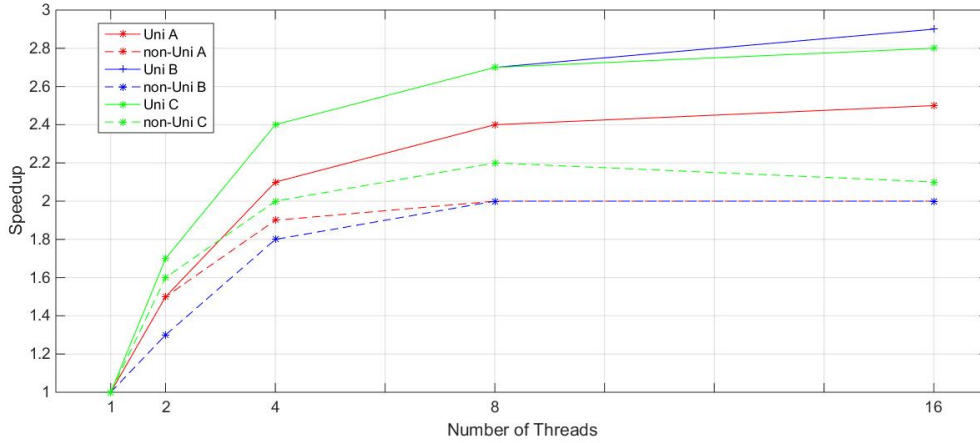


Σχήμα 4.69: Σύγκριση συνολικού χρόνου υλοποίησης με διαφορετικά νήματα εκτέλεσης σε μοιράζομενη διαμέριση



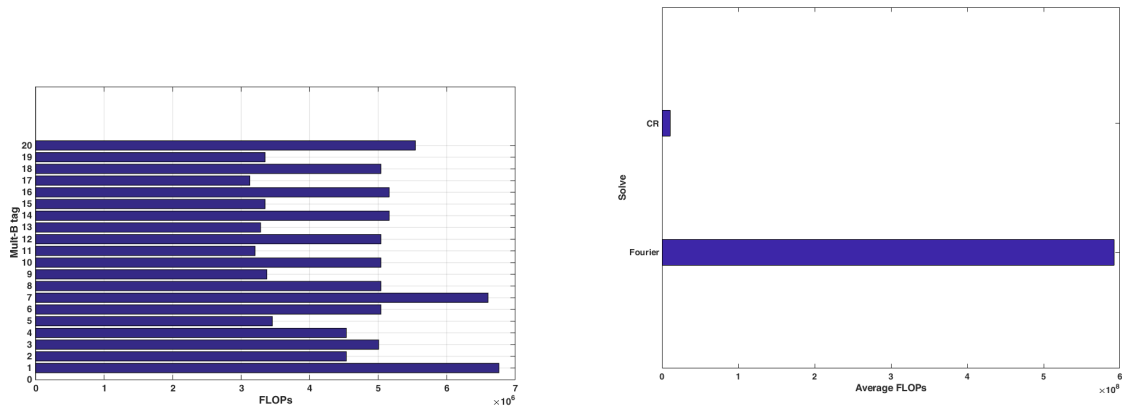
Σχήμα 4.70: Σύγκριση συνολικού χρόνου υλοποίησης με διαφορετικά νήματα εκτέλεσης σε ανομοιόμορφη διαμέριση

Συγκρίνοντας την παράλληλη υλοποίηση με OpenMP και πολλαπλά νήματα εκτέλεσης με τη σειριακή υπάρχει μια κλιμακούμενη μείωση του χρόνου εκτέλεσης, μη γραμμική ως προς το πλήθος των νημάτων εκτέλεσης που χρησιμοποιούνται με συνολικό όφελος περίπου 50% με χρήση 16 νημάτων εκτέλεσης.



Σχήμα 4.71: Το speedup σε πολυεπεξεργαστικό σύστημα με πολλαπλά νήματα εκτέλεσης σε ομοιόμορφη (Uni) και μη ομοιόμορφη (non-Uni) διαμέριση όπου Uni A: $h_x = h_y = h_z = 20m$, Uni B: $h_x = h_y = h_z = 10m$, Uni C: $h_x = h_y = h_z = 5m$ και non-Uni A: $h_x = h_z = 20m, h_y = 80m$, non-Uni B: $h_x = h_z = 10m, h_y = 40m$, non-Uni C: $h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$

Για τη διερεύνηση των λόγων μη περαιτέρω μείωσης του χρόνου επίλυσης, πραγματοποιήθηκε ανάλυση των σύνθετων υπολογιστικά τμημάτων του κώδικα του επιλυτή, των διαδικασιών B-Mult που υλοποιεί πολλαπλασιασμούς στοιχείων πίνακα με στοιχεία διανυσμάτων και των Fourier και CR που επιλύουν γραμμικά συστήματα. Τα σχήματα 4.72α' και 4.72β' δίνουν μια ενδεικτική εικόνα του πλήθους των πράξεων κινητής υποδιαστολής που απαιτούνται για την υλοποίηση των βασικών αυτών διαδικασιών κατά την υλοποίηση του παράλληλου αλγορίθμου.

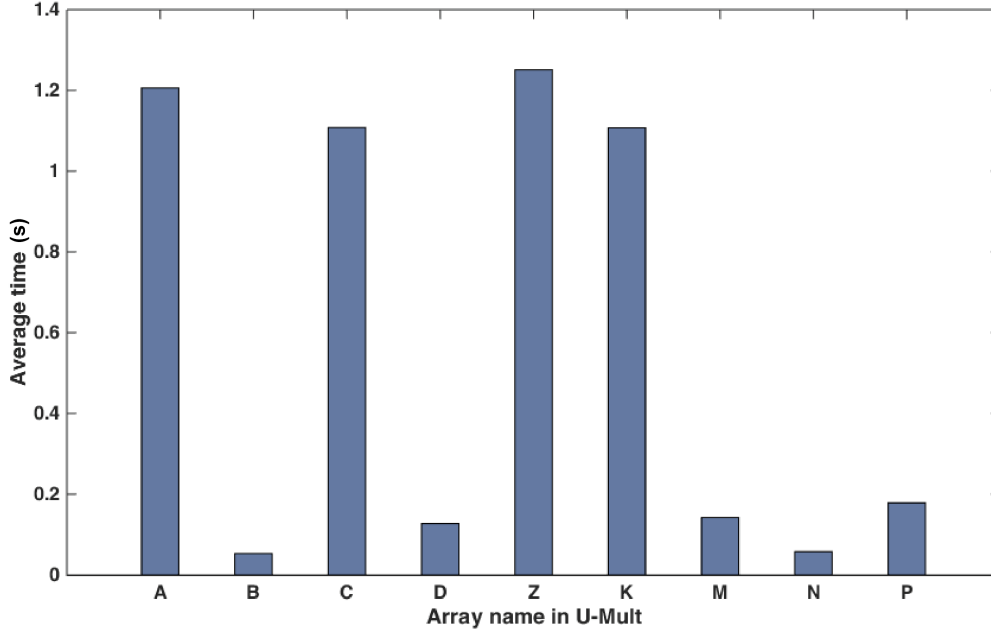


(α') FLOPs για κάθε επιμέρους πολλαπλασιασμό της (β') Μέση τιμή FLOPs ανά μέθοδο επίλυσης Fourier και CR

Σχήμα 4.72: Πράξεις κινητής υποδιαστολής σε ανομοιόμορφη διαμέριση με 16 νήματα εκτέλεσης

Είναι εμφανές ότι για κάθε έναν εκ των πολλαπλασιασμών με πίνακα B εντός της B-Mult απαιτούνται $\approx 4 \times 10^{-3}$ GFLOPs σε κάθε επανάληψη, με το μέσο χρόνο εκτέλεσης κάθε πολλαπλασιασμού να είναι $\approx 4 \times 10^{-4}$ seconds σε πολυνηματική υλοποίηση - μειωμένος 90 – 130% σε σχέση με τη σειριακή. Το πλέον απαιτητικό υπολογιστικά τμήμα του κώδικα υλοποίησης σε πράξεις κινητής υποδιαστολής είναι αυτό της επίλυσης με τη μέθοδο Fourier. Οι συγκεκριμένες διαδικασίες απαιτούν κατά μέσο όρο τη διενέργεια $\approx 6 \times 10^{-1}$ FLOPs σε κάθε επανάληψη. Σε συγκεκριμένες περιπτώσεις, η παραλληλοποίηση είχε ικανοποιητικά

αποτελέσματα, όπως στην επίλυση των S_{10} , S_{12} και S_{18} , όπου σε πολυνηματική υλοποίηση οι $\approx 7 \times 10^{-1}$ GFLOPs υλοποιούνται σε χρόνο $\approx 10^{-1}$ seconds, επιταχύνοντας τη διαδικασία σε σχέση με τη σειριακή υλοποίηση κατά $> 80\%$. Αντίθετα, στην περίπτωση των S_8 , S_{14} και S_{16} , διαδικασίες με αντίστοιχο πλήθος απαιτούμενων πράξεων κινητής υποδιαστολής αλλά διαφορετική δομή, ο μέσος χρόνος υλοποίησης για καθεμία ξεπερνά σταθερά το 1 second λόγω αδυναμίας αποδοτικής παραλληλοποίησης τμημάτων τους.



Σχήμα 4.73: Σύγκριση μέσου χρόνου υλοποίησης με 16 νήματα εκτέλεσης για κάθε διαδικασία της U-Mult σε ανομοιόμορφη διαμέριση

Τέλος, σημειώνεται η σημαντική διαφοροποίηση στο χρόνο υλοποίησης σε σχέση με αντίστοιχους επιλυτές όπου υπάρχουν διαθέσιμα στοιχεία. Χαρακτηριστικά αναφέρεται ότι για την υλοποίηση με τον επιλυτή της [28] απαιτούνται ~ 2 ώρες συνολικής επεξεργασίας για ένα πλέγμα με 950,400 αγνώστους όπου χρησιμοποιούνται ~ 48 Gb μνήμης σε πολυεπεξεργαστικό σύστημα.

4.1.3 Έλεγχος τάξης σύγκλισης μεθόδου

Για τον έλεγχο της τάξης σύγκλισης της μεθόδου επίλυσης χρησιμοποιήθηκε το απόλυτο σφάλμα

$$\text{Error}_{\Re(E_i^T)} = |\Re(E_i^T) - \Re(ET_i)|$$

του πραγματικού μέρους της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου, με χρήση, αρχικά, της - Ευκλείδειας- νόρμας L_2

$$\|e\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n |e_i|^2}$$

και της νόρμας L_∞

$$\|e\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |e_i|$$

στη συνέχεια, στον τύπο υπολογισμού

$$p \approx \frac{\ln(\frac{\|e^{2h}\|}{\|e^h\|})}{\ln 2}$$

Στους πίνακες ;; και ;; παρουσιάζονται οι μετρήσεις και οι αντίστοιχες τιμές της τάξης σύγκλισης σε ομοιόμορφη και ανομοιόμορφη διαμέριση στην περίπτωση εκπομπής κύματος συχνότητας $f = 3000\text{Hz}$ με ύψος πομπού στα 22m από το έδαφος. Από τις πραγματοποιηθείσες μετρήσεις παρατηρείται ότι η τάξη συγκλίνει στο 4.

h	Error L_2	Order p	Error L_∞	Order p
20	$9.6149e - 11$	—	$3.0586e - 13$	—
10	$9.3239e - 12$	3.36	$2.4922e - 14$	3.61
5	$7.2412e - 13$	3.68	$2.0479e - 15$	3.60

Πίνακας 4.6: Τάξη σύγκλισης σε ομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 3000\text{Hz}$ και $TH = 22\text{m}$

$h_x = h_z$	h_y	Error L_2	Order p	Error L_∞	Order p
20	80	$1.0496e - 07$	—	$5.8214e - 08$	—
10	40	$1.0064e - 08$	3.38	$5.0559e - 09$	3.52
5	20	$8.5097e - 10$	3.56	$3.7205e - 10$	3.76

Πίνακας 4.7: Τάξη σύγκλισης σε ανομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 3000\text{Hz}$ και $TH = 22\text{m}$

Αντίστοιχη παρατήρηση μπορεί να γίνει και για διαφορετικές τιμές συχνότητας εκπομπής. Στους πίνακες 4.8, ;; και ;; παρατίθεται η τάξη σύγκλισης για $f = 900\text{Hz}$, $f = 10000\text{Hz}$ και $f = 30000\text{Hz}$ με το ύψος του πομπού στα 22m για ομοιόμορφη διαμέριση του τρισδιάστατου χωρίου.

h	Error L_2	Order p	Error L_∞	Order p
20	$7.6166e - 12$	—	$6.2835e - 14$	—
10	$8.3715e - 13$		$6.9135e - 15$	
5	$8.0151e - 14$		$6.1041e - 16$	

Πίνακας 4.8: Τάξη σύγκλισης σε ομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 900Hz$ και $TH = 22m$

h	Error L_2	Order p	Error L_∞	Order p
20	$7.9130e - 11$	—	$1.5643e - 12$	—
10	$9.4192e - 12$		$1.5184e - 13$	
5	$8.5590e - 13$		$1.2564e - 14$	

Πίνακας 4.9: Τάξη σύγκλισης σε ομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 10000Hz$ και $TH = 22m$

h	Error L_2	Order p	Error L_∞	Order p
20	$2.3318e - 10$	—	$5.9876e - 12$	—
10	$2.5570e - 11$		$7.4260e - 13$	
5	$2.1086e - 12$		$4.8938e - 14$	

Πίνακας 4.10: Τάξη σύγκλισης σε ομοιόμορφη διαμέριση σε νόρμες L_2 και L_∞ για το πραγματικό μέρος του E_x όταν $f = 30000Hz$ και $TH = 22m$

4.2 Υλοποίηση σε αρχιτεκτονικές πλέγματος

Βασικός στόχος κατά την ανάπτυξη του ολοκληρωμένου προγράμματος εκτίμησης της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου ήταν η δυνατότητα υλοποίησης του σε μηχανήματα χωρίς ιδιαίτερα μεγάλες απαιτήσεις σε υπολογιστικούς πόρους (υπολογιστική ισχύς επεξεργαστή, μνήμη) τα οποία να είναι είναι προσβάσιμα είτε τοπικά είτε κατά παραγγελία σε περιβάλλοντα νέφους. Οι δοκιμές επίλυσης με χρήση της BiCGSTAB στο πολυπύρρηνο σύστημα, όπως αυτό περιγράφηκε στην προηγούμενη ενότητα, κρίθηκαν επιτυχημένες από άποψη ακρίβειας των προσεγγίσεων και χρόνου ολοκλήρωσης, οπότε και θεωρήθηκε ουσιαστικής σημασίας η εξέλιξη του προγράμματος με την υλοποίηση του σε πολυεπεξεργαστικό περιβάλλον κατανομής μνήμης. Ο στόχος αυτής της μετάβασης ήταν να δοθεί η δυνατότητα υπολογισμού εκτιμήσεων της έντασης για πλήθος θέσεων πομπού, όπως απαιτείται σε μια διαδικασία ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης, ταυτόχρονα - απώτερος σκοπός η διακύμανση της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου σε συγκεκριμένη θέση του δέκτη για πολλαπλές θέσεις του πομπού.

Σε εφαρμογή της DMSIMD - Distributed Memory Single Instruction Multiple Data, [119] τεχνικής ανατίθεται η επίλυση του προβλήματος προσέγγισης της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου για διαφορετική τιμή της θέσης του πομπού σε κάθε υπολογιστικό κόμβο του υπολογιστικού συστήματος. Στο σχήμα 4.74 αναπαρίσταται η διαδρομή των υπολογισμών. Τα χαρακτηριστικά των κόμβων του υπολογιστικού συστήματος κρίθηκε απαραίτητο να συνάδουν με τα αντίστοιχα χαρακτηριστικά του μηχανήματος που χρησιμοποιήθηκε τοπικά για την υλοποίηση.

Για την παραπάνω εφαρμογή χρησιμοποιήθηκε η υπολογιστική υποδομή του συστήματος Aris της ΕΔΥΤΕ στα πλαίσια της πρότασης GAIA-HPC η οποία κατατέθηκε και έγινε αποδεκτή ως έργο προετοιμασίας.

Τα κυριότερα χαρακτηριστικά των κόμβων στους οποίους παραχωρήθηκε πρόσβαση είναι τα εξής:

1. Υλικό

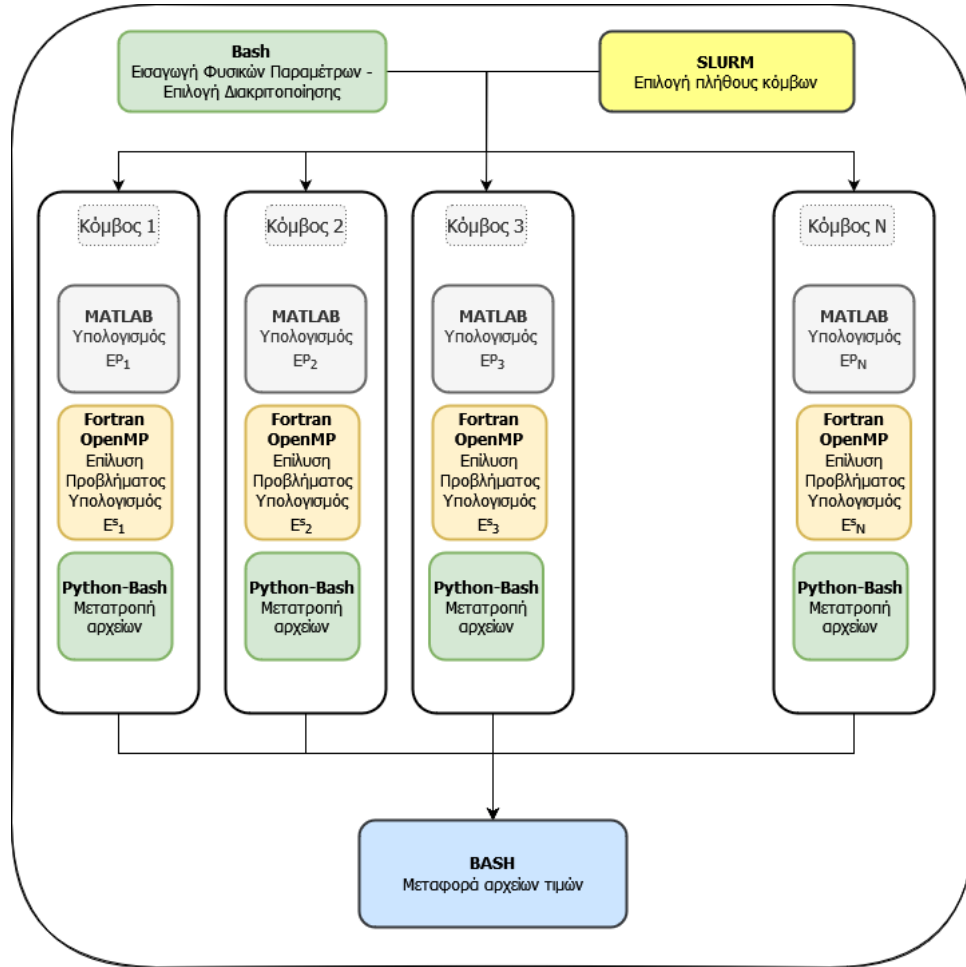
- Intel Xeon E5-2680 v2 @ 2.8 GHz
- Σύνολο πυρήνων 10
- Νήματα εκτέλεσης ανά πυρήνα 2
- 64 GB RAM

Το λογισμικό του συστήματος που χρησιμοποιήθηκε:

2. Λογισμικό

- Fortran 90
Compiler: pgf90 - HPC SDK NVIDIA
- Matlab Runtime
- Python

Η ανάθεση της διαδικασίας επίλυσης στους υπολογιστικούς κόμβους γίνεται μέσω του κόμβου διασύνδεσης του συστήματος και με χρήση του χρονοδρομολογητή (batch system) Slurm ([120]). Καθότι το σύστημα αποτελείται κατά κανόνα από ετερογενείς υπολογιστικούς κόμβους, αυτοί ομαδοποιούνται ανά ουρά (partition). Σε κάθε ουρά οι κόμβοι είναι



Σχήμα 4.74: Διάγραμμα διαδρομής υπολογισμών σε περιβάλλον κατανομής μνήμης όπου κάθε κόμβος υπολογίζει την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου για συγκεκριμένη θέση πομπού

ομογενείς και διασυνδέονται μεταξύ τους μέσω ενός ενιαίου δικτύου βασισμένου στην αρχιτεκτονική infiniband. Στο χρονοδρομολογητή περιγράφονται οι πόροι που χρειάζεται το σύστημα (π.χ. cores, nodes, μνήμη, χρόνος εκτέλεσης) και από ποια ουρά, καταγράφονται οι πόροι που ζητήθηκαν και όταν βρεθούν οι διαθέσιμοι, ξεκινάει η εκτέλεση της εργασίας με τους πόρους να διατίθενται με βάση τις προϋποθέσεις που έχει θέσει ο χρήστης.

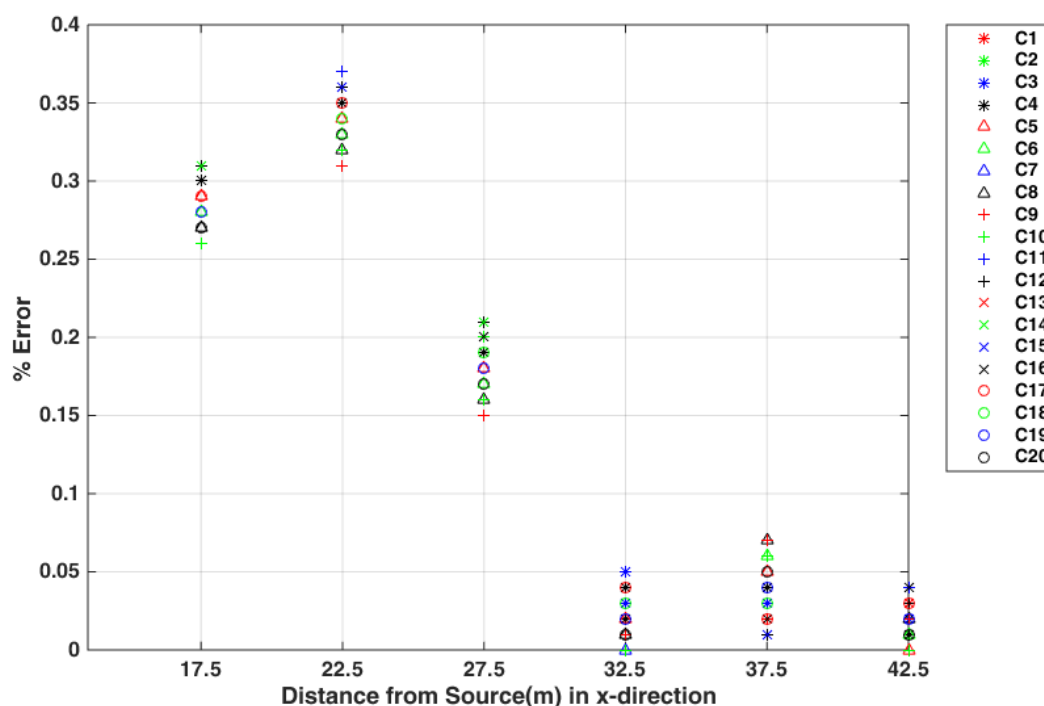
Για την ανάπτυξη του κώδικα και την πραγματοποίηση των δοκιμών παραχωρήθηκε από τη διαχείριση του συστήματος Aris πρόσβαση σε 20 υπολογιστικούς κόμβους (thin nodes) για 10000 core hours (όπου 1 core hour θεωρείται 1 πραγματική ώρα κατά την οποία χρησιμοποιείται 1 υπολογιστικός πυρήνας) έτσι ώστε κάθε ένας εξ' αυτών να υπολογίσει την ένταση του ηλεκτρικού πεδίου για διαφορετική θέση πομπού, σε θέσεις κατά μήκος της x κατεύθυνσης. Συγκεκριμένα, ο πομπός θεωρήθηκε στα $(x = -100, -90, -80, \dots, -10, 10, \dots, 80, 90, 100, y = 0, z = 22m)$ αντίστοιχα για κάθε έναν εκ των κόμβων. Όπως είναι σαφές, οι πομποί έχουν απόσταση $10m$ μεταξύ τους και βρίσκονται εκατέρωθεν του σημείου 0 στο οποίο και είχε θεωρηθεί ο πομπός στο σύνολο των αρχικών δοκιμών - η εφαρμογή η οποία αναπτύχθηκε μπορεί, γενικά, να δεχθεί n πλήθος θέσεων πομπού σε σύστημα με $\geq n$ διαθέσιμους κόμβους και οποιαδήποτε απόσταση d μεταξύ τους.

Το σύνολο των δοκιμών που πραγματοποιήθηκαν αφορούν την περίπτωση όπου $f = 3000$ σε ημιχώρο με $\sigma_0 = 0.001$ και $\sigma = 0.01$ και ύψος πομπού $22m$. Ο πίνακας 4.11 παρουσιάζει τις περιπτώσεις που υλοποιήθηκαν ανάλογα τη θέση του πομπού στην x -κατεύθυνση ενώ τα σχήματα 4.75 και 4.76 το σχετικό σφάλμα για τα E_x^T και E_y^T αντίστοιχα.

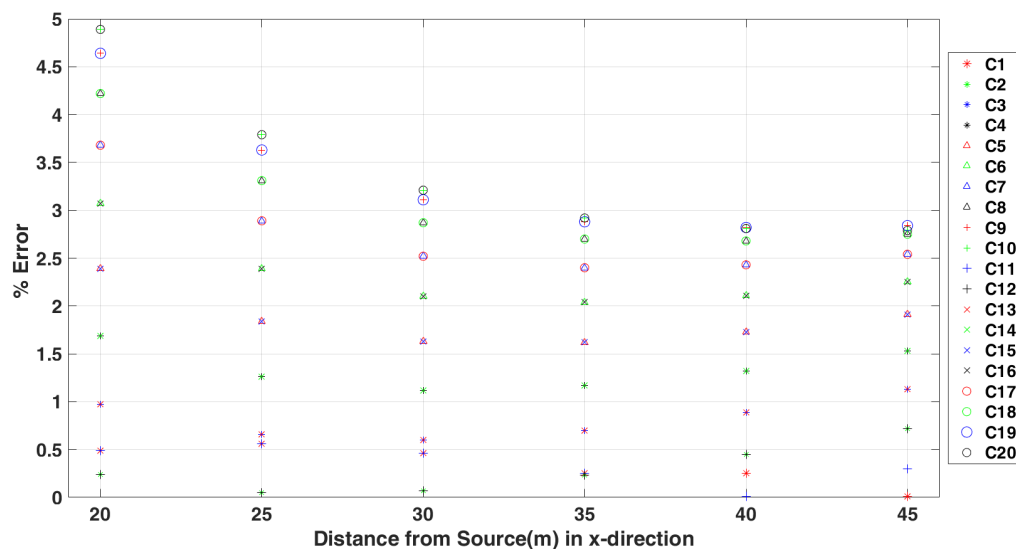
Περίπτωση	Απόσταση (m)	Περίπτωση	Απόσταση (m)
C_1	-10	C_{11}	+10
C_2	-20	C_{12}	+20
C_3	-30	C_{13}	+30
C_4	-40	C_{14}	+40
C_5	-50	C_{15}	+50
C_6	-60	C_{16}	+60
C_7	-70	C_{17}	+70
C_8	-80	C_{18}	+80
C_9	-90	C_{19}	+90
C_{10}	-100	C_{20}	+100

Πίνακας 4.11: Πίνακας περιπτώσεων θέσης πομπού σε σχέση με την απόσταση της από τη θέση 0 στην x -κατεύθυνση

Πρέπει να σημειωθεί ότι η έναρξη της εκτέλεσης του προγράμματος εξαρτάται από τη διαθεσιμότητα των πόρων του συστήματος. Στο σύνολο των δοκιμών υλοποίησης ο συνολικός χρόνος ολοκλήρωσης του προγράμματος (αναμονή για διαθέσιμους κόμβους + χρόνος υλοποίησης) δεν ξεπέρασε τα 11000sec καθιστώντας συμφέρουσα -χρονικά- την εφαρμογή της μεθόδου.

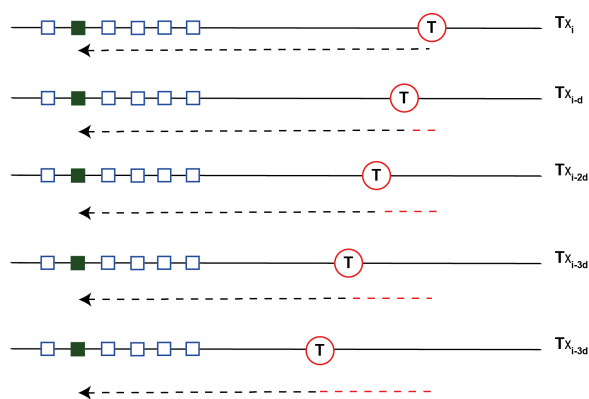


Σχήμα 4.75: Σχετικό σφάλμα E_x^T σε απόσταση $> 15m$ για τις θέσεις πομπού του πίνακα 4.11



Σχήμα 4.76: Σχετικό σφάλμα E_y^T σε απόσταση $> 15m$ για τις θέσεις πομπού του πίνακα 4.11

Κατά την ολοκλήρωση του προγράμματος είναι διαθέσιμο το σύνολο των τιμών των προσεγγίσεων για τις συνιστώσες E_x^T , E_y^T της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου καθώς και στοιχεία της εκτέλεσης του προγράμματος. Για τη μηδενική επιβάρυνση του συστήματος σε επίπεδο μνήμης όμως - και όπως πρακτικά είναι αναγκαίο σε ρεαλιστικές εφαρμογές - επιστρέφονται μεμονωμένες προσεγγίσεις σε συγκεκριμένες θέσεις του πεδίου ελέγχου που καθορίζονται εκ των προτέρων από το χρήστη (ενδεικτικά στο σχήμα 4.77).



Σχήμα 4.77: Πολλαπλές θέσεις πομπού και ζητούμενη προσέγγιση

4.3 Συμπεράσματα

Συνοψίζοντας, για τον επιλυτή που αναπτύχθηκε στο πρόβλημα της ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης με τα χαρακτηριστικά που αναφέρθηκαν και με τις διαφορετικές παραμέτρους υλοποίησης (διαφορετικά ύψη πομπού, τυπικές τιμές αγωγιμότητας ημιχώρου, διαφορετικές συχνότητες) προέκυψαν αρκετά συμπεράσματα. Συγκεκριμένα,

- Η εφαρμογή ανομοιόμορφης διαμέρισης $5m$ - $20m$ παράγει εν γένει ικανοποιητικά αποτελέσματα σε σύγκριση με αυτά ομοιόμορφης διαμερίσης $5m$. Οι δοκιμές στην διατριβή πραγματοποιήθηκαν σχεδόν καθολικά με αυτά τα χαρακτηριστικά ανομοιόμορφης διακριτοποίησης αλλά ο επιλυτής μπορεί να χρησιμοποιηθεί και με διαφορετικά μήκη ανά κατεύθυνση.
- Οι υλοποιήσεις εμφανίζουν αποδεκτά αριθμητικά αποτελέσματα σε αποστάσεις $> 20m$ και $< 120m$ από τον πομπό πάνω στη γραμμή ελέγχου, σε χαμηλό ύψος και χαμηλές συχνότητες, οπότε ο επιλυτής μπορεί να θεωρηθεί δυνητικά αξιοποιήσιμος σε εφαρμογές επί του πεδίου σε έρευνες για γεωλογικούς σχηματισμούς μη μαγνητικών μέσων
- Η εφαρμογή των επιλεγμένων συνοριακών συνθηκών, Dirichlet με μηδενικές τιμές πεδίου \mathbf{E} και, ταυτόχρονα, η θεώρηση μηδενικών τιμών των παραγώγων του δεύτερης τάξης, δεν επηρεάζει τα αριθμητικά αποτελέσματα με το δέκτη θεωρούμενο σε αποδεκτή απόσταση από τον πομπό και παράλληλα σε ικανοποιητική απόσταση από το σύνορο στο μοντέλο των δοκιμών, όπως υποδεικνύουν οι συγκρίσεις προσεγγίσεων και αναλυτικών λύσεων. Πιθανή εφαρμογή Απορροφητικών Οριακών Συνθηκών ενδεχομένως να αυξήσει περαιτέρω -κατά περίπτωση- την απόσταση αυτή, ταυτόχρονα θα επιβαρύνει με υπολογιστικό φόρτο τον επιλυτή.
- Η αγωγιμότητα καθορίστηκε στις θέσεις όπου προσεγγίζεται η ένταση του ηλεκτρικού πεδίου, με την ασυνέχεια να περνάει μέσα από τα κελιά της διεπαφής αέρα-εδάφους. Όπως υποδεικνύεται από τις συγκρίσεις, ο επιλυτής διαχειρίζεται την ασυνέχεια της αγωγιμότητας σε ικανοποιητικό βαθμό σε χαμηλό ύψος πομπού.
- Οι χρόνοι υλοποίησης σε πολυνηματικό μηχάνημα είναι ικανοποιητικοί ενώ οι απαιτήσεις σε μνήμη είναι εξαιρετικά περιορισμένες ακόμα και για πυκνότερες διαμερίσεις, επιτρέποντας την υλοποίηση του επιλυτή σε μηχανήματα με περιορισμένους πόρους.
- Το λογισμικό που δημιουργήθηκε ως επέκταση στον επιλυτή δίνει τη δυνατότητα της ταυτόχρονης υλοποίησης του σε περιβάλλοντα κατανεμημένης μνήμης ή σε ομάδα πολυεπεξεργαστικών μηχανημάτων, επιτρέποντας την εντός απαιτούμενης ακρίβειας εκτίμηση της έντασης του ηλεκτρικού πεδίου για πολλαπλές θέσεις πομπού, στα πλαίσια της επίλυσης του προβλήματος του αντιστρόφου

4.4 Μελλοντικοί Στόχοι

Οι μελλοντικοί στόχοι που έχουν τεθεί στα πλαίσια

- Η επίλυση του ευθέος προβλήματος όταν στο υπέδαφος της γης υπάρχει:
 - διαστρωμάτωση από ετερογενή υλικά με διαφορετική αγωγιμότητα (σε εξέλιξη)
 - περιοχές όπου υφίστανται μεμονωμένες κοιλότητες με γεωλογικούς σχηματισμούς αποτελούμενους από ετερογενή υλικά (σε εξέλιξη)
- Η ενσωμάτωση του επιλυτή του ευθέος προβλήματος σε υφιστάμενη διαδικασία επίλυσης του προβλήματος του αντιστρόφου ώστε να παρέχεται ολοκληρωμένα η δυνατότητα παραγωγής αποτελεσμάτων τρισδιάστατης απεικόνισης γεωλογικών σχηματισμών με χρήση ηλεκτρομαγνητικής διασκόπησης.
- Η μετατροπή του κώδικα του επιλυτή ώστε να εκτελείται σε ετερογενή συστήματα με επιταχυντές
- Η ενσωμάτωση του επιλυτή σε container ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί αυτόνομα σε cloud υποδομές

Βιβλιογραφία

- [1] Amodio P., Mazzia F., 1994, Backward error analysis of cyclic reduction for the solution of tridiagonal systems, *Mathematics of Computation*, 62, pp. 601-617
- [2] Alumbaugh, D., Newman, G., Prevost, L. Shadid, J., 1996, Three-dimensional wideband electromagnetic modeling on massively parallel computers, *Radio Science*, 31 (1), pp. 1-23
- [3] Avdeev, D., 2005, Three-dimensional electromagnetic modelling and inversion from theory to application, *Surveys in Geophysics*, 26, pp.767-799
- [4] Avdeev, D., A. V. Kuvshinov, O. V. Pankratov, and G. A. Newman, 2000, 3D EM modelling using fast integral equation approach with Krylov subspace accelerator, *Extended abstracts of 62nd EAGE Conference*, pp.195-198
- [5] Berenger, J., 1994, A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves, *Journal of Computational Physics*, 114 (2), pp.185–200
- [6] Fomenko, E. Y., and T. Mogi, 2002, A new computation method for a staggered grid of 3D EM field conservative modeling, *Earth Planets Space*, 54, pp.499-509
- [7] Gaitonde, D., Visbal, M., 1998, High order schemes for Navier-Stokes equations: Algorithm and implementation into FDL3DI, *Air Force Research Lab Wright-Patterson Air Vehicles Directorate*, 3060, NASA
- [8] Gander, W., Golub, G. H., 1997, Cyclic reduction history and applications, *Proceedings of the Workshop on Scientific Computing 1997 Hong Kong*, pp.73-85
- [9] Swarztrauber, P.N., 1977, The Methods of Cyclic Reduction, Fourier Analysis and the FACR Algorithm for the Discrete Solution of Poisson's Equation on a Rectangle, *SIAM Review*, 19 (3), pp. 490-501
- [10] Heller, D., 1976, Some Aspects of the Cyclic Reduction Algorithm for Block Tridiagonal Linear Systems, *SIAM J. Numer. Anal.* 13 (4)
- [11] Huang, Y., McColl, W.F., 1997, Analytical inversion of general tridiagonal matrices, *J. Phys. A: Math. Gen.*, 30, pp. 7919–7933
- [12] Haber, E., U. M. Ascher, D. A. Aruliah, and D. W. Oldenburg, 2000, Fast simulation of 3D electromagnetic problems using potentials, *Journal of Computational Physics*, 163, pp.150-171
- [13] Hanssens, D., Delefortrie, S., Bobe, C, Hermans, T., De Smedt, P., 2019, Improving the reliability of soil EC-mapping: Robust apparent electrical conductivity (rECa) estimation in ground-based frequency domain electromagnetics, *Geoderma*, 337, pp.1155-1163

- [14] Hirsh, R. S., 1975, Higher order accurate difference solutions of fluid mechanics problems by a compact differencing technique, *Journal of Computational Physics*, 19, pp.90-109
- [15] Jaysaval, P., Shantsev, D., de la Kethulle de Ryhove, S., Bratteland, T., 2016, Fast simulation of 3D electromagnetic problems using potentials, *Geophysical Journal International*, 207, pp.1554-1572
- [16] Johnson, S. G., 2021, Notes on Perfectly Matched Layers (PMLs), arXiv:2108.05348, physics.comp-ph, Tutorial review based on online MIT course notes
- [17] Koldan, J., Puzyrev, V., de la Puente, J., Houzeaux, G., Cela, J.M., 2014, Algebraic multigrid preconditioning within parallel finite element solvers for 3-D electromagnetic modelling problems in geophysics, *Geophysical Journal International*, 197(3), 1442–1458
- [18] Lele, S. K., 1992, Compact finite difference schemes with spectral-like resolution, *Journal of Computational Physics*, 103, pp.16-42
- [19] Minsley, B., J., 2011, A trans-dimensional Bayesian Markov chain Monte Carlo algorithm for model assessment using frequency-domain electromagnetic data, *Geophysical Journal International*, 187, pp.252-272
- [20] Mitsuhashi, Y., Uchida, T., 2004, 3D magnetotelluric modeling using the T-W document finite-element method, *Geophysics*, 69, pp.108-119
- [21] Newman, G. A., Alumbaugh, D. L., 1995, Frequency domain modeling of airborne electromagnetic responses using staggered finite differences, *Geophysical Prospecting*, 43, pp. 1021-1042
- [22] Raiche, A., 1974, An integral equation approach to three-dimensional modeling, *Geophysical Journal International*, 36, pp.363-376
- [23] Sasaki, Y., Kim J., Cho, S., 2010, Multidimensional inversion of loop-loop frequency-domain EM data for resistivity and magnetic susceptibility, *Geophysics*, 75, F213-F223
- [24] Smith, J., 1996, Conservative modeling of 3-D electromagnetic fields, Part I: Properties and error analysis, *Geophysics*, 61, pp.1308-1318.
- [25] Papadopoulou E., Saridakis I., Mathioudakis E., 2001, Bi-CGSTAB for collocation equations on distributed memory parallel architectures, 4th European Conference on Numerical Math. and Adv. Applications, pp.957-966
- [26] Mathioudakis E., Papadopoulou E., Saridakis I., 2001, BiCGSTAB for Collocation systems on Shared Memory Parallel Architectures, International Conference on Numerical Algorithms
- [27] Papadopoulou E., Mathioudakis E., 2007, Grid Computing for the Bi-CGSTAB applied to the solution of the Modified Helmholtz equation, *International Journal of Applied Maths and Computer Science*, 4(3), pp 179-184, WASET
- [28] Streich, R., 2009, 3D finite-difference frequency-domain modeling of controlled-source electromagnetic data: Direct solution and optimization for high accuracy, *Geophysics*, 74, F95-F105

- [29] Taflove, A., Hagness, S., 2005, Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, 3rd ed. Artech House Publishers, pp. 273-327
- [30] Varga, R., 2000, Matrix iterative analysis, Springer Series in Computational Mathematics, 27, pp. 63-110
- [31] Ward, S. H., dan Hohmann, G. W., 1998, 4. Electromagnetic theory for geophysical applications: M. N. Nabighian, Ed., Electromagnetic Methods in applied Geophysics, Theory and Practice, Investigations in Geophysics, Society of Exploration Geophysicists, pp.208-212 and pp.130-311
- [32] Yee, K. S., 1966, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media: IEEE Transactions on Antennas and Propagation, 14, pp.302-307
- [33] Scott, J., Tuma, M., 2023, Algorithms for Sparse Linear Systems, Incomplete Factorizations, NECES, pp. 185-203
- [34] Zyserman, F. I., Santos, J. E., 2000, Parallel finite element algorithm with domain decomposition for three-dimensional magnetotelluric modeling, Journal of Applied Geophysics, 44, pp.337-351
- [35] el Guennouni, A., Jbilou, K., Sadok, H., 2003, A block version of BiCGSTAB for linear systems with multiple right-hand sides, ETNA, Electronic Transactions on Numerical Analysis, 16, pp. 129-142
- [36] Mulder, W.A., 2006, A multigrid solver for 3D electromagnetic diffusion, Geophysical Prospecting, 54(5), 633–649
- [37] Carlson, D., 1986, What are the Schur complements, anyway?, Linear Algebra and its Applications, 74, pp. 257-275
- [38] Weiss, M., Neytcheva, M., Kalscheuer, T., 2022, Iterative solution methods for 3D controlled-source electromagnetic forward modelling of geophysical exploration scenarios, Computational Geosciences, 27, pp. 81–102
- [39] Ercegovac, M., Muller, J.M., 2007, Solving Systems of Linear Equations in Complex Domain: Complex E-Method, ensl-00125369v2
- [40] Espinola, G., Cabral, J., Schaerer, C., 2020, Adaptive GMRES(m) for the Electromagnetic Scattering Problem: Tendencias em Matematica Aplicada e Computacional, 21, N. 1, pp. 191-208
- [41] Zhang, Z., Liu, Q., 2003, Applications of the BCGS-FFT method to 3-D induction well logging problems: IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing, 41/5, pp. 998-1004
- [42] Horn, R., Johnson, C., 2013, Matrix Analysis, 2nd Edition, pp.352
- [43] Bini, A., Meini, B., 2009, The cyclic reduction algorithm: from Poisson equation to stochastic processes and beyond, 2nd Edition, 51, pp.23-60
- [44] schwarz
- [45] Rumpf, R. C., 2022, Electromagnetic and Photonic Simulation for the Beginner: Finite-Difference Frequency-Domain in MATLAB

- [46] Liu, Y., Yin C., 2013, Electromagnetic divergence correction for 3D anisotropic EM modeling, *Journal of Applied Geophysics*, pp. 96
- [47] Horn, R., Johnson, C., 2013, *Matrix Analysis*, 2nd edition, ISBN 978-0-521-83940-2, pp. 352
- [48] Wilson, G., Conrad, J., Anderson, J., Swidinsky, A., Shragge, J., 2022, Developing a low-cost frequency-domain electromagnetic induction instrument, *Geoscientific Instrumentation, Methods and Data Systems*, 11, pp.279–291
- [49] Feingold, D.G., Varga, R.S., 1962, Block diagonally dominant matrices and generalizations of the Gershgorin circle theorem, *Pacific Journal of Mathematics*, 12/4, pp. 1241-1250
- [50] Wu, J., He, X., Wei, B., Li, X., Fast Parallel FDFD Algorithm for Solving Electromagnetic Scattering Problems, 2021, *Journal of Electrical and Electronic Engineering*, 9, pp. 186-193
- [51] Korus J., 2018, Combining Hydraulic Head Analysis with Airborne Electromagnetics to Detect and Map Impermeable Aquifer Boundaries, *Water*, 10, pp. 975
- [52] Schwarzbach, C., Borner, R.U., Spitzer, K., 2011, Three dimensional adaptive higher order finite element simulation for geoelectromagnetics, a marine CSEM example, *Geophysical Journal International*, 187(1), pp. 63–74
- [53] Amestoy, P., Buttari, A., L'Excellent, J.-Y., Mary, T., 2019, Performance and scalability of the block low-rank multifrontal factorization on multicore architectures, *ACM Transactions on Mathematical Software*, 45, 2:1–2:26
- [54] Talukder, P. K., Schmuckle, F. J., Schlundt R., Heinrich, W., 2007, Optimizing the FDFD Method in Order to Minimize PML-Related Numerical Problems, *IEEE/MTT-S International Microwave Symposium*, pp. 293-296
- [55] Rappaport, C.M., Kilmer, M., Miller, E, 2000, Accuracy considerations in using the PML ABC with FDFD Helmholtz Equation Computation, *International Journal on Numerical Modelling*, 13, 471-482
- [56] Egbert, G, 2012, Kelbert, A., Computational recipes for electromagnetic inverse problems, *Geophysical Journal International*, 189, 1, pp. 251-267
- [57] Tischler, T., Heinrich, W., 2002, Accuracy limitations of perfectly matched layers in 3D finite-difference frequency-domain method, *IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest*, 3, 1885
- [58] Amestoy, P., Duff, I.S., Koster, J., L'Excellent, J.-Y., 2001, A fully asynchronous multifrontal solver using distributed dynamic scheduling, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 23(1), pp.15–41
- [59] Schenk, O., Gartner, K., 2004, Solving unsymmetric sparse systems of linear equations with PARDISO, *Future Generation Computer Systems*, 20(3), pp.475–487
- [60] Gould, N.I., Scott, J.A., Hu, Y., 2007, A numerical evaluation of sparse direct solvers for the solution of large sparse symmetric linear systems of equations, *ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS)*, 33(2), 10–es

- [61] Pardo, D., Paszynski, M., Collier, N., Alvarez, J., Dalcin, L., Calo, V.M., 2012, A survey on direct solvers for Galerkin methods, *SeMA Journal*, 57(1), pp. 107–134
- [62] Da Silva, N.V., Morgan, J.V., MacGregor, L., Warner, M., 2012, A finite element multifrontal method for 3D CSEM modeling in the frequency domain, *Geophysics*, 77(2), E101–E115
- [63] Puzyrev, V., Koric, S., Wilkin, S., 2016, Evaluation of parallel direct sparse linear solvers in electromagnetic geophysical problems, *Computers and Geosciences*, 89, 79–87
- [64] Castillo-Reyes, O., de la Puente, J., Cela, J.M., 2018, PETGEM: A parallel code for 3D CSEM forward modeling using edge finite elements, *Computers and Geosciences*, 119, 123–136
- [65] Ehas, M.W., Zyserman, F.I., Rosas-Carbajal, M., Manassero, M.C., 2022, Three-dimensional modelling of controlled source electromagnetic surveys using non-conforming finite element methods, *Geophysical Journal International* 229(2), pp. 1133–1151
- [66] Ren, Z., Kalscheuer, T., Greenhalgh, S., Maurer, H., 2013, A goaloriented adaptive finite-element approach for plane wave 3-D electromagnetic modelling, *Geophysical Journal International*, 194(2), 700–718
- [67] Rochlitz, R., Skibbe, N., Gunther, T., 2019, custEM: Customizable finite-element simulation of complex controlled-source electromagnetic data, *Geophysics* 84(2), F17–F33
- [68] Swanson K.R., Alvord Jr. E.C., Murray J.D., 2000, A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter, *Cell Proliferation*, 33, pp. 317–329
- [69] Swanson K.R., Bridge C., Murray J.D., Alvord Jr. E.C., 2003, Virtual and real brain tumours: using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion, *Journal of the Neurological Sciences*, 216, pp. 1–10
- [70] Alexander R., 1977, Diagonally implicit runge-kutta methods for stiff odes, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 14(5), pp. 1006–1021
- [71] Varga, R.S., 1960, Factorization and normalized iterative methods, in: R.E. Langer (Ed.), *Boundary Problems in Differential Equations*, University of Wisconsin Press, Madison
- [72] Yun, H., Kim, S.W., 1999, Parallel block ILU preconditioners for a block-tridiagonal M-matrix, *J. Korean Math. Soc.* 36, pp. 209–227
- [73] Beauwens, R., Bouzid, M., 1987, On sparse block factorization iterative methods, *SIAM J. Numer. Anal.* 24, pp. 1066–1076
- [74] Meijerink, J.A., van der Vorst, H.A., 1977, An iterative solution method for linear systems of which the coefficient matrix is a symmetric M-matrix, *Math. Comp.* 31, pp. 148–162
- [75] Bank, R., Chan, T., 1994, A composite step bi-conjugate gradient algorithm for nonsymmetric linear systems, *Numerical Algorithms*, 7, pp. 1–16

