

# Aspekte der Inversion von Daten der Spektralen Induzierten Polarisation

Dissertation

zur

Erlangung des Doktorgrades (Dr. rer. nat.)

der

Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät

der

Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

vorgelegt von

Roland Blaschek

aus

Düsseldorf

Bonn, Februar 2006

Angefertigt mit Genehmigung der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

1. Referent: Prof. Dr. A. Hördt
2. Referent: Prof. Dr. S. A. Miller

Tag der Promotion: 20.10.2006

Diese Dissertation ist auf dem Hochschulschriftenserver der ULB Bonn [http://hss.ulb.uni-bonn.de/diss\\_online](http://hss.ulb.uni-bonn.de/diss_online) elektronisch publiziert.

Erscheinungsjahr: 2006

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Einordnung . . . . .	1
1.2	Motivation und Problemstellung . . . . .	2
1.3	Struktur der Arbeit . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation</b>	<b>5</b>
2.1	Historisches . . . . .	5
2.2	Physikalische Grundlagen . . . . .	6
2.2.1	Messung im Zeitbereich . . . . .	6
2.2.2	Messung im Frequenzbereich mit zwei Frequenzen . . . . .	8
2.2.3	Spektrale Messung im Frequenzbereich . . . . .	9
2.3	Petrophysikalische und -chemische Grundlagen . . . . .	10
2.3.1	Leitungsmechanismen . . . . .	11
2.3.2	Polarisationsarten . . . . .	13
2.3.3	Relaxationsmodelle . . . . .	15
2.4	Anwendungsmöglichkeiten . . . . .	19
2.4.1	Mineral-, Öl-, und Gasprospektion . . . . .	19
2.4.2	Umweltgeophysik . . . . .	20
2.4.3	Hydrogeologie . . . . .	21
<b>3</b>	<b>Theorie zur Inversion</b>	<b>27</b>
3.1	Die Vorwärtsrechnung . . . . .	27
3.1.1	Physikalische Grundgleichungen . . . . .	27
3.1.2	Umsetzung mittels Finiter Elemente . . . . .	30
3.2	Umsetzung der Inversion . . . . .	36
3.2.1	Allgemeine Einordnung . . . . .	36
3.2.2	Beschreibung von Datenanpassung und Regularisierung in der Ziel- funktion . . . . .	37
3.2.3	Der Inversionsablauf . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz</b>	<b>51</b>
4.1	Regularisierung . . . . .	51
4.2	Topografie . . . . .	64
4.3	Messbeispiele . . . . .	73

## *Inhaltsverzeichnis*

<b>5</b>	<b>Multifrequenz–Inversion in zwei räumlichen Dimensionen</b>	<b>83</b>
5.1	Behandlung der EM-Kopplung . . . . .	84
5.2	Cole-Cole Anpassung . . . . .	90
5.3	Constant Phase Angle Anpassung . . . . .	104
<b>6</b>	<b>Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz</b>	<b>115</b>
6.1	Umsetzung . . . . .	115
6.2	Beschränkungen . . . . .	133
<b>7</b>	<b>Feldpraxis und Messgebiet</b>	<b>135</b>
7.1	Messgebiet . . . . .	135
7.1.1	Das Testfeld Krauthausen . . . . .	135
7.1.2	Das Messgebiet Cuxhaven . . . . .	140
7.2	Feldpraxis . . . . .	140
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>147</b>
8.1	Zusammenfassung . . . . .	147
8.2	Ausblick . . . . .	149
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>150</b>
<b>A</b>	<b>Elementmatrizen für dreidimensionale Volumenelemente</b>	<b>159</b>
<b>B</b>	<b>Zur Benutzung der erstellten Programme</b>	<b>163</b>