- [76] Saad, Y., Schultz, M.H., 1986, A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 7(3)
- [77] Fletcher, R., Watson, G., 1976, Conjugate gradient methods for indefinite systems, *Numerical Analysis: Lecture Notes in Mathematics*, 506, pp. 73–89
- [78] Van der Vorst, H.A., 1992, BiCGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, *SIAM, Journal on Scientific Computing*, 13(2), 631–644
- [79] Kim, S.W., Yun, J.H., Block ILU factorization preconditioners for a block-tridiagonal H-matrix, *Linear Algebra and its Applications*, 317 (2000), pp. 103–125
- [80] Saad Y., 2003, *Iterative methods for sparse linear systems*, SIAM
- [81] Liu, P. Li, K., 2002, Programming the Bi-CGSTAB Matrix Solver for HPC and Benchmarking IBM SP3 and Alpha ES40, *IEEE, IPDPS*, 3, pp. 0234
- [82] Kaporin, I., Milyukova, O., 2019, MPI+OpenMP implementation of the BiCGStab method with explicit preconditioning for the numerical solution of sparse linear systems, *Numerical Methods and Programming*, 20(4)
- [83] Rana F., *Lecture notes on Electromagnetic Fields and Waves*, Cornell University
- [84] Sato, M., 2008, Diagonally Staggered Grid for the Analysis of Elastic Wave Fields in Isotropic and Anisotropic Solids Using the Finite-Difference Time-Domain Method, *Japanese Journal of Applied Physics*, 47, 3931
- [85] Graves, R., 1996, Simulating seismic wave propagation in 3D elastic media using staggered-grid finite differences, *Bulletin of the Seismological Society of America*
- [86] Meyer, F., Davidson, D., 1996, Adaptive-mesh refinement of finite-element solutions for two-dimensional electromagnetic problems. *IEEE Antennas and Propagation Magazine*, 38, pp. 77-83
- [87] Tsompanopoulou, P., Vavalis, E., 2008, An experimental study of interface relaxation methods for composite elliptic differential equations, *Applied Mathematical Modelling Volume 32*, 8, pp. 1620-1641
- [88] Maroudas, E., Vilanakis, N., Antonopoulos, C., Mathioudakis, E., Saridakis, Y., Vavalis, M., Schwarz splitting for the steady state problem of saltwater intrusion in coastal aquifers, 2015, *International Journal of Mathematical Models in Applied Sciences*, 9, pp.733-739
- [89] Voznyuk, I., 2016, Domain decomposition method for electromagnetic modelling and quantitative microwave imaging in large-scale three-dimensional configurations, *Electromagnetism*, Aix-Marseille Universite
- [90] Li X., Wei B., He X.B., Gao Z.W., 2020, Parallel FDFD Algorithm Based on MPI and Its Application, *Cross Strait Radio Science and Wireless Technology Conference*, pp. 1-3, doi: 10.1109/CSRSWTC50769.2020.9372456
- [91] Demir V., 2012, Graphics Processor Unit (GPU) Acceleration Of Finite-Difference Frequency Domain (FDFD) Method, *Progress in Electromagnetics Research M.*, Vol. 23, 29-51

- [92] Smith, J.T., 1996, Conservative modeling of 3-D electromagnetic fields, Part II: Biconjugate gradient solution and an accelerator, *Geophysics*, 61(5), 1319–1324
- [93] Qiu, C., Yin, C., Liu, Y., Ren, X., Chen, H., Yan, T., 2021, Solution of large-scale 3D controlled-source electromagnetic modeling problem using efficient iterative solvers, *Geophysics*, 86(4), E283–E296
- [94] Farquharson, C.G., Miensopust, M.P., 2011, Three-dimensional finite element modelling of magnetotelluric data with a divergence correction, *Journal of Applied Geophysics*, 75(4), 699–710
- [95] Jahandari, H., Farquharson, C.G., 2015, Finite-volume modelling of geophysical electromagnetic data on unstructured grids using potentials, *Geophysical Journal International*, 202(3), 1859–1876
- [96] Um, E.S., Commer, M., Newman, G.A., 2013, Efficient pre-conditioned iterative solution strategies for the electromagnetic diffusion in the Earth: finite-element frequency-domain approach, *Geophysical Journal International*, 193(3), 1460–1473
- [97] Borner, R.U., 2010, Numerical modelling in geo-electromagnetics: Advances and challenges, *Surveys in Geophysics*, 31(2), 225–245
- [98] Bin Zubair Syed, H., Farquharson, C., MacLachlan, S., 2020, Block preconditioning techniques for geophysical electromagnetics, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 42(3), B696–B721
- [99] Grayver, A.V., Burg, M., 2014, Robust and scalable 3-D geoelectromagnetic modelling approach using the finite element method, *Geophysical Journal International*, 198(1), 110–125
- [100] Grayver, A.V., Kolev, T.V., 2015, Large-scale 3D geoelectromagnetic modeling using parallel adaptive high-order finite element method, *Geophysics* 80(6), E277–E291
- [101] Herzberg, B., 1901, Die Wasserversorgung einiger Nordseebäder, *Jour. Gasbeleuchtung Wasserversorg*, 44, pp. 815–844
- [102] Mantoglou, A., 2003, Pumping management of coastal aquifers using analytical models of saltwater intrusion, *Water Resources Research*, 39(12), pp. 1335–1346
- [103] Athanasakis, I., Dokou, Z., Mathioudakis, E., Stratis, P., Vilanakis, N., 2015, Combining Stochastic Optimization and Numerical Methods-Software for the Pumping Management of Coastal Aquifers: Case Study of a Rectangular Homogeneous Aquifer, *MMCTSE International Conference*
- [104] Luszczynski, N.J., 1961, Head and flow of ground water of variable density, *Journal of Geophysical Research*, 66(12), pp. 4247–4256
- [105] Athanasakis, I.E., Vilanakis N.D, Mathioudakis E.M, 2015, Solving Discontinuous Collocation Equations for a Class of Brain Tumor Models on GPUs, *Proceedings of the World Congress on Engineering*, I
- [106] Athanasakis I.E., Papadomanolaki, M.G., Papadopoulou, E.P., Saridakis, Y.G., 2013, Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a brain tumour invasion model, *Proceedings of WCE 2013, Vol I, IAENG*, pp. 241–246

- [107] Papadomanolaki, M.G., 2012, The collocation method for parabolic differential equations with discontinuous diffusion coefficient: in the direction of brain tumour simulations, PhD Thesis, Technical University of Crete
- [108] Papadomanolaki, M.G., Saridakis, I., 2010, Hermite Collocation for one dimensional tumour invasion model with heterogenous diffusion, HERMIS, 11, pp.63-68
- [109] Stratis P., Karatzas G., Papadopoulou E., Zakynthinaki M., Saridakis Y., 2016, Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers, PLoS ONE, 11(9):e0162783
- [110] Athanasakis I., Papadopoulou E., Saridakis Y., 2015, Hermite Collocation and SSPRK schemes for the numerical treatment of a generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov equation, Proceedings of the World Congress of Engineering, pp. 137-142
- [111] Αθανασάκης Ι., 2018, Ασυνεχείς - υβριδικές μέθοδοι ζολλοστασιον για προβλήματα πολλαπλών πεδίων, Διδακτορική διατριβή, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης
- [112] Μαθιουδάκης Ε., 2001, Επαναληπτικές μέθοδοι για την επίλυση μεγάλων γραμμικών συστημάτων σε παράλληλες αρχιτεκτονικές, Διδακτορική Διατριβή, Γενικό Τμήμα, Πολυτεχνείο Κρήτης
- [113] Μάνδικας Β., 2017, Παράλληλοποίησιμες Πολυπλεγματικές τεχνικές σε επιλυτές Navier-Stokes για την μοντελοποίηση ασυμπίεστων ροών, Διδακτορική Διατριβή, Γενικό Τμήμα, Πολυτεχνείο Κρήτης
- [114] Στρατής Π., 2017, Υψηλής Τάξης Προσεγγίσεις και Στοχαστική Βελτιστοποίηση για Μοντέλα Υφαλμύρισης Υπόγειων Υδροφορέων, Διδακτορική Διατριβή, Σχολή Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, Πολυτεχνείο Κρήτης
- [115] Τζάνης, Α., Εισαγωγή στις ηλεκτρομαγνητικές μεθόδους γεωφυσικής διασκόπησης, 2003, Σημειώσεις, Τομέας Γεωφυσικής - Γεωθερμίας, Σχολή Γεωλογίας, Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών
- [116] Μαντόγλου Α., Γιαννουλόπουλος Π., 2001, Βελτιστοποίηση αντλήσεων παράκτιων υδροφορέων για πρόληψη υφαλμύρισης, Πρακτικά Συμποσίου Αιγαίο - Νερό Βιώσιμη Ανάπτυξη
- [117] Ελληνική Υδροτεχνική Ένωση, 2003, Πρακτικά 9ου Πανελλήνιου Συνεδρίου
- [118] <https://www.openmp.org/wp-content/uploads/OpenMP-API-Specification-5-2.pdf>
- [119] <https://netlib.org/utk/papers/advanced-computers/dm-simd.html>
- [120] <https://slurm.schedmd.com>
- [121] <https://geosiamservices.com/services/airborne-services/airborne-em-survey/>
- [122] <https://www.amcl.tuc.gr/el/ereyna/ereynitika-programmata/matenvmed-thalis/archi>

Παράρτημα Α΄

Πρόβλημα Ιατρικής

Α΄.1 Διάχυση Πρωτογενών Καρκινικών Όγκων - Περιγραφή

Το γλοίωμα είναι ο πλέον κοινός πρωτογενής όγκος του εγκεφάλου. Αναπτύσσεται από τα νευρογλοιακά κύτταρα, τα οποία στηρίζουν τους νευρώνες του εγκεφάλου παρέχοντας τους οξυγόνο και άλλα στοιχεία. Παρουσιάζεται με διάφορους βαθμούς κακοήθειας με το πολύμορφο γλοιοβλάστωμα να είναι η πιο συνηθισμένη και η πιο επιθετική κακοήθης μορφή γλοιωμάτων - πάνω από 50% των γλοιωμάτων είναι θανατηφόρα, ακόμη και μετά από εκτεταμένη χειρουργική επέμβαση, ραδιοθεραπεία και χημειοθεραπεία. Είναι ξεκάθαρο λοιπόν ότι η διάδοση των γλοιωμάτων είναι ένα εξαιρετικά κρίσιμο πρόβλημα ιατρικής φύσης, το οποίο όμως μπορεί να μελετηθεί με τη βοήθεια μαθηματικών μοντέλων.

Το βασικό μαθηματικό μοντέλο, το οποίο βασίζεται στην ανάλυση δεδομένων αξονικών τομογραφιών, θεωρεί μια γραμμική Μερική Διαφορική Εξίσωση διάχυσης, όπως αυτή περιγράφηκε στο κεφάλαιο 1, για να μελετήσει κυρίως την εξέλιξη καρκινικών όγκων με διαχυτική επιθετικότητα όπως το γλοιοβλάστωμα. Το μοντέλο περιλαμβάνει την ανομοιογένεια του εγκεφαλικού ιστού, ο οποίος αποτελείται από λευκή και φαιά ουσία, με αποτέλεσμα την εισαγωγή ασυνεχειών στους συντελεστές της ΜΔΕ. Στην παρούσα εργασία μελετάται ένα γραμμικό μοντέλο χωρίς όρους θεραπείας ή χειρουργικής επέμβασης ώστε να βρεθεί ο βέλτιστος αλγόριθμος επίλυσης για τη συγκεκριμένη οικογένεια προβλημάτων. Σε σχετικά πρόσφατες όμως εργασίες παρουσιάστηκαν και μοντέλα με πρωτόκολλα θεραπείας ([111]).

Για την αριθμητική μελέτη και επίλυση του παραπάνω μοντέλου καρκινικών όγκων εγκεφάλου εισήχθη από τον Καθ. Ι. Σαριδάκη μια νέα Collocation μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων, με ασυνεχή στοιχεία Hermite τα οποία προσομοιώνουν τις ασυνέχειες του μοντέλου, η οποία αρχικά παρουσιάστηκε από τους Ι. Σαριδάκη, Μ. Παπαδομανωλάκη ([107], [108]). Στο πλαίσιο του ερευνητικού προγράμματος ΘΑΛΗΣ-MATENVMED, και συγκεκριμένα των δράσεων 2.1 και 4.1, αναπτύχθηκε από τους Ι. Σαριδάκη, Ε. Παπαδοπούλου και Ι. Αθανασάκη η τέταρτης τάξης ακρίβειας αριθμητική μέθοδος DHC (Discontinuous Hermite Collocation) σε συνδυασμό με υψηλής τάξης ακρίβειας Runge-Kutta στις 1+1 και 1+2 διαστάσεις για την μοντελοποίηση του παραπάνω προβλήματος διάχυσης καρκινικών όγκων ([106], [111]). Η μέθοδος απαιτεί την επίλυση μεγάλων γραμμικών συστημάτων σε κάθε χρονικό βήμα, με συνέπεια το μεγάλο υπολογιστικό κόστος.

Κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της παρούσας διατριβής, ο γράφων συμμετείχε στο σχεδιασμό και την ανάπτυξη ενός παράλληλου αλγορίθμου για την υλοποίηση της μεθόδου DHC-RK με σκοπό την ταχύτερη επίλυση της σε ετερογενείς αρχιτεκτονικές με χρήση επιταχυντών (CPU-GPU). Στη συνέχεια παρουσιάζεται συνοπτικά το πρόβλημα, ο παράλληλος αλγόριθμος καθώς και τα αποτελέσματα της υλοποίησης, τα οποία και παρουσιάστηκαν στο World Congress of Engineering, Λονδίνο 2015, στα πλαίσια του συνεδρίου International

Conference on Parallel and Distributed Computing [105]. Το σύνολο της ερευνητικής εργασίας, με την ανάπτυξη της μεθόδου και την υλοποίηση της σε συστήματα παράλληλων υπολογισμών, παρουσιάστηκε στο Διεθνές Συνέδριο Αριθμητικής Ανάλυσης NumAn, 2014.

Α'.2 Αριθμητική Μέθοδος

Το πρόβλημα διάχυσης καρκινικών όγκων εμπίπτει στην κατηγορία προβλημάτων πολυ-λαπλών χωρίων λόγω της ετερογενούς φύσης φαιάς και λευκής ουσίας στον εγκέφαλο. Για την μοντελοποίηση του, η Swanson εισήγαγε έναν ασυνεχή συντελεστή διάχυσης ενσωματώνοντας αυτή την ετερογένεια του εγκεφαλικού ιστού ([68], [69]). Η βασική μορφή αυτής της μοντελοποίησης μπορεί να παρασταθεί με τη βοήθεια της εξίσωσης διάχυσης (1.6) σε γραμμική μορφή

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot (\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) \nabla \bar{c}) + \rho \bar{c} \quad , \quad (\text{A'.1})$$

όπου $\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})$ η πυκνότητα του εγκεφαλικού όγκου, ρ ο ρυθμός διάδοσης και $\bar{D}(\bar{\mathbf{x}})$ ο συντελεστής διάχυσης που αναπαριστά την κινητικότητα των κακοηθών κυττάρων και ικανοποιεί τη συνθήκη

$$\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) = \begin{cases} D_g & , \quad \bar{\mathbf{x}} \text{ στη φαιά ουσία} \\ D_w & , \quad \bar{\mathbf{x}} \text{ στη λευκή ουσία} \end{cases} \quad , \quad (\text{A'.2})$$

όπου τα D_g και D_w να είναι βαθμωτά μεγέθη και $D_w > D_g$. Με χρήση των αδιάστατων μεταβλητών

$$\mathbf{x} = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{\mathbf{x}} \quad , \quad t = \rho \bar{t} \quad , \quad f(\mathbf{x}) = \bar{f} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{\mathbf{x}} \right) ,$$

$$\text{και } c(\mathbf{x}, t) = \bar{c} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{\mathbf{x}}, \rho \bar{t} \right) \frac{D_w}{\rho N_0}$$

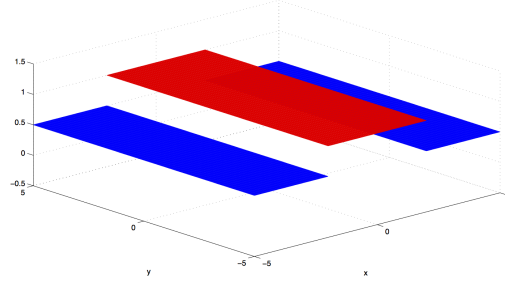
με $N_0 = \int \bar{f}(\bar{\mathbf{x}}) d\bar{\mathbf{x}}$ το αρχικό πλήθος των καρκινικών κυττάρων στον εγκέφαλο τη χρονική στιγμή $\bar{t} = 0$, καθώς επίσης και του μετασχηματισμού

$$c(\mathbf{x}, t) = e^t u(\mathbf{x}, t) \quad ,$$

το μοντέλο στις $2 + 1$ διαστάσεις μπορεί να περιγραφεί ως εξής

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x + (Du_y)_y & , \quad (x, y, t) \in [a, b]^2 \times \mathbb{R}^+ \\ \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0, \quad u(x, y, 0) = f(x, y), \quad D = \begin{cases} \gamma, x \notin [w_1, w_2] \\ 1, x \in [w_1, w_2] \end{cases} \end{cases} \quad (\text{A'.3})$$

όπου ο συντελεστής διάχυσης D είναι τμηματικά σταθερός και συνεχής ενώ μεταξύ των γραμμών διεπαφής $x = w_1$, $x = w_2$ είναι ασυνεχής, όπως παρουσιάζει το σχήμα Α'.1. Ο ασυνεχής συντελεστής D οδηγεί στην ασυνέχεια του παράγοντα u_x κατά μήκος των διεπαφών. Αξίζει να σημειωθεί ότι ο όρος u_x είναι ασυνεχής με τέτοιο τρόπο ώστε ο όρος Du_x να είναι παντού συνεχής, όπως περιγράφουν οι εξισώσεις που ακολουθούν.

Σχήμα Α'1: Ασυνεχής συντελεστής D

Η παραβολική μορφή του προβλήματος αρχικών τιμών προδίδει ότι η u είναι συνεχής συνάρτηση κατά μήκος της γραμμής διεπαφής δηλαδή

$$[u] = \lim_{x \rightarrow w_k^+} u(x, y_0) - \lim_{x \rightarrow w_k^-} u(x, y_0) = 0$$

και

$$[Du_x] = \lim_{x \rightarrow w_k^+} Du_x(x, y_0) - \lim_{x \rightarrow w_k^-} Du_x(x, y_0) = 0$$

όπου $k = 1, 2$ -για τις 2 γραμμές διεπαφής- και $y = y_0$ ένα σταθερό σημείο του $[\alpha, b]$. Κατά συνέπεια, το μοντέλο Α'3 μπορεί να γραφτεί ως

$$\begin{cases} u_t = Du_{xx} + Du_{yy} & , (x, y) \in \mathbb{R}_l, l = 1, 2, 3 \\ \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0, u(x, y, 0) = f(x, y) \\ [u] = 0, [Du_x] = 0 & \text{για } x = w_{1,2} \end{cases} \quad (\text{Α'4})$$

όπου $R_1 := [\alpha, w_1) \times [\alpha, b]$, $R_2 := [w_1, w_2) \times [\alpha, b]$ και $R_3 := [w_2, b) \times [\alpha, b]$. Ακολουθώντας το συμβολισμό που εισήχθη στην [;] για την DHC σε συνδυασμό με υψηλής τάξης Runge Kutta σχημάτων, η προσεγγιστική λύση $U(x, y, t)$ δίδεται από τη σχέση

$$U(x, y, t) = \sum_{i=1}^{2N_y+2} \sum_{j=1}^{2N_x+2} [\alpha_{i,j}(t) \phi_i(x) \phi_j(y)] \quad (\text{Α'5})$$

με $N_y = N_x = N_1 + N_2 + N_3$ το πλήθος των υποδιαστημάτων του \mathbb{R}_l και ϕ τις κυβικές συναρτήσεις βάσης Hermite. Για τον καθορισμό των αγνώστων συντελεστών $\alpha_{i,j}$ της Α'5 η εφαρμογή της DHC ([111], [;]) καταλήγει σε σύστημα με συνήθεις διαφορικές εξισώσεις

$$(C_x^0 \otimes C_y^0) \dot{a} = (D_x C_x^2 \otimes D_x C_y^0) a + (D_x C_x^0 \otimes D_x C_y^2) a \quad (\text{Α'6})$$

όπου \otimes ο τανυστής Kronecker, C_x^* και C_y^* οι πίνακες της ασυνεχούς 1D Collocation ([111]) και D_x διαγώνιος πίνακας με $D_x = \text{diag}(\gamma, \dots, \gamma, 1, \dots, 1, \gamma, \dots, \gamma)$. Συνεπώς, με την αντικατάσταση $A_0 := C_x^0 \otimes C_y^0$ και $B := D_x C_x^2 \otimes D_x C_y^0 + D_x C_x^0 \otimes D_x C_y^2$ η εξίσωση Α'6 γράφεται

$$A_0 \dot{a} = Ba \iff \dot{a} = C(t, a) \quad (\text{Α'7})$$

όπου $C(t, a) = A_0^{-1} Ba$. Με την εισαγωγή ενός τρίτης τάξης σχήματος χρονικής διακριτοποίησης Diagonally Implicit Runge-Kutta με χρήση δύο ενδιάμεσων βημάτων [111], [70] προκύπτει το σύστημα των γραμμικών εξισώσεων

$$\begin{aligned} \alpha^{(n,1)} &= \alpha^{(n)} + \tau \lambda C(t_{n,1}, \alpha^{(n,1)}) \\ \alpha^{(n,2)} &= \alpha^{(n)} + \tau [(1 - 2\lambda)C(t_{n,1}, \alpha^{(n,1)}) + \lambda C(t_{n,2}, \alpha^{(n,2)})] \\ \alpha^{(n+1)} &= \alpha^{(n)} + \frac{\tau}{2} [C(t_{n,1}, \alpha^{(n,1)}) + C(t_{n,2}, \alpha^{(n,2)})] \end{aligned} \quad (\text{Α'8})$$

ή ισοδύναμα,

$$\begin{aligned} A \alpha^{(n,1)} &= A_0 \alpha^{(n)} \\ A \alpha^{(n,2)} &= A_0 \alpha^{(n)} + \tau(1 - 2\lambda)B \alpha^{(n,1)} \quad . \\ A_0 \alpha^{(n+1)} &= A_0 \alpha^{(n)} + \frac{\tau}{2} [B \alpha^{(n,1)} + B \alpha^{(n,2)}] \end{aligned} \quad (A'.9)$$

όπου ο πίνακας $A := A_0 - \tau\lambda B$, τ το χρονικό βήμα και $\lambda = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}$.

Για την επίλυση αυτού του συστήματος γραμμικών εξισώσεων, προτάθηκε ο εξής αλγόριθμος στην [105]

:

```
Procedure systemSolve()
matvecCreate( $A, A_b, A_0, B, \alpha_{old}$ )
for  $t$  to  $t_{max}$  do with step  $dt$ 
     $\alpha_{new} \leftarrow A_0 \alpha_{old}$ 
    if  $t \leq 2dt$  then
        |  $\alpha_{new} \leftarrow \text{Solve}(A_b, \alpha_0)$ 
    else
        |  $\alpha_1 \leftarrow \text{Solve}(A_0, \alpha_0)$ 
        |  $\alpha_0 \leftarrow \alpha_0 - dt \frac{\sqrt{3}}{3} B \alpha_1$ 
        |  $\alpha_2 \leftarrow \text{Solve}(A, \alpha_0)$ 
        |  $\alpha_2 \leftarrow \alpha_0 + \frac{dt}{2} B(\alpha_1 + \alpha_2)$ 
        |  $\alpha_{new} \leftarrow \text{Solve}(A_0, \alpha_2)$ 
    end
     $\alpha_{new} = \alpha_{old}$ 
end
return  $\alpha_{new}$ 
```

Algorithm 29: Αλγόριθμος επίλυσης συστήματος Α'.9

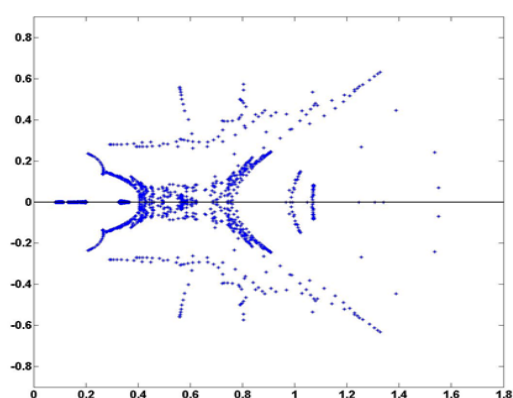
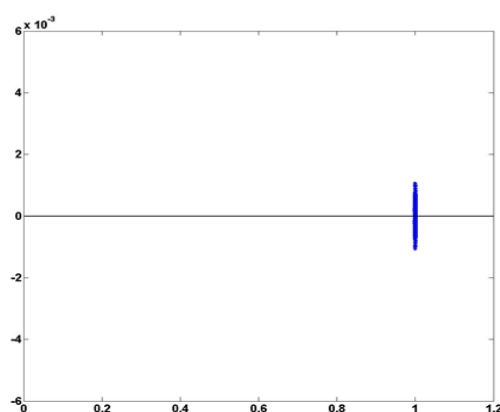
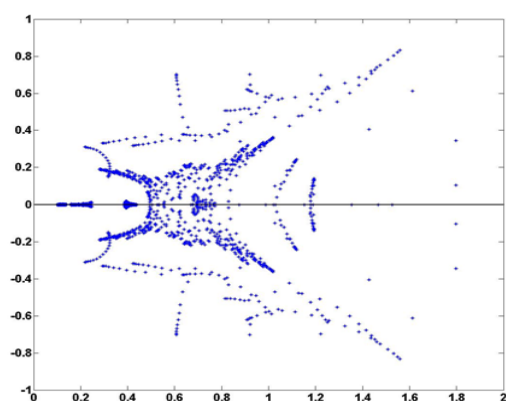
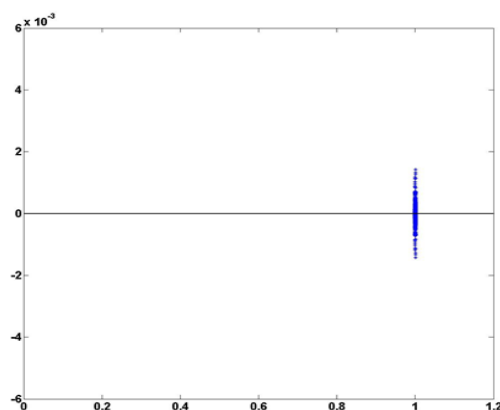
Όπως διαπιστώνεται, τα δύο πρώτα βήματα του αλγορίθμου εμπλέκουν τον πίνακα A_b , όπου $A_b := A_0 - \tau B$. Η επιλογή συνδέεται με την εφαρμογή της μεθόδου Backward Euler η οποία ενδείκνυται να χρησιμοποιείται για ένα πλήθος αρχικών βημάτων στην περίπτωση εμφάνισης ταλαντώσεων κατά την επίλυση. Στη συνέχεια, για κάθε επόμενο βήμα, εμπλέκονται οι πίνακες A, A_0 και B , οι οποίοι προκύπτουν από την εφαρμογή του σχήματος χρονικής διακριτοποίησης DIRK. Δεδομένου του μεγάλου μεγέθους και της αραιής δομής όλων των εμπλεκόμενων πινάκων στα γραμμικά συστήματα του αλγορίθμου, είναι προτιμότεα μια επαναληπτική μέθοδος επίλυσης αντί άμεσης επίλυσης για λόγους σχετικούς με τον υπολογιστικό φόρτο και κατ' επέκτασιν το χρονικό κόστος.

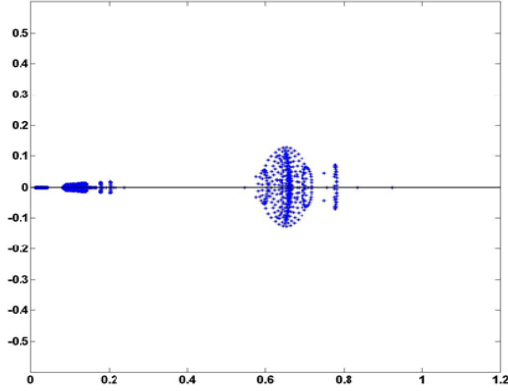
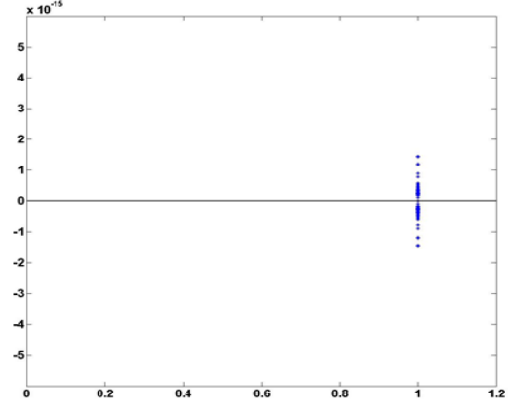
Στην επιλογή της επαναληπτικής μεθόδου ελήφθησαν υπόψιν παράγοντες όπως

- οι απαιτήσεις διάσπασης των πινάκων στη μορφή $A = D - L - U$ των κλασσικών μεθόδων Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, προσέγγιση που απορρίφθηκε λόγω των ιδιοτήτων και της φύσης των πινάκων του σχήματος και
- η πρόθεση για εκτέλεση υπολογισμών σε παράλληλες διαδικασίες, τεχνική που προκρίνει τη χρήση επαναληπτικών μεθόδων υποχώρων Krylov, όπου το σύνολο των υπολογισμών αφορά πολλαπλασιασμούς πινάκων (ή ορθότερα στοιχείων πινάκων) με διανύσματα

Α'.2.1 Εφαρμογή προρύθμισης

Ο υπολογισμός και η αναπαράσταση των ιδιοτιμών των πινάκων A , A_0 και A_b στο μιγαδικό επίπεδο (σχήματα Α'.2α', Α'.3α', Α'.4α'), για την αρχική δομή των πινάκων σε συγκεκριμένη διάσταση προβλήματος, οδήγησε στο συμπέρασμα ότι η εφαρμογή κατάλληλης τεχνικής προρύθμισης σε κάθε πίνακα θα είχε θετικό αντίκτυπο στη σύγκλιση μιας επαναληπτικής μεθόδου υποχώρων Krylov. Οι πίνακες είναι ανεξάρτητοι του χρονικού βήματος, οπότε και η κατασκευή του πίνακα προρύθμισης πραγματοποιείται μια φορά πριν την έναρξη της διαδικασίας, και παράλληλα μεγάλης διάστασης και αραιοί οπότε θεωρήθηκε ότι η ατελής LU παραγοντοποίηση των πινάκων είναι κατάλληλη επιλογή για την προρύθμιση τους.

(α') Ιδιοτιμές του πίνακα A (β') Ιδιοτιμές του πίνακα M_A Σχήμα Α'.2: Ιδιοτιμές του πίνακα A πριν (αριστερά) και μετά την προρύθμιση (δεξιά)(α') Ιδιοτιμές του πίνακα A_b (β') Ιδιοτιμές του πίνακα M_{A_b} Σχήμα Α'.3: Ιδιοτιμές του πίνακα A_b πριν (αριστερά) και μετά την προρύθμιση (δεξιά)

(α') Ιδιοτιμές του πίνακα A_0 (β') Ιδιοτιμές του πίνακα M_{A_0}

Ο υπολογισμός των ιδιοτιμών των πινάκων $M_{A_b} := iLU(A_b)$, $M_{A_0} := iLU(A_0)$ και $M_A := iLU(A)$ (σχήματα Α'.2β', Α'.3β', Α'.4β') επιβεβαιώνει την επιλογή της τεχνικής προρύθμισης καθώς οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές και για τη φασματική ακτίνα κάθε προρρυθμισμένου πίνακα ισχύει $0 < \rho(\cdot) < 1$.

Α'.3 Παράλληλος Αλγόριθμος

Ο αλγόριθμος 29 απαιτεί την επίλυση τριών γραμμικών συστημάτων σε κάθε χρονικό βήμα, σε κάθε ένα από τα οποία οι πίνακες συντελεστών παραμένουν αμετάβλητοι. Η επίλυση τους πραγματοποιείται με την επαναληπτική μέθοδο BiCGSTAB, η οποία περιγράφηκε αναλυτικά στην ενότητα 1.4.2, και στην οποία κυρίαρχο ρόλο έχουν οι βασικές πράξεις γραμμικής άλγεβρας.

Η δημιουργία των πινάκων A_b , A_0 , A και B , του διανύσματος a_{old} καθώς και η iLU παραγοντοποίηση των πινάκων πραγματοποιείται στον επεξεργαστή πριν την έναρξη της επαναληπτικής διαδικασίας και κατόπιν τα δεδομένα αντιγράφονται στη μνήμη της κάρτας πριν την έναρξη των χρονικών βημάτων. Από εκεί και έπειτα, το σύνολο σχεδόν των πράξεων κινητής υποδιαστολής πραγματοποιείται στην κάρτα γραφικών. Το χρονικό κόστος αντιγραφής (επικοινωνίας) εξαρτάται από το μήκος των διανυσμάτων που εμπλέκονται στην εμπρός και πίσω αντικατάσταση στη διαδικασία της προρρύθμισης με τους πίνακες M_{A_b} , M_{A_0} και M_A .

Ακολουθεί ο κύριος αλγόριθμος με ξεχωριστή περιγραφή στην εσωτερική διαδικασία επίλυσης με την επαναληπτική μέθοδο BiCGSTAB στην GPU.

```

Procedure systemSolveParallel()
matvecCreateinCPU( $A, A_b, A_0, B, \alpha_{old}$ )
iLUcomputeinCPU( $A_b, A_0, A$ )
copytoGPU( $A_b, A_0, A, B, \alpha_{old}$ )
for  $t$  to  $t_{max}$  do with step  $dt$ 
     $\alpha_0 \leftarrow A_0 \alpha_{old}$ 
    if  $t \leq 2dt$  then
        |  $\alpha_{new} \leftarrow \text{GPU-BiCGSTAB-Solve}(A_b, \alpha_0)$ 
    else
        |  $\alpha_1 \leftarrow \text{GPU-BiCGSTAB-Solve}(A_0, \alpha_0)$ 
        |  $\alpha_0 \leftarrow \alpha_0 - dt \frac{\sqrt{3}}{3} B \alpha_1$  (GPU-compute)
        |  $\alpha_2 \leftarrow \text{GPU-BiCGSTAB-Solve}(A, \alpha_0)$ 
        |  $\alpha_2 \leftarrow \alpha_0 + \frac{dt}{2} B (\alpha_1 + \alpha_2)$  (GPU-compute)
        |  $\alpha_{new} \leftarrow \text{GPU-BiCGSTAB-Solve}(A_0, \alpha_2)$ 
    end
     $\alpha_{new} = \alpha_{old}$  (GPU-compute)
end
copytoCPU( $\alpha_{new}$ )
return  $\alpha_{new}$ 

```

Algorithm 29: Παράλληλος αλγόριθμος επίλυσης συστήματος Α'.9

Η παράλληλη διαδικασία που υλοποιεί την επαναληπτική μέθοδο GPU-BiCGSTAB στον παραπάνω αλγόριθμο περιγράφεται στη συνέχεια. Οι πίνακες L και U που συμμετέχουν είναι αυτοί που προκύπτουν από την ατελή παραγοντοποίηση του αρχικού πίνακα συντελεστών:

Procedure GPU-BiCGSTAB(A,b)assign initial value to $x^{(0)}$ $r^{(0)} \leftarrow b - Ax^{(0)}$ assign initial value to \hat{r} (usually $\hat{r} \leftarrow r^{(0)}$)**for** $i = 1$ **to** \dots **do** $\rho_{i-1} \leftarrow \hat{r}^T r^{i-1}$ (**GPU-compute**) **if** $\rho_{i-1} = 0$ **then**

| method fails

end **if** $i = 1$ **then** | $p^{(1)} \leftarrow r^{(0)}$ (**GPU-compute**) **else** | $\beta_{i-1} \leftarrow \frac{\rho_{i-1} \alpha_{i-1}}{\rho_{i-2} \omega_{i-1}}$ | $p^{(i)} \leftarrow r^{(i-1)} + \beta_{i-1}(p^{(i-1)} - \omega_{i-1}v^{(i-1)})$ (**GPU-compute**) **end** copyGPUtoCPU($p^{(i)}$) $y \leftarrow \text{solveCPU}(L, p^{(i)})$ $\hat{p} \leftarrow \text{solveCPU}(U, y)$ copyCPUtoGPU(\hat{p}) $v^{(i)} \leftarrow A\hat{p}$ (**GPU-compute**) $\alpha_i \leftarrow \frac{\rho_{i-1}}{\hat{r}^T v^{(i)}}$ (**GPU-compute**) $s \leftarrow \rho^{(i-1)} - \alpha_i v^{(i)}$ (**GPU-compute**) **if** $\|s\|$ *small enough* **then** | $x^{(i)} \leftarrow x^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p}$ **exit** **end** copyGPUtoCPU(s) $y \leftarrow \text{solveCPU}(L, s)$ $z \leftarrow \text{solveCPU}(U, y)$ copyCPUtoGPU(z) $t \leftarrow Az$ (**GPU-compute**) $\omega_i \leftarrow \frac{s^T t}{t^T t}$ (**GPU-compute**) $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i \hat{p} + \omega_i z$ (**GPU-compute**)

Conversion check

if $\omega_i = 0$ **then**

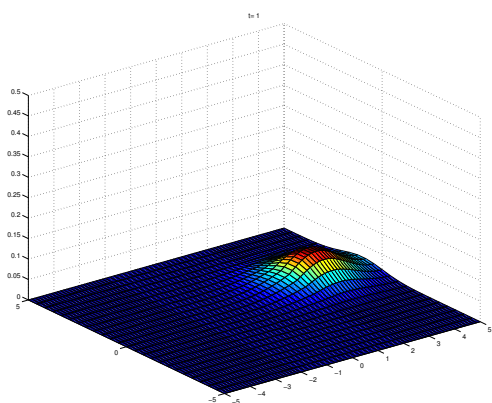
| method ends

end $r^{(i)} \leftarrow s - \omega_i t$ (**GPU-compute**)**end****return** x **Algorithm 30:** Αλγόριθμος υλοποίησης της μεθόδου BiCGSTAB στη GPU

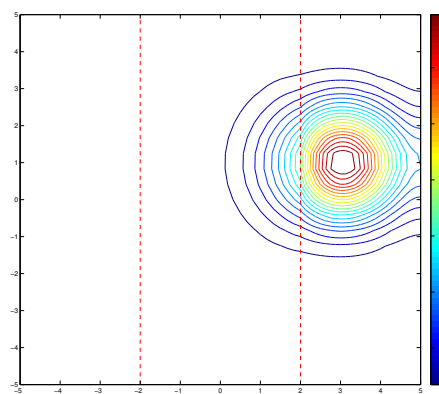
Α'4 Αριθμητικά Αποτελέσματα

Η υλοποίηση του παραπάνω παράλληλου αλγορίθμου πραγματοποιήθηκε σε μηχανήμα αρχιτεκτονικής κοινής μνήμης με 2 επεξεργαστές τύπου Intel Xeon X5600@2.8 GHz της σειράς Nehalem. Η συνολική μνήμη του μηχανήματος είναι 24 GB ενώ κατά το χρόνο της υλοποίησης έφερε λειτουργικό σύστημα Oracle Linux v6.2. Παράλληλα, διαθέτει μια κάρτα γραφικών τύπου NVIDIA Tesla M2070, αρχιτεκτονικής Fermi, με 448 πυρήνες ομαδοποιημένους σε 14 πολυεπεξεργαστές καθώς και 6 GB μνήμης. Στην ανάπτυξη του λογισμικού που υλοποιεί τον αλγόριθμο χρησιμοποιήθηκαν υποπρογράμματα από τις βιβλιοθήκες cuBLAS και cuSPARSE (σε διαδικασίες της GPU) και SPARSEKIT (σε διαδικασίες της CPU).

Στα γραφήματα Α'5, Α'6, Α'7, Α'8 που ακολουθούν παρουσιάζονται οι τρισδιάστατες αποτυπώσεις (Α'5α', Α'6α', Α'7α', Α'8α') καθώς και τα διαγράμματα ισοϋψών (Α'5β', Α'6β', Α'7β', Α'8β') της εξέλιξης του εγκεφαλικού όγκου για τις χρονικές στιγμές $t_i, i = 1, 2, 3, 4$. Οι ευθείες που διαχωρίζουν τα χωρία με την ετερογενή ουσία είναι ευδιάκριτες και επιβεβαιώνουν την αποδοτικότητα του αριθμητικού σχήματος.

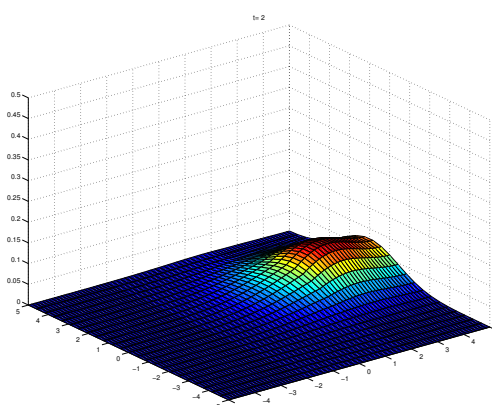


(α')

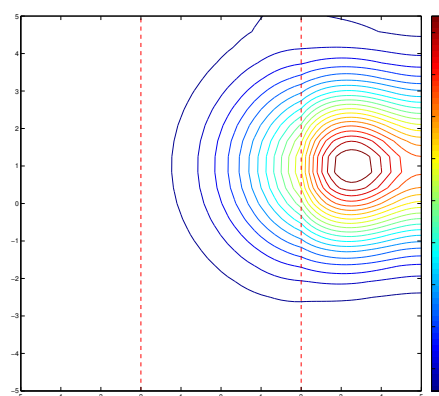


(β')

Σχήμα Α'5: Τρισδιάστατο γράφημα (α') και διάγραμμα ισοϋψών (β') της προσέγγισης της λύσης για $t = 1$

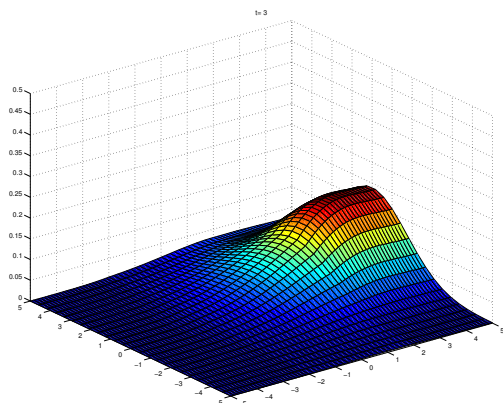


(α')

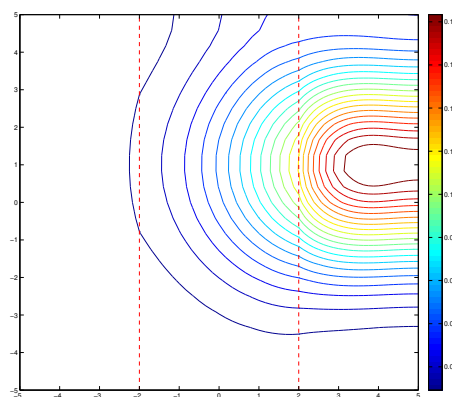


(β')

Σχήμα Α'6: Τρισδιάστατο γράφημα (α') και διάγραμμα ισοϋψών (β') της προσέγγισης της λύσης για $t = 2$

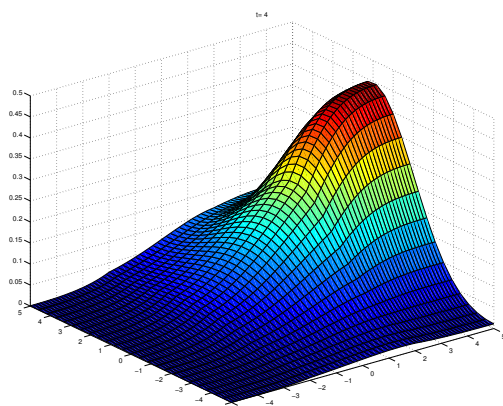


(α')

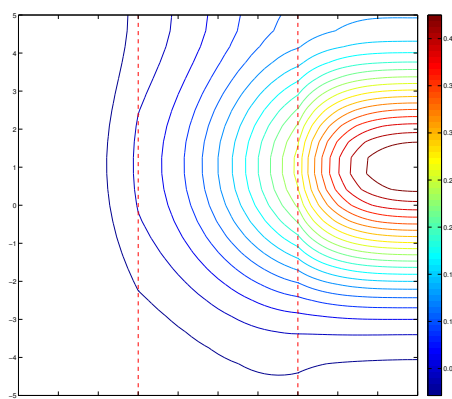


(β')

Σχήμα Α'.7: Τρισδιάστατο γράφημα (α') και διάγραμμα ισοϋψών (β') της προσέγγισης της λύσης για $t = 3$



(α')



(β')

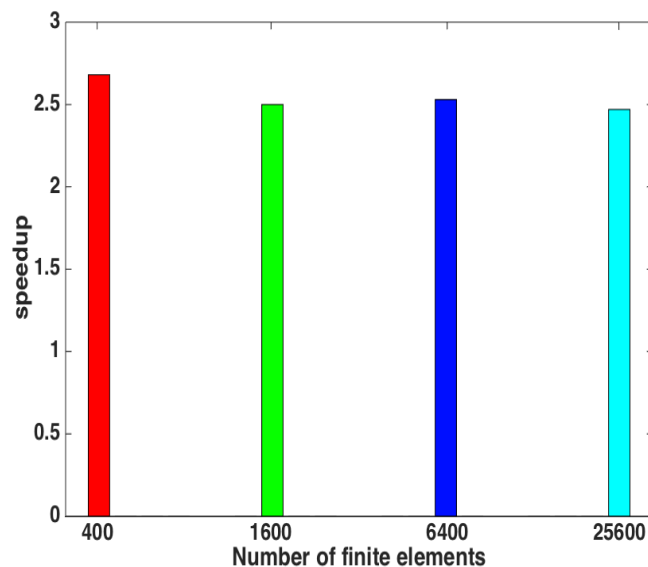
Σχήμα Α'.8: Τρισδιάστατο γράφημα (α') και διάγραμμα ισοϋψών (β') της προσέγγισης της λύσης για $t = 4$

Για τον έλεγχο της χρονικής επίδοσης του παράλληλου αλγορίθμου, αναπτύχθηκε εφαρμογή στην πλατφόρμα της Matlab, έκδοση R2014b που υλοποιεί τον αντίστοιχο αλγόριθμο αποκλειστικά στη CPU. Οι πίνακες που ακολουθούν παρουσιάζουν τους χρόνους εκτέλεσης οι οποίοι προέκυψαν για την CPU-only και την CPU-GPU εφαρμογή για διαφορετικές περιπτώσεις διακριτοποίησης.

Πλήθος στοιχείων	Άγνωστοι	DoF	Χρόνος CPU-Matlab	Χρόνος CPU-GPU
400	1600	6400	0.83	0.31
1600	6400	25600	2.35	0.94
6400	25600	102400	11.5	4.55
25600	102400	409600	202	81.8

Πίνακας: Χρόνοι εκτέλεσης των εφαρμογών σε Matlab CPU-multithreaded και Matlab-CUDA Fortran CPU-GPU

Επιπλέον, στο σχήμα Α'.9 παρουσιάζεται η επιτάχυνση (speedup) που προέκυψε λαμβάνο-



Σχήμα Α'.9: Μέτρηση speedup για υλοποιήσεις CPU Matlab και CPU-GPU Matlab-CUDA Fortran

ντας υπόψιν τους χρόνους των υλοποιήσεων CPU Matlab και CPU-GPU Matlab-CUDA Fortran, επιβεβαιώνοντας την αποδοτικότητα του αλγορίθμου. Η επιτάχυνση πλησιάζει και, κατά περίπτωση, ξεπερνάει το $2.5x$ ανάλογα το μέγεθος του προβλήματος. Η εξήγηση για τη μη κλιμάκωση της επιτάχυνσης, που θεωρητικά θα μπορούσε να παρατηρηθεί συγκρίνοντας χρονικά αποτελέσματα υλοποιήσεων με διαφορετική πυκνότητα πλέγματος, αναζητήθηκε αρχικά στο κόστος συγχρονισμού-επικοινωνίας. Ο έλεγχος μέσω κατάλληλου λογισμικού καταγραφής δραστηριότητας της GPU για τη μεγαλύτερη διάσταση του προβλήματος κατέδειξε περιορισμένο κόστος επικοινωνίας σε σχέση με το συνολικό χρόνο εκτέλεσης (1 sec στην περίπτωση 25600 πεπερασμένων στοιχείων). Στη συνέχεια, επιβεβαιώθηκε ότι το $\approx 75\%$ του χρόνου εκτέλεσης αναλώθηκε σε πολλαπλασιασμό στοιχείων πίνακα με διάνυσμα και $\approx 11\%$ πολλαπλασιασμού αριθμού με διάνυσμα και πρόσθεση σε νέο διάνυσμα, με συμπέρασμα ότι έστω και σε αραιή μορφή, η επιλογή αποθήκευσης των στοιχείων του πίνακα περιορίζει την πλήρη εκμετάλλευση των δυνατοτήτων της παράλληλης υποδομής.

Παράρτημα Β'

Πρόβλημα Περιβαλλοντικής Μηχανικής

Β'.1 Εισαγωγή - Υφαλμύριση Υδροφορέων Λόγω Υπεράντλησης

Το πρόβλημα της διείσδυσης υφάλμυρου ύδατος στο εσωτερικό ενός υδροφορέα συνιστά σημαντική απειλή για την ποιότητα των υπόγειων αποθεμάτων γλυκών υδάτων σε παράκτιες περιοχές. Το φαινόμενο οφείλεται κατά κανόνα στην υπεράντληση που διαταράσσει την φυσική ισορροπία στους υπόγειους υδροφορείς. Η ανεξέλεγκτη εξέλιξη του οδηγεί στη μείωση των αποθεμάτων γλυκού ύδατος των υδροφορέων, αποτελώντας σοβαρή απειλή για την ποιότητα των υπόγειων υδάτινων συστημάτων, ειδικά στις παραθαλάσσιες ή νησιωτικές περιοχές. Το φαινόμενο οξύνεται μάλιστα κατά τη διάρκεια του καλοκαιριού, κυρίως σε περιοχές αυξημένου τουριστικού ενδιαφέροντος με την ύπαρξη αντίστοιχων υποδομών, με ιδιαίτερα αρνητικές συνέπειες. Για την προστασία των αποθεματικών των παράκτιων υδροφορέων μέσω του σχεδιασμού μιας στρατηγικής αειφόρου διαχείρισης των υδάτων σε αυτούς, εξελίσσεται διαρκώς η ερευνητική προσπάθεια, συνδυάζοντας μαθηματικά μοντέλα με αριθμητικές προσομοιώσεις και αλγόριθμους βελτιστοποίησης. Μικρό μέρος της έρευνας στα πλαίσια της παρούσας διδακτορικής διατριβής αφιερώθηκε στην ανάπτυξη του κώδικα επίλυσης του προβλήματος της υφαλμύρισης στην πλατφόρμα FENICS στα πλαίσια της επικύρωσης αποτελεσμάτων μεθόδου επίλυσης που αναπτύχθηκε για το σκοπό αυτό από τους Καθ. Ι. Σαριδάκη και Δρ. Στρατή με χρήση της τεχνικής Collocation και συνδυαστική εφαρμογή του αλγορίθμου βελτιστοποίησης ALOPEX, σε μια προσπάθεια για την ανάπτυξη ενός ολοκληρωμένου πακέτου λογισμικού που θα παρέχει συγκεκριμένες προτάσεις διαχείρισης για την επίλυση του προαναφερθέντος προβλήματος στους υδροφορείς του Βαθέως Καλύμνου και της Χερσονήσου Ηρακλείου Κρήτης. Τα αποτελέσματα και λεπτομέρειες επί της ανάπτυξης μεθόδων και λογισμικού δημοσιεύτηκαν και παρουσιάστηκαν στα πλαίσια του ερευνητικού προγράμματος Θαλής-MATENVMED και είναι διαθέσιμα στην [122].