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Der IP-Effekt im Zeitbereich. . . . .	6
2.2	Schematischer Spannungsverlauf einer IP-Messung. . . . .	7
2.3	Beispiel eines Betrags- und Phasenspektrums. . . . .	11
2.4	Prozesse des IP-Effektes. . . . .	14
2.5	Untergrundmodell mit Ersatzschaltbild. . . . .	15
2.6	Abhängigkeit des Betrags- und Phasenspektrums vom Cole-Cole Parameter $c$ . . . . .	17
2.7	Fraktales Porenraummodell. . . . .	19
2.8	Widerstandsbetrag und Aufladbarkeit über einer Deponie. . . . .	21
3.1	Schematische Darstellung einer allgemeinen Vierpunktanordnung. . . . .	30
3.2	Beitrag zur Zielfunktion in Abhängigkeit vom Parametergradienten. Vergleich der Regularisierungen. . . . .	41
3.3	Sensitivitätsverteilung bei typischer Auslage. . . . .	43
3.4	Einfluss von $f$ auf den Beitrag zur Zielfunktion. . . . .	44
3.5	Skizze zu Größen der anisotropen Glättung. . . . .	44
3.6	Geometrische Interpretation eines allgemeinen Iterationsschrittes. . . . .	48
3.7	Nachteil der Methode des steilsten Abstiegs . . . . .	49
4.1	Inversionsergebnis bei Occam-Glättung. . . . .	52
4.2	Inversionsergebnis für bekannte Störkörpergrenze. . . . .	52
4.3	Inversionsergebnis für falsch angenommene Störkörpergrenze. . . . .	53
4.4	Abweichung der Vorwärtsrechnungen zwischen Rechtecksgitter und trianguliertem Gebiet. . . . .	53
4.5	Betragsfehler der Vorwärtsrechnung. . . . .	54
4.6	Trianguliertes FE-Netz. . . . .	54
4.7	Inversionsergebnis bei bekannter Störkörpergrenze. . . . .	55
4.8	Inversionsergebnis bei selbsterkannten Störkörpergrenzen. . . . .	56
4.9	Algorithmisch erkannte Diskontinuitäten. . . . .	56
4.10	Gewichtungen des Parametergradienten. . . . .	57
4.11	Inversionsstudie für variierendes $\beta$ . . . . .	58
4.12	Inversionsstudie für variierende Sensitivitätsabhängigkeit. . . . .	59
4.13	Inversionsergebnisse im Vergleich. . . . .	60
4.14	Relative Abweichungen der synthetischen Spannungsbeträge. . . . .	61
4.15	Modell und Inversionsergebnisse für synthetisches Mehrschichtmodell. . . . .	63

## Abbildungsverzeichnis

4.16	Inversionsergebnisse für synthetisches Modell mit glatter Leitfähigkeitsvariation. . . . .	63
4.17	Analytisch berechnete Potentialverteilung für eine Dipoleinspeisung. . . .	65
4.18	Potentialverteilung für eine Dipoleinspeisung, synthetische Berechnung mit Dirichletschen Randbedingungen. . . . .	65
4.19	Abweichung des Dipolpotentials bei Berechnung mit Dirichletschen Randbedingungen. . . . .	66
4.20	Abweichung des Dipolpotentials bei Berechnung mit gemischten Randbedingungen. . . . .	66
4.21	Abweichung des Dipolpotentials bei Berechnung mit Dirichletschen Randbedingungen und vergrößertem Gitter. . . . .	67
4.22	Analytisches Potential, durch eine Elektrode erzeugt. . . . .	67
4.23	Zusammensetzung des Gesamtpotentials in Abhängigkeit von den Wellenzahlen . . . . .	68
4.24	$\beta$ der Randlelemente. . . . .	69
4.25	Prozentuale Abweichung bei Benutzung analytischer gemischter Randbedingungen (für flache Topografie). . . . .	70
4.26	Prozentuale Abweichung bei Benutzung analytischer gemischter Randbedingungen für flache Topografie, weitere Konfiguration. . . . .	70
4.27	Prozentuale Abweichung nach Inversion bei Benutzung analytischer gemischter Randbedingungen für flache Topografie. . . . .	71
4.28	Inversionsergebnis bei Benutzung synthetischer gemischter Randbedingungen. . . . .	72
4.29	Inversionsergebnis bei Benutzung synthetischer gemischter Randbedingungen, weitere Regularisierung . . . . .	72
4.30	Inversion von Daten aus einem Berechnungsversuch. . . . .	74
4.31	Inversionsergebnisse zum Profil B32 bei 312,5mHz. . . . .	75
4.32	Pseudosektionen zu den Messdaten des Profils B32 bei 312,5mHz. . . . .	77
4.33	Pseudosektionen zu den Messdaten des Profils B32 bei 312,5mHz, Abweichungen . . . . .	78
4.34	Inversionsergebnisse zum Profil B32 bei 312,5mHz im Vergleich zum Normalprofil. . . . .	78
4.35	Inversionsergebnisse zum Profil B22 bei 312,5mHz, kombinierte Regularisierung. . . . .	79
4.36	Gemessene Fluidleitfähigkeit im Testgebiet Cuxhaven. . . . .	80
4.37	Inversionsergebnisse zum Profil buc im Messgebiet Cuxhaven bei 1,25Hz. . .	81
5.1	Gemessenes Phasenspektrum mit Zerlegung in Anteile induktiver Kopplung und Rest. . . . .	86
5.2	Messdaten eines Phasenspektrums. . . . .	87
5.3	Anpassung eines doppelten Cole-Cole Modells. . . . .	87
5.4	Messdaten eines Phasenspektrums. . . . .	88
5.5	Spektren für ein Cole-Cole Modell. . . . .	89
5.6	Synthetische Messdaten, aufgezeichnet über einem Zweischicht-Modell. . .	91