Β'.2 Περιγραφή Προβλήματος

Η μελέτη του φαινομένου της διείσδυσης θαλασσινού νερού στους υδροφορείς γίνεται συνήθως με την παραδοχή της ύπαρξης διεπιφάνειας, η οποία διαχωρίζει το γλυκό από το υφάλμυρο νερό ([104], [116], [117]). Έτσι, το πρόβλημα κατατάσσεται στα προβλήματα πολλαπλών χωρίων και παράλληλα το φαινόμενο προσεγγίζεται από το μοντέλο της αλμυρής

σφήνας, το οποίο από κοινού με τη σχέση Ghyben-Herzberg ([101])

$$\xi = \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} \approx 40h_f \quad (\text{B'.1})$$

όπου ξ την απόσταση της υφάλμυρης σφήνας από την επιφάνεια της θάλασσας, h_f την πιεζομετρική κεφαλή του γλυκού ύδατος από το πυθμένα του υδροφορέα, ρ_f την πυκνότητα του γλυκού ύδατος και ρ_s την πυκνότητα του αλμυρού, προσομοιάζουν συνθήκες ροής οι οποίες τείνουν σε σταθερή κατάσταση (steady state). Με αυτό τον τρόπο μπορούν να εκφραστούν οι εξισώσεις σταθερής ροής με μία εξίσωση δυναμικού ροής στις περιοχές ενδιαφέροντος, η λύση της οποίας οδηγεί στον εντοπισμό του μετώπου της διεπιφάνειας. Εισάγοντας παράλληλα μεθόδους βελτιστοποίησης, επιτυγχάνεται ο έλεγχος της άντλησης γλυκού ύδατος. Η εξίσωση δυναμικού ροής είναι εξίσωση διάχυσης, συγκεκριμένα,

$$\nabla \cdot (K \nabla \phi) + N - Q = 0 \quad (\text{B'.2})$$

με ϕ το δυναμικό ροής, K την υδραυλική αγωγιμότητα, N την επιφανειακή ανατροφοδότηση του υδροφορέα μέσω βροχόπτωσης και Q ο συνολικός ρυθμός άντλησης από το σύνολο των γεωτρήσεων στην περιοχή ενδιαφέροντος. Για την επίλυση της με τη μέθοδο Hermite Collocation, σύμφωνα με τις εργασίες των Ι.Σαριδάκη, Π.Στρατή ([109], [114]) αναζητούνται προσεγγίσεις $u(x, y)$ $\phi(x, y)$ σε ομοιόμορφα διαμερισμένο χωρίο -με βήμα διακριτοποίησης h - διαστάσεων $N_x \times N_y$ όπου

$$u(x, y) = \sum_{i=1}^{2N_x+2} \sum_{j=1}^{2N_y+2} \alpha_{i,j} \Phi_{i,j}(x, y) \quad (\text{B'.3})$$

με $\Phi_{i,j}(x, y) = \Phi_i(x) + \Phi_j(y)$ τα πολυώνυμα Hermite σε κόμβο (x_i, y_j) . Για τον υπολογισμό των $\alpha_{i,j}$ (με $\alpha_{i,j} \equiv \alpha_{i,j}(t)$) με $i = 1, \dots, N_x + 1, j = 1, \dots, N_y + 1$ η μέθοδος Collocation παράγει ένα σύστημα με συνήθεις διαφορικές εξισώσεις στα σημεία Gauss που προκύπτουν σε κάθε στοιχείο $I_{i,j} = [x_i, x_{i+1}] \times [y_i, y_{i+1}]$ ως ρίζες του πολυωνύμου Legendre και είναι

$$\begin{aligned} \sigma_{2i-1}^x &= \frac{x_i + x_{i+1}}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}}, \sigma_{2i}^x = \frac{x_i + x_{i+1}}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}}, \\ \sigma_{2i-1}^y &= \frac{y_i + y_{i+1}}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}}, \sigma_{2i}^y = \frac{y_i + y_{i+1}}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}}, \end{aligned}$$

Η αντικατάσταση της B'.3 στην B'.2 για βαθμωτό K

$$K \sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{k,l} \frac{\partial^2 \Phi_{k,l}}{\partial x^2}(\sigma_K^x, \sigma_L^y) + K \sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{k,l} \frac{\partial^2 \Phi_{k,l}}{\partial y^2}(\sigma_{C_1}^x, \sigma_{C_2}^y) = (Q - N)(\sigma_K^x, \sigma_L^y) \quad (\text{B'.4})$$

όπου $C_1 = 2i - 1, 2i$ και $C_2 = 2j - 1, 2j$. Από [110] οι εξισώσεις μπορούν να γραφτούν με $C_i^{(0),(2)}, C_j^{(0),(2)}$ και $\alpha_{ij} = \alpha_i \otimes \alpha_j$ για $\alpha_i = [\alpha_{2i-1}(t) \alpha_{2i}(t) \alpha_{2i+1}(t) \alpha_{2i+2}(t)]^T$ και $\alpha_j = [\alpha_{2j-1}(t) \alpha_{2j}(t) \alpha_{2j+1}(t) \alpha_{2j+2}(t)]^T$. Με εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών:

$$\alpha_{1j}(t) = \alpha_{(2N_x+2)j}(t) = \alpha_{i2}(t) = \alpha_{i(2N_y+2)}(t) \quad (\text{B'.5})$$

το γραμμικό σύστημα από τη μέθοδο collocation είναι

$$K(C^{(2)} \otimes C^{(0)})\alpha + K(C^{(0)} \otimes C^{(2)})\alpha = \mathbf{f} \quad (\text{B'.6})$$

όπου $\mathbf{f} = [f(\sigma_1^x, \sigma^y), f(\sigma_2^x, \sigma^y), \dots, f(\sigma_{2N_x+2}^x, \sigma^y)]$ για $f(x, y) = (Q - N)(x, y)$ και $\sigma^y = [\sigma_1^y, \sigma_2^y, \dots, \sigma_{2N_y+2}^y]$.

Η αναλυτική λύση του δυναμικού ροής δίνεται από την

$$\Phi(x, y) = \frac{q}{K}x + \sum_{j=1}^M \frac{Q_j}{4\pi K} \log\left(\frac{(x - x_j)^2 + (y - y_j)^2}{(x + x_j)^2 + (y - y_j)^2}\right), [102] \quad (\text{B'.7})$$

όπου Q_j οι ρυθμοί άντλησης (m^3/day) κάθε ενεργής γεώτρησης j .

B'.3 Επίλυση με FEniCS

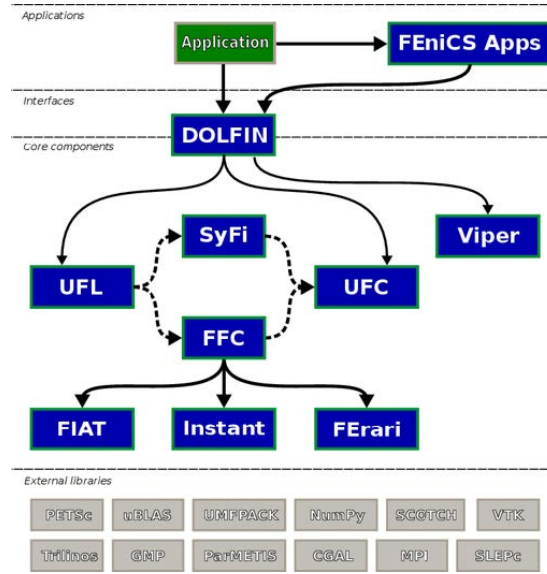
B'.3.1 Το λογισμικό FEniCS

Το FEniCS είναι μια ολοκληρωμένη πλατφόρμα ανοιχτού κώδικα για την επίλυση μερικών διαφορικών εξισώσεων. Παρέχει εξειδικευμένα εργαλεία και βιβλιοθήκες σε Python και C++ δίνοντας τη δυνατότητα στο χρήστη να μοντελοποιήσει ένα επιστημονικό πρόβλημα και να το επιλύσει με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Αποτελείται από ένα σύνολο στοιχείων λογισμικού, τα βασικότερα εκ των οποίων, στην τρέχουσα έκδοση του FEniCSx, είναι η βιβλιοθήκη DOLFINx, η γλώσσα ειδικού πεδίου UFL, ο μεταγλωττιστής Basix και το λογισμικό FFCx.

- Η DOLFINx είναι βιβλιοθήκη C++/Python και αποτελεί τη βασική διεπαφή του χρήστη, αποτελώντας παράλληλα το τμήμα του λογισμικού που ενσωματώνει όλα τα επιμέρους λειτουργικά στοιχεία του FEniCS και αναλαμβάνει την επικοινωνία με εξωτερικές βιβλιοθήκες. Επιπλέον, υλοποιεί δομές δεδομένων για την παραγωγή πλεγμάτων και τη συγκρότηση συστημάτων πεπερασμένων στοιχείων.
- Η γλώσσα ειδικού πεδίου UFL χρησιμοποιείται για την έκφραση διακριτοποιήσεων πεπερασμένων στοιχείων και την έκφραση μη γραμμικών μερικών διαφορικών εξισώσεων. Συγκεκριμένα, η γλώσσα ορίζει μια ευέλικτη διεπαφή για τη μοντελοποίηση χώρων πεπερασμένων στοιχείων και την έκφραση ασθενών διατυπώσεων (weak formulations) σε σημειογραφία που προσεγγίζει τη μαθηματική.
- Ο μεταγλωττιστής μορφής FFCx αναλαμβάνει τη μετατροπή των δομών από τη γλώσσα UFL σε χαμηλού επιπέδου συναρτήσεις C++
- το basix αποτελεί την Python βιβλιοθήκη για τη δημιουργία συναρτήσεων βάσης τροφοδοτούν τον FFCx

Για την επίλυση ενός προβλήματος συνοριακών τιμών με χρήση του λογισμικού FEniCS είναι απαραίτητη η εισαγωγή από το χρήστη της μερικής διαφορικής εξίσωσης σε μεταβολική διατύπωση και του πλέγματος στο οποίο αυτή θα επιλυθεί με τη μέθοδο ΠΣ. Η δημιουργία του πλέγματος μπορεί να πραγματοποιηθεί είτε με χρήση εσωτερική βιβλιοθήκης του FEniCS είτε με εισαγωγή πλέγματος από εξωτερική γεννήτρια πλεγμάτων. Στις υλοποιήσεις που πραγματοποιήθηκαν στα πλαίσια αυτής της διατριβής χρησιμοποιήθηκαν πλέγματα από τη γεννήτρια **gmsh**. Πρέπει επίσης να αναφερθεί ότι η ανάπτυξη του κώδικα για αυτές τις υλοποιήσεις πραγματοποιήθηκε στη διαθέσιμη για εκείνη την περίοδο έκδοση του FEniCS, στην οποία βασική βιβλιοθήκη-διεπαφή ήταν η FIAT (αντί της τρέχουσας basix) ενώ και τα υπόλοιπα στοιχεία λογισμικού ήταν διαθέσιμα σε προγενέστερες εκδόσεις.

Όπως αναφέρθηκε νωρίτερα, η υλοποίηση σε FEniCS προϋποθέτει αφενός την εισαγωγή του πλέγματος αφετέρου την διατύπωση του προβλήματος στην μεταβολική του μορφή, στην



Σχήμα B'.1: Η δομή του FEniCS

οποία ακολουθεί πολλαπλασιασμός με μια συνάρτηση δοκιμής v και κατόπιν ολοκλήρωση κατά μέλη. Τότε η διγραμμική και η γραμμική μορφή που προκύπτουν είναι

$$\alpha(u, v) = \int_D K \nabla u \nabla v dx \quad (B'.8)$$

$$L(v) = \int_D d \cdot v dx + \int_{\partial D} q \cdot v dx \quad (B'.9)$$

αντίστοιχα. Το FEniCS στη συνέχεια κατασκευάζει το γραμμικό σύστημα των εξισώσεων το οποίο και επιλύει. Στην περίπτωση που η επιλεγθείσα βιβλιοθήκη γραμμικής άλγεβρας είναι το PETSc, η προεπιλεγμένη επιλογή μεθόδου επίλυσης είναι μέσω ανάλυσης LU . Σε περίπτωση επίλυσης μεγάλου -σε διάσταση- προβλήματος προκύπτουν περιορισμοί σχετικοί με τη φύση της μεθόδου (μεγάλες απαιτήσεις σε μνήμη, αργή υλοποίηση) οπότε ενδείκνυται η αλλαγή του επιλυτή σε κάποιον από τους εναλλακτικά διαθέσιμους με εφαρμογή επαναληπτικής μεθόδου Krylov (BiCGSTAB, GMRES, MinRES, κα) και επιπλέον την προρύθμιση του πίνακα μέσα από μια λίστα διαθέσιμων επιλογών (iLU, aMG, iCholesky, κα). Για την επίλυση της B'.2 χρησιμοποιήθηκε η επαναληπτική μέθοδος BiCGSTAB χωρίς προρύθμιση του πίνακα συντελεστών.

B'.3.2 Υποθέσεις μοντέλου

Περιοχή ελέγχου

Η περιοχή ελέγχου είναι ένα ορθογώνιο τμήμα υδροφορέα, με ομοιογενή χαρακτηριστικά ως προς τις τιμές υδραυλικών παραμέτρων, με πλάτος $W = 3Km$ και μήκος $L = 7Km$ στο Βαθύ της Καλύμνου. Για τις φυσικές παραμέτρους θεωρούνται οι τιμές $K = 100m/day$, $d = 25m$, $N = 30mm/year$, $Q_A = 20000m^3/day$ και $(Q_i, \bar{Q}_i) = (200, 250)m^3/day$. Στην περιοχή ελέγχου είναι ενεργές 5 γεωτρήσεις στις θέσεις $x_i = (2640, 3340, 3920, 4620, 4860)$, $y_i = (1560, 2200, 960, 2460, 1580)$. Στα όρια της περιοχής ελέγχου από την πλευρά της ακτογραμμής εφαρμόζονται συνοριακές συνθήκες Dirichlet ενώ στα υπόλοιπα -άνω, κάτω και δεξιά- εφαρμόζονται συνθήκες Neumann.

Έλεγχος άντλησης

Στόχος της μελέτης είναι η μεγιστοποίηση των αντλήσεων από τον υδροφορέα, διατηρώντας ταυτόχρονα την υφάλμυρη σφήνα εκτός ακτίνας γεωτρήσεων. Στις [103], [114] εξηγείται αναλυτικά η οριοθέτηση ζωνών ελέγχου γύρω από κάθε γεώτρηση με τη χρήση ενός σημείου ελέγχου μπροστά από κάθε θέση γεώτρησης σε απόσταση $d_s = 400m$ από αυτήν. Για την αναζήτηση του μέγιστου ποσού άντλησης θεωρείται το μη γραμμικό πρόβλημα βελτιστοποίησης

$$\begin{aligned} P &\equiv P(Q) = e^{-[S(\bar{Q})-S(Q)]^2/S^2(\bar{Q})}, \in [0, 1] \\ S(Q) &= \sum_{i=1}^M Q_i \leq Q_A \\ 0 &\leq \underline{Q}_i \leq Q_i \leq \bar{Q}_i < Q_A \\ x_{T,i} &\leq x_i - d_s, i \in \{1, \dots, M\} \end{aligned} \quad (B'.10)$$

όπου P η αντικειμενική συνάρτηση, $Q_i, i = 1, \dots, M$ η άντληση από την i^{th} ενεργή γεώτρηση με συντεταγμένες (x_i, y_i) , $\bar{Q}_i, \underline{Q}_i$ η μέγιστη και η ελάχιστη αντίστοιχα δυνατότητα άντλησης της i^{th} γεώτρησης και Q_A η συνολική δυνατότητα ανατροφοδότησης του υδροφορέα. Τέλος, $x_{T,i}$ είναι η θέση ως προς την x -κατεύθυνση του μετώπου της υφάλμυρης σφήνας στην περιοχή της i^{th} γεώτρησης, M το πλήθος των ενεργών γεωτρήσεων και d_s η απόσταση ασφαλείας, που όπως αναφέρθηκε, ορίστηκε στα 400m.

Εφαρμογή αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης

Για την επίλυση της B'.10, προτείνεται στις [109], [114] η χρήση του αλγορίθμου στοχαστικής βελτιστοποίησης ALOPEX σε συνδυασμό ένα σύστημα κατάλληλων περιορισμών σχετικών με τις φυσικές διαστάσεις του προβλήματος. Συγκεκριμένα, προτείνεται μια εκδοχή στην οποία η στοχαστική διαδικασία μεταβάλλει τις παραμέτρους ελέγχου αντλήσεων $Q_i, i = 1, \dots, M$ με βάση τον διανυσματικό κανόνα

$$Q^{(k)} = Q^{(k-1)} + c_k \Delta Q^{(k-1)} \Delta P^{(k-1)} + g^{(k)} \quad (B'.11)$$

όπου

$$\Delta Q^{(k)} = Q^{(k)} - Q^{(k-1)} \Delta P^{(k)} = P(Q^{(k)}) - P(Q^{(k-1)}) \quad (B'.12)$$

με c_k και $g^{(k)}$ πραγματικούς αριθμούς που ελέγχουν στοχαστικές παραμέτρους - συγκεκριμένα πλάτος όρου μνήμης και όρου θορύβου αντίστοιχα, [114], [114].

Σε κάθε επαναληπτικό βήμα του αλγορίθμου Alopex, επιχειρείται η διόρθωση των μεταβλητών ελέγχου $Q_i, i = 1, \dots, M$, στο σύνολο τους αν είναι απαραίτητο, σε 2 φάσεις. Στην πρώτη με εφαρμογή των περιορισμών της B'.10 πριν την υλοποίηση με FEniCS και στη δεύτερη, μετά από αυτήν, με εντοπισμό του μετώπου της υφάλμυρης σφήνας.

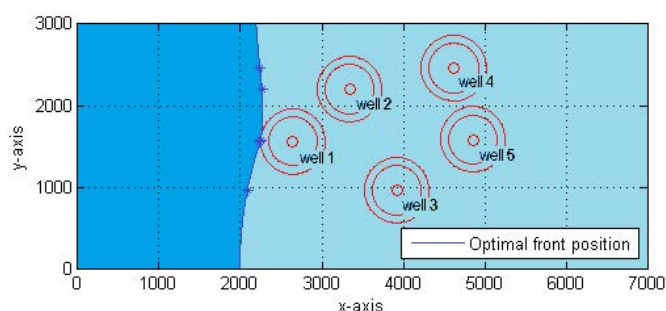
B'.4 Αριθμητικά αποτελέσματα

Για τον έλεγχο των αποτελεσμάτων παρατίθεται ο πίνακας B'.1 στον οποίο και συγκρίνονται τιμές αριθμητικών υλοποιήσεων με τη μέθοδο Collocation και με χρήση FEniCS καθώς και βέλτιστες τιμές από την αναλυτική λύση.

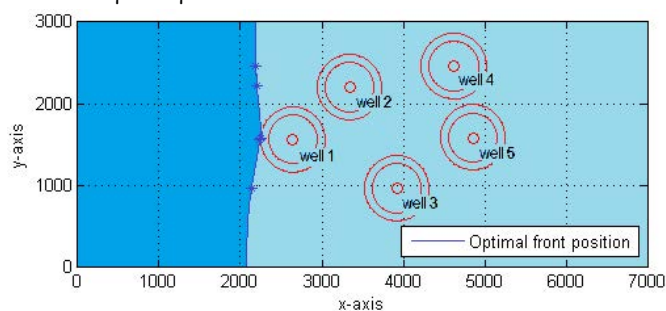
Παράμετροι	Αναλυτική λύση	HC	FEniCS
Επαναλήψεις	161	383	446
$P(Q^{(k)})$	0.62716	0.63195	0.63211
$Q_1^{(k)}$	209.75	201.16	202.62
$Q_2^{(k)}$	1089.32	317.34	695.46
$Q_3^{(k)}$	1069.24	1191.93	1303.02
$Q_4^{(k)}$	306.39	1342.76	376.06
$Q_5^{(k)}$	1287.18	1068.57	1457.01
$Q_6^{(k)}$	3961.88	4031.76	4034.18

Πίνακας B'.1: Σύγκριση βέλτιστων τιμών άντλησης μεταξύ αναλυτικής λύσης, υλοποίησης HC και FEniCS

Επίσης, στο σχήμα B'.2 παρουσιάζεται η αποτύπωση του μετώπου της αλμυρής σφήνας ενώ στα επιμέρους διαγράμματα των σχημάτων B'.4 και B'.3 παρατίθενται προς σύγκριση οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης καθώς και οι ρυθμοί άντλησης που προκύπτουν από την αναλυτική λύση, την επίλυση με Collocation και την επίλυση με FEniCS, για κάθε μια εκ τω πέντε θέσεων των ενεργών γεωτρήσεων που αναφέρθηκαν νωρίτερα.

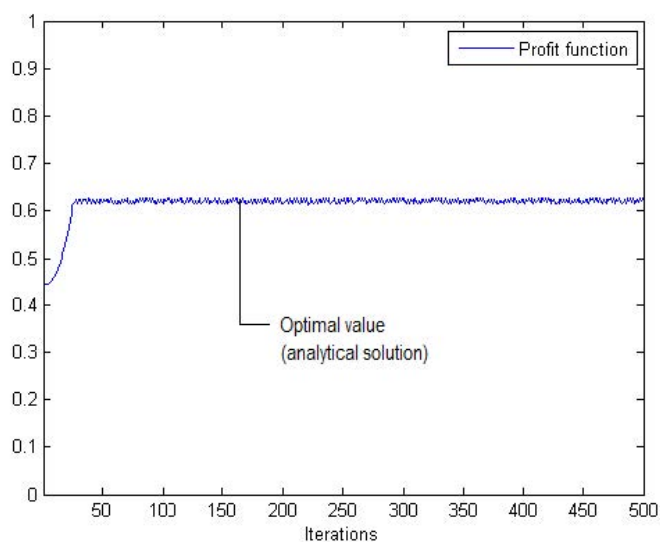


(α') Με εφαρμογή των βέλτιστων τιμών άντλησης από την αναλυτική λύση

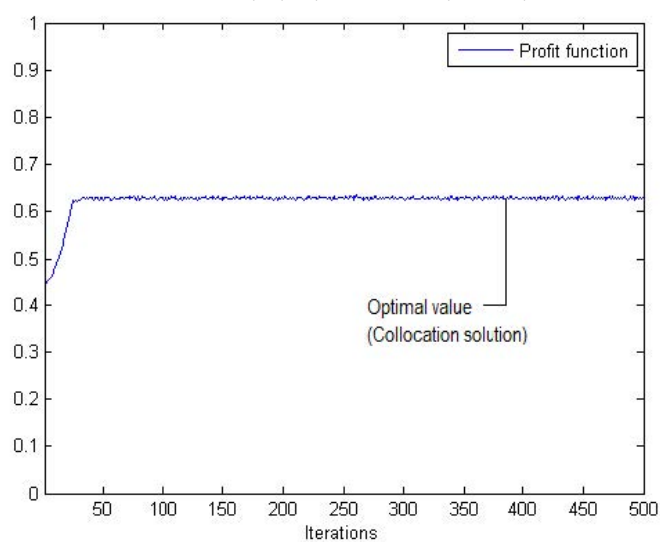


(β') Με εφαρμογή των βέλτιστων τιμών άντλησης από την επίλυση με FEniCS

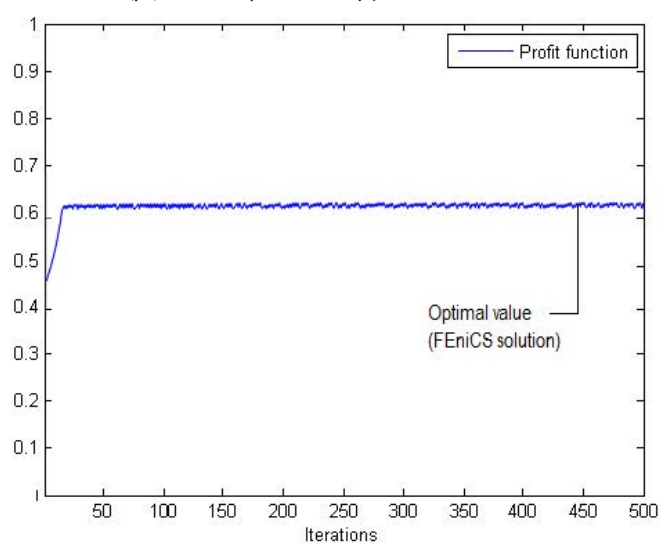
Σχήμα B'.2: Αποτύπωση του μετώπου της αλμυρής σφήνας



(α') Με χρήση της αναλυτικής λύσης

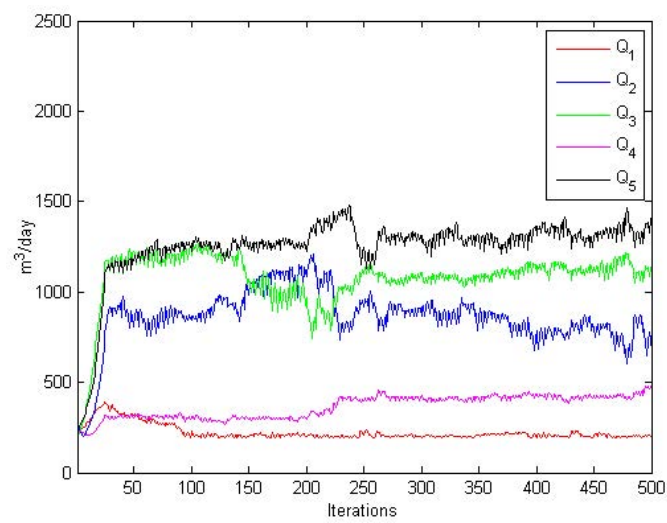


(β') Από την επίλυση με Collocation

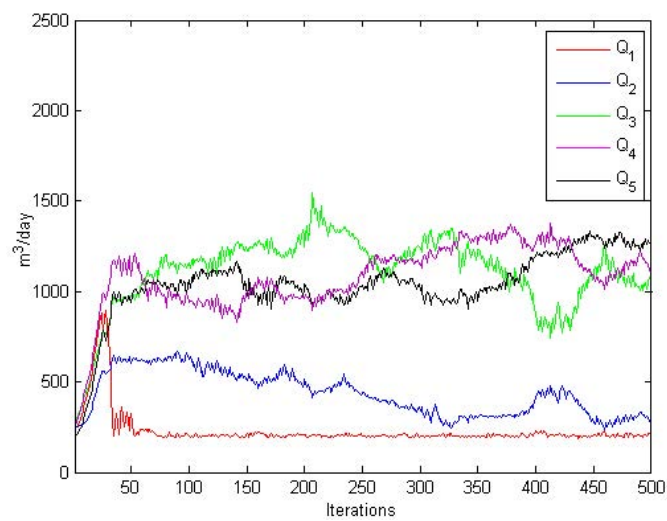


(γ') Από την επίλυση με FEniCS

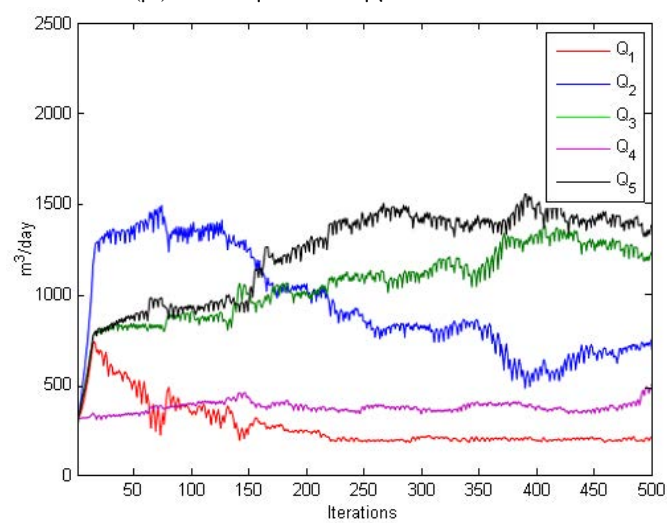
Σχήμα Β'.3: Οι τιμές της αντικειμενικής συνάρτησης $P(Q^{(k)})$



(α') Με χρήση αναλυτικής λύσης



(β') Από την επίλυση με Collocation

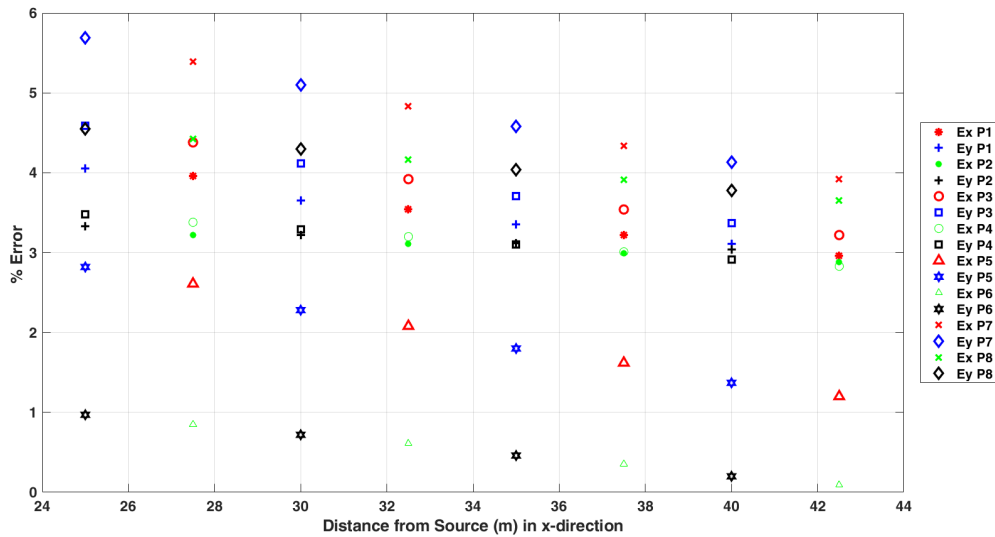


(γ') Από την επίλυση με FEniCS

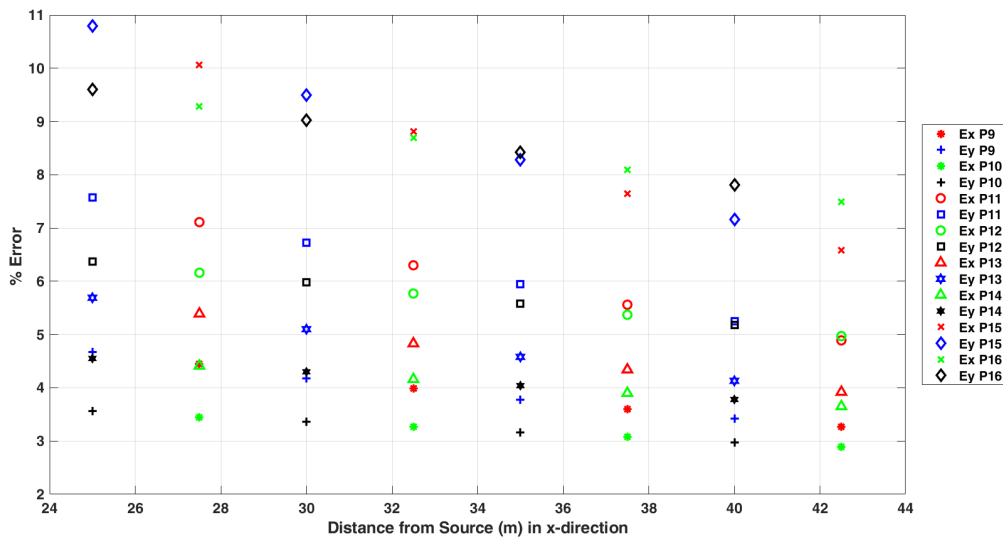
Σχήμα B'4: Ρυθμός άντλησης Q_i για κάθε γεώτρηση

Παράρτημα Γ'

Γραφήματα Προβλήματος Γεωφυσικής

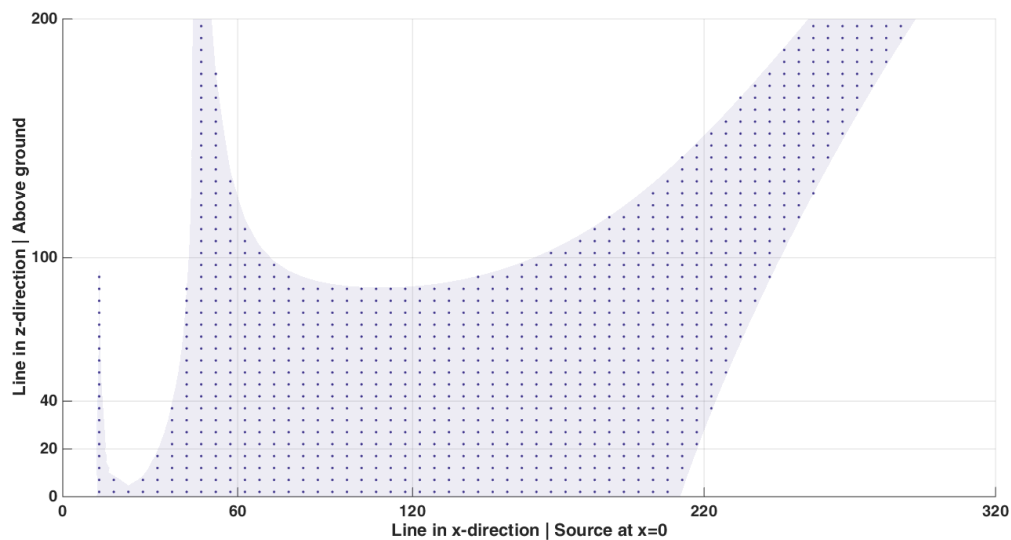


(α') Περιπτώσεις από P_1 μέχρι και P_8

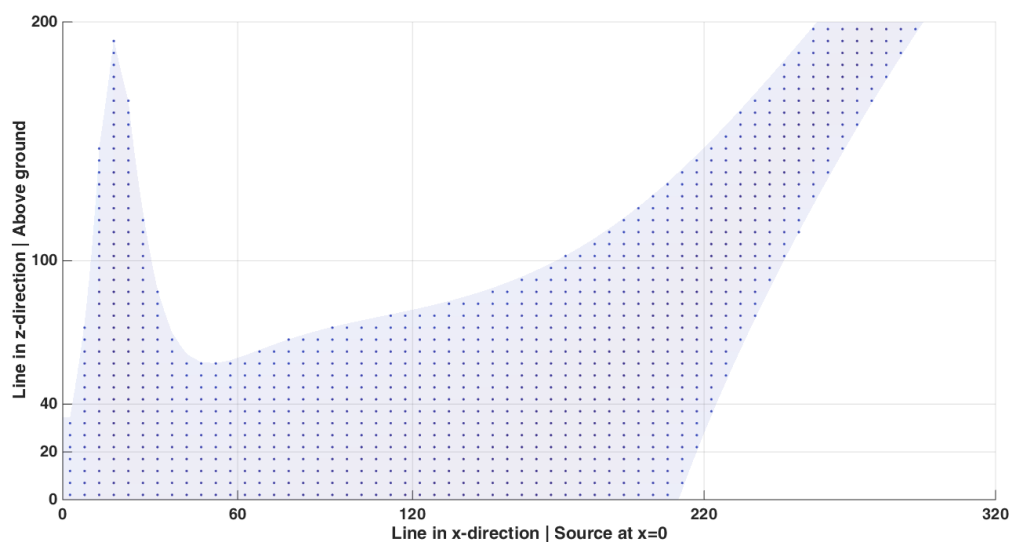


(β') Περιπτώσεις από P_9 μέχρι και P_{16}

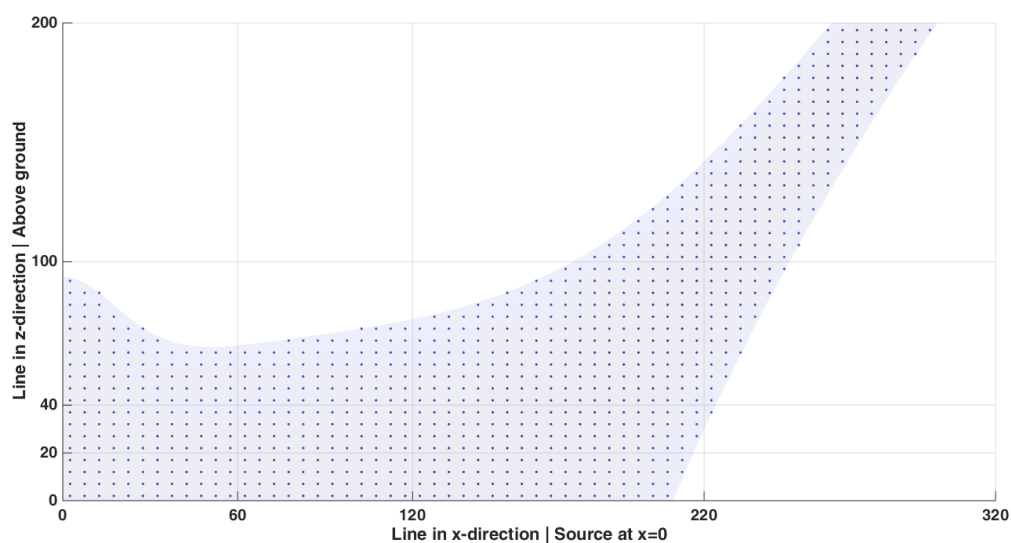
Σχήμα Γ'.1: Διάγραμμα σχετικού σφάλματος των περιπτώσεων του πίνακα 4.3 του πραγματικού μέρους των \mathbf{E}_x^T , \mathbf{E}_y^T σε υλοποιήσεις ομοιόμορφης διαμέρισης $5m$. Στον οριζόντιο άξονα αποτυπώνεται η απόσταση από τον πομπό ενώ στον κατακόρυφο το σχετικό σφάλμα %.



(α') Πομπός σε ύψος 12m

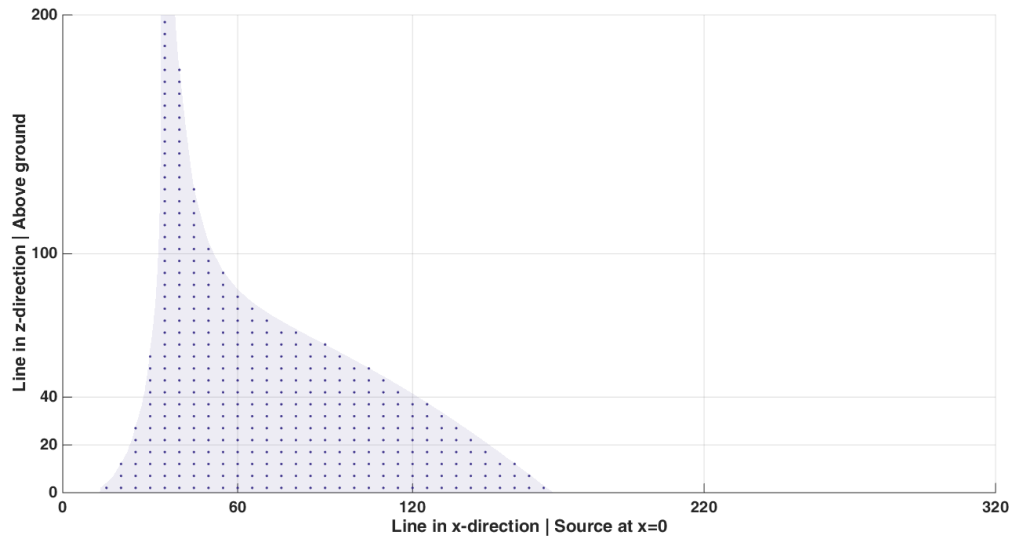


(β') Πομπός σε ύψος 22m

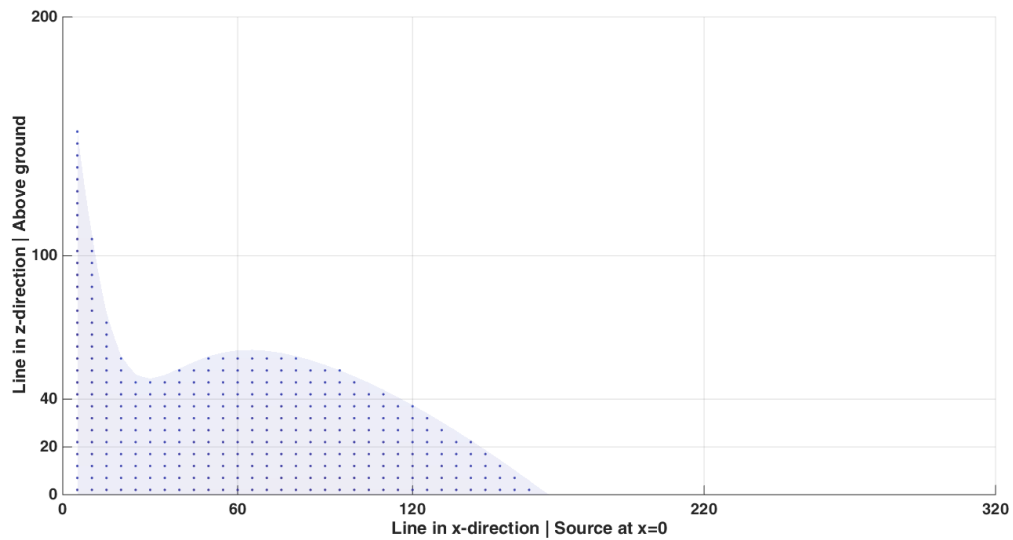


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

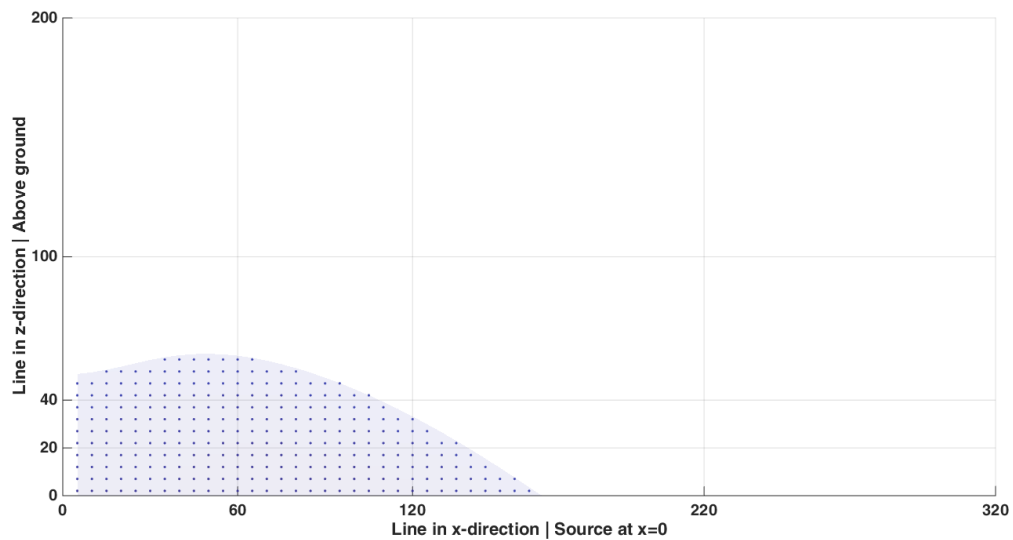
Σχήμα Γ'.2: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_x^T στα $900Hz$ ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m

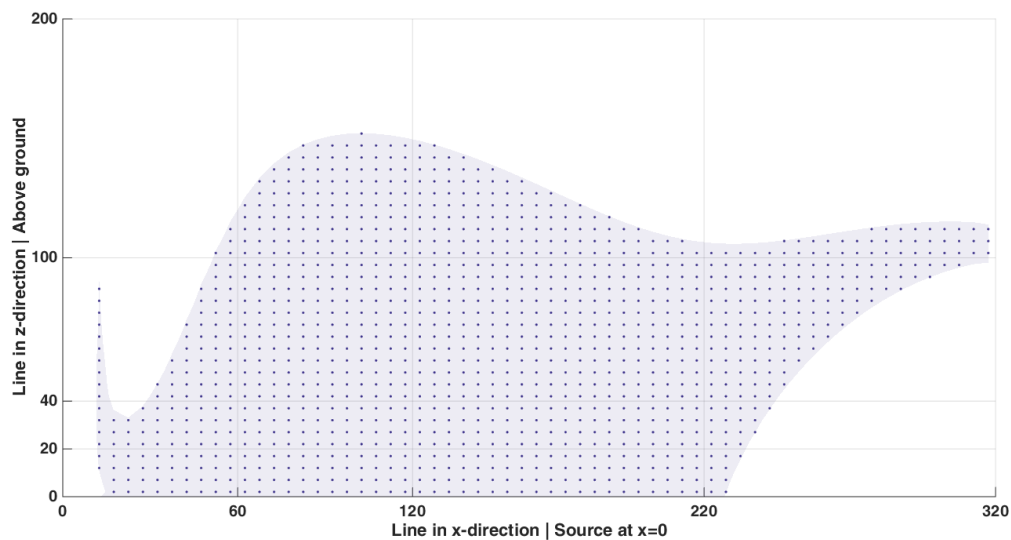


(β') Πομπός σε ύψος 22m

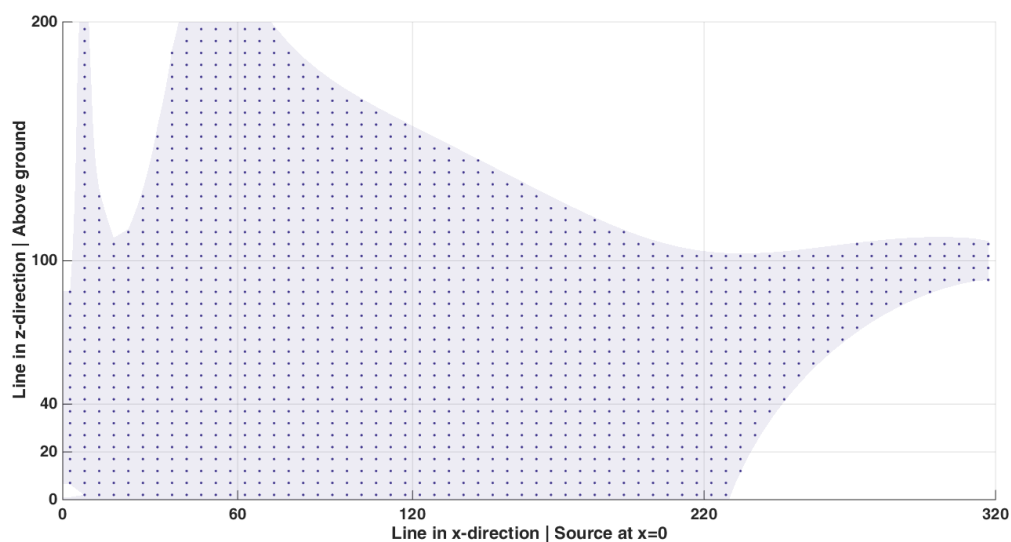


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

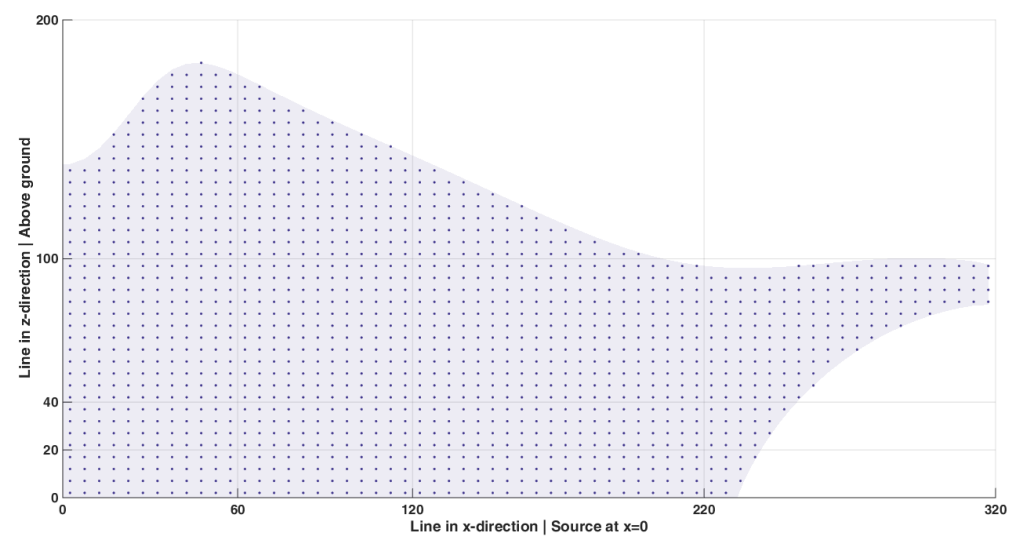
Σχήμα Γ'3: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_y^T στα $900Hz$ ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m