5.7	Betrags- und Phasenspektren bei Variation einzelner Cole-Cole Parameter.	92
5.8	Ableitungen nach den Cole-Cole Parametern. . . . .	94
5.9	Nötige Variation im Parameter, um eine Betragsänderung von 10% zu erreichen. . . . .	95
5.10	Nötige Variation im Parameter, um eine Phasenänderung von 3mrad. . . . .	96
5.11	Verteilung der Cole-Cole Parameter bei Inversion, getrennt für jede Frequenz und anschließender Cole-Cole Anpassung für jede Zelle. . . . .	97
5.12	Verteilung der Parameter bei gleichzeitiger Inversion für alle Frequenzen in Cole-Cole Modelle. . . . .	98
5.13	Verteilung der Parameter bei Inversion, getrennt für jede Frequenz und anschließender Cole-Cole Anpassung für jede Zelle, Modell 2. . . . .	99
5.14	Verteilung der Parameter bei gleichzeitiger Inversion für alle Frequenzen in Cole-Cole Modelle, Modell 2. . . . .	100
5.15	Verteilung der Parameter bei gleichzeitiger Inversion für alle Frequenzen in Cole-Cole Modelle, B32-Profil. . . . .	101
5.16	Vergleich der Pseudosektionen zu 1,25Hz, B32-Profil. . . . .	102
5.17	Vergleich eines Spektrums im B32-Profil. . . . .	103
5.18	Betrags- und Phasenspektren bei Variation einzelner CPA Parameter. . . . .	105
5.19	Verteilung der Parameter bei Inversion der einzelnen Frequenzen mit anschließender Anpassung oder gleichzeitiger Inversion aller Frequenzen. . . . .	106
5.20	Verteilung der Parameter bei Inversion der einzelnen Frequenzen mit anschließender Anpassung oder gleichzeitiger Inversion aller Frequenzen, Modell 2. . . . .	107
5.21	Vergleich der Pseudosektionen zu 1Hz. . . . .	107
5.22	Verteilung der Parameter bei Inversion der einzelnen Frequenzen mit anschließender Anpassung oder gleichzeitiger Inversion aller Frequenzen, Profil B32. . . . .	109
5.23	Inversionsergebnis für die Phasen bei Einzelfrequenzinversion. . . . .	109
5.24	Vergleich der Pseudosektionen zu 1,25Hz. . . . .	110
5.25	Vergleich eines Spektrums im B32-Profil. . . . .	111
5.26	Vergleich der Messspektrenanpassung. . . . .	113
5.27	Vergleich der zellenweisen Anpassung an die Ergebnisse der Einzelspektreninversion. . . . .	113
5.28	Vergleich der intrinsischen Spektrenanpassung. . . . .	114
6.1	Zerlegung eines Würfels in 5 Tetraeder. . . . .	117
6.2	Die Messkonfiguration (mit Inversionsgebiet) in drei Dimensionen. . . . .	118
6.3	Die Abweichung des Betrages synthetischer gegenüber analytischer Werte. . . . .	119
6.4	Inversionsergebnisse für Betrag und Phase. Zweischichtfall. . . . .	123
6.5	Schnitt durch die Mitte des Inversionsgebietes. Ergebnisse für Betrag und Phase. Zweischichtfall. . . . .	124
6.6	Inversionsergebnisse für Betrag und Phase, Modell 2. . . . .	125
6.7	Schnitt durch die Mitte des Inversionsgebietes. Ergebnisse für Betrag und Phase, Modell 2. . . . .	126

## Abbildungsverzeichnis

6.8	Anpassung der Pseudosektion des mittleren Profils. . . . .	126
6.9	Inversionsergebnisse für Betrag und Phase, Krauthausen-Daten. . . . .	127
6.10	Inversionsergebnisse für den Betrag als Schnitte entlang der Messprofile bei 3D- und 2D-Inversion. . . . .	128
6.11	Inversionsergebnisse für die Phase als Schnitte entlang der Messprofile bei 3D- und 2D-Inversion. . . . .	129
6.12	Inversionsergebnisse für die Phase als Schnitt in $z=-9\text{m}$ Tiefe bei 3D- Inversion und 2D-Inversion. . . . .	130
6.13	Inversionsergebnisse für den Betrag als Schnitt in $z=-9\text{m}$ Tiefe bei 3D- Inversion und 2D-Inversion. . . . .	131
6.14	Anpassung an die Messdaten für den Betrag am Beispiel des mittleren Profils. . . . .	131
6.15	Anpassung an die Messdaten für die Phase am Beispiel des mittleren Profils.	132
7.1	Tektonische Übersichtskarte der Niederrheinischen Bucht. . . . .	136
7.2	Geologisches Profil durch die Niederrheinische Bucht. . . . .	137
7.3	Lithologisches Normalprofil zum Testfeld Krauthausen. . . . .	138
7.4	Lage der Messprofile auf dem Testfeld Krauthausen. . . . .	139
7.5	Lithologisches Profil zu einer Lokation im Testgebiet Cuxhaven . . . . .	141
7.6	Abhängigkeit des Fehlerniveaus von der Pseudotiefe. . . . .	143
7.7	Abhängigkeit des Fehlerniveaus von der Dipolweite. . . . .	145
7.8	Abhängigkeit des Fehlerniveaus von der Frequenz. . . . .	146
7.9	Abhängigkeit des Fehlerniveaus von der Frequenz mit berücksichtigter Sta- pelrate. . . . .	146
A.1	Die dreidimensionalen Volumenelemente Tetraeder und Parallelepipet. . .	162



# Tabellenverzeichnis

2.1	Die Aufladbarkeit verschiedener Gesteine. . . . .	8
2.2	Die Materialabhängigkeit des Metallfaktors. . . . .	10
2.3	Feuchtigkeitsabhängigkeit des spezifischen Widerstandes. . . . .	12
2.4	$k_f$ -Werte für Lockersedimente. . . . .	25
7.1	Mögliche Abfolge von Strom- und Spannungsdipolen im Messverlauf. . . .	142



# Kurzzusammenfassung

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Inversion von Daten der Spektral Induzierten Polarisation (SIP), die eine Erweiterung der Gleichstromgeoelektrik auf frequenzabhängige komplexwertige elektrische Widerstände darstellt. Ziel ist die Entwicklung flexibler Auswertelgorithmen auf Basis eines bestehenden Programmes für möglichst vielfältige Einsatzbereiche.

Im ersten Teil wird eine neuartige Regularisierung eingeführt, die sich als sehr vielfältig einsetzbar erweist und über einen Steuerungsparameter sowohl in der Lage ist, stark fokussierte, als auch geglättete Ergebnismodelle zu produzieren. Der Einsatz zeigt sich auch bei der Anwendung auf Felddaten als vorteilhaft gegenüber anderen Ansätzen.

Im Weiteren wird die Verwendung von Daten ermöglicht, die über unebener Topografie aufgezeichnet wurden. Damit erschließen sich auch hier neue Anwendungsmöglichkeiten. Im folgenden Teil wird die Fragestellung untersucht, inwieweit spektrale Information aus Felddaten interpretiert werden kann. Neben einer kritischen Betrachtung zur Anwendbarkeit auf aktuelle Messdaten werden Algorithmen erstellt, die eine Inversion in Modelle nach Cole-Cole bzw. Modelle der konstanten Phase zulassen. Die grundsätzliche Machbarkeit wird gezeigt.

Im letzten Teil wird ein Programm zur Interpretation der Daten in drei räumlichen Dimensionen erstellt und wiederum an synthetischen sowie Felddaten getestet. Die Benutzung eines aktuellen Standard-PCs für die direkte Auswertung im Feld erweist sich dabei aufgrund der benötigten Rechenzeit als kritisch.

Insgesamt können durch die gemachten Erweiterungen eine Vielzahl von neuen Anwendungsbereichen erschlossen werden, insbesondere auch in aktuellen Gebieten, wie z.B. der Grundwasserprospektion, auf die das Projekt abzielt, in dessen Rahmen diese Arbeit erstellt wurde.



# 1 Einleitung

## 1.1 Einordnung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Inversion von Daten der Spektralen Induzierten Polarisation (SIP), im Speziellen mit den Aspekten Regularisierung, Topografie, Multifrequenz-Inversion und 3D-Inversion.