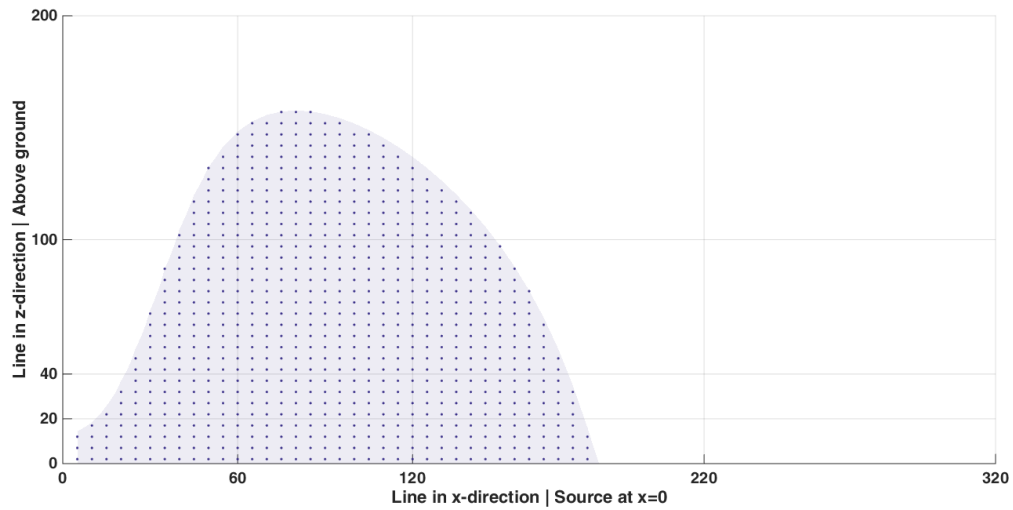
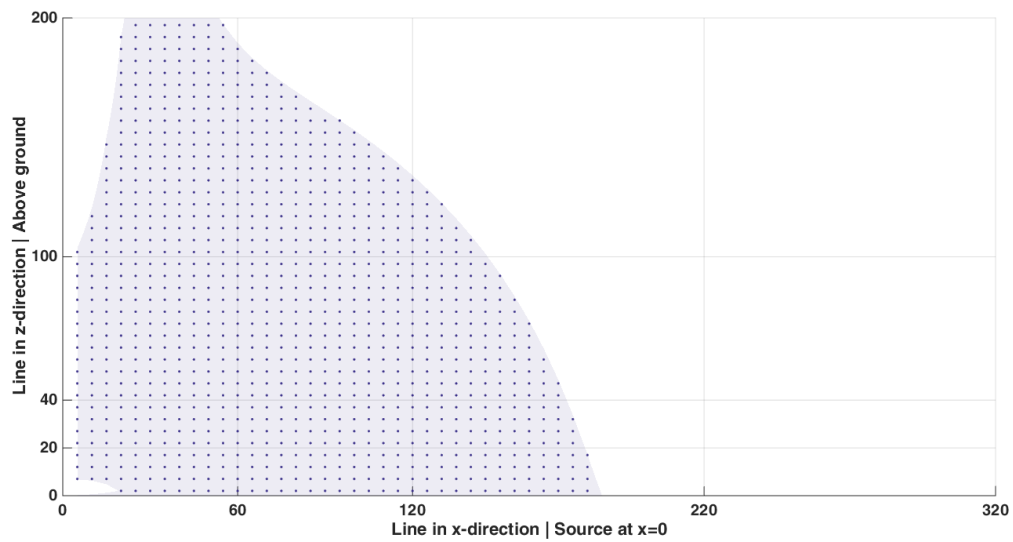
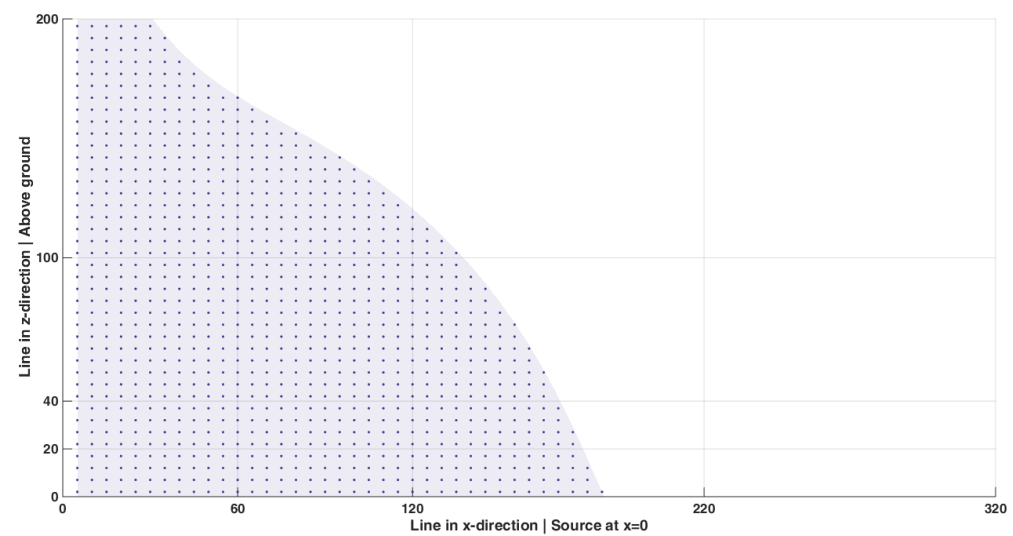


(β') Πομπός σε ύψος 22m

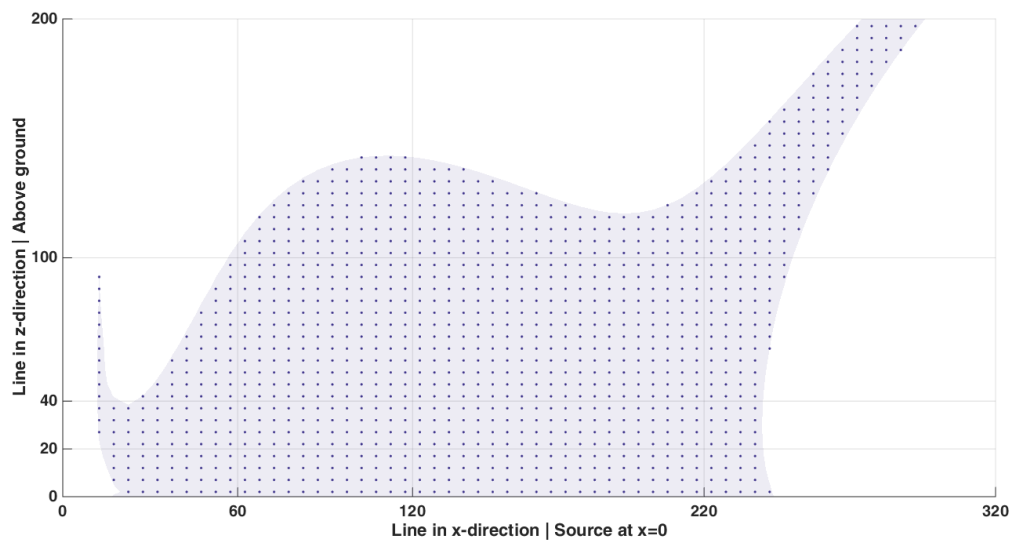


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

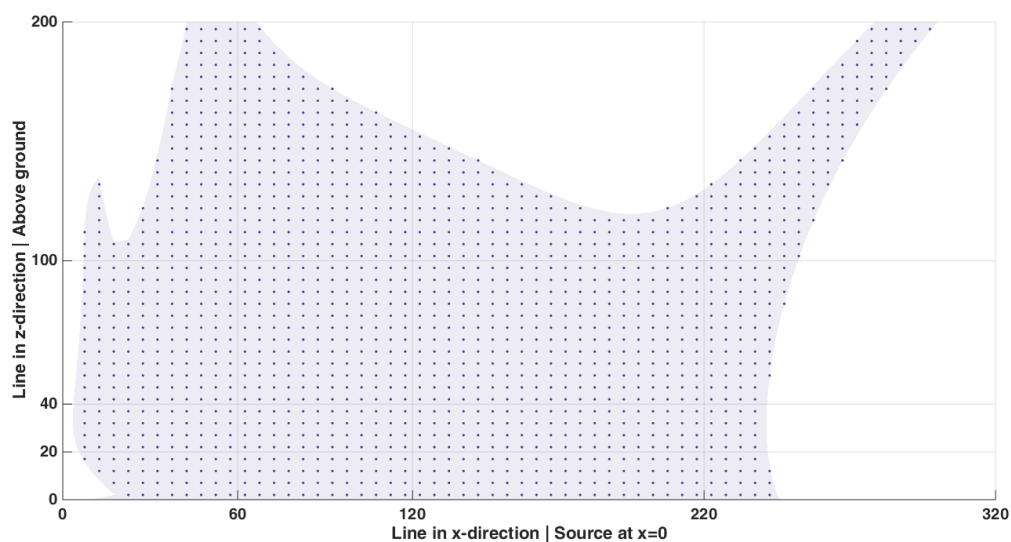
Σχήμα Γ'.4: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_x^T στα $10000Hz$ ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)

(α') Πομπός σε ύψος $12m$ (β') Πομπός σε ύψος $22m$ (γ') Πομπός σε ύψος $42m$

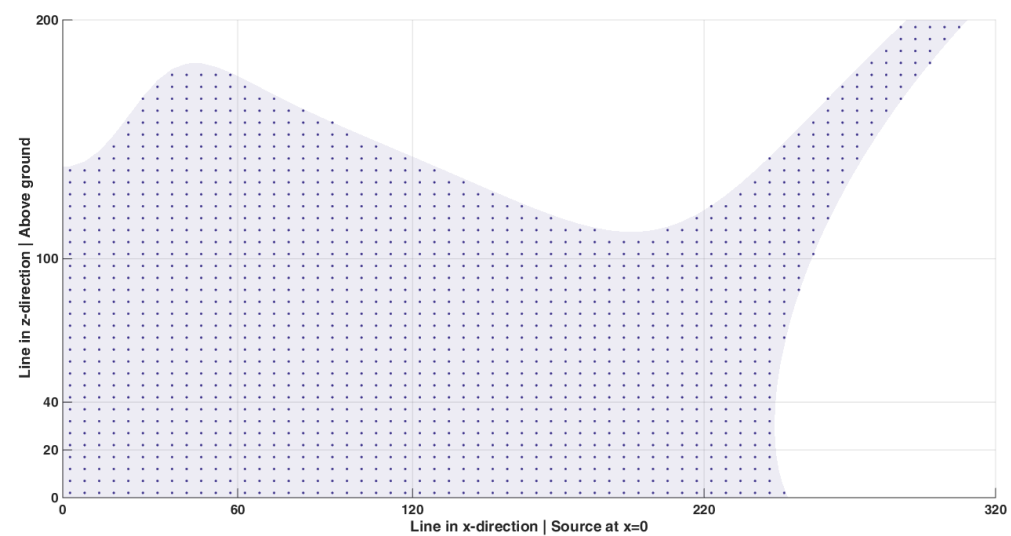
Σχήμα Γ'.5: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $10000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_z = 5m, \mathbf{h}_y = 20m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m

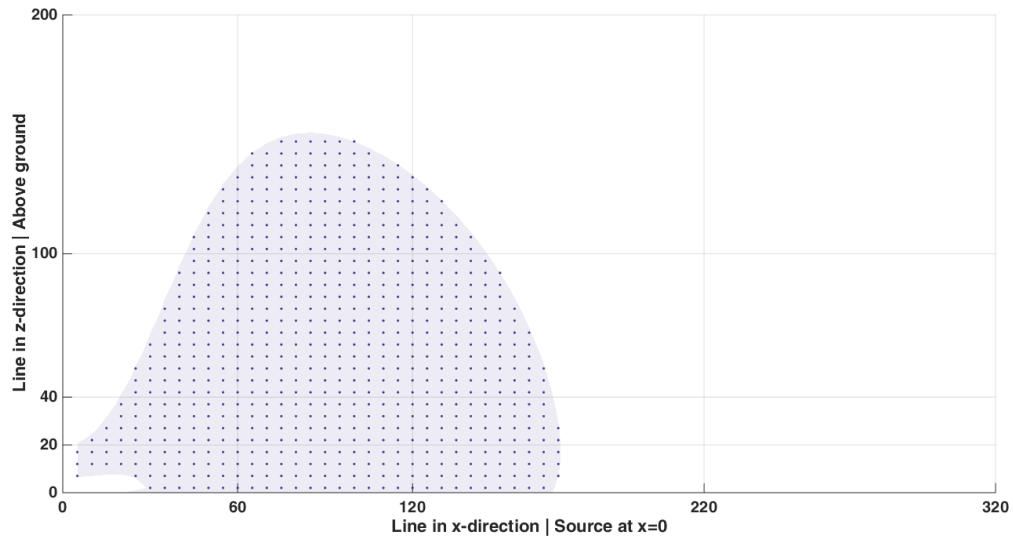


(β') Πομπός σε ύψος 22m

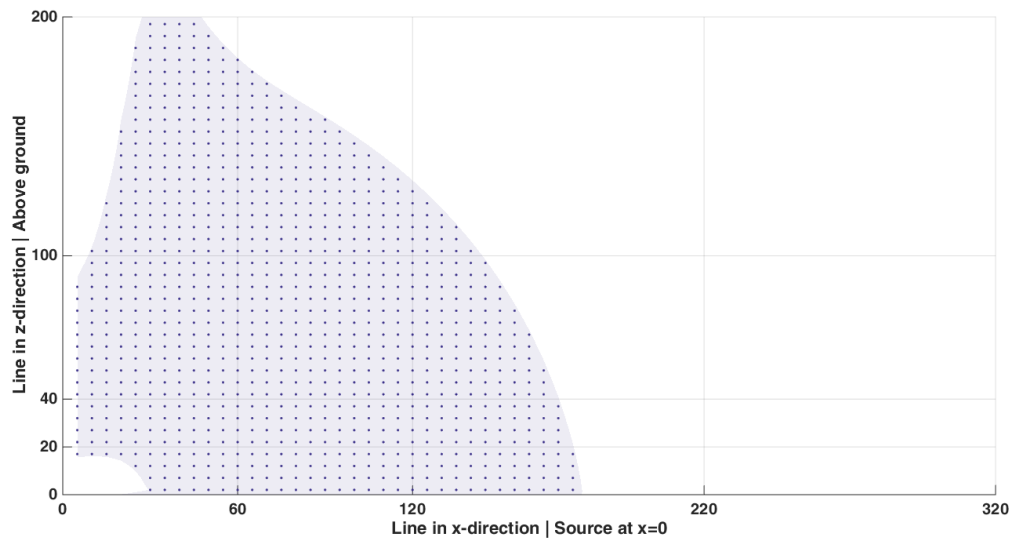


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

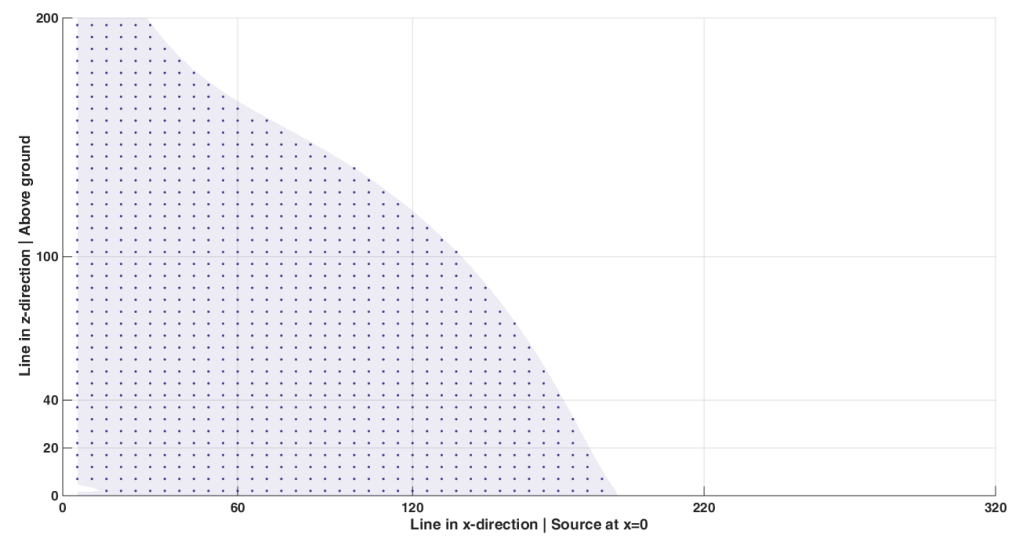
Σχήμα Γ'.6: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_x^T στα $30000Hz$ ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m

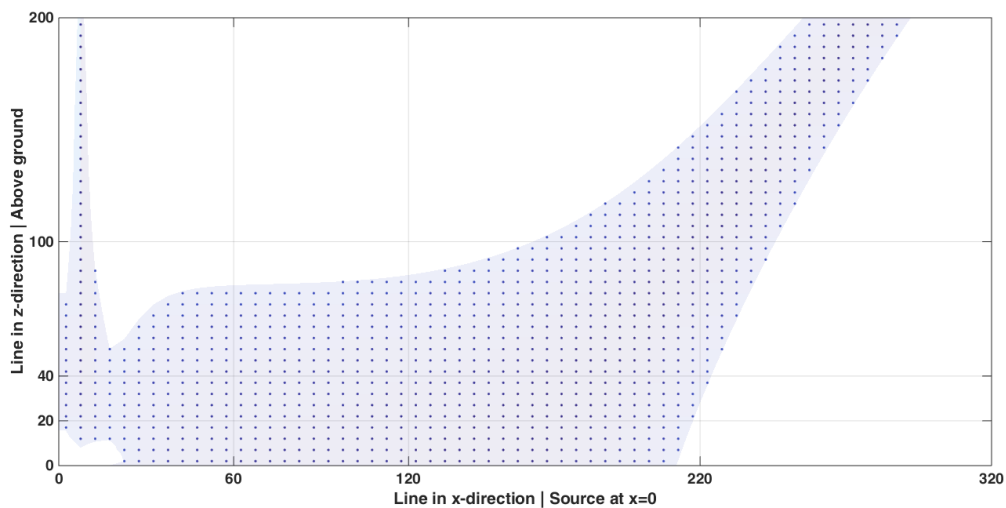


(β') Πομπός σε ύψος 22m

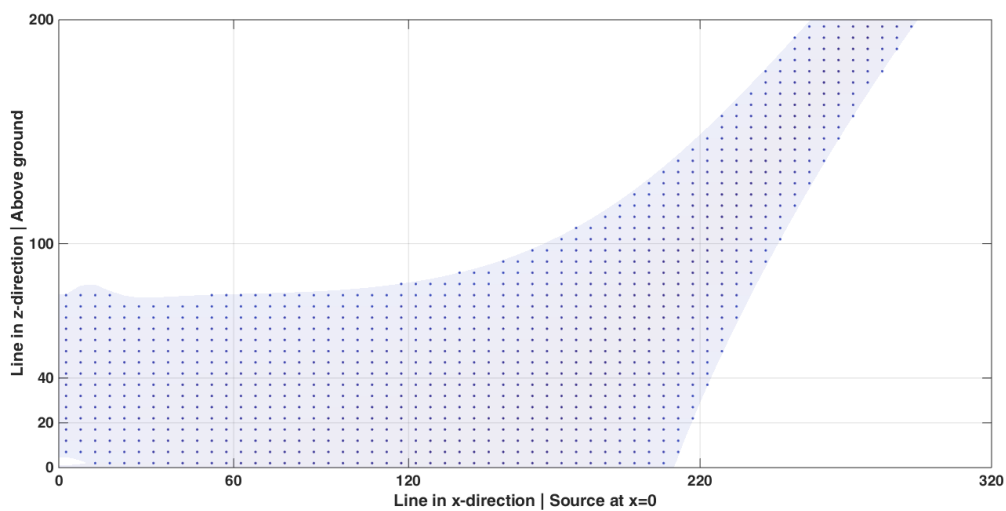


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

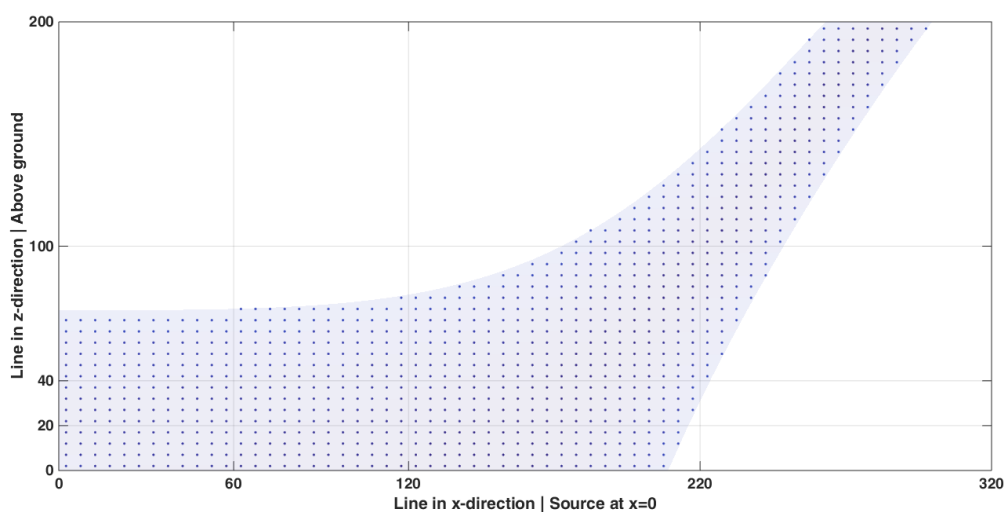
Σχήμα Γ.7: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $30000Hz$ ($h_x = h_z = 5m, h_y = 20m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m

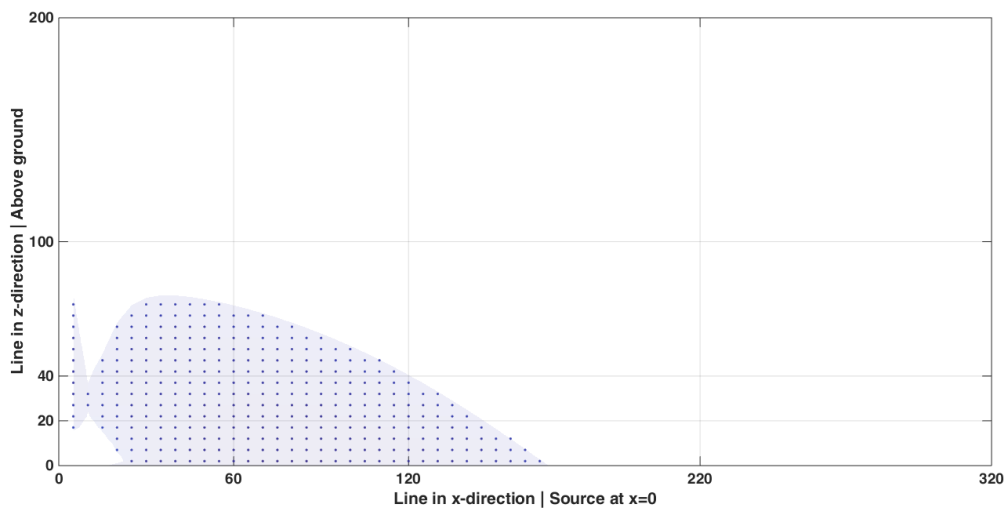


(β') Πομπός σε ύψος 22m

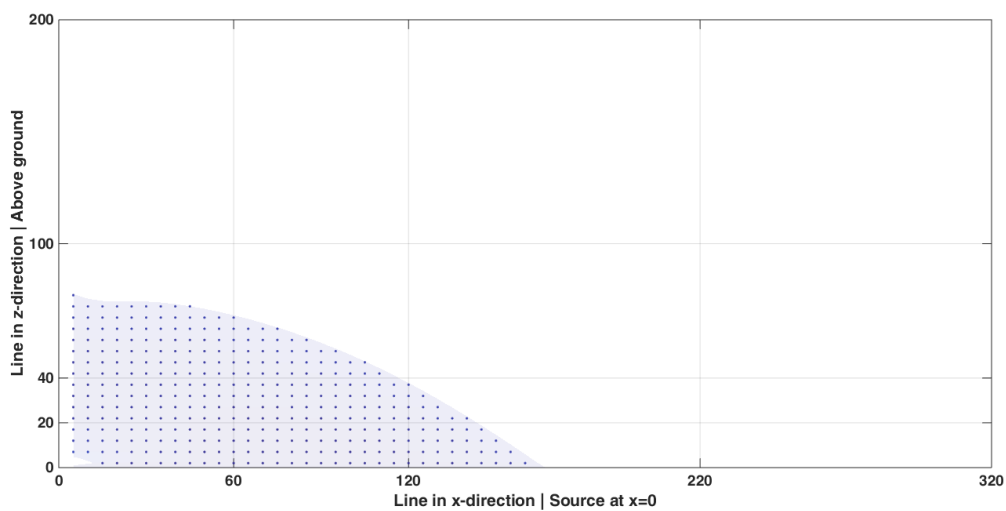


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

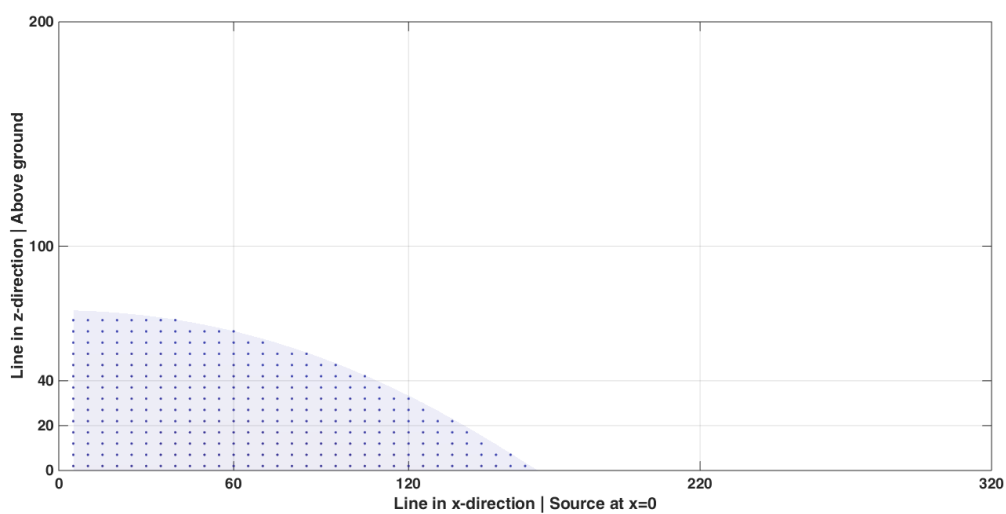
Σχήμα Γ'.8: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_x^T στα $900Hz$ ($h_x = h_y = h_z = 5m$)



(α') Πομπός σε ύψος $12m$

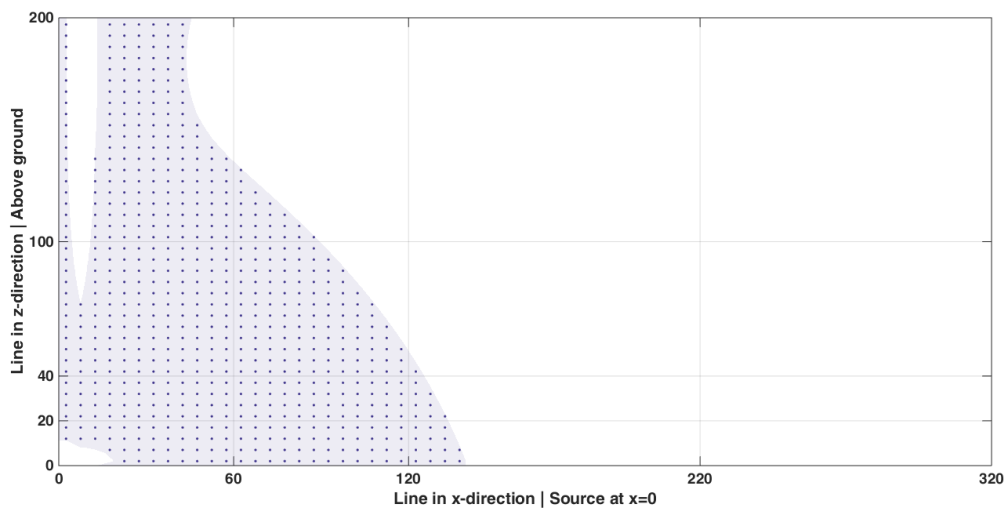


(β') Πομπός σε ύψος $22m$

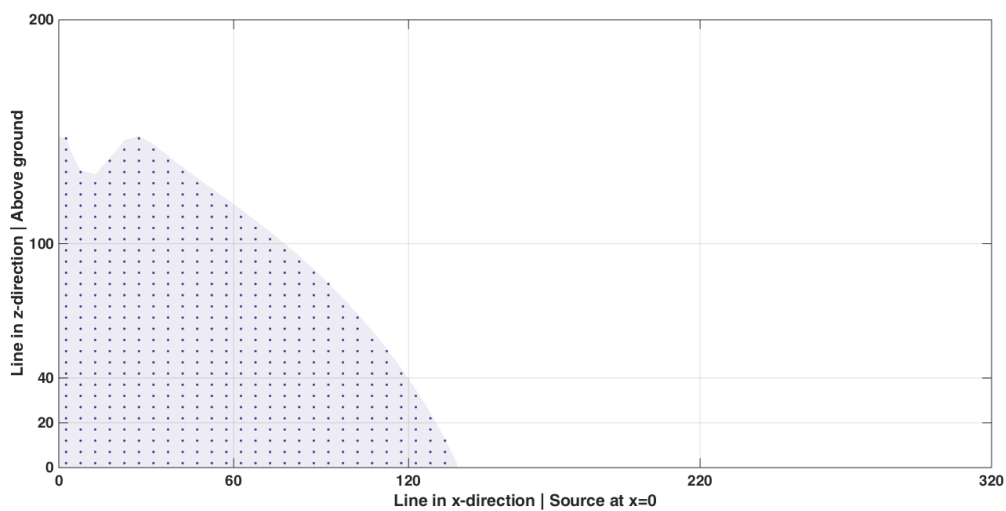


(γ') Πομπός σε ύψος $42m$

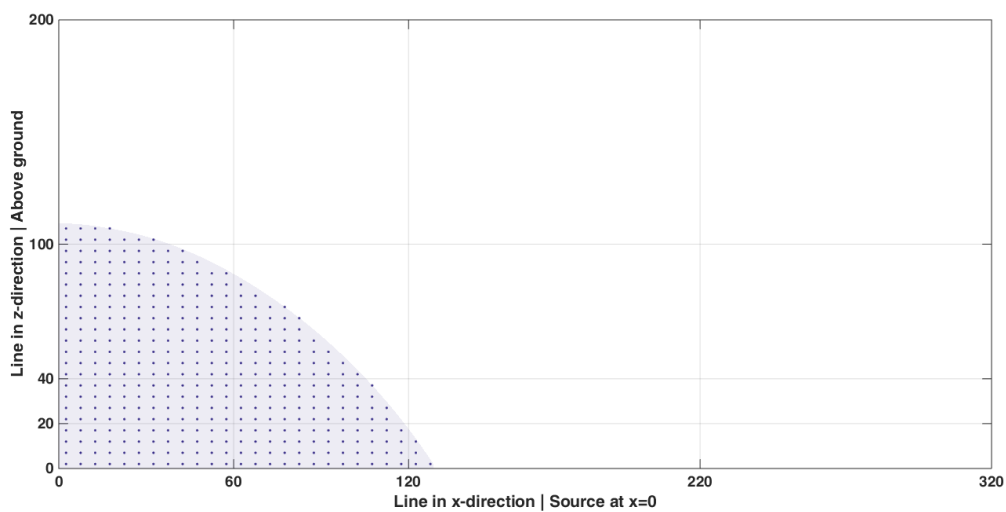
Σχήμα Γ'.9: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του E_y^T στα $900Hz$ ($h_x = h_y = h_z = 5m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m

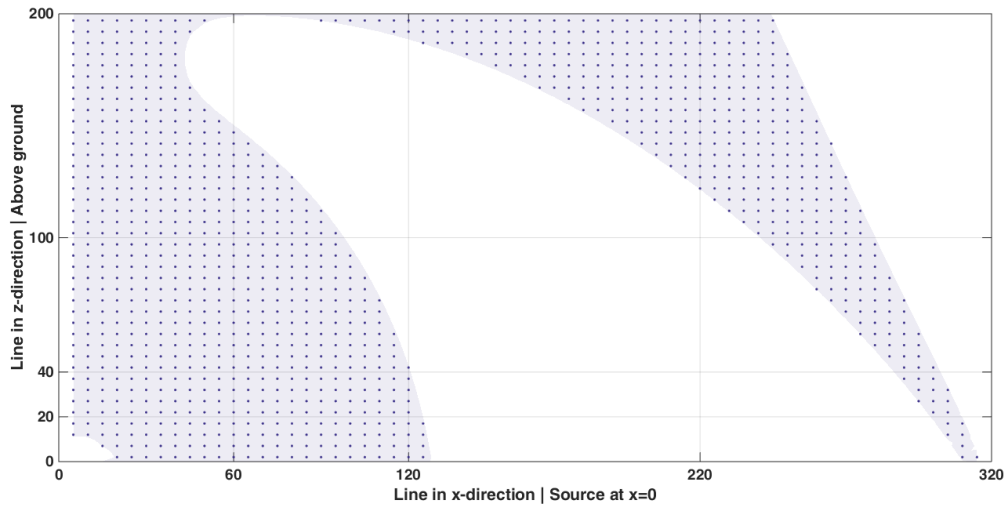
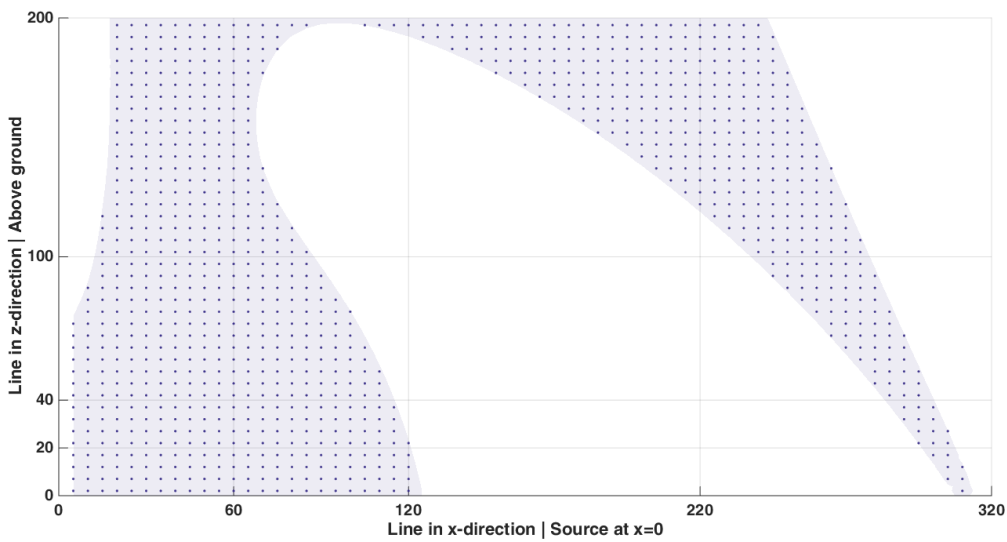
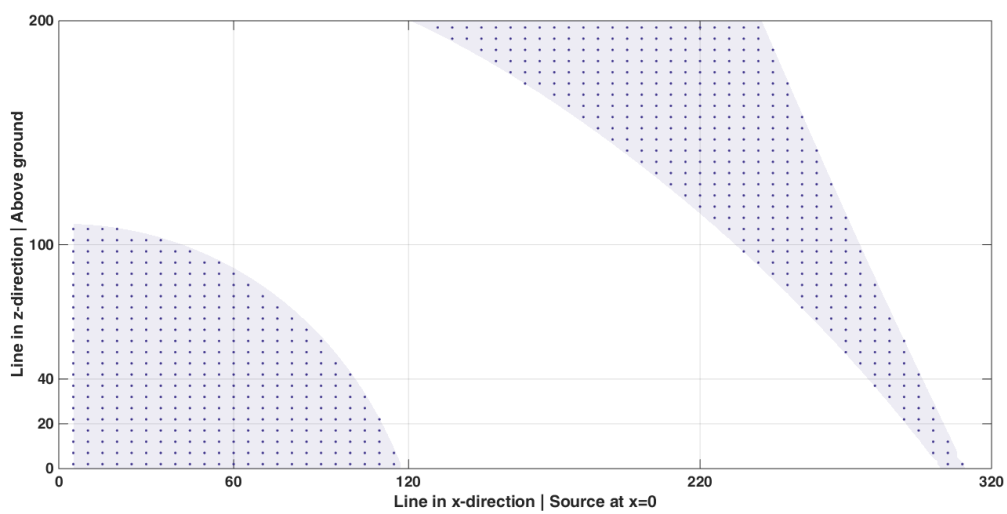


(β') Πομπός σε ύψος 22m

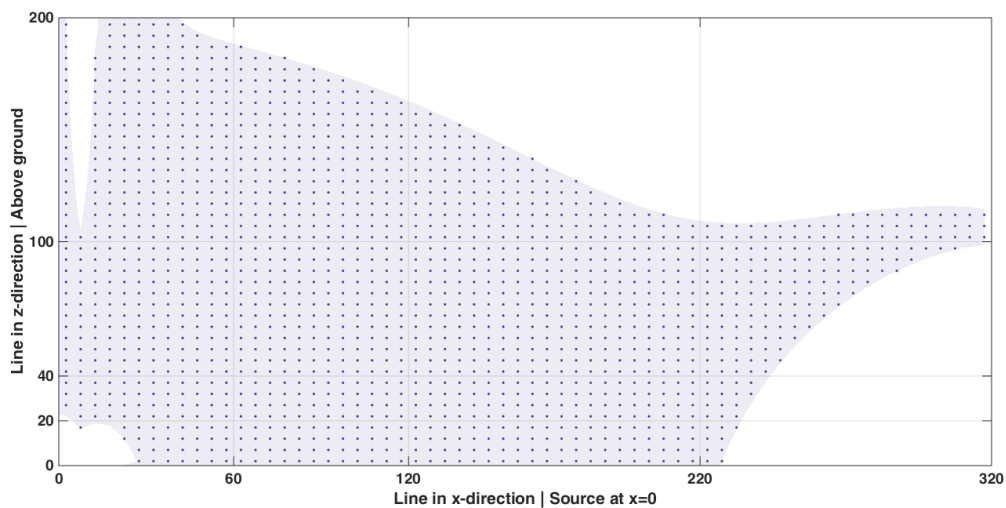


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

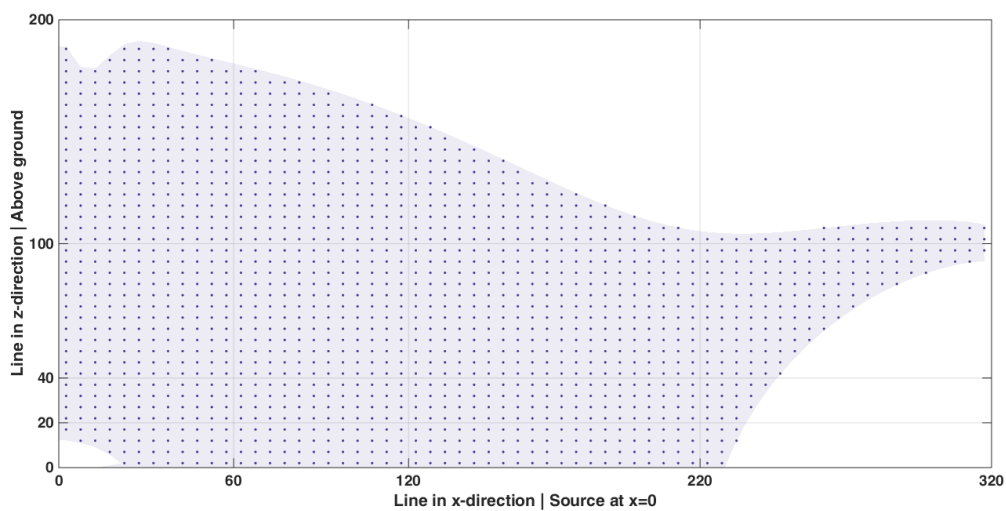
Σχήμα Γ'.10: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $3000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)

(α') Πομπός σε ύψος $12m$ (β') Πομπός σε ύψος $22m$ (γ') Πομπός σε ύψος $42m$

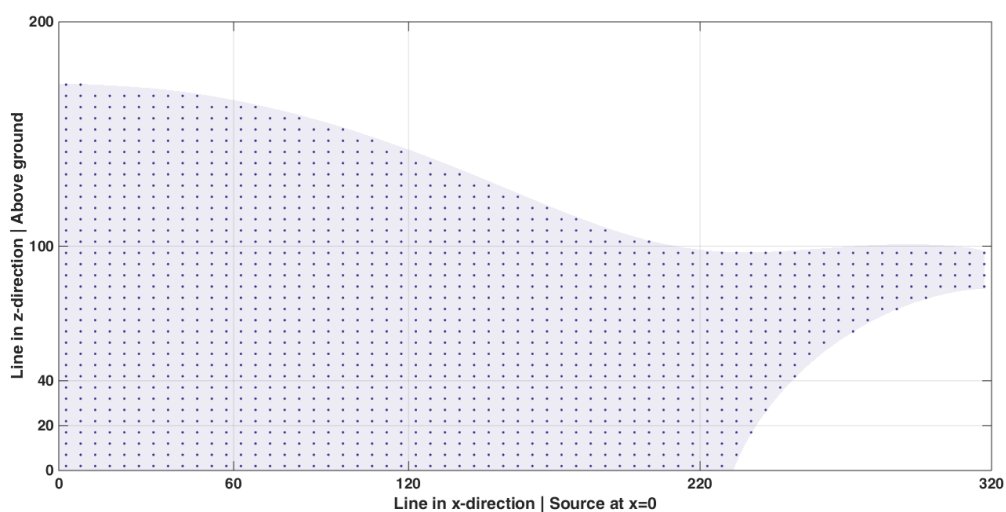
Σχήμα Γ'.11: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $3000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m

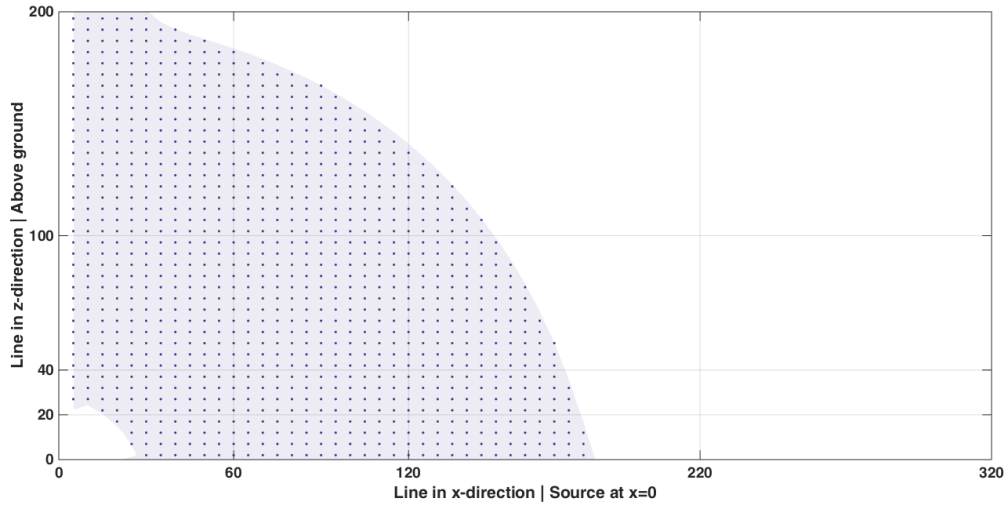


(β') Πομπός σε ύψος 22m

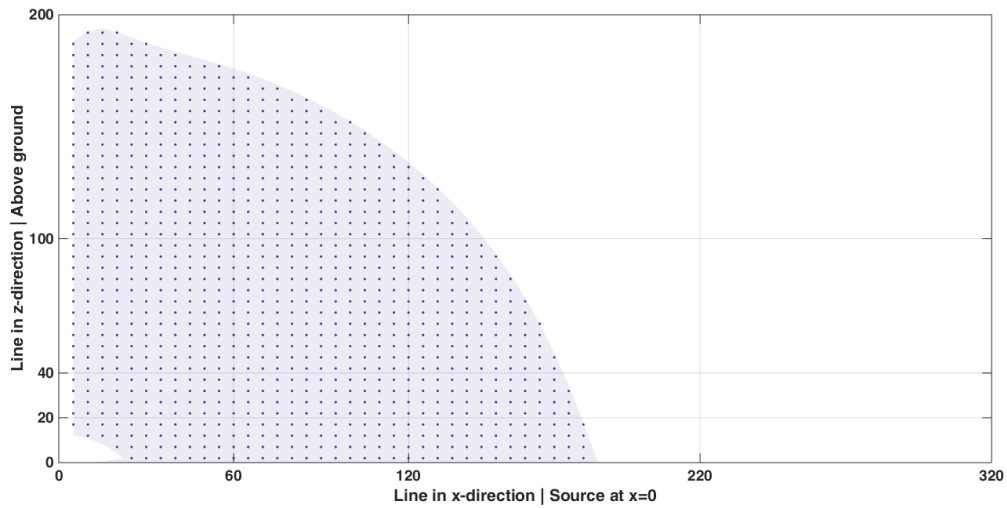


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

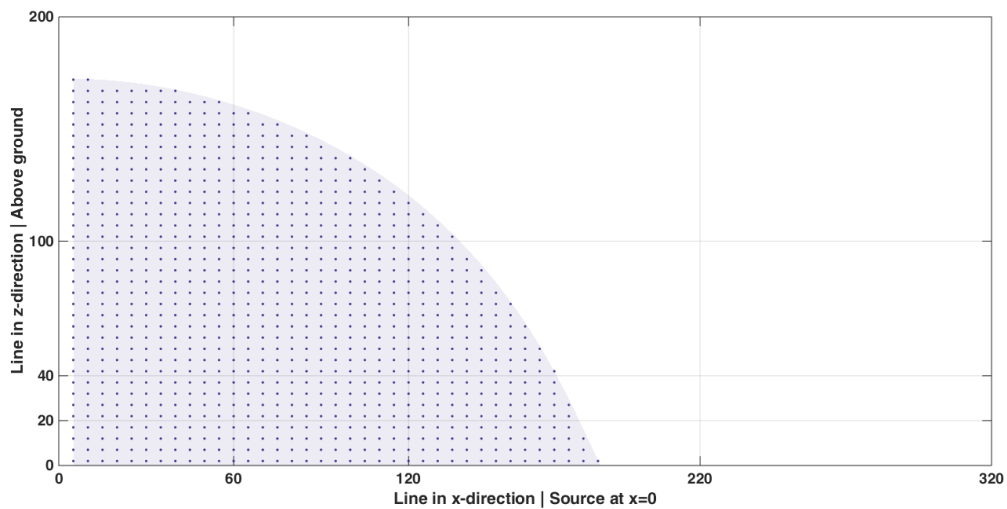
Σχήμα Γ'.12: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $10000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)



(α') Πομπός σε ύψος $12m$

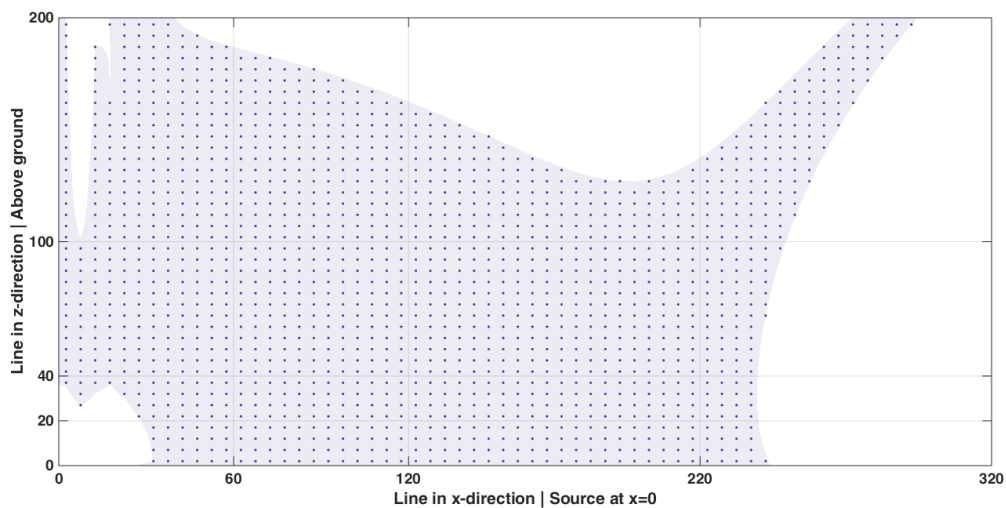


(β') Πομπός σε ύψος $22m$

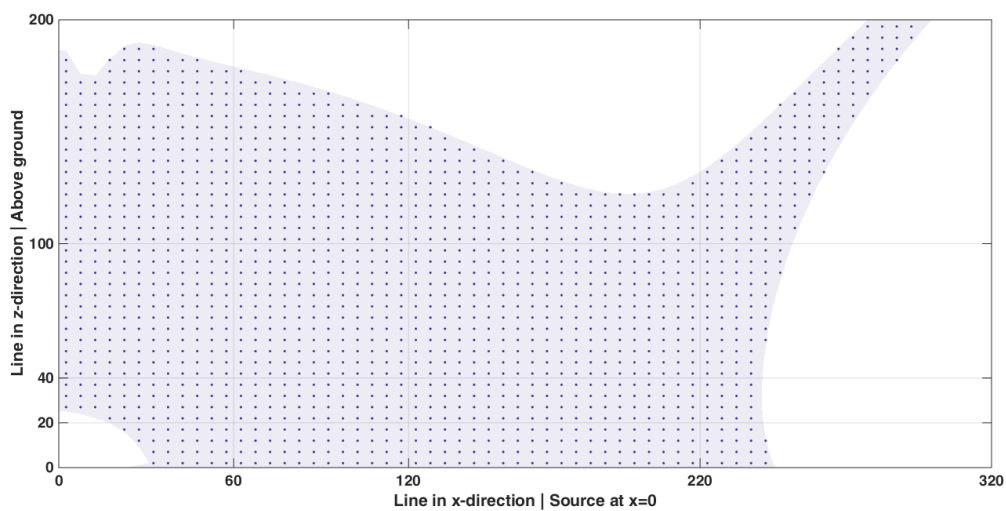


(γ') Πομπός σε ύψος $42m$

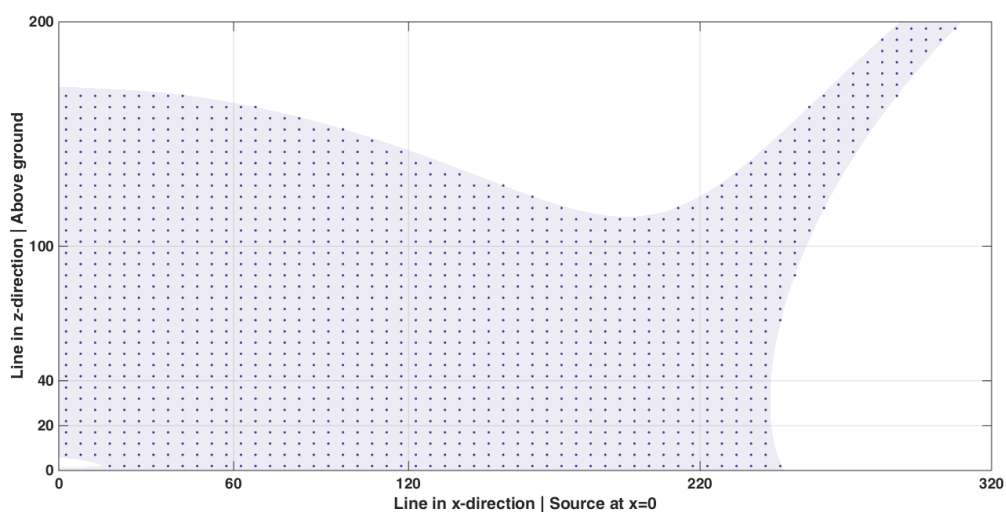
Σχήμα Γ.13: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $10000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m