Die SIP ist eine Messmethode der Angewandten Geophysik und stellt eine Erweiterung der Gleichstromgeoelektrik dar, bei der nicht nur der Betrag des spezifischen elektrischen Widerstandes im Untergrund bestimmt wird, sondern der Widerstand als komplexe Größe und auch seine Frequenzabhängigkeit.

Der Effekt der induzierten Polarisation wurde zu Beginn des 20. Jahrhunderts von den Gebrütern Schlumberger entdeckt ([Schlumberger, 1922]): Es wurde beobachtet, dass bei einer typischen 4-Elektroden Widerstandsmessung die Spannung nach Unterbrechen des Stromes nicht unmittelbar auf Null zurückgeht, sondern ihr Wert zunächst nur um einen Teil des Betrages fällt und in der Folge langsam verschwindet.

Dieser Effekt wurde zunächst zur Exploration von Erzlagerstätten (z.B. [Bleil, 1953]) und Erdölreservoirs (z.B. [Dakhnov, 1941]) genutzt, da hierbei die stärksten IP-Anomalien gemessen wurden. Laboruntersuchungen (z.B. [Marshall and Madden, 1959]) und mathematische Betrachtungen (z.B. [Seigel, 1959]) führten zu immer besseren Beschreibungen der Effekte bei gleichzeitig fortschreitender Entwicklung der Messtechnik.

In der Folge wurde auch die Frequenzabhängigkeit in die Messungen mit einbezogen und führte zu einer Vielzahl von Relaxationsmodellen, die die gemessenen Effekte beschreiben sollten, wobei dasjenige nach *Cole and Cole* [1941] und das der konstanten Phase ([Voorhis et al., 1973]) zu den bekanntesten gehören. Problem in der spektralen Beschreibung war die Behandlung der induktiven Kopplung im Bereich hoher Frequenzen (z.B. [Pelton et al., 1978b] oder [Xiang et al., 2002]).

Mit immer empfindlicheren Messgeräten konnten auch andere Gebiete für die SIP erschlossen werden. Neben der Umweltgeophysik mit Messungen z.B. an Müllhalden ([Hönig, 2002]), gewann der Bereich der Hydrogeophysik an Bedeutung. Hierbei wird die komplexe elektrische mit der hydraulischen Leitfähigkeit über empirische Beziehungen verbunden (z.B. [Börner et al., 1996] oder [Slater and Lesmes, 2002]).

Parallel zum Fortschritt bei den Messgeräten sind auch die Möglichkeiten in der Interpretation mit verbesserter Computertechnik immer weiter optimiert worden. Neben der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen (z.B. [Oldenburg and Li, 1994] oder [Kemna, 2000]), wurden auch Algorithmen für drei Dimensionen erstellt (z.B. [Weller et al., 1999] oder [Li and Oldenburg, 2000]) und solche, die die spektrale Information interpretieren (z.B. [Yuval and Oldenburg, 1997] oder [Routh and Oldenburg, 1998]).

## 1 Einleitung

Unterschieden werden kann hierbei in den verschiedenen Ansätzen, das Vorwärtsproblem zu lösen. Im Bereich der Geoelektrik finden sich meist Anwendungen der Finiten Differenzen Methode (z.B. [Spitzer, 1995]), aber auch der Integralgleichungsmethode (z.B. [Lesur et al., 1999]) oder der Methode der Finiten Elemente (z.B. [Kemna, 2000]). In der Inversion werden dann verschiedene Ansätze zur Regularisierung unterschieden. Neben der noch sehr verbreiteten Occam-Bedingung (z.B. [de Groot-Hedlin and Constable, 1990]), die stark geglättete Modelle liefert, wurden vermehrt Konzepte präsentiert, die Vorinformationen nutzen (z.B. [Auken and Christiansen, 2004]) oder den Parameterraum einschränken (z.B. [Smith et al., 1999]). Es wurden auch vollständig andere Regularisierungsansätze eingeführt, die nicht mehr zu geglätteten Modellen führen (z.B. [Portniaguine and Zhdanov, 1999], aufbauend auf [Last and Kubik, 1983]) oder zumindest versuchen, nur noch in kleineren Bereichen stark zu glätten (z.B. [Yi et al., 2003]).