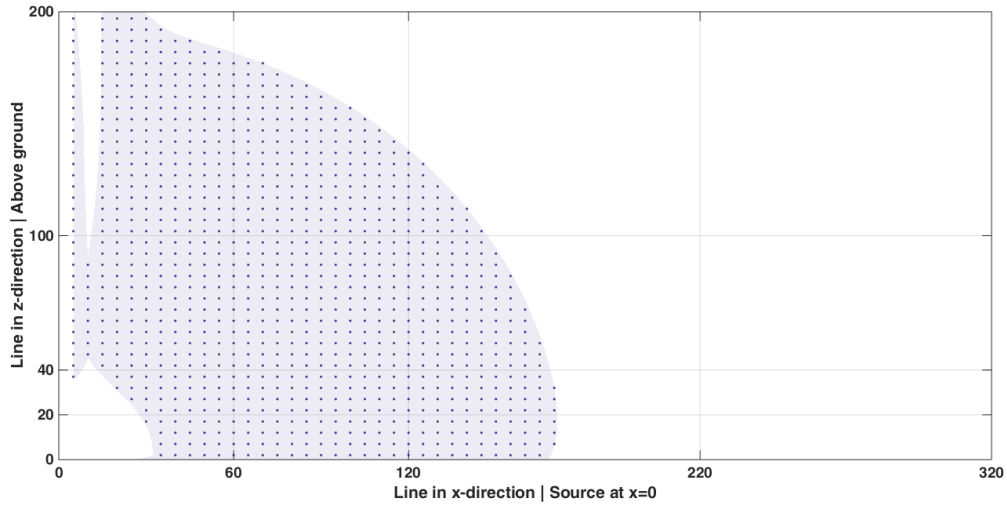


(β') Πομπός σε ύψος 22m

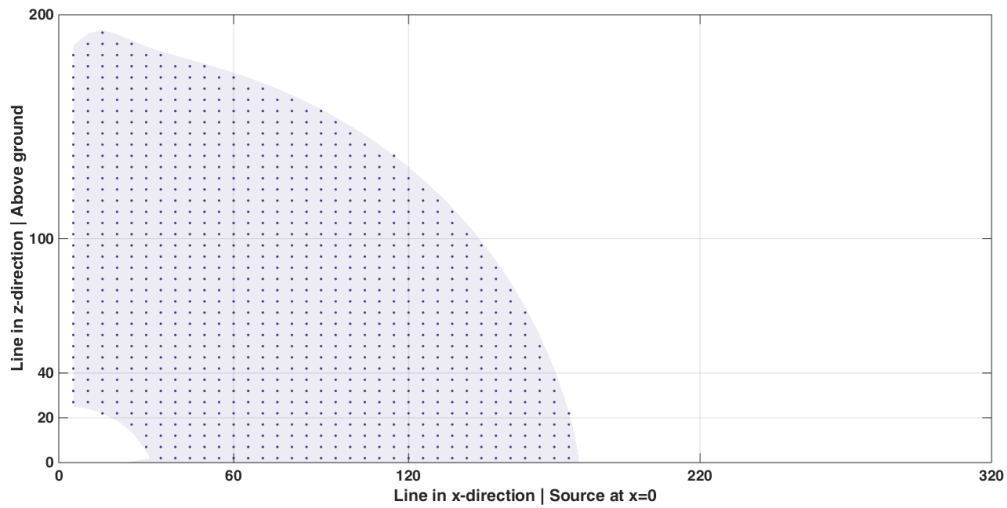


(γ') Πομπός σε ύψος 42m

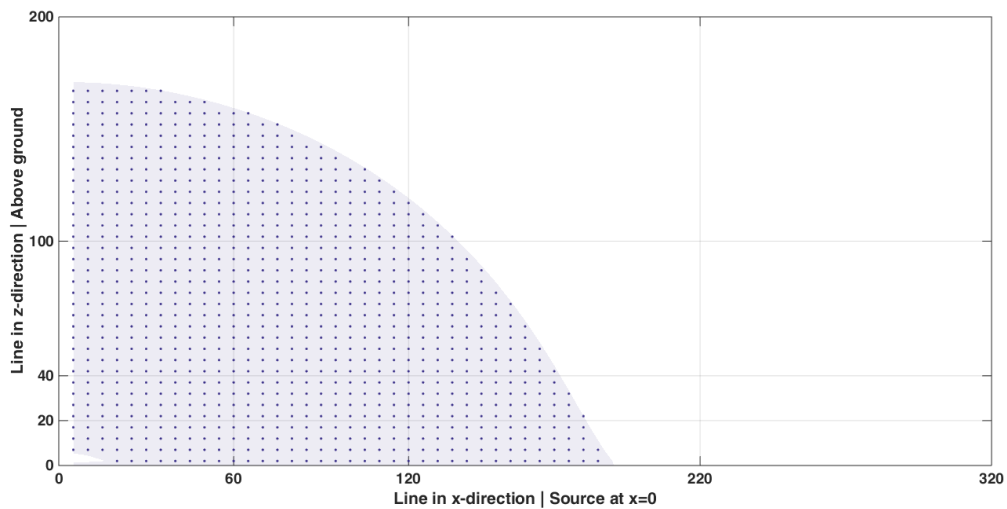
Σχήμα Γ'.14: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_x^T στα $30000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)



(α') Πομπός σε ύψος 12m



(β') Πομπός σε ύψος 22m



(γ') Πομπός σε ύψος 42m

Σχήμα Γ'.15: Κόμβοι με σφάλμα $< 5\%$ για το πραγματικό μέρος του \mathbf{E}_y^T στα $30000Hz$ ($\mathbf{h}_x = \mathbf{h}_y = \mathbf{h}_z = 5m$)

Παράρτημα Δ΄

Σχετικές Δημοσιεύσεις

Η συγγραφή και δημοσίευση των παρακάτω επιστημονικών άρθρων πραγματοποιήθηκε κατά τη διάρκεια της εκπόνησης της παρούσας διατριβής

- A 3D frequency-domain electromagnetic solver employing a high order compact finite-difference scheme
N.D. Vilanakis, N. Economou, E.N. Mathioudakis, A. Vafidis
Computers and Geosciences, Elsevier, Volume 178, September 2023, 105391
- Solving Discontinuous Collocation Equations for a Class of Brain Tumor Models on GPUs
I.E. Athanasakis, N.D. Vilanakis, E.N. Mathioudakis
Proceedings of WCE 2015, vol.1, pp. 529-534, IAENG, 2015
Best Paper Award
- Combining Stochastic Optimization and Numerical Methods-Software for the Pumping Management of Coastal Aquifers: Case Study of A Rectangular Homogeneous Aquifer
I.E. Athanasakis, Z.A. Dokou, E.N. Mathioudakis, P.N.Stratis, N.D. Vilanakis
International Journal Of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, vol. 9, pp. 727-732, 2015
- Schwarz Splitting for the Steady State problem of Saltwater Intrusion in Coastal Aquifers
E. Maroudas, N. Vilanakis, Ch. Antonopoulos, E. Mathioudakis, I. Saridakis, M. Vavalis
International Journal Of Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, vol. 9, pp. 733-739, 2015

Η ερευνητική εργασία *Solving Discontinuous Collocation Equations for a Class of Brain Tumor Models on GPUs* παρουσιάστηκε από κοινού με τον Δρ. Ι. Αθανασάκη στο Διεθνές Συνέδριο **NumAn**, Χανιά Κρήτης, 2014 όπου και απέσπασε το **Βραβείο Καλύτερου Νέου Ερευνητή**.



A 3D frequency-domain electromagnetic solver employing a high order compact finite-difference scheme

N.D. Vilanakis^{a,*}, N. Economou^{b,c}, E. Mathioudakis^{a,1}, A. Vafidis^b

^a Applied Mathematics and Computers Laboratory, Technical University of Crete, University Campus, 73100, Chania, Greece

^b Applied Geophysics Laboratory, School of Mineral Resources Engineering, Technical University of Crete, Univ. Campus, 73100, Chania, Greece

^c Earth Sciences Department, College of Science, Sultan Qaboos University, Al Khoud, 123 Muscat Oman, Oman

ARTICLE INFO

Keywords:

EM induction Method
FDFD Solver
High-order scheme
Parallel algorithm

ABSTRACT

Three-dimensional (3D) electromagnetic (EM) modeling is an important tool for geophysical applications. In EM induction methods the modified Helmholtz equation is often used to describe scattered or residual electric fields in three dimensions. Throughout this paper, a high order compact finite difference scheme for the solution of that equation for vertical magnetic dipole source (VMD) is presented. The approximation of the residual electric field intensity using a fourth order compact finite difference (FD) discretizer is achieved with the solution of a block linear system, the coefficient matrices are large and sparse with a particular structure, implying the application of a matrix-free Krylov subspace method for an efficient numerical solution. The proposed solver is being examined using a number of test problems in uniform and non-uniform grid spacing where numerical and analytical solutions for the homogeneous half-space cases are being compared.

1. Introduction

Loops generate electromagnetic fields at selected frequencies in electromagnetic induction methods and detect the resulting secondary magnetic field for the estimation of the subsurface conductivity. Electromagnetic forward modeling must be performed fast and with high accuracy for an efficient electromagnetic data inversion algorithm. This means, that electromagnetic modeling should utilize the coarsest grid possible achieving at the same time an acceptable accuracy.

Numerical methods have been developed to simulate the electromagnetic response of a 3D earth to a magnetic dipole source at frequencies ranging from 100 Hz to 100 MHz (Avdeev et al., 2000). Most of them work with the scattered field versions of the Maxwell's equations to allow coarser discretization about the source location. The modified Helmholtz equation for the scattered electric field is preferred instead of the coupled Maxwell system, since scattered field versions of Maxwell's equations numerically decouple in the air at frequencies less than 10 MHz. Different forms of numerical solutions exist for the calculation of the electric field in the frequency domain employing the Helmholtz equation: finite element methods, finite difference and closely related finite-volume methods and integral equation methods (Avdeev et al., 2000; Haber et al., 2000; Newman and Alumbaugh, 1995; Mitsuhata and Uchida, 2004, among others).

Finite element and finite difference techniques result in linear systems of equations in which the coefficient matrix is large and very sparse for real application problems. In this case, iterative Krylov subspace methods for the linear system solution are more efficient than direct solvers or matrix inversion (Avdeev et al., 2000). In the finite-element approach, the electromagnetic field is decomposed to some basic (usually, edge and nodal) functions. The coefficients of the decomposition are sought using the Galerkin method (Mitsuhata and Uchida, 2004; Zyserman and Santos, 2000, among others). Finite element discretizers are more flexible in terms of the mesh geometry, while a finite difference scheme results in a well-structured grid. Finite difference solvers are probably most commonly employed in complex problem applications since, on massively parallel computing architectures, the speedup rate of the simulations is increased (Newman and Alumbaugh, 1995; Fomenko and Mogi, 2002, among others). With the integral equation approach, Maxwell's differential equations are first reduced to a second-kind Fredholm integral equation (Raiche, 1974; Avdeev et al., 2000; among others). Still, integral equation methods suffer from increased computational cost and generality efficiency (Newman and Alumbaugh, 1995). As the complexity increases, the computational cost of the full solutions increases, while on the other hand, frequency range and conductivity contrast limit the applicability of the approximate solutions.

* Corresponding author.

E-mail address: nivilanakis@tuc.gr (N.D. Vilanakis).

¹ deceased.

The electromagnetic forward problem regardless of the approach employed, is always reduced to the solution of a system of linear equations (Avdeev, 2005). Direct-solution techniques (Varga, 2000) comprise matrix factorization which can entail tremendous cost in terms of memory and computation time (Streich, 2009). The most important aspect in the construction of such a solver is how accurately the constructed linear system represents Maxwell's equations. Of high importance is also the condition number of the system matrix and whether a preconditioning technique needs to be applied at it, as the condition numbers of the system matrices can be significantly large, resulting to the slow - or even unattainable - convergence of the method solving the linear system. Most often, staggered grids as well as a variety of the preconditioners are commonly used to address these issues (Avdeev, 2005).

In order to ensure an acceptable numerical solution for relatively lower frequencies ($< \text{kHz}$), an additional constraint proposed by Smith (1996), incorporates the current's conservation ensured by the enforcement of the divergence of the product of conductivity and electric field intensity to be equal to zero. This, along with the absorbing boundaries conditions, enhances the efficiency of the solver.

In this paper, we propose a high order compact finite difference scheme on a staggered grid for the solution of the modified Helmholtz equation which describes scattered or residual electric fields in the three dimensions for a vertical magnetic dipole source transmitting from above the Earth's surface. The algorithm of the solver is designed to be implemented on multithreaded multicore architectures for efficient simulations of realistic large size problems. In the case of this structure of coefficient matrices, matrix-free basic linear algebra operations are being considered, leading to an efficient memory handling. Furthermore, we demonstrate that our solver is efficient without the need to incorporate an enforcement of a static-divergence-free condition of current density and the use of absorbing boundaries conditions. The proposed solver is tested against analytical solutions for homogeneous half-space cases in several instances where the frequency, the conductivity and the transmitter's height vary.

2. Methodology

2.1. The numerical scheme

The residual electric field intensity $E(x, y, z) = (E_x, E_y, E_z)$ evaluation in the three-dimensional Cartesian domain with conductivity $\sigma(x, y, z)$ from the Maxwell's equations can be expressed with the partial differential equation (Sasaki et al., 2010)

$$\nabla \times \nabla \times E + i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_0)E = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_0)E^p \quad (1)$$

for a certain angular frequency $\omega = 2\pi f$ of frequency f , assuming negligible displacement currents. This formulation excludes source-point singularities from the numerical computations. $E^p(x, y, z) = (E_x^p, E_y^p, 0)$ represents the background electric field intensity for a vertical magnetic dipole source (Ward and dan Hohmann, 1998) for conductivity σ_0 and permeability μ_0 of the homogeneous half-space. Domain is assumed to extend significantly so that the value of the residual electric field intensity on the boundary $\partial\Omega$ is zero (Dirichlet boundary conditions). In this development, absorbing boundaries conditions like the Perfectly Matched Layer method (Berenger, 1994; Johnson, 2021; Taflove and Hagness, 2005) at the model edges were not implemented, since initial tests demonstrated that the solution is characterized by low level errors, when compared to the analytical solution.

Equation (1) can be expanded in the following system of the partial differential equations

$$C_1 \frac{\partial^2 E}{\partial x^2} + C_2 \frac{\partial^2 E}{\partial y^2} + C_3 \frac{\partial^2 E}{\partial z^2} + C_4 \frac{\partial^2 E}{\partial x \partial y} + C_5 \frac{\partial^2 E}{\partial x \partial z} + C_6 \frac{\partial^2 E}{\partial y \partial z} + C_7 E = F \quad (2)$$

where the coefficient matrices have the form

$$C_1 = -\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad C_2 = -\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ C_3 = -\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$C_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad C_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad C_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$C_7 = i\omega\mu_0\sigma \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{and } F = \begin{pmatrix} F_1 \\ F_2 \\ 0 \end{pmatrix}, \text{ with } F_1 = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_0)E_x^p \text{ and } F_2 = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_0)E_y^p.$$

2.2. Compact finite difference discretization

The discretization method utilized for the numerical solution of equation (2) is hinged upon the standard Yee grid type (Fig. 1; Yee, 1966), storing the scalar variable conductivity to the cell center and the rest of the vector quantities to the cell edges.

The considered physical domain $[0, L_x] \times [0, L_y] \times [0, L_z]$ is subdivided into cells by setting N_x , N_y and N_z subintervals in each direction, where $h_x = \frac{L_x}{N_x}$, $h_y = \frac{L_y}{N_y}$ and $h_z = \frac{L_z}{N_z}$ the respective discretization step sizes. The vertices of each cell are (x_i, y_j, z_k) , where $x_i = ih_x$, $y_j = jh_y$ and $z_k = kh_z$ for $0 \leq i \leq N_x$, $0 \leq j \leq N_y$ and $0 \leq k \leq N_z$. Midpoints on the vertical and horizontal edges and at the centers of the cell faces are defined by the associated midpoints on each spatial direction denoted by $x_{i-\frac{1}{2}} = (i - \frac{1}{2})h_x$, $y_{j-\frac{1}{2}} = (j - \frac{1}{2})h_y$ and $z_{k-\frac{1}{2}} = (k - \frac{1}{2})h_z$ for $0 < i \leq N_x$, $0 < j \leq N_y$ and $0 < k \leq N_z$.

The discrete finite difference form of equation (2) involves the second order derivatives of the electric E field components. Assuming the vector notation for discrete quantities, the first discrete equation is defined in the \vec{E}_x positions, while the second and third equations are defined in the \vec{E}_y and \vec{E}_z positions, accordingly. Their values can be approximated with the application of an appropriate for the staggered grid type high order numerical scheme. The latter implies that numerical schemes have to be considered for derivative approximations at different positions than those where the function values are available. Each of the three discrete equations in (2) is defined at different grid positions. As presented in Fig. 1, the $E \approx \vec{E} = (\vec{E}_x, \vec{E}_y, \vec{E}_z)$ residual electric field approximation components are located in the middle of the cell edges. The discrete background electric field components \vec{E}_x^p and \vec{E}_y^p as well as the discrete conductivities $\sigma(x, y, z) = (\vec{\sigma}_x, \vec{\sigma}_y, \vec{\sigma}_z)$ and σ_0 follow the discretization pattern of \vec{E} .

Compact, Padé-type finite difference schemes (Gaitonde and Visbal, 1998; Hirsh, 1975; Lele, 1992), are used to obtain fourth-order accuracy for the derivatives of the electric field. The approximation scheme for the second-order derivatives on staggered grids is derived by the application of the first derivative approximation twice. In case of one-dimensional staggered grid type, the evaluation of the first derivative of a function φ is possible with the following compact fourth order formula (Gaitonde and Visbal, 1998) assuming discretization step h for n subintervals

$$h(a\varphi'_{i-1} + \varphi'_i + a\varphi'_{i+1}) = \alpha \left(\varphi_{i+\frac{1}{2}} + \varphi_{i-\frac{1}{2}} \right) + \frac{b}{3} \left(\varphi_{i+\frac{3}{2}} + \varphi_{i-\frac{3}{2}} \right) + O(h^4) \quad (3)$$

where a has an arbitrary chosen value, $\alpha = \frac{9-6a}{8}$ and $b = \frac{-1+22a}{8}$ (Gaitonde

and Visbal, 1998). This relation involves derivative values φ' computed on the cell edge corner, while the function values φ are computed on the cell edge centers. Choosing $a = \frac{1}{22}$, giving $b = 0$, the above fourth-order formula (3) results to the approximation

$$\varphi'_{i-1} + 22\varphi'_i + \varphi'_{i+1} = \frac{24}{h} \left(\varphi_{i+\frac{1}{2}} - \varphi_{i-\frac{1}{2}} \right) \quad (4)$$

The respective scheme used in the case of computing the derivative values on the cell edge centers comprises with the following approximation formula

$$\varphi'_{i-\frac{1}{2}} + 22\varphi'_{i+\frac{1}{2}} + \varphi'_{i+\frac{3}{2}} = \frac{24}{h} (\varphi_{i+1} - \varphi_i) \quad (5)$$

for the interval nodes $i = 1, \dots, n-2$ and for the nodes close to the boundaries

$$24 \left(\varphi'_{\frac{1}{2}} + \varphi'_{\frac{3}{2}} \right) = \frac{1}{h} (-10\varphi_1 + 36\varphi_2 - 6\varphi_3 + \varphi_4) \quad (6)$$

$$24 \left(\varphi'_{n-\frac{1}{2}} + \varphi'_{n-\frac{3}{2}} \right) = \frac{1}{h} (10\varphi_{n-1} - 36\varphi_{n-2} + 6\varphi_{n-3} - \varphi_{n-4}) \quad (7)$$

The application of the above discretization scheme in equation (2) results in the block structured linear system of equations

$$A\vec{E}_x + B\vec{E}_y + C\vec{E}_z = \vec{F}_1 \quad (8)$$

$$D\vec{E}_x + Z\vec{E}_y + K\vec{E}_z = \vec{F}_2 \quad (9)$$

$$M\vec{E}_x + N\vec{E}_y + P\vec{E}_z = \vec{0} \quad (10)$$

where $\vec{F}_1 = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_0)\vec{E}_x^p$, $\vec{F}_2 = -i\omega\mu_0(\sigma - \sigma_0)\vec{E}_y^p$ and $\vec{E}_x, \vec{F}_1 \in \mathbb{C}^{N_1 \times 1}$, $\vec{E}_y, \vec{F}_2 \in \mathbb{C}^{N_2 \times 1}$, $\vec{E}_z \in \mathbb{C}^{N_3 \times 1}$.

The above linear system of equations (8)–(10) can be rewritten in the form

$$U\vec{E} = \vec{b} \quad (11)$$

where,

$$U = \begin{pmatrix} A & B & C \\ D & Z & K \\ M & N & P \end{pmatrix}, \vec{E} = \begin{pmatrix} \vec{E}_x \\ \vec{E}_y \\ \vec{E}_z \end{pmatrix} \text{ and } \vec{b} = \begin{pmatrix} \vec{F}_1 \\ \vec{F}_2 \\ \vec{0} \end{pmatrix}. \text{ The coefficient}$$

matrices of the system have the following mathematical expressions

$$A = I_1 \vec{q}_1 - \frac{24}{h_y^2} S_4^{-1} B_4 S_3^{-1} B_3 - \frac{24}{h_z^2} S_6^{-1} B_6 S_5^{-1} B_5, \quad (12)$$

$$A \in \mathbb{C}^{N_1 \times N_1}$$

$$B = \frac{24}{h_x h_y} S_2^{-1} B_2 S_1^{-1} B_1, B \in \mathbb{C}^{N_1 \times N_2} \quad (13)$$

$$C = \frac{24}{h_x h_z} S_8^{-1} B_8 S_7^{-1} B_7, C \in \mathbb{C}^{N_1 \times N_3} \quad (14)$$

$$D = \frac{24}{h_x h_y} S_{10}^{-1} B_{10} S_9^{-1} B_9, D \in \mathbb{C}^{N_2 \times N_1} \quad (15)$$

$$Z = I_2 \vec{q}_2 - \frac{24}{h_x^2} S_{12}^{-1} B_{12} S_{11}^{-1} B_{11} - \frac{24}{h_z^2} S_{14}^{-1} B_{14} S_{13}^{-1} B_{13}, \quad (16)$$

$$Z \in \mathbb{C}^{N_2 \times N_2}$$

$$K = \frac{24}{h_y h_z} S_{16}^{-1} B_{16} S_{15}^{-1} B_{15}, K \in \mathbb{C}^{N_2 \times N_3} \quad (17)$$

$$M = \frac{24}{h_x h_z} S_{18}^{-1} B_{18} S_{17}^{-1} B_{17}, M \in \mathbb{C}^{N_3 \times N_1} \quad (18)$$

$$N = \frac{24}{h_y h_z} S_{20}^{-1} B_{20} S_{19}^{-1} B_{19}, N \in \mathbb{C}^{N_3 \times N_2} \quad (19)$$

$$P = I_3 \vec{q}_3 - \frac{24}{h_x^2} S_{18}^{-1} B_{18} S_{17}^{-1} B_{17} - \frac{24}{h_y^2} S_{20}^{-1} B_{20} S_{19}^{-1} B_{19}, \quad (20)$$

$$P \in \mathbb{C}^{N_3 \times N_3}$$

where $N_1 = N_x(N_y-1)(N_z-1)$, $N_2 = (N_x-1)N_y(N_z-1)$ and $N_3 = (N_x-1)(N_y-1)N_z$, I_1 , the identity matrix of size $N_1 \times N_1$, I_2 the identity matrix of size $N_2 \times N_2$, I_3 the identity matrix of size $N_3 \times N_3$, $\vec{q}_1 = i\omega\mu_0 \vec{\sigma}_x$, $q_1 \in \mathbb{C}^{N_1 \times 1}$, $\vec{q}_2 = i\omega\mu_0 \vec{\sigma}_y$, $q_2 \in \mathbb{C}^{N_2 \times 1}$ and $\vec{q}_3 = i\omega\mu_0 \vec{\sigma}_z$, $q_3 \in \mathbb{C}^{N_3 \times 1}$.

2.3. Iterative solution of the linear system

The approximation of the residual electric field intensity \vec{E} using the compact finite difference discretization scheme described above is achieved with the solution of the block linear system (11) using the BiCG-STAB iterative method. The main complex matrix U comprises of block matrices that are large and sparse with a particular block structure, indicating towards the application of an iterative method for the efficient solution. The BiCG-STAB is a popular selection in such kind of linear systems; as a Krylov subspace method it only involves matrix-vector operations, avoiding matrix-matrix operations of the non-symmetric block coefficient matrices. In our design, there are two distinct classes of basic matrices and each matrix emerging from the finite difference numerical scheme belongs to one: the S_i class of the matrices and the B_i class, for $i = 1, \dots, 20$, both matrix classes contained in equations 12–20. The structure and dimension of each one of those matrices is connected to the application of the discretization scheme formulas (4), (5), (6) and (7) on system of equation (2). The S_i class contains square coefficient matrices, each one based on one of the following core square matrices: S_* , S_*^l , S_{**} or S_{**}^l , where

$$S_* = \begin{pmatrix} 22 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 1 & 22 & 1 & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & 22 & 1 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 1 & 22 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$S_*^l = \begin{pmatrix} 22I & I & O & \dots & \dots & O \\ I & 22I & I & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & I & 22I & I & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & O \\ \vdots & \dots & O & I & 22I & I \\ O & \dots & \dots & O & I & 22I \end{pmatrix}$$

$$S_{**} = \begin{pmatrix} 24 & 24 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 1 & 22 & 1 & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & 22 & 1 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \dots & 0 & 1 & 22 & 1 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 24 & 24 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$S_{**}^l = \begin{pmatrix} 24I & 24I & O & \dots & \dots & O \\ I & 22I & I & \vdots & \vdots & \vdots \\ O & I & 22I & I & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & O \\ \vdots & \dots & O & I & 22I & I \\ O & \dots & \dots & O & 24I & 24I \end{pmatrix}$$

For instance, coefficient matrices S_7, S_8 have the following structure and dimensions:

$$S_7 = \text{diag}(S_{**}, S_{**}, \dots),$$

$$S_7 \in \mathbb{R}^{N_x(N_y-1)N_z \times N_x(N_y-1)N_z}, S_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x}$$

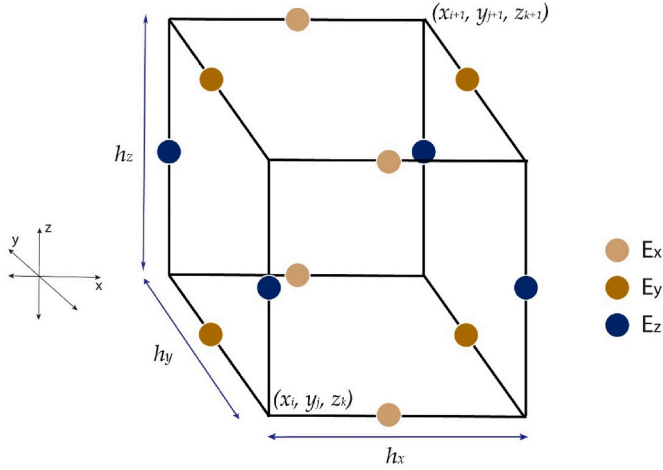


Fig. 1. The staggered grid arrangements of residual electric field intensity E approximation components at every computing cell (Yee, 1966).

$$S_8 = \text{diag}(S'_x, S'_y, \dots),$$

$$S_8 \in \mathbb{R}^{N_x(N_y-1)(N_z-1) \times N_x(N_y-1)(N_z-1)},$$

$$S'_x \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times (N_z-1)}, I \in \mathbb{R}^{N_x(N_y-1) \times N_x(N_y-1)}$$

On the other hand, the B_i class contains non-square matrices, whose dimensions depend on the direction in which the scheme is applied. Each B_i class matrix is formed based on core matrices B_* , B_*^I , B_{**} and B_{**}^I where

$$B_* = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & -1 & 1 & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix},$$

$$B_*^I = \begin{pmatrix} -I & I & O & \dots & \dots & O \\ O & -I & I & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & O & -I & I & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & O \\ \vdots & \dots & \dots & O & -I & I \end{pmatrix} \quad (23)$$

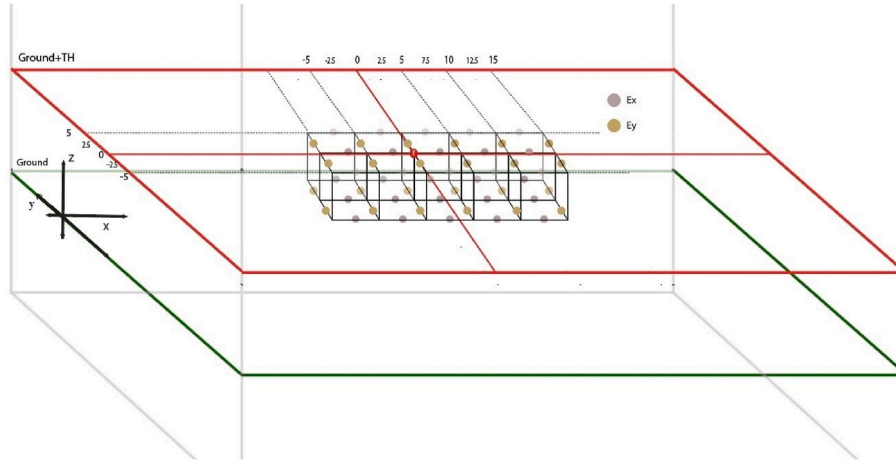


Fig. 2. Components E_x , E_y in a uniformly partitioned grid. TH indicates transmitter height; T represents the transmitter's position. The mesh shown is an indicative illustration of the cells as emerged from the discretization of the cube in the region between the ground and the VMD source. The mesh used is for the whole cube during the discretization.

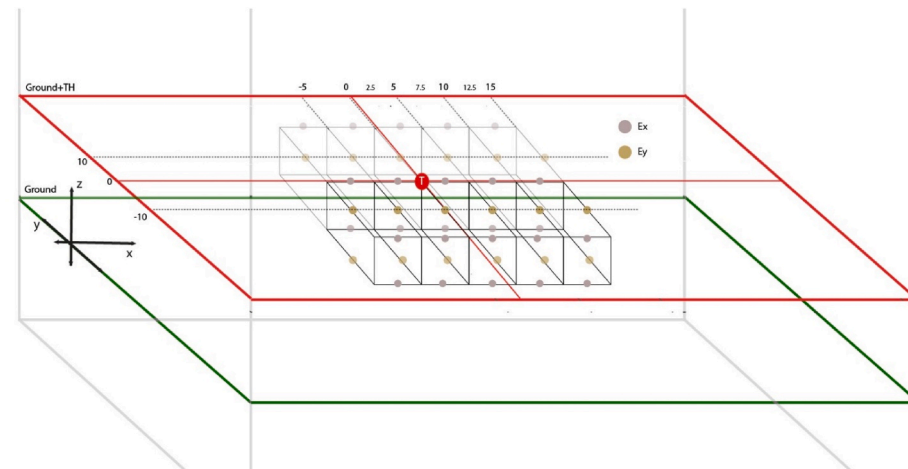


Fig. 3. Components E_x , E_y in a non-uniformly partitioned grid. TH indicates transmitter height; T represents the transmitter's position. The mesh shown is an indicative illustration of the cells as emerged from the discretization of the cube in the region between the ground and the VMD source. The mesh used is for the whole cube during the discretization.

$$\begin{aligned}
B_{**} &= \begin{pmatrix} -10 & 36 & -6 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -24 & 24 & 0 & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ 0 & -24 & 24 & 0 & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & 0 & -24 & 24 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & 0 & -24 & 24 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 6 & -36 & 10 \end{pmatrix}, \\
B'_{**} &= \begin{pmatrix} -10I & 36I & -6I & I & O & \dots & O \\ -24I & 24I & O & \dots & \dots & \dots & \vdots \\ O & -24I & 24I & O & \dots & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \dots & \dots & O & -24I & 24I & O \\ \vdots & \dots & \dots & O & -24I & 24I & O \\ O & \dots & O & -I & 6I & -36I & 10I \end{pmatrix}
\end{aligned} \quad (24)$$

For instance, matrices B_7, B_8 have the following structure and dimensions:

$$B_7 = \text{diag}(B_{**}, B_{**}, \dots),$$

$$B_7 \in \mathbb{R}^{N_z(N_y-1)N_z \times (N_z-1)(N_y-1)N_z}, \quad B_{**} \in \mathbb{R}^{N_z \times (N_z-1)}$$

$$B_8 = \text{diag}(B'_*, B'_*, \dots),$$

$$B_8 \in \mathbb{R}^{N_z(N_y-1)(N_z-1) \times N_z(N_y-1)N_z},$$

$$B'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times N_z}, \quad I \in \mathbb{R}^{N_z(N_y-1) \times N_z(N_y-1)}$$

Extensive details of the structure and dimensions of all the S_i and B_i matrices are included in the appendix.

Every basic operation that involves elements (blocks) of the main matrix in the iterative method is performed as a matrix-vector multiplication involving the respective B_i matrix and a linear system solution with the respective coefficient matrix S_i . The design of matrix-free algorithms for those two basic linear algebra computations allows the whole computation of the proposed solver to be performed without storing the elements of each matrix in equations 12–20. As the structure in each S_i matrix follows a different pattern, the matrix-free linear system solution methods differ accordingly. Linear systems of S_i coefficient matrices that consist of a core matrix as presented in (21) -either S_* or S'_* - can be efficiently solved on parallel computing architectures implementing the matrix-free Cyclic Reduction (CR) algorithms based on the Fourier method (Gander and Golub, 1997), while linear systems of S_i coefficient matrices that consist of a core matrix as presented in (22) -either S_{**} or S'_{**} - can be efficiently solved with the implementation of matrix-free algorithms based on the classic Cyclic Reduction method.

3. Algorithm and implementation

The proposed numerical methodology simulating the residual electric field intensity $\vec{E}(x, y, z)$ can be expressed with the algorithms that follow. In particular, in algorithm 1, the input information of the background electric field intensity $\vec{E}_p(x, y, z)$ is inserted through vectors \vec{F}_1, \vec{F}_2 into the iterative method. Algorithm 2 presents the steps of the BiCGSTAB method used in our implementation, while algorithm 3 presents the matrix-vector multiplication procedure that comes within. Every procedure presented herein involves the basic linear algebra operation of multiplication between a matrix defined in terms of equations 12–20 and a vector. Algorithm 4 presents multiplication with matrix C. In every other matrix case, the operation is performed in a similar way. The MULT-B procedure implements the matrix-vector multiplication with matrices from B_i class, $i = 1, \dots, 20$ (dimensions and structure of which are explicitly defined in (A.2)). This operation can be performed in parallel as a matrix-free one as presented in algorithm5. The basic linear operation of the linear system solution with a coefficient matrix from S_i class, $i = 1, \dots, 20$

(dimensions and structure of which are explicitly defined in (A.1)) is SOLVE-S and is also a matrix-free operation.

Algorithms 6 and 7 present the application of the two Cyclic Reduction solvers. In case of the matrix definition algorithm6 implements the Fourier method, otherwise the solution task is carried out using the classic algorithm 8 of Cyclic Reduction solution process. The Cyclic Reduction solver algorithm consists of two phases presented in algorithms 8 and 9, that are properly adjusted for our custom-structured linear systems. In the first one, a forward reduction process is applied for the evaluation of the right-hand side and the coefficient values for every reduced linear system. Then, a backward reduction process is applied, for the gradual evaluation of the linear system's solution.

Algorithm 1. for Simulation of Residual Electric Field Intensity $\vec{E}(x, y, z)$ given the Background $\vec{E}^p(x, y, z)$ Field

1. $[E_x, E_y, E_z] \leftarrow \text{MainSolver}(E_x^p, E_y^p, \sigma, \sigma_0, f)$
2. $[F_1, F_2] \leftarrow \text{makeF}(E_x^p, E_y^p, \sigma, \sigma_0, f)$
3. $b \leftarrow \text{makeb}(F_1, F_2)$
4. $[E_x, E_y, E_z] \leftarrow \text{BiCGSTAB-U}(b)$
5. **end**

Algorithm 2. for the Solution $U\vec{E} = \vec{b}$ with BiCG-STAB-U

1. **procedure** BiCGSTAB-U(b)
2. $x \leftarrow b$
3. $\hat{r} \leftarrow b - U\text{-Mult}(x) \quad r = b - Ux$
4. $p \leftarrow r$
5. $r' \leftarrow r$
6. **while** $\|r\|$ is not small enough **do**
7. $v \leftarrow U\text{-Mult}(p) \quad v = Up$
8. $a \leftarrow \frac{\langle r, r' \rangle}{\langle v, r' \rangle}$
9. $s \leftarrow r - av$
10. $t \leftarrow U\text{-Mult}(s) \quad t = Us$
11. $\omega \leftarrow \frac{\langle s, t \rangle}{\langle t, t \rangle}$
12. $x \leftarrow x + ap + \omega s$
13. $r_0 \leftarrow r$
14. $r \leftarrow s - \omega t$
15. $p \leftarrow r_0 + \frac{a\langle r, r' \rangle}{\omega\langle r_0, r' \rangle} (p - \omega v)$
16. **return** x

Algorithm 3. for the Evaluation $\vec{g} = U\vec{t}$ with U-MULT

1. **procedure** U-MULT(t)
2. $g_{x_1} \leftarrow \text{matrixVector-A}(t_{1:N_1})$
3. $g_{y_1} \leftarrow \text{matrixVector-B}(t_{N_1+1:N_2})$
4. $g_{z_1} \leftarrow \text{matrixVector-C}(t_{N_2+1:N_3})$
5. $g_{x_2} \leftarrow \text{matrixVector-D}(t_{1:N_1})$
6. $g_{y_2} \leftarrow \text{matrixVector-Z}(t_{N_1+1:N_2})$
7. $g_{z_2} \leftarrow \text{matrixVector-K}(t_{N_2+1:N_3})$
8. $g_{x_3} \leftarrow \text{matrixVector-M}(t_{1:N_1})$
9. $g_{y_3} \leftarrow \text{matrixVector-N}(t_{N_1+1:N_2})$
10. $g_{z_3} \leftarrow \text{matrixVector-P}(t_{N_2+1:N_3})$
11. $g_{1:N_1} \leftarrow g_{x_1} + g_{x_2} + g_{x_3}, g_{N_1+1:N_2} \leftarrow g_{y_1} + g_{y_2} + g_{y_3}, g_{N_2+1:N_3} \leftarrow g_{z_1} + g_{z_2} + g_{z_3}$
12. **return** g

Algorithm 4. for the Evaluation $\vec{s} = C\vec{t}$.

1. **procedure** matrixVector-C(t)
2. $s \leftarrow \text{MULT-B}(t, 7, N_z(N_y - 1))$ evaluate: $s = B_7 t$
3. $t \leftarrow \text{SOLVE-CR}(s, 7, N_z(N_y - 1), N_y - 1, N_x - 1)$
4. $s \leftarrow \text{MULT-B}(t, 8, N_z - 1)$ evaluate: $s = B_8 t$
5. $t \leftarrow \text{SOLVE-FCR}(s, 8, N_z - 1)$ solve: $S_8 t = s$
6. $s \leftarrow \frac{24}{h_x h_z} t$
7. **return** s

Algorithm 5. for Matrix Free Evaluation of $\vec{s} = B_k \vec{t}$.

1. **procedure** MULT-B(t, k, n)
2. **if** k even **then**
3. **for** $i = 1, \dots, n$ **do in parallel**
4. $s_i \leftarrow t_{i+1} - t_i$
5. **else**
6. $s_i \leftarrow -10t_1 + 36t_2 - 6t_3 + t_4$
7. **for** $i = 2, \dots, n-1$ **do in parallel**
8. $s_i \leftarrow 24(t_i - t_{i-1})$
9. $s_n \leftarrow 10t_{n-1} - 36t_{n-2} + 6t_{n-3} - t_{n-4}$
10. **return** s

Algorithm 6. for Matrix Free Solution of $S_k \vec{x} = \vec{t}$ with Fourier Cyclic Reduction Method

1. **procedure** SOLVE-FCR(t, k, n)

2. $\rho \leftarrow \sqrt{\frac{2}{n+1}}$
3. **for** $i = 1, \dots, n$ **do**
4. **for** $j = 1, \dots, n$ **do**
5. $q_j \leftarrow \sin(\frac{ij\pi}{n+1}) \cdot \rho \cdot t_j$
6. $q_i \leftarrow \frac{1}{22 + 2 \cos(\frac{i\pi}{n+1})} \cdot q_i$
7. **for** $j = 1, \dots, n$ **do in parallel**
8. $x_j \leftarrow \sin(\frac{ij\pi}{n+1}) \cdot \rho \cdot q_i$
9. **return** x

Algorithm 7. for Matrix Free Solution of $S_k \vec{x} = \vec{t}$ with Cyclic

Reduction Method

Algorithm 8. for the Forward Phase of the Cyclic Reduction Method

1. **procedure** SOLVE-CR(t, n, l, m_1)
2. $[r, val] \leftarrow \text{FORWARD-CR}(t, n, l, m_1)$
3. $x \leftarrow \text{BACKWARD-CR}(r, n, l, m_1, val)$
4. **return** x

1. **procedure** FORWARD-CR(q, n, l, m_1)
2. $k \leftarrow 5 \log_2(l)$
3. **for** $i = 1, \dots, n$ **do in parallel**
4. $r_i \leftarrow q_i$
5. **for** $is = 1, \dots, n$ **do in parallel**
6. $a_1 \leftarrow 24, b_1 \leftarrow 24, c_1 \leftarrow 0, a_l \leftarrow 24, b_l \leftarrow 0, c_l \leftarrow 24$
7. **for** $j = 2, \dots, l-1$ **do in parallel**
8. $a_j \leftarrow 24, b_j \leftarrow -1, c_j \leftarrow 1$
9. **for** $j = 1, \dots, k$ **do**
10. $j_1 \leftarrow \frac{2^j - 1}{2^{j-1}}, j_2 \leftarrow \frac{2^{j-1} - 1}{2^{j-2}}, m \leftarrow \left\lfloor \frac{l}{2^j} \right\rfloor$
11. **for** $i = 1, \dots, m$ **do**
12. $s \leftarrow \frac{c_{2i}}{a_{2i-1}}$
13. **if** $i = m$ **then**
14. $t \leftarrow 0, val_{5(j-1)+3} \leftarrow a_{2i} - s \cdot b_{2i-1}$
15. **else**
16. $t \leftarrow \frac{b_{2i}}{a_{2i+1}}$
17. **if** $i = 1$ **or** $i = 2$ **and** $j \neq k$ **then**
18. $ip \leftarrow 5(j-1) + i$
19. $val_{ip} \leftarrow a_{2i} - s \cdot b_{2i-1} - t \cdot c_{2i+1}$
20. **if** $i = 1$ **then**
21. $val_{5(j-1)+4} \leftarrow -t \cdot b_{2i+1}, c_i \leftarrow 0$
22. $a_i \leftarrow val_{5(j-1)+1}, b_i \leftarrow val_{5(j-1)+4}$
23. **else if** $i = m$ **then**
24. $val_{5(j-1)+5} \leftarrow -s \cdot c_{2i+1}, b_i \leftarrow 0$
25. $a_i \leftarrow val_{5(j-1)+3}, c_i \leftarrow val_{5(j-1)+5}$
26. **else**
27. $a_i \leftarrow val_{5(j-1)+2}, b_i \leftarrow val_{5(j-1)+4}$
28. $c_i \leftarrow b_i$
29. **if** $i = m$ **then**
30. $r \left[j_1 \cdot l + \frac{l}{2^j} + (is-1)(2l-1)-1 \cdot m_1 + 1 \right] \leftarrow r \left[j_1 \cdot l + (is-1)(2l-1)-1 \cdot m_1 + 1 \right] -$
31. $s \cdot r \left[(j_1 \cdot l + (is-1)(2l-1)-2) \cdot m_1 + 1 \right]$
32. **else**
33. $r \left[(j_1 \cdot l + i + (is-1)(2l-1)-1) \cdot m_1 + 1 \right] \leftarrow r \left[j_1 \cdot l + 2i - 1 + (is-1)(2l-1)-1 \cdot m_1 + 1 \right] -$
34. $s \cdot r \left[(j_1 \cdot l + 2i - 2 + (is-1)(2l-1)-2) \cdot m_1 + 1 \right] - t \cdot r \left[(j_1 \cdot l + 2i + (is-1)(2l-1)-2) \cdot m_1 + 1 \right]$
35. $val_{5(k-1)+1} \leftarrow val_{5(k-1)+3}, val_{5(k-1)+3} \leftarrow 0$
36. **return** r, val

Algorithm 9. for the Backward Phase of the Cyclic Reduction Method

analogous to those of a uniformly discretized grid but trading on significantly less memory and execution time. In order to substantiate

```

1. procedure BACKWARD-CR( $r, n, l, m_1, val$ )
2.    $k \leftarrow 5 \log_2(l)$ 
3.   for  $is = 1, \dots, n$  do in parallel
4.      $x_{(is-l-1)m_1+1} \leftarrow \frac{1}{val_{5(k-1)+1}} r_{is(2l-1)}$ 
5.     for  $j = k, \dots, 1$  do
6.        $j_2 \leftarrow \frac{2^{j-1}-1}{2^{j-1}}$ 
7.        $ik \leftarrow 0$ 
8.       for  $i = 2^{j-1}, \dots, l - 2^{j-1}$  with step  $2^j$  do
9.          $ik \leftarrow ik + 1$ 
10.         $ix \leftarrow ((is-1) \cdot l + i - 1) \cdot m_1 + 1$ 
11.         $iv \leftarrow 5(j-2) + 1$ 
12.        if  $i = 1$  or  $j = 1$  then
13.           $x_{ix} \leftarrow r_{(2l-1)(is-1)m_1+1} - x_{(is-1)l+2m_1+1}$ 
14.        else if  $i = 2^{j-1}$  then
15.           $x_{ix} \leftarrow \frac{1}{val_{iv}} (r_{(j_2 l + ik - 1 + (is-1)(2l-1))m_1+1} - val_{iv+3} x_{(i-1+(is-1)l+2^{j-1})m_1+1})$ 
16.        else if  $i = l - 2^{j-1}$  and  $j = 2$  then
17.           $x_{ix} \leftarrow \frac{1}{val_2} (r_{(\frac{3l}{2}-1+(is-1)(2l-1))m_1+1} - val_4 (x_{(i-3+(is-1)l)m_1+1} - x_{(i+1+(is-1)l)m_1+1}))$ 
18.        else if  $j = 1$  then
19.           $x_{ix} \leftarrow \frac{1}{22} (r_{(i-1+(is-1)(2l-1))m_1+1} - x_{(i-2+(is-1)l)m_1+1} - x_{(i+(is-1)l)m_1+1})$ 
20.        else
21.           $x_{ix} \leftarrow \frac{1}{val_{iv+1}} (r_{(j_2 l + (is-1)(2l-1) + 2(ik-1))m_1+1} - val_{iv+3} (x_{(i-1-2^{j-1}+(is-1)l)m_1+1} - x_{(i-1-2^{j-1}+(is-1)l)m_1+1}))$ 
22.   return  $x$ 

```

4. Results

The area considered for the realizations is a 640m × 640m × 640m cube. The solver has been designed to handle different discretization h in each direction, therefore tests have been performed in order to examine its efficiency using uniform and non-uniform grids (Figs. 2 and 3). Discretization has been performed across the 3D grid and the solution is obtained in every point of it (above and below the surface). However, both Figs. 2 and 3 indicatively present cells and components in a region between the ground and the VMD source, which is placed above the surface of the Earth. We will compare the solutions above the Earth's surface where analytical solutions exist (for homogeneous half-space) and where the geophysical measurements are normally taken. Our examples are focused on the helicopter or drone born electromagnetic transmitter-receiver techniques where there is one transmitter and one or several receivers at similar heights.

The initial results obtained from both occasions, indicate that using fine discretization in x and z directions and a coarser one towards y direction leads on to promising and potentially acceptable results,

the claim, we have opted for a half-space test case where the frequency is equal to 3 kHz while the background conductivity and the foreground subsurface conductivity values were equal to 0.001S/m and 0.01S/m respectively. The transmitter was placed at $x = y = 0$ and 22m above the ground and three cases of a uniform discretization were utilized, namely cell's sides lengths of 20m, 10m and 5m. The numerical and analytical real parts of the total electric field E_x^T and E_y^T are displayed in Figs. 4 and 5, and then the relative errors for both real and imaginary parts are presented in Figs. 6 and 7.

The analytical values of the electrical field vary with the cell size h , since they are estimated at different positions of the uniform grid (Fig. 2), namely, at $(x, y = 5, z = 22)$, $(x, y = 10, z = 22)$ and $(x, y = 20, z = 22)$ for $h = 5, 10$ and 20m respectively for E_x^T (Fig. 4). Accordingly, for E_y^T the corresponding estimation nodes of the grid are $(x, y = 2.5, z = 22)$, $(x, y = 5, z = 22)$ and $(x, y = 10, z = 22)$ for $h = 5, 10$ and 20m respectively (Fig. 5).