## 1.2 Motivation und Problemstellung

Die vorliegende Arbeit wurde im Rahmen eines DFG-Projektes (Projekt-Nr. Ho1506/11-1 und 11/2) erstellt, das sich mit der Fragestellung beschäftigt, wie stark die hydraulische Leitfähigkeit des Untergrundes (bzw. Durchlässigkeit eines porösen Mediums gegenüber einem Fluid) mit der elektrischen korreliert. Zu diesem Zweck muss zunächst ein komplexwertiges Leitfähigkeitsmodell des Untergrundes erzeugt werden, an welchem dann die empirischen Beziehungen zur Hydrologie getestet werden können. (Die hydraulische Leitfähigkeit wird zur Kontrolle unabhängig von der elektrischen bestimmt.) Zu letzterem Schritt wurde bereits von Zisser [2005] im Rahmen des gleichen Projektes eine Diplomarbeit erstellt.

Die Aufgabe der Dateninversion in ein komplexwertiges Widerstandsmodell kam dieser Arbeit zu. Zur Umsetzung wurde ein bestehendes Programm zur 2D-Inversion in einer Frequenz auf Basis der Finiten Elemente Methode ([Kemna, 2000]) als Grundlage benutzt.

Die erste Änderung erfolgte in der Regularisierung. Die implementierte Occam-Bedingung erwies sich als nicht angebracht für den Bereich der Hydrogeophysik. Die z.B. in der Grundwasserprospektion auftretenden scharfen Kontraste bei Wechsellagerung von Kies-, Sand- und Tonschichten, widersprachen der Anwendung einer Glättungsbedingung. Es wurde eine flexible Variante des „minimum gradient support“ (z.B. [Portniaguine and Zhdanov, 1999]) eingesetzt. Grundlage ist die Idee, dass bereits kleine Parametergradienten so in die Modellfunktion einfließen wie sehr große. Damit unterscheidet die Inversion nur Gebiete mit Gradient gleich und ungleich Null, wobei versucht wird, in möglichst weiten Gebieten Parametergradienten um Null zu erreichen. Folge ist ein Modell mit wenigen, sehr homogenen Strukturen und praktisch beliebig starken Kontrasten dazwischen.

Diese fokussierende Bedingung wurde in einer Weise implementiert, die über einen variablen Parameter die Stärke der Fokussierung regelt und damit insbesondere auch realistische Modelle mit deutlichen Kontrasten zwischen den Schichtungen und leichten Parametervariationen innerhalb zulässt. Auch eine Sensitivitätsabhängigkeit der Regularisierung zur besseren Auflösung (nach Ansätzen von [Yi et al., 2003]) wurde umgesetzt. Damit

steht eine flexible Regularisierung für eine Vielzahl von Anwendungen zur Verfügung. Im Weiteren wurde das Potential des Finiten Elemente Ansatzes dadurch besser genutzt, dass die Inversion auch auf nichtebene Topografie mittels eines Zweigitter-Verfahrens erweitert wurde. Damit wird eine bessere Interpretation von Daten, die in unebenem Gelände aufgezeichnet wurden, erreicht.

Die Inversion nach Relaxationsmodellen (Cole-Cole und constant phase angle) erleichtert den Überblick über das Spektralverhalten des Untergrundes, da z.B. die Parameter des Cole-Cole Modells eine deutlich direktere Aussage über Materialeigenschaften zulassen, als die Angabe eines spezifischen Widerstandes zu einer Vielzahl von Frequenzen.

Der Algorithmus für drei räumliche Dimensionen stellt ein Mittel bereit, um z.B. auch flächig aufgezeichnete Daten, wie sie in Zukunft bei vermehrter Benutzung von Multikanalapparaturen anfallen werden, konsistent in ein einziges Untergrundmodell invertieren zu können. Ein Aneinanderfügen von 2D-Sektionen wird dadurch überflüssig. Die Erweiterung ist gerade für den Bereich der Grundwasserprospektion günstig, da hier die Kartierung eine häufig benutzte Erkundungsmethode ist.

### 1.3 Struktur der Arbeit

Die vorliegende Arbeit teilt sich im Hauptteil in fünf Kapitel.

Kapitel 2 schafft die Grundlagen zur SIP. Zunächst werden die historische Entwicklung der Messmethode dargestellt und die physikalischen und petrophysikalischen sowie petrochemischen Grundlagen des IP-Effektes eingeführt. Danach werden die Anwendungsmöglichkeiten aufgezeigt. Am Ende des Kapitels wird noch auf die speziellen Probleme hingewiesen, die bei der Messpraxis im Feld berücksichtigt werden müssen, zusammen mit den Eckdaten einer typischen Feldmessung.