Analytical parts of the electric fields, here and throughout the whole paper, denote the electric field values estimated with the Hankel Transform (Ward and Hofmann, 1987; Minsley, 2011). For this, we

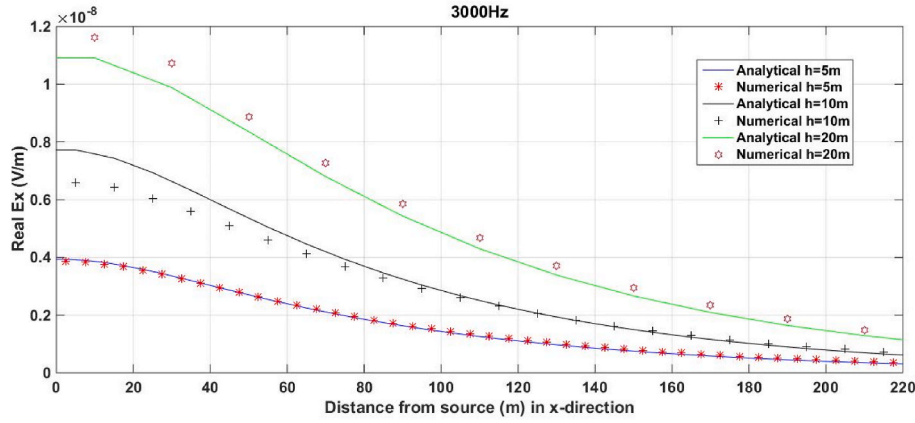


Fig. 4. Real part of E_x^T in a uniform grid with cell's side h . The electric field is estimated in various positions at $(x, y = 5, z = 22)$ for $h = 5$ m (magenta asterisk), at $(x, y = 10, z = 22)$ for $h = 10$ m (black plus sign) and at $(x, y = 20, z = 22)$ for $h = 20$ m (black hexagram).

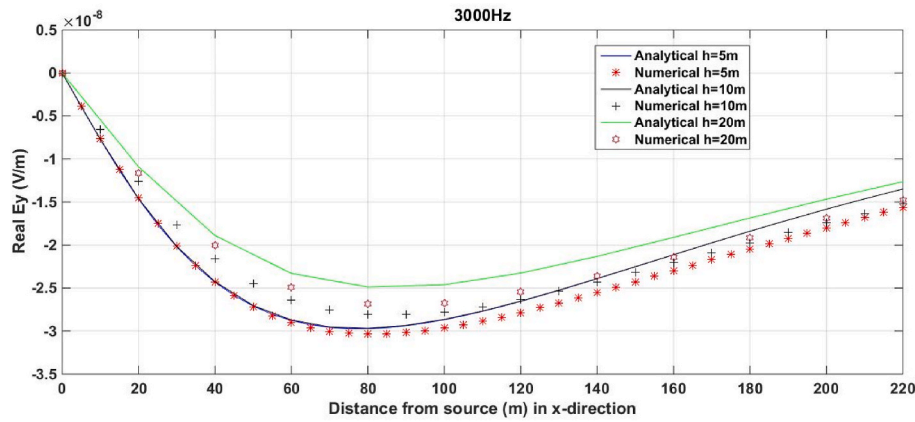


Fig. 5. Real part of E_y^T in a uniform grid with cell's side h . The electric field is estimated in various positions at $(x, y = 2.5, z = 22)$ for $h = 5$ m (magenta asterisk), at $(x, y = 5, z = 22)$ for $h = 10$ m (black plus sign) and at $(x, y = 10, z = 22)$ for $h = 20$ m (black hexagram).

modified the MATLAB algorithm of [Hanssens et al. \(2019\)](#) to compute the electric field values. Figs. 4 and 5, present only the real part of the electric field components, as it completely depends on the secondary. Conductivity of air was set to 10^{-8} S/m.

Figs. 6 and 7 indicate that, as expected, the finer gridding ($h = 5$ m) gives lower error values of the numerical estimations compared to the analytical solution. In general, we can also observe that the imaginary part exhibits significantly lower error values. This is due to its heavy dependence on the electrical field generated by the transmitter. Consequently, we compare the numerical results in the prementioned case, for the electric field component in y -direction in a uniform (when $h_x = 5$ m) and a non-uniform (when $h_x = 5$ m, $h_y = 20$ m, $h_z = 5$ m) discretization against the respective analytical solutions in Fig. 8. The corresponding relative errors for both components are presented in Figs. 9 and 10.

From Figs. 9 and 10, one can derive the conclusion that the uniform grid implementation appears to give solutions with lower than 5% for a relatively large distance from the source (~ 170 m) while the non-uniform grid implementation appears to give solutions with lower than 5% for a relatively smaller distance from the source (~ 120 m), which is practically efficient for electromagnetic geophysical applications.

Finally, we provide Figs. 11 and 12 for the relative errors, which exhibit the gradual improvement of the numerical solution in the non-uniform case from a coarse ($h_x = 20$ m, $h_y = 80$ m, $h_z = 20$ m) to an intermediate ($h_x = 10$ m, $h_y = 40$ m, $h_z = 10$ m) and then to a fine grid ($h_x = 5$ m, $h_y = 20$ m, $h_z = 5$ m).

Subsequently, we further inspected the accuracy of the solver with

the comparison of the numerical to the analytical solutions in sixteen half-space test case problems in the non-uniform discretization $h_x = 5$ m, $h_y = 20$ m, $h_z = 5$ m case, exhibiting four frequency (900 Hz, 3 kHz, 10 kHz, 30 kHz) and two electrical conductivity values (0.001 S/m, 0.01 S/m) in two different height positions of the transmitter (12 m, 22 m), as presented on Table 1. Our intention was, on the one hand, to have a typical range of frequencies tested and, on the other, not to disregard the two factors by which a secondary-field approach is considered effective. The first important factor is the selection of a whole space or half-space background. Half-space is the optimum selection as it is the type of background that does not create strong secondary fields near the source ([Newman and Alumbaugh, 1995](#); [Streich, 2009](#)). Secondly, secondary fields arising from the half-space shall be sufficiently higher than those from the background, so the selection of the conductivity contrast between the background and the half-space is in the power scale of 1.

For every case the conductivity above the ground is set to 10^{-8} S/m and the source is placed at $x = y = 0$ m position. For all the implementations the residual field E of the half-space is calculated from the solver and is then added to the background field E^p to get the total electric field E^T .

The indicative relative errors of the real part of E_x^T and E_y^T components of the total electric field E^T in the abovementioned test cases of Table 1 are being presented in Figs. 13 and 14 respectively. The error displayed refers to nodes 27.5, 32.5, 37.5 and 42.5 m away from source in x -direction for E_x^T and 25, 30, 35, and 40 m away from source in x -direction also for the E_y^T component (the distinction in x and y positions is due to the discretization).

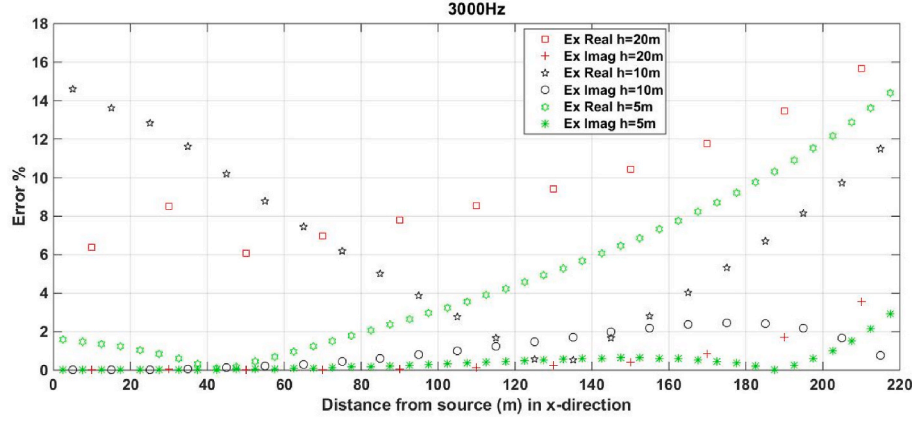


Fig. 6. Relative error of E_x^T in a uniform grid with cell's side h .

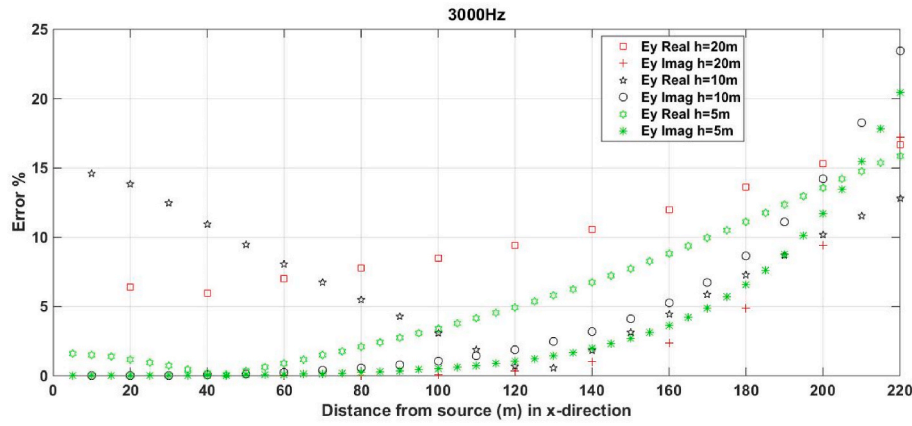


Fig. 7. Relative error of E_y^T in a uniform grid with cell's side h .

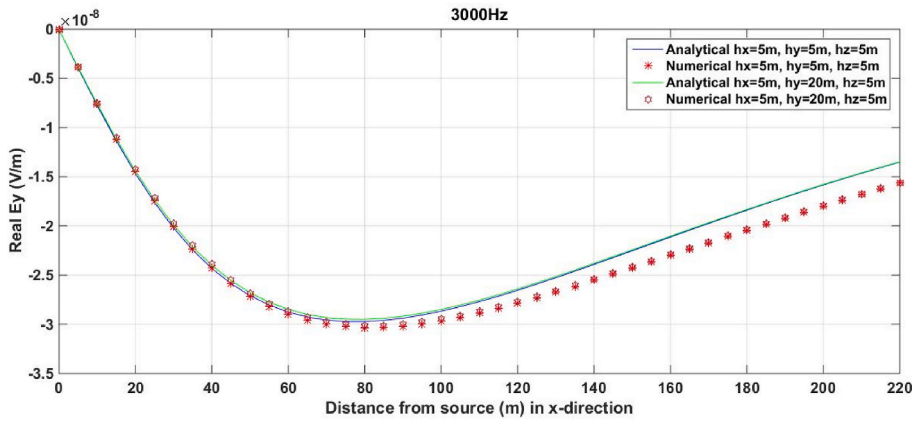


Fig. 8. Comparison of the real part of E_y^T in a fine uniform versus a non-uniform grid.

A better insight of the algorithm's performance in each test case is enabled through Figs. 15–22, which provide a combined comparison for each frequency selection between the numerical and the analytical solutions for the real part of the E_x^T and E_y^T components. A detailed comparison for the imaginary part is omitted since the relative error for every case is well below 1%; only the 3 kHz case is presented in Figs. 23 and 24.

Based on Figs. 13 and 14, the following observations can be made:

- Real E_x^T performs better overall than real E_y^T , probably due to the non-uniform grid which is coarser in the y-direction.
- The comparison of the results from cases P3-P7-P11 and P15, which differ in the characteristic frequency only, shows that the relative error for both E_x^T and E_y^T increases with frequency. The same applies for the sets of cases P1-P5-P9-P13, P2-P6-P10-P14 and P4-P8-P12-P16
- When comparing the results from pairs P9-P11 and P13-P15, which differ in the conductivity of the half-space only, the relative error for

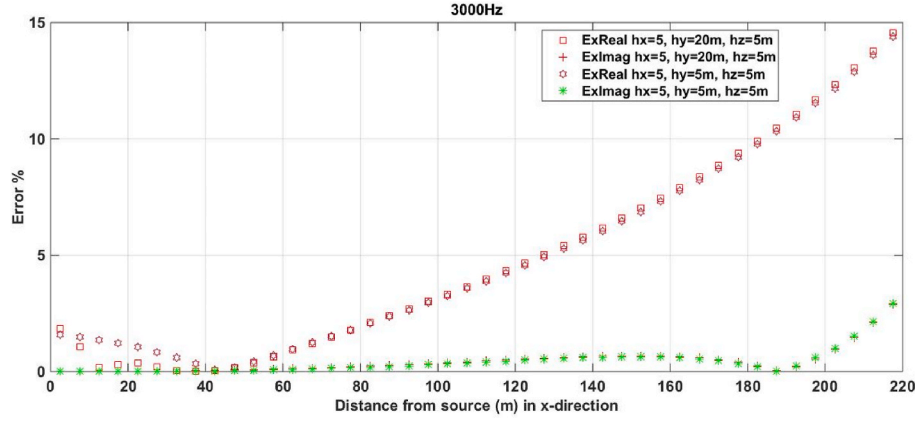


Fig. 9. Relative error of E_x^T in a fine uniform grid versus a non-uniform grid.

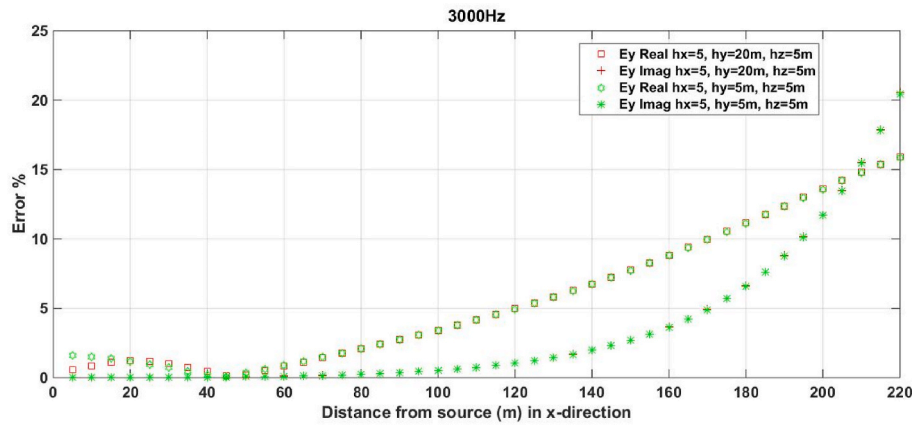


Fig. 10. Relative error of E_y^T in a fine uniform grid versus a non-uniform grid.

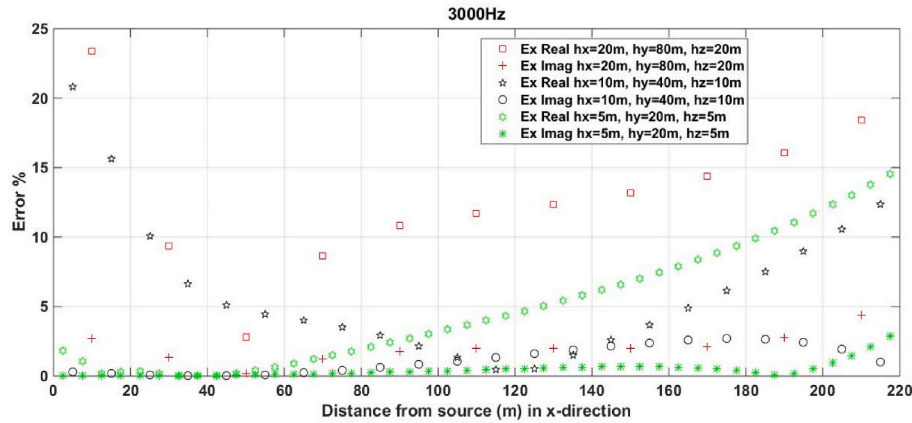


Fig. 11. Relative error of E_x^T in non-uniform grid cases.

both E_x^T and E_y^T decreases as conductivity decreases. The same applies for the sets of cases: P6-P8, P10-P12, P14-P16 and in the P1-P3, P5-P7 cases for E_y^T only

- Overall, the relative error increases as the height of the receiver increases, except for the smaller horizontal transmitter – receiver distances and in the test cases: P1-P2 and P15-P16 for E_x^T , P11-P12 and P15-P16 for E_y^T .

- Overall, the relative error decreases with the horizontal transmitter-receiver distance with the exception of cases: P3 for both E_x^T and E_y^T , P5 for E_y^T only and P9 for E_x^T only
- The case P6 exhibits the best results for both E_x^T and E_y^T , while P3, only for E_x^T and P5, only for E_y^T .

Moreover, from the figures of both the real and imaginary components of E_x^T in test cases P5, P6, P7 and P8 (Figs. 16 and 23), we observe that the imaginary part is one order higher than the real. The imaginary

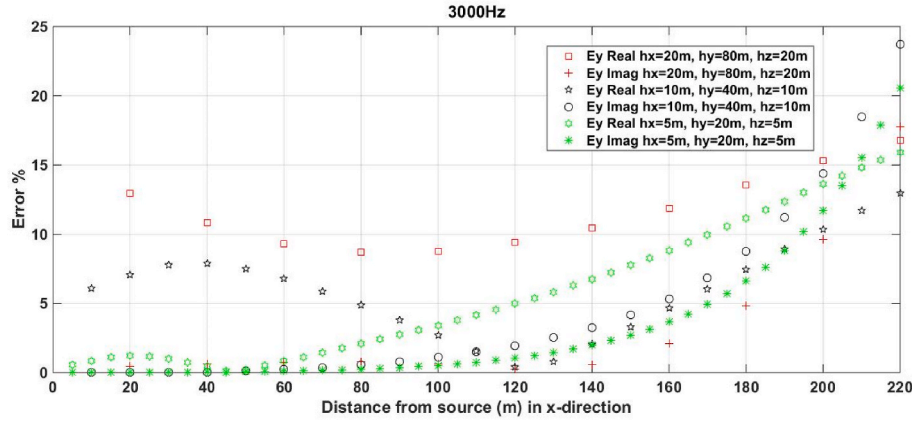


Fig. 12. Relative error of E_y^T in non-uniform grid cases.

Table 1

Test cases.

Cases	f (Hz)	Background σ (S/m)	Half-Space σ (S/m)	Transmitter's Height (m)
P1	900	0.001	0.01	12
P2		0.001	0.01	22
P3		0.01	0.1	12
P4		0.01	0.1	22
P5	3000	0.001	0.01	12
P6		0.001	0.01	22
P7		0.01	0.1	12
P8		0.01	0.1	22
P9	10000	0.001	0.01	12
P10		0.001	0.01	22
P11		0.01	0.1	12
P12		0.01	0.1	22
P13	30000	0.001	0.01	12
P14		0.001	0.01	22
P15		0.01	0.1	12
P16		0.01	0.1	22

part does not exhibit the same sensitivity to conductivity and receiver's height like the real part does.

From the figures of the real part of both E_x^T and E_y^T (Figs. 15–22), we observe that:

- Real E_x^T exhibits an exponential decay with horizontal transmitter-receiver distance. This decay is more pronounced in higher conductivity cases.

- For the real E_x^T the discrepancy between numerical and analytical solutions is more pronounced at very short horizontal transmitter-receiver distances.
- Real E_y^T exhibits negative values and a minimum at intermediate horizontal transmitter-receiver distance. This distance depends on the conductivity of the half-space, the characteristic frequency and the receiver height. The minimum is more pronounced for the higher conductivity cases.

From the comparison of the relative errors of the non-uniform vs uniform grid realizations, we observe that:

- Fine grids perform better than coarse ones for both E_x^T and E_y^T , as expected (Figs. 4 and 5).
- The non-uniform grid case ($h_x = h_z = 5$ and $h_y = 20m$) performs as well as the corresponding uniform one ($h_x = h_y = h_z = 5m$) at short horizontal transmitter - receiver distances (less than 70m) where the relative error for real and imaginary components of E_x^T and E_y^T are less than 2% (Figs. 9 and 10).

Comparing E_x^T and E_y^T of the non-uniform versus uniform grid realizations, the following remarks can be made:

- For the E_y^T graphs of the non-uniform grids, the values were picked at $y = 10m$ (fine), $y = 20m$ (intermediate) and $y = 40m$ (coarse). For the E_x^T graphs, the values were picked at $y = 20m$ (fine), $y = 40m$ (intermediate) and $y = 80m$ (coarse). That explains the discrepancy

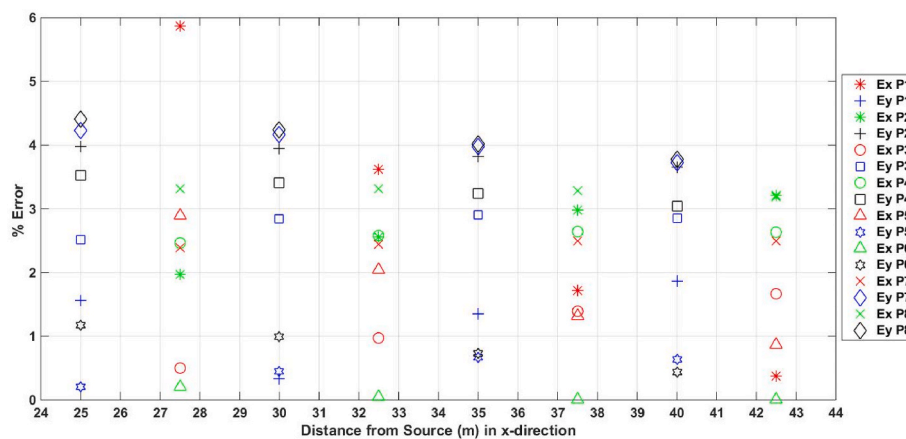


Fig. 13. Relative error plot for the real parts of E_x^T , E_y^T in cases P1 to P8 of Table 1.

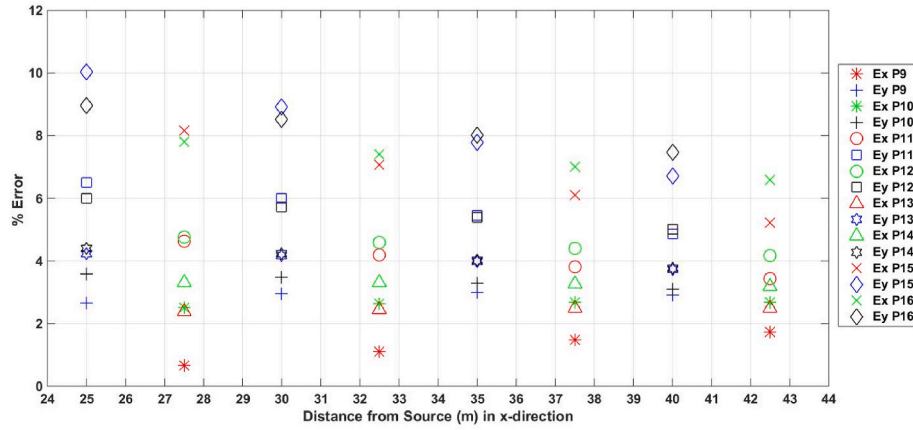


Fig. 14. Relative error plot for the real parts of E_x^T , E_y^T in cases P9 to P16 of Table 1.

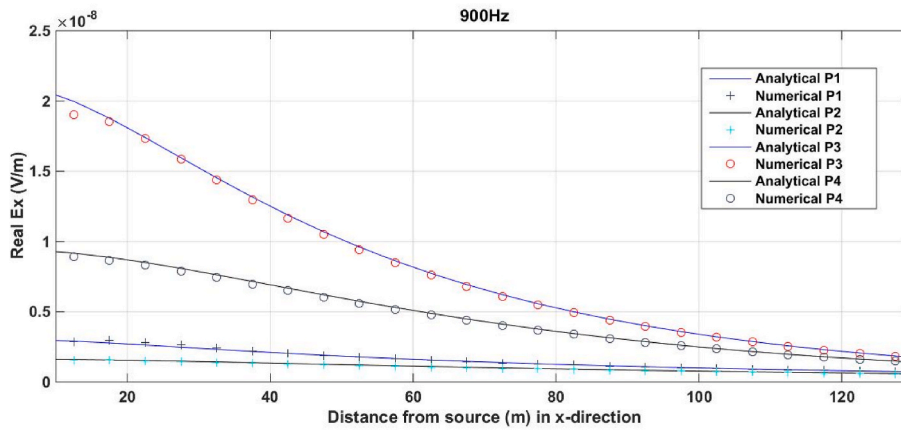


Fig. 15. Comparison of the real part of E_x^T at 900Hz.

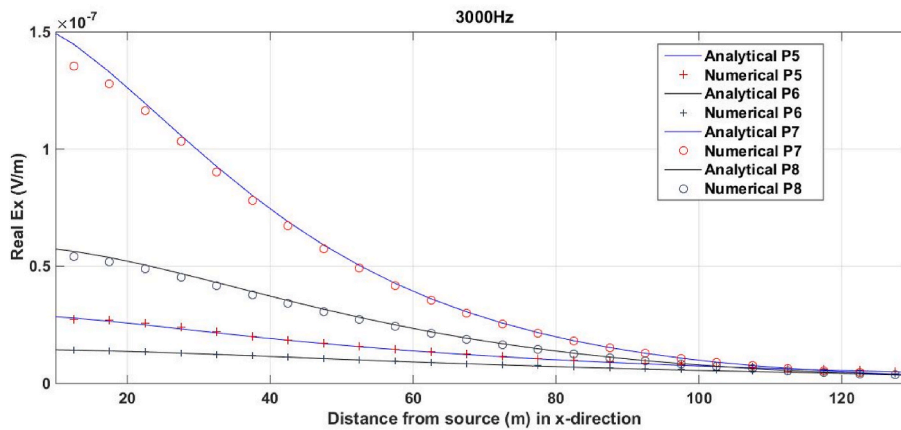


Fig. 16. Comparison of the real part of E_x^T at 3000Hz.

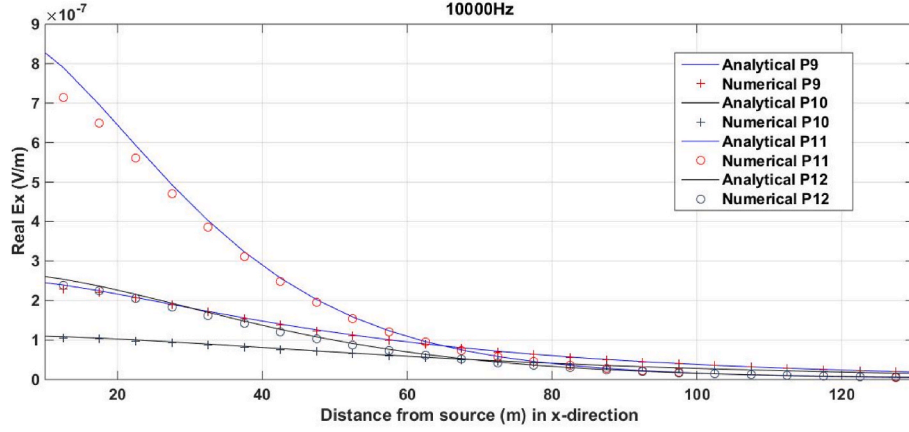
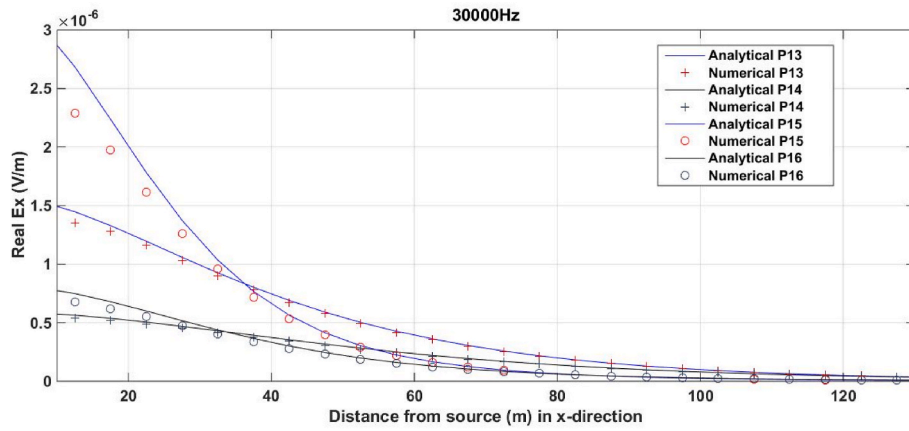
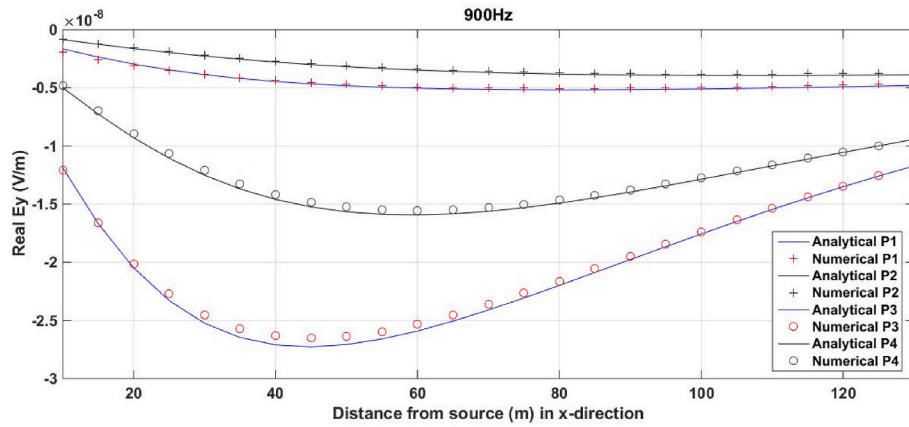
between the E_y^T graphs for different grid spacing of the non-uniform grid cases. In particular, the max E_y^T decreases as the grid becomes coarser, since the horizontal transmitter-receiver distances become larger.

- For the E_y^T graphs of the uniform grids, the values were picked at $y = 2.5\text{m}$ (fine), $y = 5\text{m}$ (intermediate) and $y = 10\text{m}$ (coarse). For the E_x^T graphs, at $y = 5\text{m}$ (fine), $y = 10\text{m}$ (intermediate) and $y = 20\text{m}$ (coarse), respectively. That, accordingly, explains the discrepancy

between the E_y^T graphs for different grid spacing of the uniform grid cases. In particular, the max E_y^T decreases as the grid becomes coarser since the horizontal transmitter-receiver distances become larger.

- The E_x^T , at least the analytical ones, in the fine non-uniform grid and the coarse uniform grid are similar, as it should be.

In terms of memory requirements, in a fine uniformly partitioned grid ($h_x = h_y = h_z = 5\text{m}$), the number of E unknown components to be computed is 6,193,536 and the total memory consumption is about 6 GB

Fig. 17. Comparison of the real part of E_x^T at 10000Hz.Fig. 18. Comparison of the real part of E_x^T at 30000Hz.Fig. 19. Comparison of the real part of E_y^T at 900Hz.

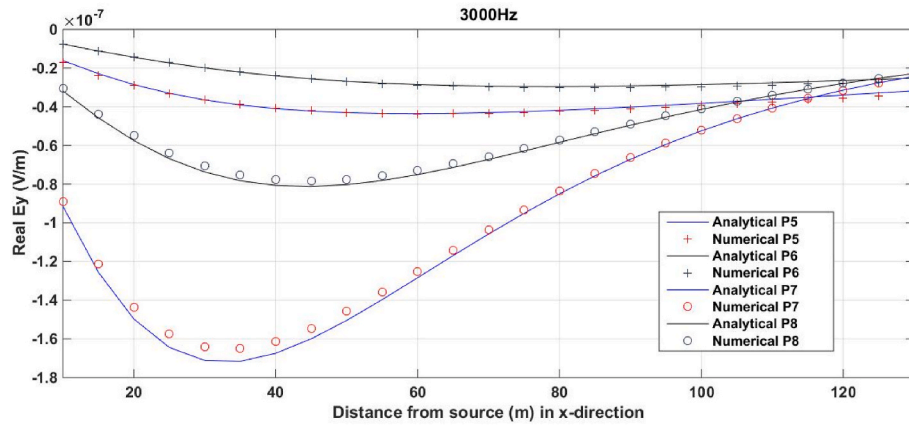
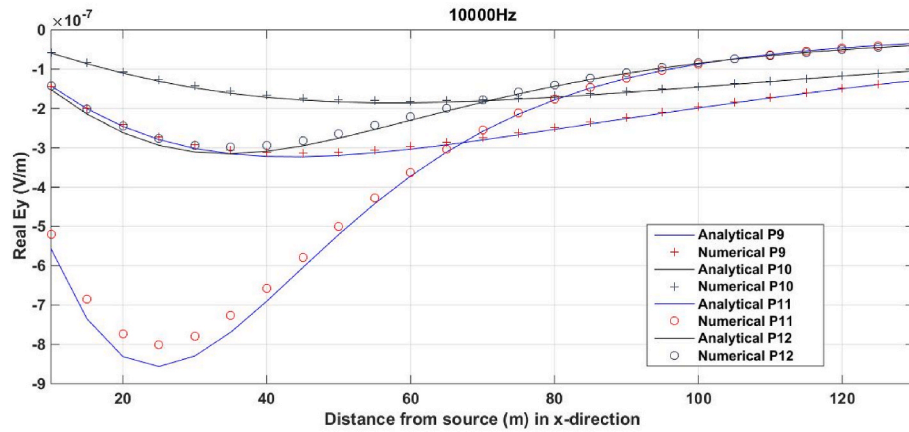
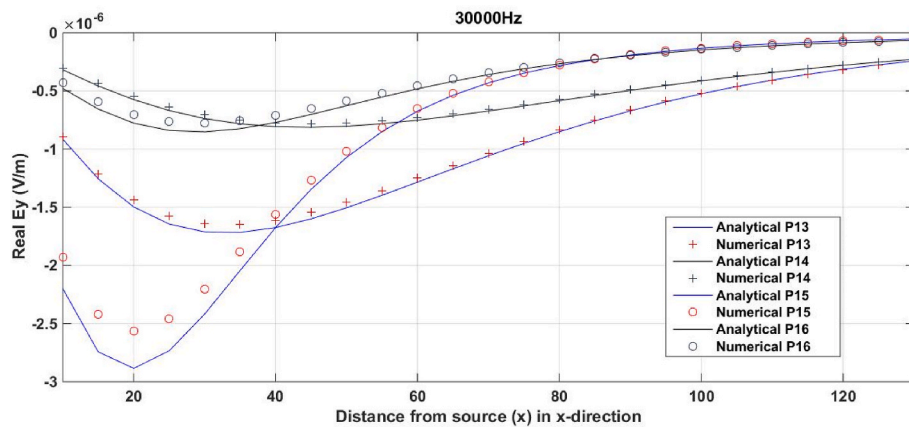
– the respective amount of memory needed when using a fine partitioning in x and z directions ($h_x = h_z = 5m$) and a coarser one in the y-direction ($h_y = 20m$) drops to ~ 3.5 GB and 1,524,000 node value approximations should be computed.

The computation time gain is approximately 80% in a multithreaded implementation (from $45 \cdot 10^4$ to $9.5 \cdot 10^4$ s). In order to evaluate the efficiency of the parallel implementation of the algorithm and the actual benefit on a single processor multithreaded environment, time measurements taken from implementations using uniform and non-uniform

grids when with a different number of threads in test case P6 are provided in Fig. 25 (in log scale). The respective speedup is presented in Fig. 26. In both Figs. 25 and 26, the following notations for the respective discretization cases have been used:

Uni A: $h_x = h_y = h_z = 20m$, Uni B: $h_x = h_y = h_z = 10m$, Uni C: $h_x = h_y = h_z = 5m$ and

non-Uni A: $h_x = h_z = 20m$, $h_y = 80m$, non-Uni B: $h_x = h_z = 10m$, $h_y = 40m$, non-Uni C: $h_x = h_z = 5m$, $h_y = 20m$

Fig. 20. Comparison of the real part of E_y^T at 3000Hz.Fig. 21. Comparison of the real part of E_y^T at 10000Hz.Fig. 22. Comparison of the real part of E_y^T at 30000Hz.

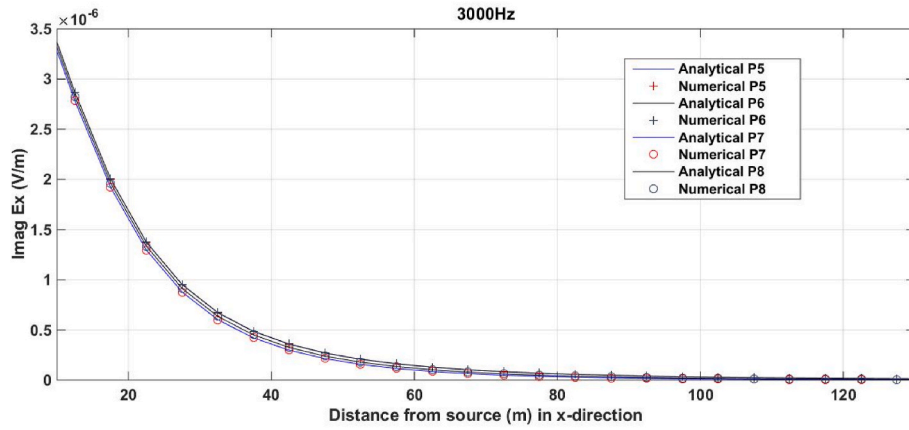
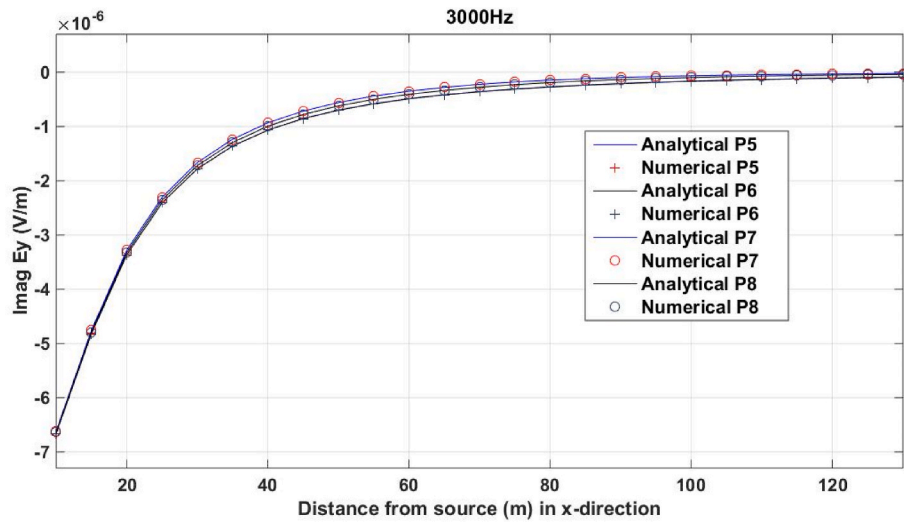
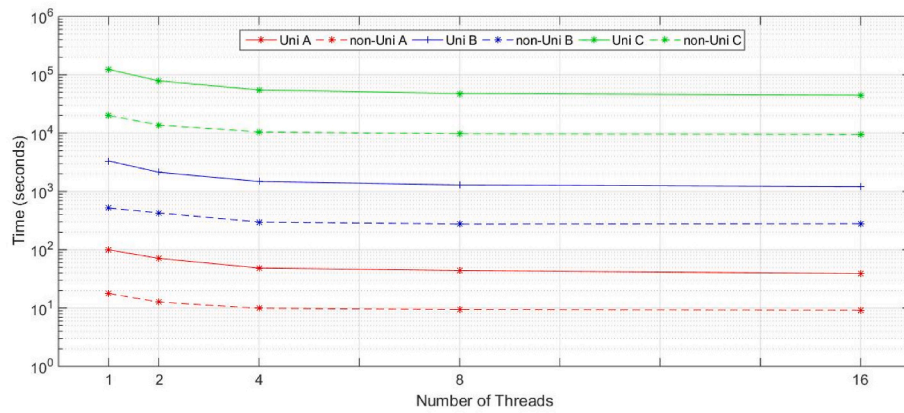
Fig. 23. Comparison of the imaginary part of E_x^T at 3000Hz.Fig. 24. Comparison of the imaginary part of E_y^T at 3000Hz.

Fig. 25. Time measurements in seconds in uniform (Uni) and non-uniform (non-Uni) grid spacing where Uni A: $h_x = h_y = h_z = 20m$, Uni B: $h_x = h_y = h_z = 10m$, Uni C: $h_x = h_y = h_z = 5m$ and non-Uni A: $h_x = h_z = 20m$, $h_y = 80m$, non-Uni B: $h_x = h_z = 10m$, $h_y = 40m$, non-Uni C: $h_x = h_z = 5m$, $h_y = 20m$.

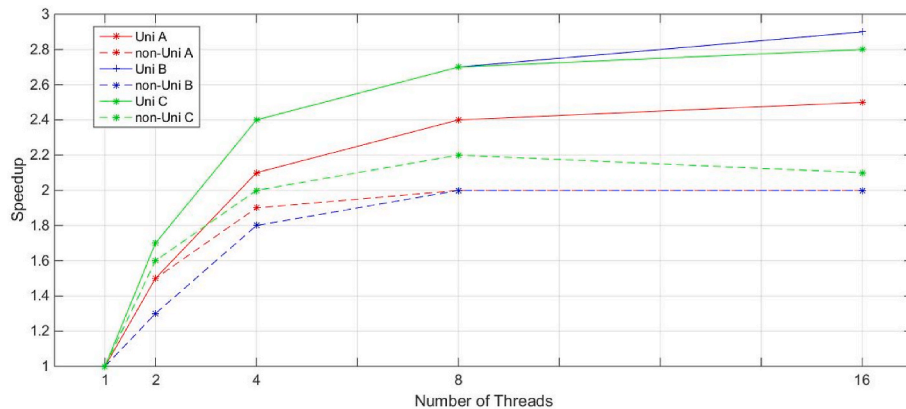


Fig. 26. Speedup in a multithreaded single processor in uniform (Uni) and non-uniform (non-Uni) grid spacing where Uni A: $h_x = h_y = h_z = 20m$, Uni B: $h_x = h_y = h_z = 10m$, Uni C: $h_x = h_y = h_z = 5m$ and non-Uni A: $h_x = h_z = 20m$, $h_y = 80m$, non-Uni B: $h_x = h_z = 10m$, $h_y = 40m$, non-Uni C: $h_x = h_z = 5m$, $h_y = 20m$.

5. Conclusions

In this article a novel high order electric field intensity simulator is proposed, which assumes that displacement currents are negligible and magnetic permeability does not depend on space coordinates. The simulator is based on fourth order compact finite difference schemes for three dimensional staggered grids.

In the numerical scheme, the conductivity is defined at discrete locations where the components of the unknown electric field intensity are estimated, allowing discontinuities to pass through cells. Thus, the proposed solver does treat the discontinuities eventuated by the conductivity coefficient σ in equation (1) remarkably, regardless of the transmitter's height.

The current implementation is realized for vertical magnetic dipole sources on a standalone multithreaded multicore computer. The solver can be easily modified to accept other types of sources. In the presented tests the discretization is set to 5 m in x and z directions and 20 m in the y directions but the solver is flexible in terms of discretization in each direction. Moreover, as no matrix is stored in memory and operations take place in terms of matrix-vector operations, the process claims for low memory amounts and, therefore, the solver proves to be suitable for machines with limited memory.

The effect of Dirichlet conditions does not seem to affect the numerical results, when fine uniform and non-uniform grids are employed in the $640 \times 640 \times 640$ cube.

Lastly, different frequency selection does seem to bias the results e.g., in the event of a frequency equal or higher than 10 kHz when increased values of gradients of the estimated electric field components emerge.

The implementation of the proposed solver can be efficiently realized on a single processor multithreaded computing unit with modest requirements in terms of memory and computing power.

Computer code availability section

3D FDFD EM Solver.

Appendix 1

The structure and dimensions of S-class and B-class matrices that are part of equations 12–20 of the manuscript follow. The S-class matrices:

Contact: Nikolaos Vilanakis nivilanakis@tuc.gr +306974004615.

Hardware requirements: 3D FDFD EM Solver is developed on a computer with 32 CPU cores (2.4 GHz each) and 16 GiB RAM; a PC with 2 CPU cores and 6 GiB RAM installed is required for basic running of the software.

Program language: Fortran, MATLAB, Bash, Makefile.

Software required: OpenMP.

Program size: 3 MB.

The source codes are available for downloading at the link: <https://github.com/nikosvil/3DEMDFD>.

Authorship contribution statement

N. D. Vilanakis: Concept and design of study, development of model, acquisition of data, drafting the manuscript.

N. Economou: Concept and design of study, analysis and/or interpretation of data, revising the manuscript.

E. Mathioudakis: Concept and design of study, analysis and/or interpretation of data, drafting the manuscript.

A. Vafidis: Concept and design of study, analysis and/or interpretation of data, drafting and revising the manuscript, supervision.

Declaration of competing interest

The authors declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

Data availability

Data will be made available on request.

Acknowledgments

This research received no specific grant from any funding agency in the public, commercial, or not-for-profit sectors.

$$\begin{aligned}
S_1 &= \text{diag}(S_{**}, S_{**}, \dots), S_1 \in \mathbb{R}^{N_x N_y (N_z-1) \times N_x N_y (N_z-1)}, S_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
S_2 &= \text{diag}(S'_*, S'_*, \dots), S_2 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) (N_z-1) \times N_x (N_y-1) (N_z-1)}, S'_* \in \mathbb{R}^{(N_y-1) \times (N_y-1)}, I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
S_3 &= \text{diag}(S_{**}, S'_{**}, \dots), S_3 \in \mathbb{R}^{N_x N_y (N_z-1) \times N_x N_y (N_z-1)}, S'_{**} \in \mathbb{R}^{N_y \times N_y}, I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
S_4 &= \text{diag}(S'_*, S'_*, \dots), S_4 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) (N_z-1) \times N_x (N_y-1) (N_z-1)}, S'_* \in \mathbb{R}^{(N_y-1) \times (N_y-1)}, I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
S_5 &= \text{diag}(S'_{**}, S'_{**}, \dots), S_5 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) N_z \times N_x (N_y-1) N_z}, S'_{**} \in \mathbb{R}^{N_z \times N_z}, I \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) \times N_x (N_y-1)} \\
S_6 &= \text{diag}(S'_*, S'_*, \dots), S_6 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) (N_z-1) \times N_x (N_y-1) (N_z-1)}, S'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times (N_z-1)}, I \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) \times N_x (N_y-1)} \\
S_7 &= \text{diag}(S_{**}, S_{**}, \dots), S_7 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) N_z \times N_x (N_y-1) N_z}, S_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
S_8 &= \text{diag}(S'_*, S'_*, \dots), S_8 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) (N_z-1) \times N_x (N_y-1) (N_z-1)}, S'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times (N_z-1)}, I \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) \times N_x (N_y-1)} \\
S_9 &= \text{diag}(S'_{**}, S'_{**}, \dots), S_9 \in \mathbb{R}^{N_x N_y (N_z-1) \times N_x N_y (N_z-1)}, S'_{**} \in \mathbb{R}^{N_y \times N_y}, I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
S_{10} &= \text{diag}(S_*, S_*, \dots), S_{10} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y (N_z-1) \times (N_x-1) N_y (N_z-1)}, S_* \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)} \\
S_{11} &= \text{diag}(S_{**}, S_{**}, \dots), S_{11} \in \mathbb{R}^{N_x N_y (N_z-1) \times N_x N_y (N_z-1)}, S_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
S_{12} &= \text{diag}(S_*, S_*, \dots), S_{12} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y (N_z-1) \times (N_x-1) N_y (N_z-1)}, S_* \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)} \\
S_{13} &= \text{diag}(S'_{**}, S'_{**}, \dots), S_{13} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y N_z \times (N_x-1) N_y N_z}, S'_{**} \in \mathbb{R}^{N_z \times N_z}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y \times (N_x-1) N_y} \\
S_{14} &= \text{diag}(S'_*, S'_*, \dots), S_{14} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y (N_z-1) \times (N_x-1) N_y (N_z-1)}, S'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times (N_z-1)}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y \times (N_x-1) N_y} \\
S_{15} &= \text{diag}(S'_{**}, S'_{**}, \dots), S_{15} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y N_z \times (N_x-1) N_y N_z}, S'_{**} \in \mathbb{R}^{N_y \times N_y}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)} \\
S_{16} &= \text{diag}(S'_*, S'_*, \dots), S_{16} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y (N_z-1) \times (N_x-1) N_y (N_z-1)}, S'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times (N_z-1)}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y \times (N_x-1) N_y} \\
S_{17} &= \text{diag}(S_{**}, S_{**}, \dots), S_{17} \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) N_z \times N_x (N_y-1) N_z}, S_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
S_{18} &= \text{diag}(S_*, S_*, \dots), S_{18} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) (N_y-1) N_z \times (N_x-1) (N_y-1) N_z}, S_* \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)} \\
S_{19} &= \text{diag}(S'_{**}, S'_{**}, \dots), S_{19} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y N_z \times (N_x-1) N_y N_z}, S'_{**} \in \mathbb{R}^{N_y \times N_y}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)} \\
S_{20} &= \text{diag}(S'_*, S'_*, \dots), S_{20} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) (N_y-1) N_z \times (N_x-1) (N_y-1) N_z}, S'_* \in \mathbb{R}^{(N_y-1) \times (N_y-1)}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)}
\end{aligned} \tag{A1}$$

The B-class matrices:

$$\begin{aligned}
B_1 &= \text{diag}(B_{**}, B_{**}, \dots), B_1 \in \mathbb{R}^{N_x N_y (N_z-1) \times (N_x-1) N_y (N_z-1)}, B_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times (N_x-1)} \\
B_2 &= \text{diag}(B'_*, B'_*, \dots), B_2 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) (N_z-1) \times N_x N_y (N_z-1)}, B'_* \in \mathbb{R}^{(N_y-1) \times N_y}, I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
B_3 &= \text{diag}(B'_{**}, B'_{**}, \dots), B_3 \in \mathbb{R}^{N_x N_y (N_z-1) \times N_x (N_y-1) (N_z-1)}, B'_{**} \in \mathbb{R}^{N_y \times (N_y-1)}, I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
B_4 &= \text{diag}(B'_*, B'_*, \dots), B_4 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) (N_z-1) \times N_x N_y (N_z-1)}, B'_* \in \mathbb{R}^{(N_y-1) \times N_y}, I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
B_5 &= \text{diag}(B'_{**}, B'_{**}, \dots), B_5 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) N_z \times N_x (N_y-1) (N_z-1)}, B'_{**} \in \mathbb{R}^{N_z \times (N_z-1)}, I \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) \times N_x (N_y-1)} \\
B_6 &= \text{diag}(B'_*, B'_*, \dots), B_6 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) (N_z-1) \times N_x (N_y-1) N_z}, B'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times N_z}, I \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) \times N_x (N_y-1)} \\
B_7 &= \text{diag}(B_{**}, B_{**}, \dots), B_7 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) N_z \times (N_x-1) (N_y-1) N_z}, B_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times (N_x-1)} \\
B_8 &= \text{diag}(B'_*, B'_*, \dots), B_8 \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) (N_z-1) \times N_x (N_y-1) N_z}, B'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times N_z}, I \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) \times N_x (N_y-1)} \\
B_9 &= \text{diag}(B'_{**}, B'_{**}, \dots), B_9 \in \mathbb{R}^{N_x N_y (N_z-1) \times N_x (N_y-1) (N_z-1)}, B'_{**} \in \mathbb{R}^{N_y \times (N_y-1)}, I \in \mathbb{R}^{N_x \times N_x} \\
B_{10} &= \text{diag}(B_*, B_*, \dots), B_{10} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y (N_z-1) \times N_x N_y (N_z-1)}, B_* \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times N_x} \\
B_{11} &= \text{diag}(B_{**}, B_{**}, \dots), B_{11} \in \mathbb{R}^{N_x N_y (N_z-1) \times (N_x-1) N_y (N_z-1)}, B_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times (N_x-1)} \\
B_{12} &= \text{diag}(B_*, B_*, \dots), B_{12} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y (N_z-1) \times N_x N_y (N_z-1)}, B_* \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times N_x} \\
B_{13} &= \text{diag}(B'_{**}, B'_{**}, \dots), B_{13} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y N_z \times (N_x-1) N_y (N_z-1)}, B'_{**} \in \mathbb{R}^{N_z \times (N_z-1)}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y \times (N_x-1) N_y} \\
B_{14} &= \text{diag}(B'_*, B'_*, \dots), B_{14} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y (N_z-1) \times (N_x-1) N_y N_z}, B'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times N_z}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y \times (N_x-1) N_y} \\
B_{15} &= \text{diag}(B'_{**}, B'_{**}, \dots), B_{15} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y N_z \times (N_x-1) (N_y-1) N_z}, B'_{**} \in \mathbb{R}^{N_y \times (N_y-1)}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)} \\
B_{16} &= \text{diag}(B'_*, B'_*, \dots), B_{16} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y (N_z-1) \times (N_x-1) N_y N_z}, B'_* \in \mathbb{R}^{(N_z-1) \times N_z}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y \times (N_x-1) N_y} \\
B_{17} &= \text{diag}(B_{**}, B_{**}, \dots), B_{17} \in \mathbb{R}^{N_x (N_y-1) N_z \times (N_x-1) (N_y-1) N_z}, B_{**} \in \mathbb{R}^{N_x \times (N_x-1)} \\
B_{18} &= \text{diag}(B_*, B_*, \dots), B_{18} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) (N_y-1) N_z \times N_x (N_y-1) N_z}, B_* \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times N_x} \\
B_{19} &= \text{diag}(B'_{**}, B'_{**}, \dots), B_{19} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) N_y N_z \times (N_x-1) (N_y-1) N_z}, B'_{**} \in \mathbb{R}^{N_y \times (N_y-1)}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)} \\
B_{20} &= \text{diag}(B'_*, B'_*, \dots), B_{20} \in \mathbb{R}^{(N_x-1) (N_y-1) N_z \times (N_x-1) N_y N_z}, B'_* \in \mathbb{R}^{(N_y-1) \times N_y}, I \in \mathbb{R}^{(N_x-1) \times (N_x-1)}
\end{aligned} \tag{A2}$$

In the above patterns, I is an identity matrix and O a zero matrix, with proper dimensions in each case.