Kapitel 3 stellt die mathematische und numerische Seite des physikalischen Problems dar. Zunächst wird die Lösung des Vorwärtsproblems erläutert, insbesondere die Realisierung mittels der Methode der Finiten Elemente (FE). Im Weiteren wird auf die Umsetzung der Inversion eingegangen. Hier stehen die verschiedenen Möglichkeiten der Regularisierung im Vordergrund.

Kapitel 4 behandelt den Basis-Algorithmus für die zweidimensionale Inversion von Daten einer Frequenz mit seinen Erweiterungen bezüglich Regularisierung, Berücksichtigung von Vorinformationen und Topografie. Neben synthetischen Beispielen wird auch die Anwendung auf reale Messdaten gezeigt.

Kapitel 5 beschreibt die Möglichkeiten, die spektrale Information zu nutzen. Zu Anfang werden Verfahren gezeigt, die das Signal um unerwünschte Effekte der Hochfrequenz-Kopplung bereinigen sollen; danach wird gezeigt, wie man die spektralen Daten in ein Relaxationsmodell invertiert. Berücksichtigt werden dabei die bekanntesten Modelle, das Cole-Cole Modell und das der konstanten Phase.

Kapitel 6 führt die Änderungen der FE-Gleichungen auf die dritte räumliche Inversion ein, wobei jetzt wieder eine Frequenz betrachtet wird. Neben einem Unterkapitel für die Umsetzung ist auch eines speziell den numerischen Schwierigkeiten bezüglich Problemgröße und Rechenzeit gewidmet.





# 2 Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation

## 2.1 Historisches

Wenn bei der Benutzung einer typischen 4-Elektroden-Anordnung einer Widerstandsmessung der Strom unterbrochen wird, fällt die Spannung zwischen den Potentialelektroden nicht unmittelbar auf Null, sondern der Wert fällt zunächst abrupt nur um einen Teil des Betrages und sinkt im Folgenden langsam gegen Null. Dieses Verhalten wird als IP-Effekt bezeichnet.

Der IP-Effekt wurde erstmals zu Beginn des 20. Jahrhunderts von den Gebrütern *Schlumberger* [1922] beschrieben, die aus unbekanntem Gründen ihre Untersuchungen aber nicht fortsetzten. In den 40er und 50er Jahren erfolgten dann die ersten Anwendungen, bei denen der IP-Effekt zur Exploration genutzt wurde. Erkundet wurden zum einen Erdölvorkommen (z.B. [*Dakhnov*, 1941]), zum anderen Erzlagerstätten (z.B. [*Bleil*, 1953]). In diesen Fällen waren die messbaren Effekte besonders signifikant.

Parallel zu den Einsätzen zu Explorationszwecken wurden auch im Labor Messreihen durchgeführt, um die Effekte besser zu verstehen (z.B. [*Marshall and Madden*, 1959]). Dabei wurde sowohl versucht, die Effekte mathematisch zu beschreiben (z.B. [*Seigel*, 1959]), als auch elektrische Ersatzschaltbilder zu entwickeln, die die petrophysikalischen Verhältnisse vereinfacht wiedergeben sollten. Eines der bekanntesten Modelle ist hierbei das von *Cole and Cole* [1941] und das der konstanten Phase ([*Voorhis et al.*, 1973]), auf die auch speziell in 5.2 bzw. 5.3 eingegangen wird. Eine Zusammenstellung einer Vielzahl der mit der Zeit entwickelten Modelle, findet sich auch in [*Dias*, 2000].

Mit Verbesserung der Messtechnik und der automatisierten Datenverarbeitung erschlossen sich weitere Möglichkeiten. *Wait* [1959] prägte bereits früh den Begriff „complex resistivity“ womit er dem Widerstand auch einen Phasenwert gab, als Verschiebung zwischen Strom und Spannung für den Wechselstromfall. Die kommerzielle Nutzung der SIP begann allerdings erst in den 70er Jahren ([*Zonge and Wynn*, 1975]). Nun wurden auch verstärkt IP-Effekte bei anderen Objekten untersucht. Man beobachtete Effekte z.B. bei Tonmineralien, organischen Materialien oder auch Mülldeponien. Hierbei rückten auch immer mehr die chemischen Reaktionen ins Blickfeld (z.B. [*Angoran and Madden*, 1977] oder [*Olhoeft*, 1985]). Von der Explorationsgeophysik fand die IP mehr und mehr Einzug in die Umweltgeophysik. Eine Vielzahl von Artikeln erschien ab Beginn der 90er Jahre (z.B. [*Vanhala et al.*, 1992] zur Detektion organischer Verschmutzungen, [*Weller and Börner*, 1996], [*Kemna et al.*, 2000] zum Spektralverhalten an einfachen, künstlichen Störkörpern oder [*Kemna et al.*, 2004] zur Unterscheidung lithologischer Einheiten).