References

- Avdeev, D., 2005. Three-dimensional electromagnetic modelling and inversion from theory to application. *Surv. Geophys.* 26, 767–799.
- Avdeev, D.B., Kuvshinov, A.V., Pankratov, O.V., Newman, G.A., 2000. 3D EM Modelling Using Fast Integral Equation Approach with Krylov Subspace Accelerator: Extended Abstracts of 62nd EAGE Conference, pp. 195–198.
- Berenger, J., 1994. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Comput. Phys.* 114 (2), 185–200.
- Fomenko, E.Y., Mogi, T., 2002. A new computation method for a staggered grid of 3D EM field conservative modeling. *Earth Planets Space* 54, 499–509.
- Gaitonde, D., Visbal, M., 1998. High Order Schemes for Navier-Stokes Equations: Algorithm and Implementation into FDL3DI, vol. 3060. Air Force Research Lab Wright-Patterson Air Vehicles Directorate (NASA).
- Gander, W., Golub, G.H., 1997. Cyclic reduction history and applications. In: Proceedings of the Workshop on Scientific Computing 10 - 12 March 1997 Hong Kong, pp. 73–85.

- Haber, E., Ascher, U.M., Aruliah, D.A., Oldenburg, D.W., 2000. Fast simulation of 3D electromagnetic problems using potentials. *J. Comput. Phys.* 163, 150–171.
- Hanssens, D., Delefortrie, S., Bobe, C., Hermans, T., De Smedt, P., 2019. Improving the reliability of soil EC-mapping: robust apparent electrical conductivity (rECa) estimation in ground-based frequency domain electromagnetics. *Geoderma* 337, 1155–1163.
- Hirsh, R.S., 1975. Higher order accurate difference solutions of fluid mechanics problems by a compact differencing technique. *J. Comput. Phys.* 19, 90–109.
- Johnson, S.G., 2021. Notes on Perfectly Matched Layers (PMLs) arXiv:2108.05348 [physics.comp-ph]. Tutorial review based on online MIT course notes.
- Lele, S.K., 1992. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *J. Comput. Phys.* 103, 16–42.
- Minsley, B.J., 2011. A trans-dimensional Bayesian Markov chain Monte Carlo algorithm for model assessment using frequency-domain electromagnetic data. *Geophys. J. Int.* 187, 252–272.
- Mitsuhata, Y., Uchida, T., 2004. 3D magnetotelluric modeling using the T-W document finite-element method. *Geophysics* 69, 108–119.
- Newman, G.A., Alumbaugh, D.L., 1995. Frequency domain modeling of airborne electromagnetic responses using staggered finite differences. *Geophys. Prospect.* 43, 1021–1042.
- Raiche, A., 1974. An integral equation approach to three-dimensional modeling. *Geophys. J. Int.* 36, 363–376.
- Sasaki, Y., Kim, J., Cho, S., 2010. Multidimensional inversion of loop-loop frequency-domain EM data for resistivity and magnetic susceptibility. *Geophysics* 75, F213–F223.
- Smith, J., 1996. Conservative modeling of 3-D electromagnetic fields, Part I: properties and error analysis. *Geophysics* 61, 1308–1318.
- Streich, R., 2009. 3D finite-difference frequency-domain modeling of controlled-source electromagnetic data: direct solution and optimization for high accuracy. *Geophysics* 74, F95–F105.
- Taflove, A., Hagness, S., 2005. *Computational Electrodynamics: the Finite-Difference Time-Domain Method*, third ed. Artech House Publishers, pp. 273–327.
- Varga, R., 2000. *Matrix Iterative Analysis: Springer Series in Computational Mathematics*, vol. 27, pp. 63–110.
- Ward, S.H., dan Hohmann, G.W., 1998. Electromagnetic theory for geophysical applications. In: Nabighian, M.N. (Ed.), *Electromagnetic Methods in Applied Geophysics, Theory and Practice, Investigations in Geophysics*, vol. 4. Society of Exploration Geophysicists, pp. 208–212, 130–311.
- Yee, K.S., 1966. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans. Antenn. Propag.* 14, 302–307.
- Zyserman, F.I., Santos, J.E., 2000. Parallel finite element algorithm with domain decomposition for three-dimensional magnetotelluric modeling. *J. Appl. Geophys.* 44, 337–351.

Solving Discontinuous Collocation Equations for a Class of Brain Tumor Models on GPUs

I.E. Athanasakis, E.N. Mathioudakis, E.P. Papadopoulou, Y.G. Saridakis and N.D. Vilanakis

Abstract—The numerical modeling of the brain tumor invasion problem has been a challenging subject of research investigation over the last decades. A main issue in this problem's modeling is the successful incorporation of brain's heterogeneity (gray-white matter). This issue is effectively treated with the introduction of a discontinuous diffusion coefficient in the core PDE; this is considered necessary, since tumor cells migrate with different rates in brain's white and gray matter. The Discontinuous Hermite Collocation (DHC) method coupled with high order semi implicit and strongly stable Runge-Kutta (RK) time discretization scheme, in case of the linear model tumor invasion problem in 1+2 dimensions, is considered a successful choice among other high order numerical schemes. At each time step, a large linear system has to be solved thus significant computational cost emerges. Its efficient solution is performed by incomplete factorization preconditioned BiCG stabilized iterative method (as the eigenvalue topology suggests). The implementation of the numerical method in Matlab software takes part in a multicore CPU only computational environment. In this work, the design of a CPU-GPU parallel algorithm of the method is presented, the implementation of which takes part in a GPU-CPU architecture and necessitates the use of CUDA development tools. Several numerical experiments are presented to demonstrate the efficiency of the parallel algorithm.

Index Terms—Discontinuous Hermite Collocation, DIRK methods, Matlab, CUDA, CPU-GPU computations.

I. THE NUMERICAL BRAIN TUMOR MODEL

Simulations of the progress of untreated diffusive brain tumors are based on classical mathematical models, such as in [1],[2] and [3]. Recently, Swanson ([4],[5]) introduced an appropriately discontinuous diffusion coefficient and generalized these models incorporating the heterogeneity of the brain tissue (white-grey matter). Its basic modeling form can be expressed with the following two dimensional diffusion equation,

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial \bar{t}} = \nabla \cdot (\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) \nabla \bar{c}) + \rho \bar{c} \quad , \quad (1)$$

where $\bar{c}(\bar{\mathbf{x}}, \bar{t})$ denotes the tumour cell density, ρ denotes the net proliferation rate, and $\bar{D}(\bar{\mathbf{x}})$ is the diffusion coefficient representing the active motility of malignant cells satisfying

$$\bar{D}(\bar{\mathbf{x}}) = \begin{cases} D_g & , \quad \bar{\mathbf{x}} \text{ in Grey Matter} \\ D_w & , \quad \bar{\mathbf{x}} \text{ in White Matter} \end{cases} \quad , \quad (2)$$

with D_g and D_w scalars and $D_w > D_g$. Using the dimensionless variables :

$$\mathbf{x} = \sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{\mathbf{x}} \quad , \quad t = \rho \bar{t} \quad , \quad f(\mathbf{x}) = \bar{f} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{\mathbf{x}} \right) ,$$

Manuscript received March 13, 2015; revised April XX, 2015.

This work was supported by EU (European Social Fund ESF) and Greek funds through the operational program *Education and Lifelong Learning* of the National Strategic Reference Framework (NSRF) - Research Funding Program: THALIS.

All authors are with the Applied Mathematics and Computers Laboratory, Technical University of Crete, University Campus, 73132 Chania, Crete, Greece – Corresponding author's e-mail: manolis@amcl.tuc.gr.

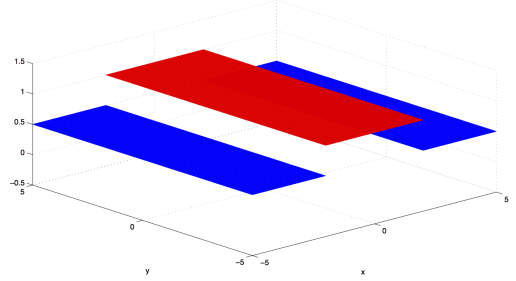


Fig. 1. Discontinuous coefficient D for a two-value problem.

$$\text{and } c(\mathbf{x}, t) = \bar{c} \left(\sqrt{\frac{\rho}{D_w}} \bar{\mathbf{x}}, \rho \bar{t} \right) \frac{D_w}{\rho N_0}$$

with $N_0 = \int \bar{f}(\bar{\mathbf{x}}) d\bar{\mathbf{x}}$ to denote the initial number of tumour cells in the brain at $\bar{t} = 0$, as well as the transformation

$$c(\mathbf{x}, t) = e^t u(\mathbf{x}, t) \quad ,$$

the model in $2 + 1$ dimensions reduces to

$$\begin{cases} u_t = (Du_x)_x + (Du_y)_y & , \quad (x, y, t) \in [a, b]^2 \times \mathbb{R}^+ \\ \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0, \quad u(x, y, 0) = f(x, y), \quad D = \begin{cases} \gamma, x \notin [w_1, w_2] \\ 1, x \in [w_1, w_2] \end{cases} \end{cases} \quad (3)$$

where diffusion coefficient D is discontinuous among two interface lines $x = w_1$ and $x = w_2$, as it depicted in Fig. 1. The discontinuous diffusion coefficient D , directly implies discontinuity of u_x , hence continuity of Du_x , across each interface line. In fact, the linear parabolic nature of the initial-boundary value problem implies continuity of u across each interface, that is

$$[u] := \lim_{x \rightarrow w_k^+} u(x, y_0) - \lim_{x \rightarrow w_k^-} u(x, y_0) = 0 \quad (4)$$

and,

$$[Du_x] := \lim_{x \rightarrow w_k^+} Du_x(x, y_0) - \lim_{x \rightarrow w_k^-} Du_x(x, y_0) = 0 \quad (5)$$

where $k = 1, 2$ and y_0 is a fixed point among $[a, b]$. Taking, now, into consideration the above two continuity constrains an alternative way to state the model can be described by

$$\begin{cases} u_t = Du_{xx} + Du_{yy} & , \quad (x, y) \in R_\ell \\ \frac{\partial u}{\partial \eta} = 0 & , \quad u(x, y, 0) = f(x, y) \\ [u] = 0 & , \quad [Du_x] = 0 \quad \text{at } x = w_{1,2} \end{cases} \quad (6)$$

where $R_1 := [a, w_1] \times [a, b]$, $R_2 := [w_1, w_2] \times [a, b]$ and $R_3 := [w_2, b] \times [a, b]$. For sufficiently smooth solutions u , Hermite cubic polynomial approximations seek fourth order, approximate solutions $U(x, y, t)$ in the form

$$U(x, y, t) = \sum_{i=1}^{2N_y+2} \sum_{j=1}^{2N_x+2} [\alpha_{ij}(t) \phi_i(x) \phi_j(y)] \quad (7)$$

where $N_y = N_x = N_{x_1} + N_{x_2} + N_{x_3}$ denotes the number of subintervals of R_ℓ and ϕ the Hermite bicubic basis functions. Considering the fact that the two dimensional Collocation matrices can be formed as the Kronecker matrix product of the one dimensional Collocation matrices of x and y direction respectively, and working as in [6] (for x direction matrices), the application of Discontinuous Hermite Collocation in equation (6) may lead to a system of ODEs:

$$(C_x^0 \otimes C_y^0) \dot{\mathbf{a}} = (D_x C_x^2 \otimes C_y^0) \mathbf{a} + (D_x C_x^0 \otimes C_y^2) \mathbf{a} \quad (8)$$

where C_x^* and C_y^* denote the 1d Discontinuous and Continuous Collocation matrices respectively, with $D_x = \text{diag}(\gamma, \dots, \gamma, 1, \dots, 1, \gamma, \dots, \gamma)$.

Assuming that $A_0 := C_x^0 \otimes C_y^0$ and $B := D_x C_x^2 \otimes C_y^0 + D_x C_x^0 \otimes C_y^2$ of order $N = 4N_x N_y$ equation (8) can be written as:

$$A_0 \dot{\mathbf{a}} = B \mathbf{a} \quad \text{or} \quad \dot{\mathbf{a}} = C(t, \mathbf{a}) \quad \text{for} \quad C(t, \mathbf{a}) = A_0^{-1} B \mathbf{a}. \quad (9)$$

Finally, we couple the DHC method with an optimal two-step and third-order Diagonally implicit Runge-Kutta scheme [7] for the time discretization and we obtain the system of linear equations:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}^{(n,1)} &= \mathbf{a}^{(n)} + \tau \lambda C(t_{n,1}, \mathbf{a}^{(n,1)}) \\ \mathbf{a}^{(n,2)} &= \mathbf{a}^{(n)} + \tau \left[(1 - 2\lambda) C(t_{n,1}, \mathbf{a}^{(n,1)}) + \lambda C(t_{n,2}, \mathbf{a}^{(n,2)}) \right] \\ \mathbf{a}^{(n+1)} &= \mathbf{a}^{(n)} + \frac{\tau}{2} \left[C(t_{n,1}, \mathbf{a}^{(n,1)}) + C(t_{n,2}, \mathbf{a}^{(n,2)}) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

or, equivalently,

$$\begin{aligned} A \mathbf{a}^{(n,1)} &= A_0 \mathbf{a}^{(n)} \\ A \mathbf{a}^{(n,2)} &= A_0 \mathbf{a}^{(n)} + \tau(1 - 2\lambda) B \mathbf{a}^{(n,1)} \\ A_0 \mathbf{a}^{(n+1)} &= A_0 \mathbf{a}^{(n)} + \frac{\tau}{2} [B \mathbf{a}^{(n,1)} + B \mathbf{a}^{(n,2)}] \end{aligned} \quad (11)$$

where $A := A_0 - \tau \lambda B$, τ is the time spacing and $\lambda = \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2}$.

In order to solve the above system of linear equations, we propose the following algorithm:

```

Create matrices  $A, A_b, A_0, B$  and  $\mathbf{a}_{old}$ 
for  $t = dt$  to  $t_{max}$  with time step  $dt$ 
  Compute  $\mathbf{a}_0 = A_0 \mathbf{a}_{old}$ 
  if  $t \leq 2dt$  then
    Solve  $A_b = \mathbf{a}_{new} \mathbf{a}_0$ 
  else
    Solve  $A_0 \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_0$ 
    Compute  $\mathbf{a}_0 = \mathbf{a}_0 - dt \frac{\sqrt{3}}{3} B \mathbf{a}_1$ 
    Solve  $A \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_0$ 
    Compute  $\mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_0 + \frac{dt}{2} B(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ 
    Solve  $A_0 \mathbf{a}_{new} = \mathbf{a}_2$ 
  endif
  Compute  $\mathbf{a}_{new} = \mathbf{a}_{old}$ 
endfor

```

As one may notice, for the first two steps of the algorithm matrix A_b is used in the solution of the linear system, where

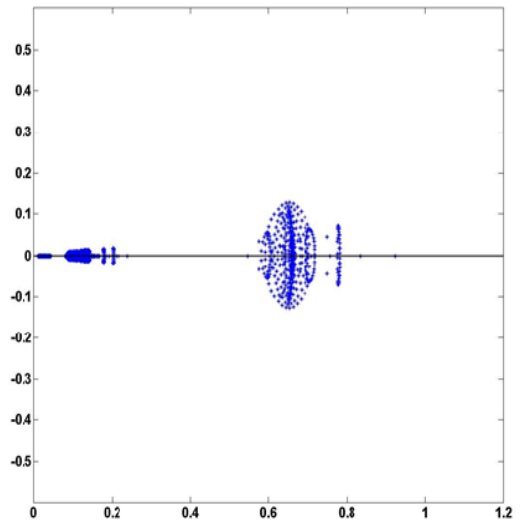
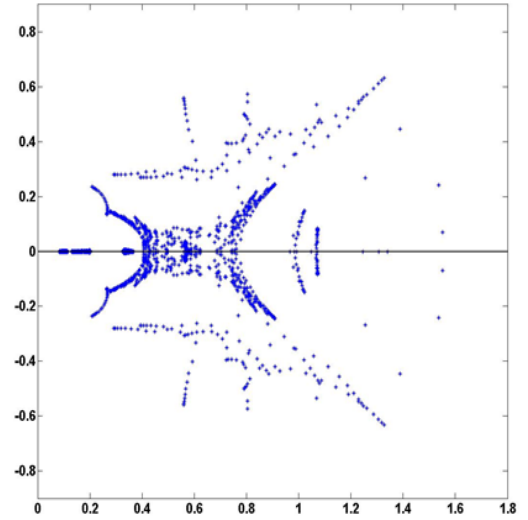
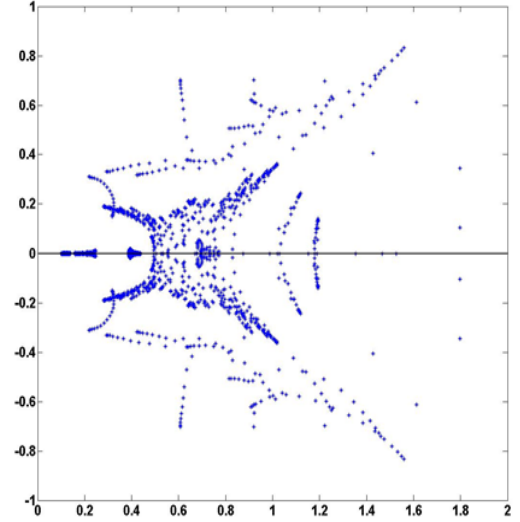


Fig. 2. Eigenvalue charts of matrices A_b, A_0 and A , respectively.

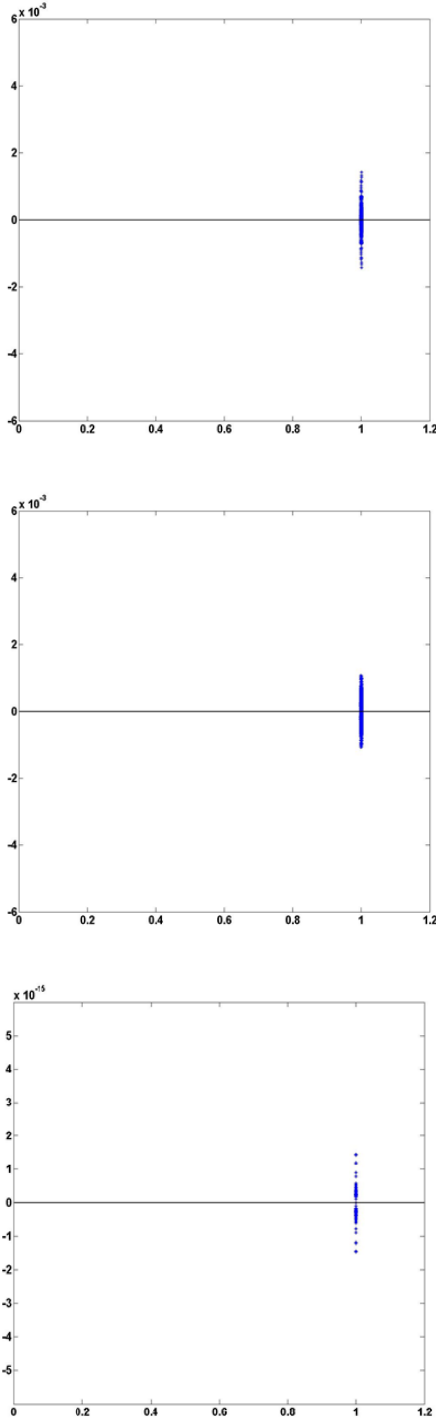


Fig. 3. Eigenvalue charts of matrices A_b , A_0 and A , respectively, with the application of the preconditioning technique.

$A_b := A_0 - \tau B$. The use of this matrix comes from the application of Backward Euler method, that is suitable for a number of initial steps when oscillations occur. For every other step from there on-wards, matrices A , A_0 and B are involved, arising from the DIRK scheme. Since all of the above matrices are large and sparse, we prefer an iterative method to solve the linear systems. The iterative method could be a stationary one or a Krylov subspace method. A stationary method would demand a matrix splitting in the form of $A = D - L - U$, but the nature and the properties

of the matrices indicate that would not be an appropriate approach. On the other hand, a Krylov subspace method where matrix-vector products are the dominant operations, suited for parallel execution, is an excellent prospect. Therefore, out of the options offered, the BiCGSTAB method [8] is preferred for the solution of the three linear systems in each step of the algorithm. The selection of this particular method is backed when having a look at the eigenvalues of each matrix involved in a linear system.

Calculation of the eigenvalues of the matrices (see Fig. 2 and 3) indicate that a suitable preconditioning technique would have a positive effect on the convergence rate of the non-stationary iterative method. Since the matrices are stored in a sparse format, the incomplete LU factorization of each matrix A_b , A_0 and A is a very convenient choice as a preconditioner, to wit $M_{A_b} := iLU(A_b)$, $M_{A_0} := iLU(A_0)$ and $M_A := iLU(A)$. An essential fact we should emphasize on, is that all three matrices are time independent, therefore their iLU factorization computation is performed once before performing the time procedure.

After the preconditioning technique is applied, it is clear that the eigenvalues of each one of the matrices are clustered around unity and notably close to the real semi-axis, indicating the proper selection of the preconditioning technique and encouraging the use of the BiCGSTAB method instead of GMRES [9].

II. THE PARALLEL ALGORITHM

The proposed numerical scheme requires the solution of three linear systems inside a time discretization procedure, where three time-independent matrices are involved, by employing an iterative method where basic linear algebra operations dominate. The decoding of this sentence indicates the development of an application that will utilize both the CPU and the GPU; sequential parts (back and forward substitutions) will be executed on the CPU, while the demanding floating-point operations of the compute-intensive parts will be transferred and performed on the GPU. It should be recalled that a Graphics Processing Unit possesses a great number of cores which are heavily multithreaded, working in a single instruction-multiple data mode; that makes it an excellent numeric computing engine, in case of matrix-vector multiplication operations for instance [10] and [11]. Therefore, in the parallel algorithm the creation of the matrices A_b , A_0 , A , B and vector a_{old} along with the computation of the iLU factorization of each matrix take place on the CPU. The data is being copied to the GPU's memory before the beginning of the time procedure and from there on the vast majority of the floating-point operations is performed on the GPU - the transfers that take place in every step of the time procedure are related to the vector's length the CPU needs to perform the preconditioned linear system's back and forward substitutions with the coefficient matrices M_{A_b} , M_{A_0} and M_A .

The primary algorithm is being described hereupon. As the time procedure is in progress the BiCGSTAB solver takes place three times in each iterative step in a CPU-GPU fashion way, therefore this particular part of the parallel algorithm is being described apart.

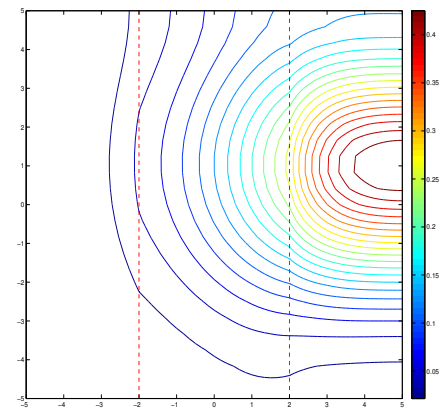
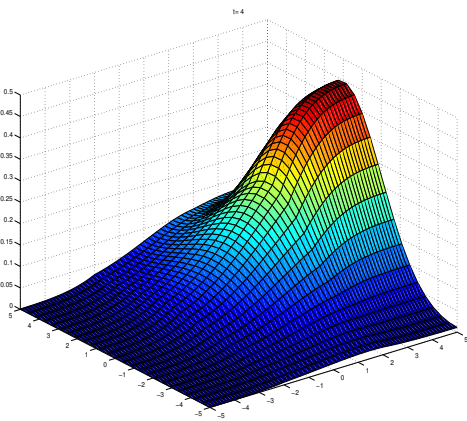
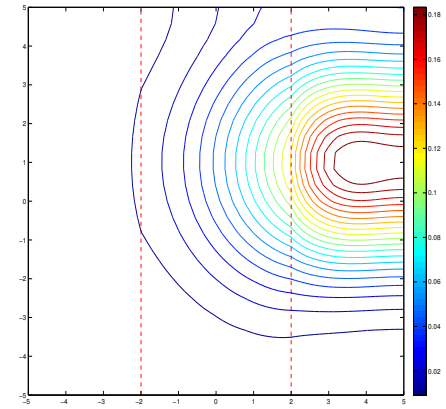
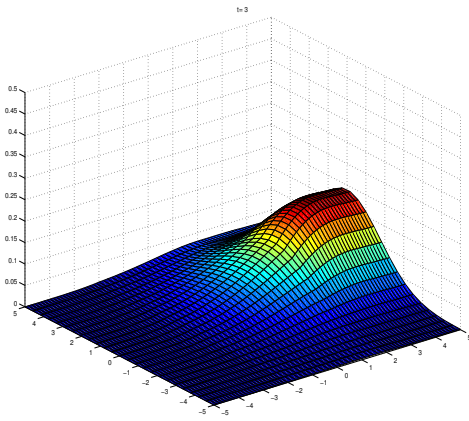
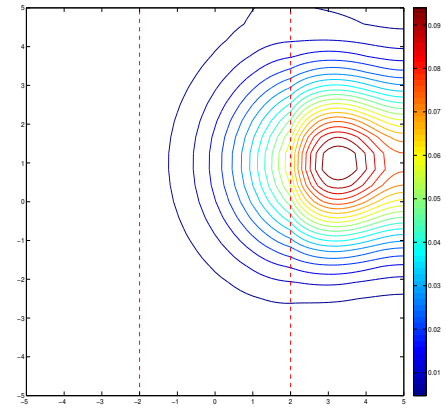
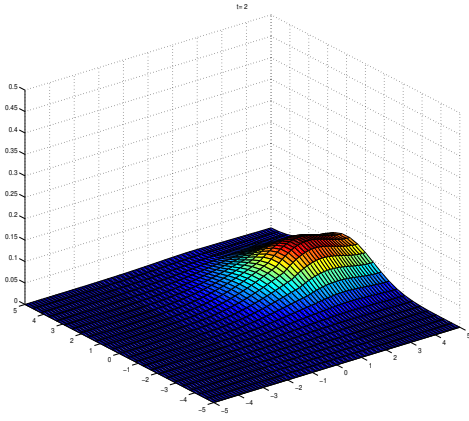
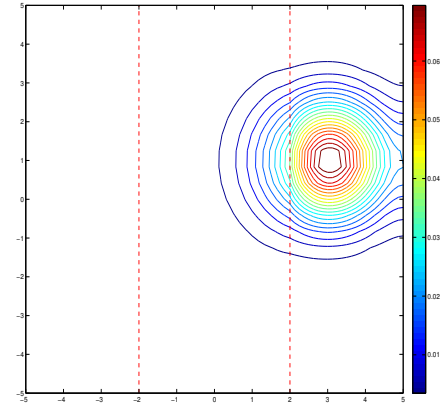
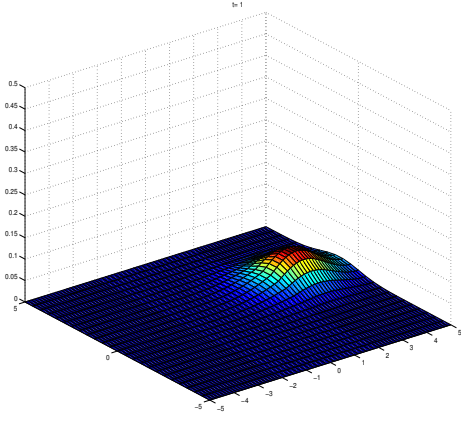


Fig. 4. Model problem's approximate solutions for 2D DHC-DIRK numerical scheme at time steps $t = 1, 2, 3$ and 4 respectively.

Fig. 5. Model problem's contour plots of approximate solutions at time steps $t = 1, 2, 3$ and 4 respectively.


```

Create matrices on CPU  $A_b, A_0, A, B$  and  $\mathbf{a}_{old}$ 
Compute on CPU iLU factorizations for matrices  $A_b, A_0$  and  $A$ 
Send from CPU to GPU matrices  $A_b, A_0, A, B$  and  $\mathbf{a}_{old}$ 
for  $t = dt$  to  $t_{max}$  with time step  $dt$ 
    Compute in parallel on GPU  $\mathbf{a}_0 = A_0 \mathbf{a}_{old}$ 
    if  $t \leq 2dt$  then
        Solve in parallel on GPU with BiCGSTAB  $A_b \mathbf{a}_{new} = \mathbf{a}_0$ 
    else
        Solve in parallel on GPU with BiCGSTAB  $A \mathbf{a}_1 = \mathbf{a}_0$ 
        Compute in parallel on GPU  $\mathbf{a}_0 = \mathbf{a}_0 - dt \frac{\sqrt{3}}{3} B \mathbf{a}_1$ 
        Solve in parallel on GPU with BiCGSTAB  $A \mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_0$ 
        Compute in parallel on GPU  $\mathbf{a}_2 = \mathbf{a}_0 + \frac{dt}{2} B(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ 
        Solve in parallel on GPU with BiCGSTAB  $A_0 \mathbf{a}_{new} = \mathbf{a}_2$ 
    endif
    Compute in parallel on GPU  $\mathbf{a}_{new} = \mathbf{a}_{old}$ 
endfor
Send from GPU to CPU solution vector  $\mathbf{a}_{new}$ 

```

The iLU preconditioned GPU - BiCGSTAB iterative method is described with the following parallel algorithm in case of solving the $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ linear system, with LU been the incomplete factorization of matrix A :

```

Choose initial approximation  $\mathbf{x}^{(0)}$  of the solution  $\mathbf{x}$ 
Compute on GPU  $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^{(0)}$ 
Choose  $\hat{r}$  (usually  $\hat{r} = \mathbf{r}^{(0)}$ )
for  $i = 1, 2, \dots$ 
    Compute on GPU  $\rho_{i-1} = \hat{r}^T \mathbf{r}^{(i-1)}$ 
    if  $\rho_{i-1} = 0$  method fails
    if  $i = 1$ 
        Compute on GPU  $\mathbf{p}^{(1)} = \mathbf{r}^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \frac{\rho_{i-1}}{\rho_{i-2}} \frac{\alpha_{i-1}}{\omega_{i-1}}$ 
        Compute on GPU  $\mathbf{p}^{(i)} = \mathbf{r}^{(i-1)} + \beta_{i-1}(\mathbf{p}^{(i-1)} - \omega_{i-1} \mathbf{v}^{(i-1)})$ 
    endif
    Send from GPU to CPU  $\mathbf{p}^{(i)}$ 
    Solve on CPU  $L \mathbf{y} = \mathbf{p}^{(i)}$ 
    Solve on CPU  $U \hat{\mathbf{p}} = \mathbf{y}$ 
    Send from CPU to GPU  $\hat{\mathbf{p}}$ 
    Compute on GPU  $\mathbf{v}^{(i)} = A \hat{\mathbf{p}}$ 
    Compute on GPU  $\alpha_i = \frac{\rho_{i-1}}{\hat{r}^T \mathbf{v}^{(i)}}$ 
    Compute on GPU  $\mathbf{s} = \mathbf{r}^{(i-1)} - \alpha_i \mathbf{v}^{(i)}$ 
    if  $\|\mathbf{s}\|$  is small enough then
        Compute on GPU  $\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{x}^{(i-1)} + \alpha_i \hat{\mathbf{p}}$  stop
    Send from GPU to CPU  $\mathbf{s}$ 
    Solve on CPU  $L \mathbf{y} = \mathbf{s}$ 
    Solve on CPU  $U \mathbf{z} = \mathbf{y}$ 
    Send from CPU to GPU  $\mathbf{z}$ 
    Compute on GPU  $\mathbf{t} = A \mathbf{z}$ 

```

```

Compute on GPU  $\omega_i = \frac{\mathbf{s}^T \mathbf{t}}{\mathbf{t}^T \mathbf{t}}$ 
Compute on GPU  $\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{x}^{(i-1)} + \alpha_i \hat{\mathbf{p}} + \omega_i \mathbf{z}$ 
Check for Convergence
if  $\omega_i = 0$  stop
Compute on GPU  $\mathbf{r}^{(i)} = \mathbf{s} - \omega_i \mathbf{t}$ 
endfor

```

III. CPU-GPU IMPLEMENTATION

The implementations of the developed algorithm were carried out on a shared memory HP SL390s G7, consisting of two 6-core Xeon X5600@2.8 GHz type processors with 12 MB Level 3 cache memory each. The total memory is 24 GB and the operating system is Oracle's Linux version 6.2. The machine is also equipped with a Fermi edition Tesla M2070 GPU, with 6 GB of memory and 448 cores on 14 multiprocessors. The time measurements comparison is between 2 different applications that were developed. The first one was developed in Matlab R2014b [12] and runs on a multicore CPU-only environment, while the second one was developed in Matlab R2014b and in PGI's 15.3 CUDA Fortran [13] and runs on a CPU-GPU environment. In the development of the CPU-GPU application, subroutines from cuBLAS and cuSPARSE libraries [14] (in GPU operations) and from SparseKit (in CPU operations) were used for CUDA 6.0 compiler suite. We have to mention that Matlab software does not support yet GPU computations for sparse matrices. This is the main reason that the CPU-GPU part of the algorithm is implemented in CUDA Fortran. The Matlab Compiler toolbox from 2014b software release is used for the compilation of the standalone multicore CPU only Matlab application.

The visual representation of the solution (Fig. 4 and 5), the evolution of the brain tumor in time, reveals the numerical scheme's successful treatment of the problem. The stripes where the discontinuities occur are visible as well as how effectively they are handled by the numerical scheme.

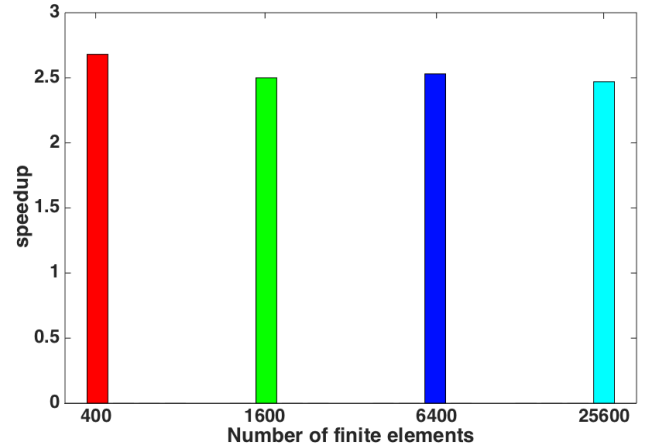


Fig. 6. Speedup measurements for CPU Matlab and CPU-GPU Matlab-CUDA Fortran implementations.

In the following Table I the time measurements (in seconds) are presented, comparing the Matlab multithread CPU implementation and the CUDA Fortran CPU-GPU implementation, in different cases of discretization, namely $n = 400, 1600, 6400$ and 25600 finite elements. The linear systems sizes are equal in each test case with the number of unknowns $N = 4n$ to be evaluated. Also the total degrees of freedom (dof) are mentioned for every finite element problem size. The observed acceleration is graphically presented in Fig. 6 for all test cases between the multicore CPU Matlab and the CPU-GPU Matlab-CUDA Fortran realization of the parallel algorithm.

Table I : Execution time measurements for Matlab multithread CPU and Matlab-CUDA Fortran CPU-GPU implementations

Number of elements	Number of unknowns	dof	CPU Matlab Time	CPU - GPU Time
400	1600	6400	0.83	0.31
1600	6400	25600	2.35	0.94
6400	25600	102400	11.5	4.55
25600	102400	409600	202	81.8

Beside the time results comparing the two applications, there are also a few comments to be made about the implementations using the GPU. Regarding the communication cost between the CPU and the GPU memories, the duration of the transfers when copying from the GPU to the CPU and backwards was the same for the same amount of data, in case of 25600 finite elements, and was less than 1 second. The same behavior was noticed in cases with less finite elements. In addition, when having a closer look at the GPU's computations, it was confirmed that the matrix-vector multiplication procedure is the most time consuming one. For instance, in case of 25600 finite elements, the matrix-vector operation was performed 5008 times and consumed nearly 64% of the GPU implementation time, while the vector addition operation which was performed 13450 times consumed 11%.

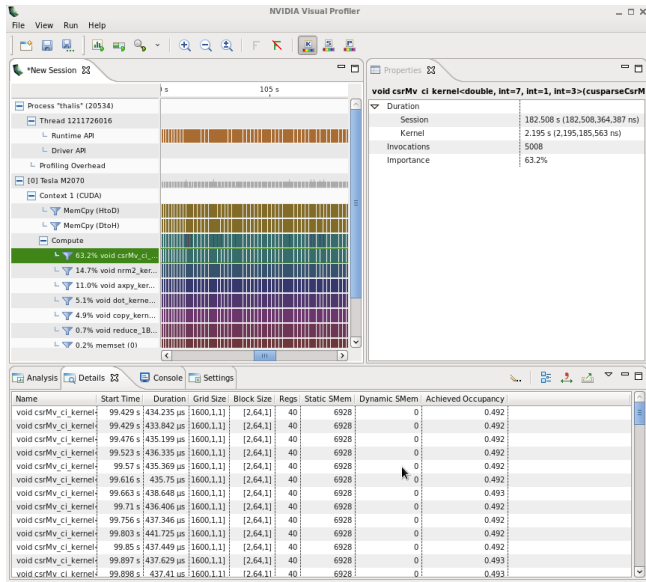


Fig. 7. NVIDIA's Visual Profiler graphical performance application tool.

The above observations were made using the NVIDIA's Visual Profiler as shown in Fig. 7.

IV. CONCLUSIONS

A new parallel algorithm for computing architectures with accelerators implementing the Discontinuous Hermite Collocation method has been developed. The algorithm was realized on machines with Graphics Processing Units and the time measurements were compared to Matlab multicore implementations. The results reveal the highest efficiency of the CPU-GPU implementation since the performance acceleration that was observed reached 2.5x.

ACKNOWLEDGMENT

The present research work has been co-financed by the European Union (European Social Fund ESF) and Greek national funds through the Operational Program *Education and Lifelong Learning* of the National Strategic Reference Framework (NSRF) - Research Funding Program: THALIS. Investing in knowledge society through the European Social Fund.

REFERENCES

- [1] G.C. Cruywagen, D.E. Woodward, P. Tracqui, G.T. Bartoo, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr., "The modeling of diffusive tumours, journal of biological systems," *Journal of Biological Systems*, vol. 3, pp. 937–945, 1995.
- [2] P.K. Burgess, P.M. Kulesa, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr., "The interaction of growth rates and diffusion coefficients in a three-dimensional mathematical model of gliomas," *Journal of Neuropathology and Experimental Neurology*, vol. 14(5), pp. 704–713, 1997.
- [3] D.E. Woodward, J.Cook, P.Tracqui, G.C. Cruywagen, J.D. Murray and E.C. Alvord Jr., "A mathematical model of glioma growth: the effect of extent of surgical resection, journal of biological systems," *Cell Proliferation*, vol. 29, pp. 269–288, 1996.
- [4] K.R. Swanson, E.C. Alvord Jr. and J.D. Murray, "A quantitative model for differential motility of gliomas in grey and white matter," *Cell Proliferation*, vol. 33, pp. 317–329, 2000.
- [5] K. R. Swanson, C. Bridge, J. D. Murray and E. C. Alvord Jr., "Virtual and real brain tumours:using mathematical modeling to quantify glioma growth and invasion," *J.Neurol.Sci.*, vol. 216, pp. 1–10, 2003.
- [6] I.E. Athanasakis, M.G. Papadomanolaki, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, "Discontinuous hermite collocation and diagonally implicit rk3 for a brain tumour invasion model," *Proceedings of WCE 2013 Vol I, IAENG*, pp. 241–246, 2013.
- [7] R. Alexander, "Diagonally implicit runge-kutta methods for stiff odes," *SIAM Num. Anal.*, vol. 14(5), pp. 1006–1021, 1977.
- [8] H.A. van der Vorst, "Bi-CGSTAB : A fast and smoothly converging variant of bi-cg for the solution of nonsymmetric linear systems," *SIAM J. Sci.Stat.Comp.*, vol. 13, pp. 631–644, 1992.
- [9] Y. Saad, *Iterative methods for sparse linear systems*. SIAM, 2003.
- [10] E.N. Mathioudakis, N.D. Vilanakis, E.P. Papadopoulou and Y.G. Saridakis, "Parallel iterative solution of the hermite collocation equations on GPUs," *Proceedings of WCE 2013 Vol II, IAENG*, pp. 1281–1286, 2013.
- [11] N.D. Vilanakis and E.N. Mathioudakis, "Parallel iterative solution of the hermite collocation equations on GPUs II," *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 490(1), 2014.
- [12] <http://www.mathworks.com>.
- [13] <http://www.pgroup.com>.
- [14] <http://www.nvidia.com/cuda>.

Combining Stochastic Optimization and Numerical Methods-Software for the Pumping Management of Coastal Aquifers: Case Study of a Rectangular Homogeneous Aquifer

I.E. Athanasakis[†], Z. Dokou[‡], E.A. Mathioudakis^{*}, P.N. Stratis[†] and N.D. Vilanakis[†]

Abstract—The advantages of using the Algorithm of Pattern Extraction (ALOPEX) stochastic optimization technique in combination with both analytical models as well as 3D numerical simulators have been recently studied in detail in [23]–[25]. In this work, we present some preliminary results from the coupling of the Collocation method and the FEniCS open source modules to the ALOPEX algorithm as an effective pumping management process of 2D aquifer approximation models. The results refer to a test case of a homogeneous rectangular aquifer that approximates the freshwater coastal aquifer at Vathi area in the Greek island of Kalymnos. The objective is, on the one hand, to provide an optimal pumping management plan for the aquifer that would maximize the total freshwater volume pumped from the aquifer and, on the other, to keep all pumping active locations safe from saltwater intrusion. For this we adapt and use the ALOPEX parameter configuration and the efficient penalty system introduced in [25] with guard points around the pumping locations. Our numerical simulations indicate that our pumping management results using the Collocation and FEniCS methods strongly compete the results obtained by using the analytical representation of the flow potential, known for this type of aquifers. Therefore, both Collocation and FEniCS methods can be effectively used to investigate the problem of optimal pumping management in heterogeneous aquifers with complex geometry boundaries and in general, aquifers where the analytical representation of the flow potential is unavailable.

Index Terms—Collocation, FEniCS, finite elements, ALOPEX stochastic optimization, guard points, penalty system, coastal aquifers, saltwater intrusion, pumping management.

I. INTRODUCTION

SALINIZATION of freshwater is the direct result from saltwater intrusion into a freshwater coastal aquifer. It is mainly due to unrestrained groundwater withdrawals that disturb the natural balance of freshwater - saltwater in groundwater systems. The uncontrolled progress of the phenomenon

implies the decrease of freshwater storage in the aquifer, and in some cases, the abandonment of the supply wells. It is clear, that saltwater intrusion poses a significant threat to the quality of groundwater reserves in coastal aquifers, thus an efficient management strategy that protects groundwater reserves is required. In the name of the design of a sustainable water management strategy in coastal aquifers, researchers have been focused on the combined use of mathematical models, numerical simulations and optimization algorithms.

The saltwater intrusion phenomenon at the Vathi aquifer in the Greek island of Kalymnos, has been thoroughly studied in the past. In [19] (see also [20]), the finite difference MODFLOW and the finite element PTC models are employed to simulate saltwater intrusion and compare the numerical results to the ones obtained by geostatistical techniques (Kriging). In [12] the PTC simulator is coupled by a differential evolution (DE) algorithm to maximize the total extracted freshwater volume from five pre-selected pumping locations (production wells) while satisfying minimum hydraulic head constraints at specified locations, ensuring no further intrusion of seawater. The same approach was taken in [6] using sequential linearization in order to reduce the computational cost. The Vathy aquifer has been also studied in [27] by making use of geostatistical techniques (Kriging and Ordinary Kriging). Finally, in the recent work of [25], where a detailed analysis of the ALOPEX algorithm was presented and a complete penalty system was devised, the performance, stability and sensitivity analysis performed for the ALOPEX algorithm, as it pertains to the analytical flow potential model described in [16], revealed the effectiveness of the method. Different recharging and pumping scenarios were examined, and in each case, ALOPEX created an optimal pumping plan, where the freshwater pumping volume was maximized, while all the wells were kept safe from saltwater intrusion.

FEniCS is an open source automated programming environment, that provides automated solution for differential equations by the Finite Element Method, and is licensed under the GNU GPL. FEniCS has recently been acknowledged as a mainstream scientific computing tool and continues to build its reputation as user-friendly, open source software comprising a large number of scientific computing tools. The solution of a physical problem, like the saltwater intrusion problem in this study, in FEniCS consists of a number of discrete steps, after

This work was supported by the ESF and Greek national funds through the operational program *Education and Lifelong Learning* of the National Strategic Reference Framework (NSRF) THALES (Grant number: MIS-379416).

[†]School of Production Engineering and Management, Applied Math & Computers Laboratory, Technical University of Crete, 73100 Chania, Crete, Greece

[‡]School of Environmental Engineering, Technical University of Crete, 73100 Chania, Crete, Greece

^{*}School of Mineral Resources, Applied Math & Computers Laboratory, Technical University of Crete, 73100 Chania, Crete, Greece

Email of the corresponding author: y.saridakis@amcl.tuc.gr

the PDE and the boundary conditions have been identified. Specifically, the user has to reformulate the PDE problem as a variational problem, and then, make a Python program where the formulas in the variational problem are coded, along with definitions of the input data. FEniCS thereafter, automatically generates basis functions, evaluates the variational forms and assembles the finite elements.

Furthermore, for comparison reasons, we used the Hermite Collocation Method (HC) for the numerical treatment of the PDE model. HC is a fourth order spatial discretization method for BVPs that requires no numerical integration unlike other finite element methods. In some of our recent work (cf. [1], [2]) we used the HC method, coupled with third order Diagonally Implicit and Strong Stability Preserving Runge-Kutta (RK) schemes, for the numerical investigation of a general class of parabolic PDEs for medical and biological applications. Therefore, the high accuracy and stability of the HC-RK, were the reasons that prompted us to implement the method in large-scale steady state models like the saltwater intrusion.

The approach in this study is to efficiently couple a Collocation or a FEniCS module, that would deal with the PDE arising from the physical problem, with the latest ALOPEX version introduced in [25]. In this hybrid coupling, an extended guarding system will be used in order to create a control zone around the pumping locations. The ultimate objective is the development of an open source simulation model coupled with a stochastic optimization algorithm, that could provide an efficient pumping management strategy.

II. METHODOLOGY

A. Simulation model

The governing Struck's flow potential equation, is expressed as

$$\nabla \cdot (K \nabla \phi) + N - Q = 0 \quad (1)$$

where ϕ denotes the flow potential, K is the hydraulic conductivity, N is the recharge distributed over the surface of the aquifer and Q is the discharge rate over the active pumping area.

B. Model assumptions

The above model equation is valid inside the aquifer under the following two common simplifications:

- the sharp interface assumption, where the no mixing zone is assumed between the fresh and salt water, and
- the Ghyben-Herzberg relationship:

$$\xi = \frac{\rho_f}{\rho_s - \rho_f} h_f \approx 40 h_f, \quad (2)$$

where ξ is the interface depth below the sea level, h_f the hydraulic head of the freshwater above the sea level, $\rho_f = 1000 \text{ kg/m}^3$ the density of freshwater and $\rho_s = 1025 \text{ kg/m}^3$ the density of saline water. Assuming steady state conditions, this equation is used to estimate the position of the saltwater interface inside the aquifer.

This approach has been applied and extended by many researchers in the literature (e.g. [3], [12], [13], [16], [20] among

many others), while a discussion about the validity of use of this approach was conducted in the work of [14].

FEniCS

The FEniCS implementation presupposes the formulation of the variational problem, by the multiplication of the equation by a test function v and then integrating by parts. The bilinear and the linear form are introduced then as

$$a(u, v) = \int_D K \nabla u \nabla v dx \quad (3)$$

$$L(v) = \int_D d \cdot v dx + \int_{\partial D} q \cdot v dx \quad (4)$$

respectively [15]. FEniCS automatically assembles the linear system of the equations, using the proper boundary conditions, solves and provides the flow potential ϕ of the aquifer.

Hermite Collocation

Let us consider a uniform partition into $N_x \times N_y$ squares of length h . The HC method seeks approximate solutions $u(x, y) \sim \phi(x, y)$ in the form:

$$u(x, t) = \sum_{i=1}^{2N_x+2} \sum_{j=1}^{2N_y+2} \alpha_{ij} \Phi_{ij}(x, y) \quad (5)$$

where $\Phi_{ij}(x, y) = \Phi_i(x) \Phi_j(y)$ are the bicubic hermite polynomials centered at node (x_i, y_j) . For the evaluation of the unknowns $\alpha_{ij} \equiv \alpha_{ij}(t)$, $i = 1, \dots, N_x + 1$ and $j = 1, \dots, N_y + 1$ the Collocation method produces a system of ordinary differential equations by forcing the approximate solution $u(x, t)$ to vanish at $(2N_x+2) \times (2N_y+2)$ interior and boundary collocation points. The needed interior collocation points, known as Gauss Points, arise from the roots of Legendre Polynomial in each element $I_{ij} = [x_i, x_{i+1}] \times [y_j, y_{j+1}]$ are given by

$$\begin{aligned} \sigma_{2i-1}^x &= \frac{x_i + x_{i+1}}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}}, & \sigma_{2i}^x &= \frac{x_i + x_{i+1}}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}} \\ \sigma_{2j-1}^y &= \frac{y_j + y_{j+1}}{2} - \frac{h}{2\sqrt{3}}, & \sigma_{2j}^y &= \frac{y_j + y_{j+1}}{2} + \frac{h}{2\sqrt{3}} \end{aligned}$$

Substituting, now, the approximate solution $u(x, y)$ of (5) into the PDE (1), observing that each element has 16 degrees of freedom and assuming that K is scalar, the elemental equations may be written as:

$$\begin{aligned} K \sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{kl} \frac{\partial^2 \Phi_{kl}}{\partial x^2} (\sigma_K^x, \sigma_L^y) + \\ + K \sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{kl} \frac{\partial^2 \Phi_{kl}}{\partial y^2} (\sigma_K^x, \sigma_L^y) = (Q - N) (\sigma_K^x, \sigma_L^y) \end{aligned} \quad (6)$$

for $K = 2i - 1, 2i$ and $L = 2j - 1, 2j$. Working as in [2] the elemental equations are expressed in the matrix form:

$$\sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{kl} \frac{\partial^2 \Phi_{kl}}{\partial x^2} (\sigma_K^x, \sigma_L^y) = \left(C_i^{(2)} \otimes C_j^{(0)} \right) \alpha_{ij} \quad (7)$$

and equivalently,

$$\sum_{k=2i-1}^{2i+2} \sum_{l=2j-1}^{2j+2} \alpha_{kl} \frac{\partial^2 \Phi_{kl}}{\partial y^2} (\sigma_K^x, \sigma_L^y) = (C_i^{(0)} \otimes C_j^{(2)}) \alpha_{ij} \quad (8)$$

where, $C_i^{(0),(2)}$, $C_j^{(0),(2)}$ are well defined in [1], [2] and $\alpha_{ij} = \alpha_i \otimes \alpha_j$ for

$$\alpha_i = [\alpha_{2i-1}(t) \ \alpha_{2i}(t) \ \alpha_{2i+1}(t) \ \alpha_{2i+2}(t)]^T \quad (9)$$

and

$$\alpha_j = [\alpha_{2j-1}(t) \ \alpha_{2j}(t) \ \alpha_{2j+1}(t) \ \alpha_{2j+2}(t)]^T \quad (10)$$

Furthermore, the combination of the well known properties of hermite and the Boundary Conditions yields the relations:

$$\alpha_{1j}(t) = \alpha_{(2N_x+2)j}(t) = \alpha_{i2}(t) = \alpha_{i(2N_y+2)}(t) = 0 \quad (11)$$

Finally, the above elemental and boundary collocation equations lead to linear system of the form:

$$K (C^{(2)} \otimes C^{(0)}) \alpha + K (C^{(0)} \otimes C^{(2)}) \alpha = f \quad (12)$$

where, of course,

$$f = [f(\sigma_1^x, \sigma^y), f(\sigma_2^x, \sigma^y), \dots, f(\sigma_{2N_x+2}^x, \sigma^y)]$$

for $f(x, y) = (Q - N)(x, y)$ and $\sigma^y = [\sigma_1^y, \sigma_2^y, \dots, \sigma_{2N_y+2}^y]$.

C. Study area and numerical model development

The test area of this study is an homogeneous (in terms of hydraulic parameter values), almost rectangular aquifer, located at the area of Vathy, in the Greek island of Kalymnos. The aquifer is 7 km long ($L = 7000$ m) and 3 km wide ($W = 3000$ m) and is characterized by the following properties: $K = 100$ m/day, $d = 25$ m, $N = 30$ mm/year, $Q_A = 20000$ m³/day, $(Q_i, \overline{Q}_i) = (200, 2500)$ m³/day. In the aquifer area there are 5 active pumping wells located in the following spots: $x_i = (2640, 3340, 3920, 4620, 4860)$ m, $y_i = (1560, 2200, 960, 2460, 1580)$ m.

The well with the higher impact in the pumping procedure is the well No 1, the closest one to the saltwater interface, as it moves inward the aquifer. This is the critical well of the optimization procedure, as most of the ALOPEX's implied penalties will be on this active pumping location. So, the protection of this well is of the highest importance, because this way, we can automatically protect all the other wells of the aquifer. We note here, that for reasons explained in [25], we choose a guard point in front of every well (see Fig. 1), in a safety distance of $d_s = 400$ m, preserving that way the stagnation points in front of all the wells and thus, creating stable pumping solutions.

As far as the boundaries are concerned, a Dirichlet boundary condition of fixed head equal to 0 m were applied along the coastline, at the left side of the aquifer, to simulate the sea boundary. On the upper, lower and right side of the aquifer, Neumann conditions were applied.

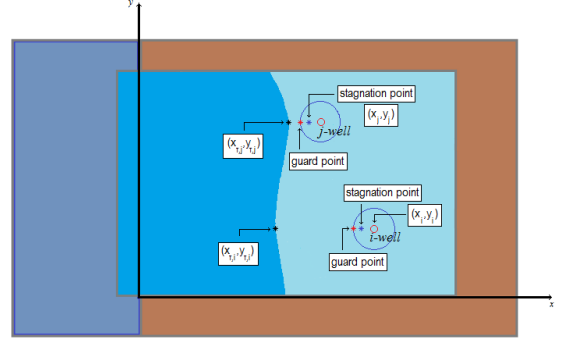


Fig. 1. Guard and stagnation points in front of an aquifer well.

D. Pumping management

The objective in this study, is to maximize the groundwater withdrawal, while avoiding saltwater front entering into safe zones around all active wells. This task can be achieved by the following nonlinear optimization problem (cf. [25]):

$$\begin{aligned} \text{maximize : } P &\equiv P(Q) = e^{-[S(\overline{Q}) - S(Q)]^2 / S^2(\overline{Q})} \in [0, 1] \\ \text{s.t : } 0 &\leq \underline{Q}_i \leq Q_i \leq \overline{Q}_i < Q_A, \\ S(Q) &= \sum_{i=1}^M Q_i \leq Q_A \\ x_{\tau,i} &\leq x_i - d_s, \ i \in \{1, \dots, M\}, \end{aligned} \quad (13)$$

where Q_i , $i = 1, \dots, M$ denotes the pumping rate of the i^{th} active well with coordinates (x_i, y_i) , P is the profit (objective) function, \underline{Q}_i and \overline{Q}_i are the minimum and maximum, respectively, pumping capabilities of the i^{th} well, Q_A is the total recharge capabilities of the aquifer, $x_{\tau,i}$ is the x -coordinate of the saltwater's front in the neighborhood i^{th} well, d_s is a pre-specified safety distance (set equal to 400m in the present implementation) and M is the number of active wells in the region.

E. Constrained ALOPEX for pumping management

For the solution of the nonlinear optimization problem (13), described in the previous section, we employ the following ALOPEX V stochastic optimization algorithm coupled by a penalty system to enforce problem's constraints.

$$Q^{(k)} = Q^{(k-1)} + c_k \Delta Q^{(k-1)} \Delta P^{(k-1)} + g^{(k)}, \quad (14)$$

with

$$\begin{aligned} \Delta Q^{(k)} &= Q^{(k)} - Q^{(k-1)} \\ \Delta P^{(k)} &= P(Q^{(k)}) - P(Q^{(k-1)}) \end{aligned} \quad (15)$$

where c_k is a real parameter controlling the amplitude of the feedback term, while $g^{(k)}$ is the noise vector, with values uniformly distributed in an appropriately chosen interval, in order to provide the necessary agitation needed to drive the process to global extrema avoiding local problems. The methodology for determining a near optimal set of values for c_k and $g^{(k)}$ is thoroughly discussed in [25].

F. The penalties management

In each ALOPEX V iteration step all control variables Q_i , $i = 1, \dots, M$ are being rectified, if needed, via a two-phase penalty system, that is described in [25]. Phase one refers to the enforcement of the first two constraints described in (13), and precedes the Collocation or FEniCS's implementation, while phase two refers to the enforcement of the third *toe-constraint* described in (13), needs the trace of the saltwater interface and, thus, follows the Collocation or FEniCS's implementation. A 5% correction policy is also used here, to create the necessary agitation in every ALOPEX step, in order to help the algorithm to propose an new pumping solution, that is better than the one of the previous step and at same time within the predefined constraints of the problem.

III. NUMERICAL SIMULATIONS

In this section we present the results of the Collocation/ALOPEX and FEniCS/ALOPEX procedures in a typical run of 500 iterations, side by side with the analytical/ALOPEX approach, presented in our previous works [23], [24] and [25], for comparison reasons. We note that in all numerical simulations the wells numbering is considered to be numbered in a left-to-right fashion, namely $x_1 \leq \dots \leq x_M$.

TABLE I
ANALYTICAL, COLLOCATION AND FENICS (IN COOPERATION WITH ALOPEX) PERFORMANCES:

Problem Parameters	Analytical solution optimal values	Collocation optimal values	FEniCS optimal values
k (# iter.)	161	383	446
$P(Q^{(k)})$	0.62716	0.63195	0.63211
$Q_1^{(k)}$	209.75	201.16	202.62
$Q_2^{(k)}$	1089.32	317.34	695.46
$Q_3^{(k)}$	1069.24	1101.93	1303.02
$Q_4^{(k)}$	306.39	1342.76	376.06
$Q_5^{(k)}$	1287.18	1068.57	1457.01
$S(Q^{(k)})$	3961.88	4031.76	4034.18

As it can be observed in Fig. 2, the proposed optimal solution in each case, corresponds to a set of pumping rates, that keeps all active pumping locations safe from saltwater intrusion. The saltwater front cannot infiltrate the safety zone created around every well, due to the activation of the constrains of the pumping procedure. The objective (profit) function in less than 50 iterations in all three cases (see Fig. 2c, 2d and 2e), reaches its maximum value, corresponding to an optimal pumping solution. Then, for the rest of the optimization procedure, it examines alternative but equivalent sets of optimal solutions, in order to find the global maximum of the profit function. Finally, we should comment that the ALOPEX is a stochastic optimization procedure, following every time a different path in order to find its optimal value, explaining that way the differences in the optimal pumping plans presented in the Table I above.

IV. CONCLUSION

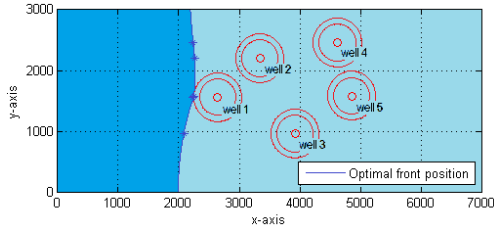
In this study, we combined the Collocation and the FEniCS PDE solver modules with the latest constrained version of the ALOPEX stochastic optimization technique, in an attempt to maximize groundwater withdrawal, in the existing pumping well network in a coastal aquifer at the Greek island of Kalymnos. At the same time, we created a safe zone around every active well in the region, in order to create stable optimal solutions, as they are described in [25], and of course to protect the pumping locations from the saltwater intrusion phenomenon. The application of the Collocation and FEniCS modules successfully replaced the part of the analytical solution of the flow potential ϕ in our optimization algorithm, estimating the position of the saltwater front in every iteration step. This, ultimately, provides the option of the future examination of aquifers with more complex geometry, hydraulic parameters with spatial variability and in general, cases where the analytical solution of the flow potential is unknown. In summary, the numerical results presented in this work, shall well be considered as an encouraging first step to further investigation on the performance of the combination of the presented methods.

ACKNOWLEDGEMENT

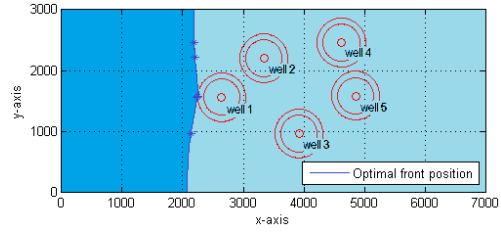
The present research work has been co-financed by the European Union (European Social Fund ESF) and Greek national funds through the Operational Program Education and Lifelong Learning of the National Strategic Reference Framework (NSRF) - Research Funding Program: THALES (Grant number: MIS-379416). Investing in knowledge society through the European Social Fund.

REFERENCES

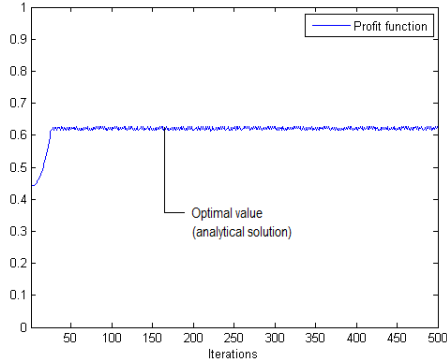
- [1] I. Athanasakis, M. Papadomanolaki, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *Discontinuous Hermite Collocation and Diagonally Implicit RK3 for a Brain Tumour Invasion Model*, Proceedings of the World Congress on Engineering 2013 Vol I, pp241-246
- [2] I. Athanasakis, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *Hermite Collocation and SSPRK Schemes for the Numerical Treatment of a Generalized Kolmogorov-Petrovskii-Piskunov Equation*, Proceedings of The World Congress on Engineering 2015, pp137-142
- [3] R. Ababou and A. Al-Bitar, *Salt water intrusion with heterogeneity and uncertainty: mathematical modeling and analyses*, Developments Water Sci., 55:1559-1571, 2004.
- [4] M. Aivalioti and G. Karatzas, *Modeling the flow and leachate transport in the vadose and saturated Zone - A field application*, Env Model Assess., 11(1):81-87, 2006.
- [5] D. Babu, G. Pinder, A. Niemi, D. Ahlfeld and S. Stothoff, *Chemical transport by three-dimensional groundwater flows*, Princeton University, 84-WR-3, USA, 1997.
- [6] Z. Dokou and G. Karatzas, *Saltwater intrusion estimation in a karstified coastal system using density-dependent modelling and comparison with the sharp-interface approach*, Hydrol. Sci., J 57(5):985-999, 2012.
- [7] Z. Dokou and G. Pinder, *Extension and field application of an integrated DNAPL source identification algorithm that utilizes stochastic modeling and a Kalman filter*, J. Hydrol., 398(3-4):277-291, 2011.
- [8] V. Guvana, S. Wade and M. Barcelo, *Simulation of regional ground water flow and salt water intrusion in Hernando County, Florida*, Ground Water, 38(5):772-783, 2000.
- [9] C.W. Fetter, *Applied Hydrogeology*, Merrill Publishing Company, 1988.
- [10] E. Harth and E. Tzanakou, *Aloplex: A stochastic method for determining visual receptive fields*, Vision Research, 14, pp.1475, B1482, 1974.
- [11] G. Karatzas and Z. Dokou, *Managing the saltwater intrusion phenomenon in the coastal aquifer of Malia, Crete using multi-objective optimization*, Hydrogeology, 2015, accepted.



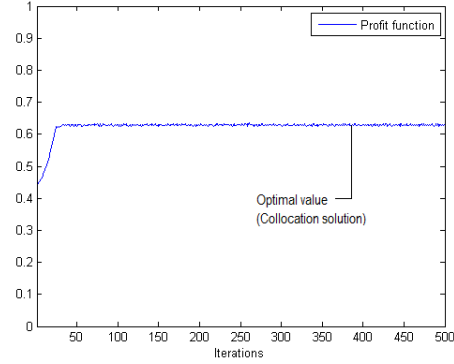
(a) Saltwater front using the analytical solution and the optimal pumping rates. All wells are kept safe from saltwater intrusion.



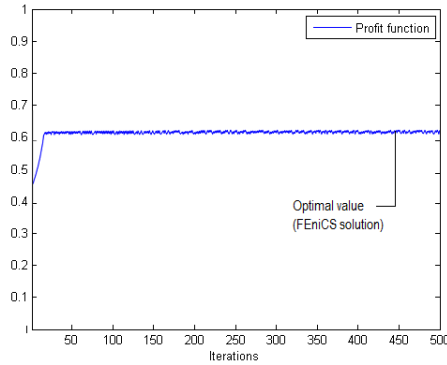
(b) Common saltwater front using the Collocation and the FEniCS methods, equipped with the optimal pumping rates. All wells are kept safe from saltwater intrusion.



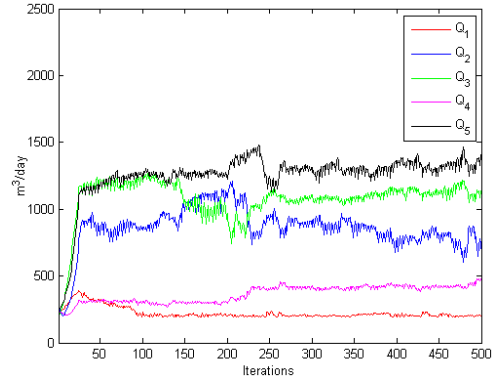
(c) Values of the profit function $P(Q^{(k)})$, using the analytical solution.



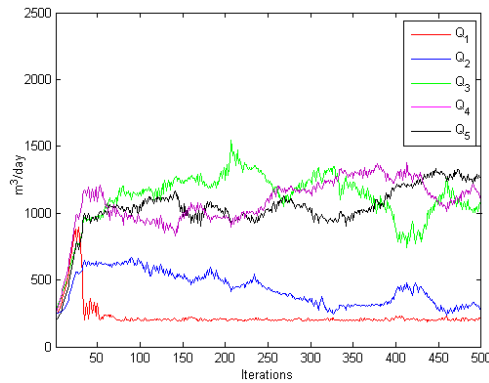
(d) Values of the profit function $P(Q^{(k)})$, using the Collocation method.



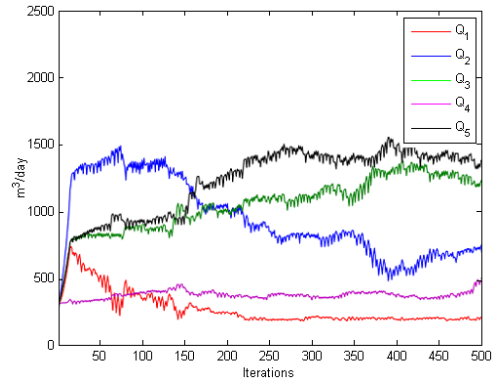
(e) Values of the profit function $P(Q^{(k)})$, using the FEniCS method.



(f) Pumping rates Q_i , using the analytical solution.



(g) Pumping rates Q_i , using the Collocation method.



(h) Pumping rates Q_i , using the FEniCS method.

Fig. 2. Analytical solution and Collocation and FEniCS methods, in cooperation with the ALOPEx optimization algorithm performance, for the test case of Kalymnos aquifer with five active pumping locations in a typical run of 500 iterations.

- [12] S. Karterakis, G. Karatzas, I. Nikolos and M. Papadopoulou *Application of linear programming and differential evolutionary optimization methodologies for the solution of coastal subsurface water management problems subject to environmental criteria*, J. Hydrol., 342(3-4):270-282, 2007.
- [13] M. Koukadaki, G. Karatzas, M. Papadopoulou and A. Vafidis, *Identification of the saline zone in a coastal aquifer using electrical tomography data and simulation*, Water Resour. Manag., 21(11):1881-1898, 2007.
- [14] Llopis-Albert C., Pulido-Velazquez D., *Discussion about the validity of sharp-interface models to deal with seawater intrusion in coastal aquifers* Hydrological Processes 28: 3642-3654, 2014.
- [15] A. Logg, K. Mardal, G. Wells, *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method (The FEniCS Book)*, ISBN: 978-3-642-23098-1 (Print) 978-3-642-23099-8 (Online)
- [16] A. Mantoglou, *Pumping management of coastal aquifers using analytical models of saltwater intrusion*, Water Resources Research, ISSN 0043-397, 39(12), 2003.
- [17] A. Mantoglou and M. Papantoniou, *Optimal Design Of Pumping Networks In Coastal Aquifers Using Sharp Interface Models*, J. Hydrol., 361:52-63, 2008.
- [18] A. Mantoglou, M. Papantoniou and P. Giannouloupoulos, *Management of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms*, J. Hydrol., 297(1-4):209-228, 2004.
- [19] M. Papadopoulou, E. Varouchakis and G. Karatzas, *Simulation of complex aquifer behaviour using numerical and geostatistical methodologies*, Desalination, 237:42-53, 2009.
- [20] M. Papadopoulou, E. Varouchakis and G. Karatzas, *Terrain Discontinuity Effects in the Regional Flow of a Complex Karstified Aquifer*, Environ. Model Assess, 15(5):319-328, 2010.
- [21] O.D.L. Strack, *Groundwater Mechanics*, Prentice Hall, 1989.
- [22] P. Stratis, Y. Saridakis, E. Papadopoulou and M. Zakyntinaki, *ALOPEX stochastic optimization for pumping management in freshwater coastal aquifers*, Journal of Physics: Conference Series, 490, 012112, 2014.
- [23] P. Stratis, Z. Dokou, G. Karatzas, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *Stochastic Optimization and Numerical Simulation for Pumping Management of the Hersonissos Freshwater Coastal Aquifer in Crete*, Procs. of INASE/CSCC-WHH 2015, Recent Advances in Environmental and Earth Sciences and Economics, 329-334, Zakynthos, 2015.
- [24] P. Stratis, Z. Dokou, G. Karatzas, E. Papadopoulou and Y. Saridakis, *PTC Simulations, Stochastic Optimization and Safety Strategies for Freshwater Pumping Management: Case Study of the Hersonissos Coastal Aquifer in Crete*, Applied Water Sciences, September 2015, submitted.
- [25] P. Stratis, G. Karatzas, E. Papadopoulou, M. Zakyntinaki and Y. Saridakis, *Stochastic optimization for an analytical model of saltwater intrusion in coastal aquifers*, 2015, (PLOSone submitted).
- [26] T. Reilly and A. Goodman, *Quantitative-Analysis of Saltwater Freshwater Relationships in Groundwater Systems - a Historical-Perspective*, J. Hydrol., 80(1-2):125-160, 1985.
- [27] K. Voudouris, D. Mandilaras and A. Antonakos, *Methods to define the areal distribution of the salt intrusion: Examples from South Greece*, 18 SWIM. Cartagena, Spain. (Ed. Aragus, Custod Io and Manzano), 2004.
- [28] M. Zakyntinaki and Y. Saridakis, *Stochastic optimization for a tip-tilt adaptive correcting system*, Comp. Phys. Commun., 150(3) 274, 2003.

SCHWARZ SPLITTING FOR THE STEADY STATE PROBLEM OF SALTWATER INTRUSION IN COASTAL AQUIFERS

E. Maroudas[‡], N. Vilanakis[‡], Ch. Antonopoulos[‡], E. Mathioudakis[‡], Y. Saridakis[‡] and M. Vavalis[‡]

Abstract—In this study we investigate the effectiveness of a meta-computing method on the modeling and the implementation of a truly multi-domain, multi-physics numerical scheme for an important practical problem in the area of environmental engineering. A case study of the steady state of saltwater intrusion in coastal aquifers is considered and a meta-computing scheme is developed and implemented on the basis of modern highly efficient software tools and practices. Numerical experiments exhibit the several desired characteristics of the proposed methodology and the associated implementation. They also justify the necessity for further research and development for an emerging new numerical computing paradigm that although known has not yet prove its practical value in particular for realistic engineering problems.

Keywords—Multi-Physics - Multi-Domain problems, FEniCS software, Schwarz method.

I. INTRODUCTION

OVERLAPPING domain decomposition methods [1] are efficient and flexible. They are also inherently suitable for high level parallel computing the numerical solution of partial differential equations (PDEs), where the methods of concern are based on a physical decomposition of a global solution domain. The global solution of the PDE problem is then sought by solving the smaller subdomain problems collaboratively and then combining their individual solutions. Their collaboration is realized through an iteration scheme that allows information flowing among the subproblems. These numerical methods are therefore termed as domain decomposition (DD) methods.

It is important to point out that our methodology is solely at continuous level. Linear algebra based DD methods are of obvious importance but unable to serve the high level meta-computing paradigm which we believe has great potential for multi-domain multi-physics (MDMP) problems. In this paradigm the basic components are PDE problems and numerical discretization and linear algebra computations take place only within each subdomain and not globally.

The rest of this paper is organized as follows. In the next session we briefly present our efforts to develop a framework for the numerical solution of MDMP problems.

The mathematical description of the well known Schwarz method that consists one of the basis of our framework is given in Section III. Section V includes material related to our implementation. Selective numerical results are presented in section VII. Our conclusions are given in section VIII.

II. A PLATFORM FOR MULTI-DOMAIN, MULTI-PHYSICS PDE PROBLEMS.

There exist a plethora of software platforms for solving composite PDE problems in various way and utilizing various programming languages and techniques. Our platform utilizes and extends the Python user interface of the FEniCS Dofn library. The reason behind our preference in Python is clearly practical. Its syntax is closer to UFL syntax and is less time consuming to experiment with due to its scripting nature. our platform is based on FEniCS 1.3 and is briefly described below. More information about our efforts to design and implement this platform can be found in [2].

As mentioned we focus on multi-domain multi-physics (MDMP) problems modeled with PDEs. As such we propose that every new solving module should be implemented on top of the existing ones, either as a new Python module using the available data structures and classes, or as an external dynamically shared C++ library, wrapped as a Python module using SWIG [3].

Our goal is to design and offer an enhanced meta-computing environment based on simple scripting languages and their practices that facilitate the numerical solution of PDEs associated with existing MDMP mathematical models. To accomplish that we utilize state of the art numerical solvers as offered by the supported FEniCS numerical discretization schemes and the state of the art linear algebra backends.

The platform aims to cover a wide range of problems, following a generic design that can support arbitrary shapes (rectangular or curvilinear) for domains and interfaces, for both 2D and 3D geometries.

One of our critical development decisions during our development phase was to keep compatibility with existing user codebases. Therefore to eliminate the possibility of breaking any existing functionality we kept the official release of FEniCS unmodified, putting all the new functionality on external Python modules.

Problems with great interest are problems with different elliptic differential operators on different subdomains as well as problems with different PDE discretization and solving

Manuscript received November 8, 2015.

[‡]School of Production Engineering and Management, Applied Math & Computers Laboratory, Technical University of Crete, 73100 Chania, Greece

[†]School of Mineral Resources Engineering, Applied Math & Computers Laboratory, Technical University of Crete, 73100 Chania, Greece

[‡]Department of Electrical and Computer Engineering, University of Thessaly, Gklavani 37, 38221 Volos, Greece

Email of the corresponding author : y.saridakis@amcl.tuc.gr

modules on different subdomains. FEniCS already supports independent subdomain definitions; the platform honors the existing infrastructure and builds upon it.

There are two emerging methodologies integrated to our platform, that can be used directly with any existing type of MDMP problem, as far as it conforms with the mathematical model behind them. One is a hybrid stochastic/deterministic Monte Carlo-based approach [4] and the other is an overlapping domain decomposition method known as the classical alternating Schwarz method [1, chapter 2.1] considered below.

III. SCHWARZ SPLITTING METHODOLOGY

THE classical alternating Schwarz method demonstrates the basic mathematical idea of overlapping domain decomposition methods.

For presentation reasons, and without loss of generality, we consider the following very simple boundary-value problem where the domain Ω is defined as the union of a circle Ω_1 and a rectangle Ω_2 , as it is depicted in Fig. 1.

$$\begin{aligned} -\nabla^2 u &= f \text{ in } \Omega = \Omega_1 \cap \Omega_2, \\ u &= g \text{ on } \partial\Omega. \end{aligned}$$

The part of the subdomain boundary $\partial\Omega_i \setminus \partial\Omega$ is referred to as the artificial internal boundary of the subdomain Ω_i for $i = 1, 2$.

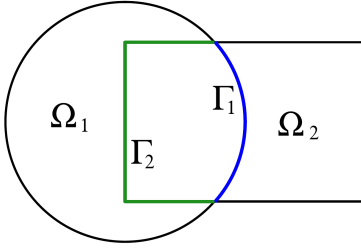


Fig. 1: A composite PDE model problem

In order to utilize analytical solution methods for solving the Poisson equation on a circle and a rectangle separately, Schwarz proposed the following iterative procedure for the solution in the entire composite domain Ω . Let u_i^n denote an approximate solution in subdomain Ω_i , and f_i the restriction of f to Ω_i . Starting with an initial guess u_0 , we iterate by computing successive approximate local solutions u_i^i , $i = 1, 2, \dots$, until they converge to the overall solution. During each iteration, we first solve the Poisson equation restricted to the circle Ω_1 , using the previous iterations solution from Ω_2 on the artificial internal boundary Γ_1 :

$$\begin{aligned} -\nabla^2 u_1^i &= f_1 \text{ in } \Omega_1, \\ u_1^i &= g \text{ on } \partial\Omega_1 \setminus \Gamma_1, \\ u_1^i &= u_2^{i-1} | \Gamma_1 \text{ on } \Gamma_1. \end{aligned}$$

Then, we solve the Poisson equation on the rectangle Ω_2 , using the latest solution u_1^i on the artificial internal boundary Γ_2 :

$$\begin{aligned} -\nabla^2 u_2^i &= f_2 \text{ in } \Omega_2, \\ u_2^i &= g \text{ on } \partial\Omega_2 \setminus \Gamma_2, \end{aligned}$$

$$u_2^i = u_1^i | \Gamma_2 \text{ on } \Gamma_2.$$

Note that the classical alternating Schwarz method is sequential by nature, meaning that the two Poisson solves within each iteration must be carried out in a predetermined sequence, first in Ω_1 then in Ω_2 . For more than two subdomains though, it exhibits pipeline type of parallelism in a Gauss-Seidel manner.

A variant of the above method, which inherently promotes parallel computing, is called additive Schwarz method and is a Jacobi type variation of the above described scheme. This variant converges slower for almost all problems.

IV. AN ENVIRONMENTAL ENGINEERING APPLICATION

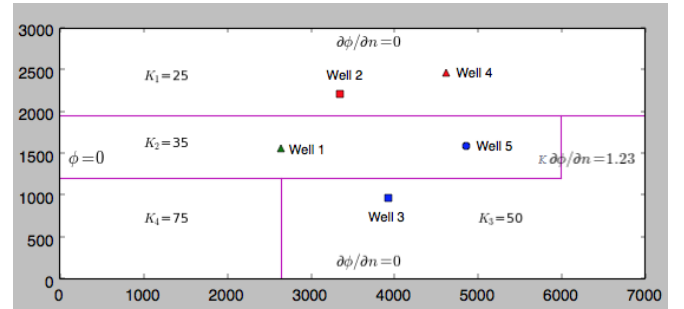


Fig. 2: Kalimnos aquifer.

To demonstrate the potential of the PDE solving procedure mentioned above and of the associated implementation framework to deal with large application problems, we consider solving a PDE that describes the steady state problem of saltwater intrusion in coastal aquifers. The PDE needs to be solved in every iteration step of a stochastic optimization algorithm (cf. [5]–[7]), used to optimally control pumping from all active pumping sources (wells) of a coastal aquifer and protect them from salinization. Its solution (flow potential) is being used to locate/determine the interface between salt and fresh water. The aquifer considered here and depicted in Fig. 2 simulates of a real coastal aquifer located at Bathi area in the Greek island of Kalymnos (cf. [8]). The computer realization of the problem is achieved by using FEniCS [9], [10] computing platform, while the whole implementation has been developed in Python.

Specifically, let us consider the elliptic PDE

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + N - Q = 0, \quad (x, y) \in \mathcal{R}, \quad (1)$$

where ϕ (m^2) denotes the Struck's flow potential, N (m/day) denotes the total aquifer recharge uniformly distributed over the surface of the aquifer, K (m/day) denotes the hydraulic conductivity and Q (m/day) denotes the total aquifer discharge. Furthermore, let us assume that the rectangular-shaped aquifer \mathcal{R} extends over an area of 7×3 Km, is *heterogeneous* with respect to the hydraulic conductivity, and contains M wells w_i ($i = 1, \dots, M$) pumping at Q_i (m^3/day) rates. In our test problem the above physical parameters are assumed the values of $N = 0.03$ $m/year$, $M = 5$ and $Q_1 = 252$ m^3/day , $Q_2 = 450$ m^3/day , $Q_3 = 749$ m^3/day ,

$Q_4 = 1045 \text{ m}^3/\text{day}$ and $Q_5 = 1270 \text{ m}^3/\text{day}$, while the hydraulic conductivity K assumes the values $K_1 = 25 \text{ m/day}$, $K_2 = 35 \text{ m/day}$, $K_3 = 50 \text{ m/day}$ and $K_4 = 75 \text{ m/day}$ associated with the four sub-regions of \mathcal{R} (see Fig. 2). Moreover, the total discharge rate Q assumes the value

$$Q = \sum_{i=1}^5 \tilde{Q}_i \delta(x - x_i, y - y_i)$$

where \tilde{Q}_i denotes the pumping rate Q_i normalized over some elemental area and $\delta(x - x_i, y - y_i)$ denotes the Delta function. Finally, Dirichlet boundary condition ($\phi(0, y) = 0$) is assumed on the left (coastline) edge, while, on all other edges, Neumann boundary conditions are imposed, as shown in Fig. 2.

The above problem has been solved using the FEniCS FE solver and the computed flow potential is depicted in Fig. 3.

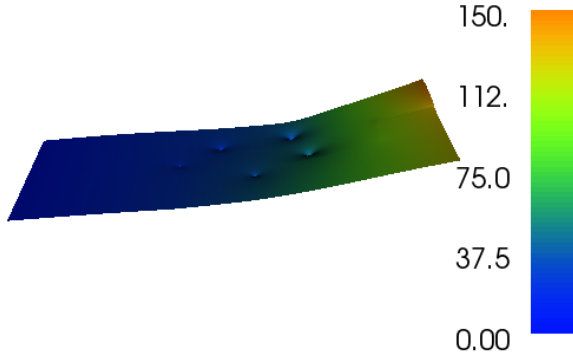


Fig. 3: Kalimnos aquifer flow potential

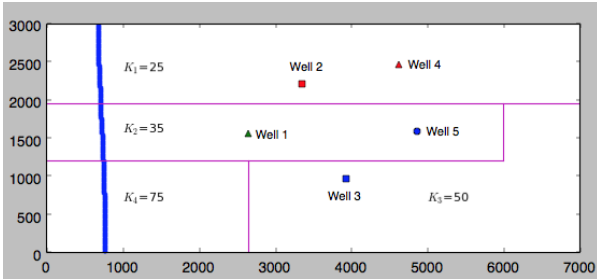


Fig. 4: Interface location between salt and fresh water.

The interface between salt and fresh water is being algorithmically determined in the sequel, and shown graphically in Fig. 4.

V. IMPLEMENTATION

We implement the additive Schwarz method and use it as a high level solver to our MPDMP problems. The full description of our implementation is beyond the scope of this paper. Below we discuss few implementation issues that characterize our implementation.

A. Split problem into files

For the best utilization of our platform, we propose and encourage the use of an organization scheme based on defining each subdomain into a separate file.

This organization scheme highlights the dependence between domains as distinct programming units. It also allows easy collaboration and sharing between different researchers or research groups and hides problem definition details from the not interested parties. Another more technical reason is that this subdomain separation to files, greatly simplifies the implementation for supporting remote solvers and methods as web services, a direction we follow which is quite attractive due to its performance benefits.

B. Python module

All underlying datatypes of the base classes are either pure Python or FEniCS objects. There is no dependence from third party software libraries at this level. The Python module consists of two files:

solverconfig.py provides the base classes with sanity checks and the API for the solver to function properly.

solver.py implements the solving routine among a handful of helper functions that simplify the whole process and further sanity checks to ensure the proper setup of the user's problem.

Inside solverconfig.py the module defines the following base classes:

class LogInfo Its purpose is to keep track of the progress in a particular subdomain. The available information may be written to a user defined logfile.

class ConfigCommon Holds separately the configuration of the whole solver. Some of the attributes which the user may set are the number of dimensions of the problem, the maximum number of iterations for the solver, a tolerance value that is used to check for convergence, the filenames of the subdomains which will take part in the solving process, whether the user wants the creation of logfiles and whether they want visual plots of the solutions in each iteration. The class provides some predefined default values for all attributes.

class Config2D (as well as class Config3D) Derives from ConfigCommon, with predefined number of dimensions set to 2 (or 3 respectively). Everything else is the same as the parent class.

class ConfigCommonProblem This is the base class the user extends to define each subdomain. There are three methods that need to be overridden. We discuss them analytically below.

1) **Domain API:** Each subdomain object that inherits from the ConfigCommonProblem base class must override the following methods. The solver object calls these methods, before the actual solving phase begins, in order to gather the appropriate useful information and setup the appropriate data structures for each subdomain.

init() This method holds the UFL [11] definition of the subdomain and sets as class attributes the subdomain's function space, linear and bilinear form of the PDE.

neighbors() It provides information to the solver about the other subdomains this subdomain overlaps with, in order for the solver to automatically update the boundary values after each iteration. It returns a Python dictionary with keys the filename of the neighbor subdomain and as value a method that returns the Boolean value True only for the nodes on the common boundary of this subdomain and the neighbor subdomain.

boundaries() It informs the solver about the fixed external boundaries of the subdomain. It returns a Python list of all the subdomain's external boundaries, each element being a DirichletBC object.

2) *Iterative solver:* The entry point of the iterative solver is the solve() method as defined inside solver.py. It takes as arguments a ConfigCommon object with the configuration of the solving environment (max iterations, tolerance, etc) and a Python list of user defined problem objects, all derived from ConfigCommonProblem base class. After certain initial steps (create logfiles, initialize solution vectors, etc), the main solving routine, named __solve(subdomains, config), is called.

The main points of interest of the iteration algorithm and two of the helper methods are shown in the associated listing in the Appendix:

After each iteration, for each subdomain solution, the algorithm checks a set of halting criteria in the following order that may terminate the solving process:

- 1) If the exact solution is known, check for convergence w.r.t. the user defined tolerance value.
- 2) If the errornorm of the current and previous approximations (thereafter called iterants) is below a user defined tolerance value.
- 3) If the max iterations limit as defined by the user is reached.

Note that in order for the stop_criterion() method to terminate the algorithm, all subdomains must converge for either of the two first criteria. The third criterion is common for all subdomains.

The solver keeps logfiles for each boundary interface between all overlapping subdomains. They keep track of the progress per iteration in a column based format which is suitable to use as input to graphics modules for example `https://plot.ly` and `Gnuplot`.

VI. EXAMPLE

For example a skeleton file (circle2D_1.py) with the definition (in Python) for the circle subdomain in Fig. 1 can be the following as shown in the associated listing in the Appendix.

The skeleton definition is abstract to the geometry and number of dimensions of the subdomain. That means that the same skeleton code from the listing can be used to define the rectangle subdomain as well.

Given two defined subdomains in files circle2D_1.py and rectangle2D_1.py, the driver code that solves them is depicted in the listing 1 below.

Listing 1: Code for solving two overlapping subdomains

```
from dolfin import *
```

```
import solverconfig
import solver

import circle2D_1 as circle
import rectangle2D_1 as rectangle

cp = circle.Problem()
rp = rectangle.Problem()
subdomains=[ cp, rp ]

config = solverconfig.Config2D()
solver.solve(subdomains=subdomains, config=config)

# keep plots on screen
interactive()
```

VII. NUMERICAL EXPERIMENTS

The above described implementation allow us to perform a set of experiments that validate primarily the convergence and secondly our assumptions concerning the desired characteristics of the method.

We therefore consider the problem described in section IV above.

This problem is naturally split into the four problems that are defined due to the different PDE operator (different Q s and K s in PDE equation 1) and clearly depicted in Fig. 2. We further split the right bottom domain into two subdomains for the simple domain geometry reason so we only consider rectangular subdomains. This results into a total of five subproblems.

In multidomain implementation for Schwarz method an overlapping area for the second subdomain with hydraulic conductivity K_2 is considered. This area extends horizontally for 400 m inside the other subdomains. Also an overlapping region for the fourth subdomain in the third subdomain for 400 m is assumed. The region for 1400 m including well3 inside the second subdomain is chosen for the overlapping region for the third subdomain. The above overlapping configuration results into a total of 14 interfaces among the five subdomains. Unfortunately it is difficult to visualize them easily.

Due to space limitations

- No details on the FE modules utilized withing each subproblem are given (they could be any state-of-the-art FE module available within FEniCS and beyond).
- We present below a only a series of figures that reveal the convergence characteristics of the method. A complete experimental study of the proposed method is beyond the scope of this paper and will be presented elsewhere.

As clearly seen from Fig. 6 and 5 the method regardless the involvement of five subproblems with a total of fourteen interfaces converges rather rapidly.

The nature of the convergence is depicted also in Fig. 7 where it is seen that high frequency error terms are first eliminated (during the first few iterations) and the solution is further being smooth in subsequent iterations.

Finally, comparing Fig. 7 and 3 observe that our DD iteration scheme converges to the solution computed by means of the conventional FE method on the whole domain.

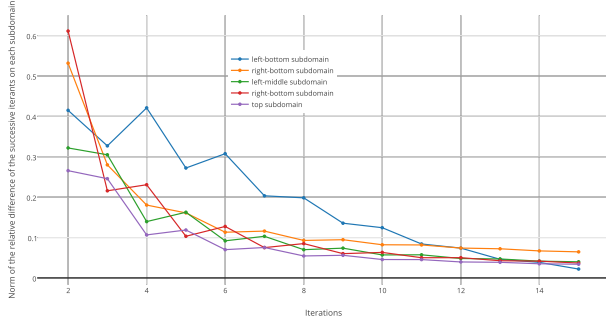


Fig. 5: The history of convergence with respect to the norm of the relative differences in the successive iterants on each subproblem.

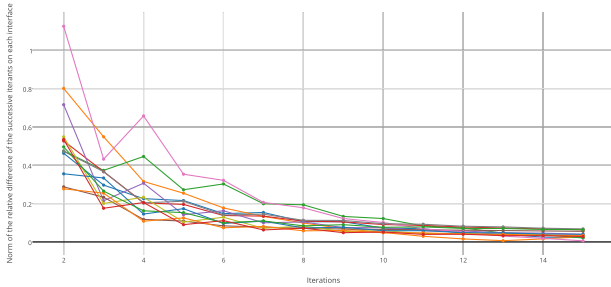


Fig. 6: The history of convergence with respect to the norm of the relative differences in the successive iterants on each of the 14 interfaces associated with the subproblems in Fig. 5.

VIII. CONCLUSION

We have developed a software platform with convenient Application Programming Interfaces and utilize it for the effective numerical solution of a practical problem in environmental engineering. Our scheme shows that the meta-computing paradigm for solving composite MDMP problems on state-of-the-art platforms consists a very promising approach. It allows us to relate the multi- nature of the problem to associated programming components and solving modules. Surely, more research and development is needed on both theoretical, algorithmic and programming matters, and we plan to work in this direction.

ACKNOWLEDGMENT

The present research work has been co-financed by the European Union (European Social Fund ESF) and Greek national funds through the Operational Program Education and Lifelong Learning of the National Strategic Reference Framework (NSRF) - Research Funding Program: THALES (Grant number: MIS-379416). Investing in knowledge society through the European Social Fund.

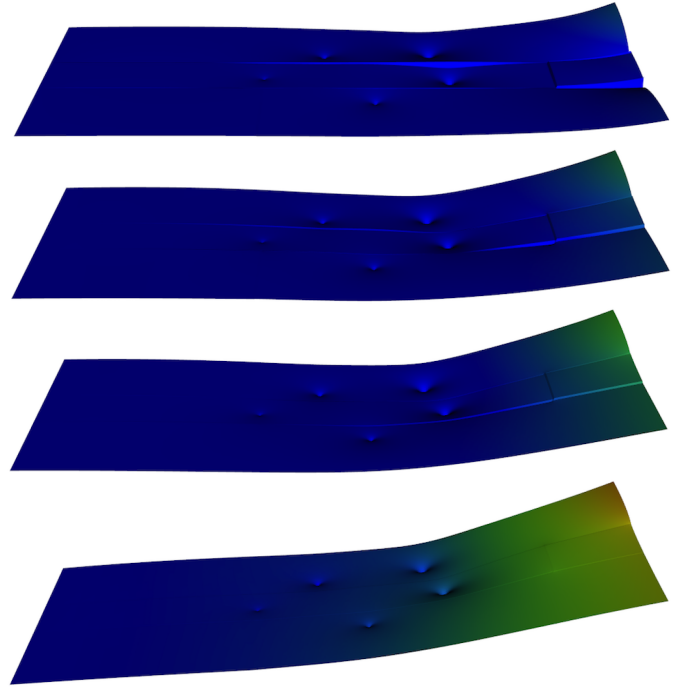


Fig. 7: Plots of the computed global solution at iterations 1, 2, 15 and 50 from top to bottom respectively.

REFERENCES

- [1] X. Cai, "Overlapping domain decomposition methods," in *Advanced Topics in Computational Partial Differential Equations*, ser. Lecture Notes in Computational Science and Engineering, H. Langtangen and A. Tveito, Eds. Springer Berlin Heidelberg, 2003, vol. 33, pp. 57–95.
- [2] C. Antonopoulos, M. Maroudas, and M. Vavalis, *Journal of Mathematics and Statistical Science*, vol. to appear, p. No. JMSS15090801, On PDE problem solving environments for multidomain multiphysics problems.
- [3] D. M. Beazley, "Swig: An easy to use tool for integrating scripting languages with c and c++," in *Proceedings of the 4th Conference on USENIX Tcl/Tk Workshop, 1996 - Volume 4*, ser. TCLKT'96. Berkeley, CA, USA: USENIX Association, 1996, pp. 15–15.
- [4] M. Vavalis, "Implementing hybrid pde solvers," in *Proceedings of the Eleventh International Conference on Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods in Scientific Computing*, 2014.
- [5] P. Stratis, Y. Saridakis, M. Zakyntinaki, and E. Papadopoulou, "Alopex stochastic optimization for pumping management in fresh water coastal aquifers," in *Journal of Physics: Conference Series*, 2014, vol. 490.
- [6] P. Stratis, G. Karatzas, E. Papadopoulou, M. Zakyntinaki, and Y. Saridakis, "Stochastic optimization for an analytical method of saltwater intrusion on coastal aquifers," 2015, submitted to PLOSone.
- [7] P. Stratis, Z. Dokou, G. Karatzas, E. Papadopoulou, and Y. Saridakis, "Stochastic optimization and numerical simulation for pumping management of the heronissos freshwater coastal aquifer in crete," in *Procs of 2015 Int. Conf. on Water Resources, Hydraulics and Hydrology, Zakynthos, Greece*, pp. 329–334.
- [8] A. Mantoglou, M. Papantoniou, and P. Giannouloupoulos, "Management of coastal aquifers based on nonlinear optimization and evolutionary algorithms," *Journal of Hydrology*, vol. 297, pp. 209–228, 2004.
- [9] <http://fenicsproject.org>.
- [10] A. Logg, Anders, K.-A. Mardal, and G. Wells, *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method*. Springer, 2004, vol. 84.
- [11] M. S. Alnæs, *UFL: a Finite Element Form Language*. Springer, 2012, ch. 17.

APPENDIX

Listing 2: Common skeleton code example for subdomain definitions

```

1 # user defined methods
2 def OverlappingWithOther():          pass
3 def getOrCreateMesh():              pass
4 def userDefinedUFL():                pass
5 def userDefinedBoundaryCondition():  pass
6
7 # skeleton example
8 def ExtBC(x, on_boundary):
9     return on_boundary and not OverlappingWithOther()
10
11 def ExtIface(x, on_boundary):
12     return on_boundary and OverlappingWithOther()
13
14 class Problem(ConfigCommonProblem):
15     def init(self, *args, **kwargs):
16         mesh = getOrCreateMesh(*args, **kwargs)
17         self.V = FunctionSpace(mesh, 'Lagrange', 1)
18         self.a, self.L = userDefinedUFL(V)
19
20     def neighbors(self):
21         interface = {}
22         interface['rectangle'] = ExtIface
23         return interface
24
25     def boundaries(self):
26         bc = DirichletBC(self.V, userDefinedBoundaryCondition(), ExtBC)
27         return [ bc ]

```

Listing 3: Core code of the iterative algorithm routine

```

1 def __interpolate_interfaces(subdomains):
2     for subdomain in subdomains:
3         for iface in subdomain.interfaces.itervalues():
4             interpolant = interpolate(iface['solution'], subdomain.trial_space())
5             iface['interpolant'].vector()[:] = interpolant.vector()
6
7 def __solve_iteration(subdomains):
8     for subdomain in subdomains:
9         subdomain.solve()
10
11 def __update_interfaces(subdomains):
12     for subdomain in subdomains:
13         for iface in subdomain.interfaces.itervalues():
14             iface['previous'].vector()[:] = iface['current'].vector()
15             iface['bc'].apply(iface['current'].vector())
16
17 def __solve(subdomains, config):
18     iteration = 0
19     iterate = True
20     while iterate:
21         iteration += 1
22
23         __interpolate_interfaces(subdomains)
24         __solve_iteration(subdomains)
25         __update_interfaces(subdomains)

```

```
26
27     if config.show_solution_plots:
28         for subdomain in subdomains:
29             plot(subdomain.solution(), title=subdomain.name)
30     for subdomain in subdomains:
31         if stop_criterion(config, subdomain, iteration):
32             iterate = False
33
34     return [ subdomain.solution() for subdomain in subdomains ]
```