Mit wachsendem Verständnis der Ursachen des IP-Effektes wurden auch empirische Zu-

sammenhänge entdeckt. Man sah Korrelationen zwischen der hydraulischen Leitfähigkeit und der komplexen elektrischen Leitfähigkeit. Der Parameter der hydraulischen Leitfähigkeit kommt aus dem Bereich der Hydrogeologie und ist beispielsweise bedeutend bei der Abschätzung der Ausbreitung einer Kontamination oder der Förderleistung eines Brunnens. Wichtige Beiträge hierzu finden sich in [Börner et al., 1996], [Slater and Lesmes, 2002] und [Slater and Glaser, 2003]. Erste Arbeiten im Zusammenhang mit der Hydrogeologie traten allerdings bereits weit früher auf, z.B. [Ogilvy and Kuzmina, 1972]. Zusammen mit der steigenden Anzahl von Messdaten bei Multikanal-Apparaturen und kleineren Elektrodenabständen für eine bessere Auflösung stieg auch der Anspruch an die Inversion. Hier gab es parallel zu der Entwicklung von immer leistungsfähigeren Rechnern auch entscheidende methodische Fortschritte, die in Kapitel 3 zusammengefasst werden sollen.

## 2.2 Physikalische Grundlagen

### 2.2.1 Messung im Zeitbereich

Wird nach Einspeisen eines Gleichstroms der Strom abrupt abgeschaltet und das sich ergebende Spannungssignal in der Nähe aufgezeichnet, so erkennt man, dass die Spannung nicht unmittelbar auf Null fällt, sondern nur um einen Teil. Im Folgenden sinkt der Wert dann asymptotisch gegen Null. Abbildung 2.1 zeigt die Signale im Zeitbereich für Ein- und Ausschaltvorgänge mit verschiedenen Vorzeichen.

Bei dieser Darstellung sind induktive Effekte vernachlässigt. Durch das schnelle Abschalten werden elektromagnetische Felder induziert, die versuchen, die Spannung aufrecht zu erhalten und zu frühen Zeiten deren Verlauf beeinflussen. Hier sind nur die IP-Effekte gezeigt.

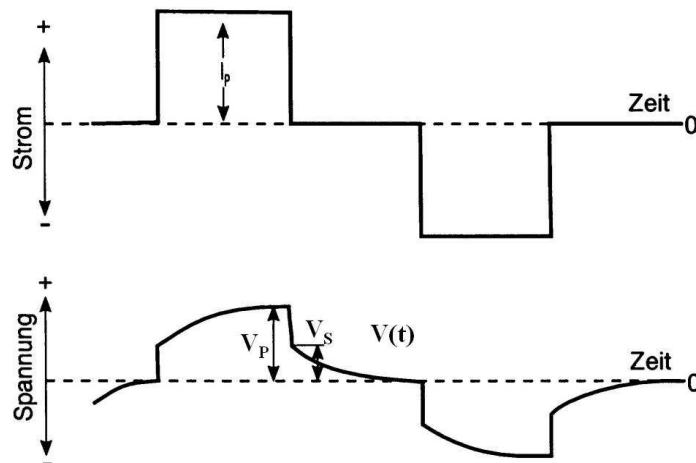


Abbildung 2.1: Der IP-Effekt im Zeitbereich. Zeichnung nach [Knödel et al., 1997].

In den Anfängen waren die aufgezeichneten Größen lediglich die Maximalspannung  $V_P$  und der Anteil, auf den die Spannung direkt fiel,  $V_S$ . Da das Signalverhalten dem eines Ladevorganges eines Kondensators ähnelt, wurde der Parameter zur Quantifizierung des IP-Effektes mit „Aufladbarkeit“ bezeichnet und als

$$m = \frac{V_S}{V_P} \quad (2.1)$$

definiert. Erste Erwähnung fand die Aufladbarkeit in [Seigel, 1959]. Eine weitere Möglichkeit, den Effekt quantitativ zu beschreiben, setzt das genauere Aufzeichnen der Abklingkurve voraus. Man integriert hierbei die Spannung nach Abschalten des Stromes über die Zeit und normiert auf die Maximalspannung. Der Parameter wird auch „Aufladbarkeit“ genannt, allerdings zur Unterscheidung mit  $M$  bezeichnet.

$$M = \frac{1}{V_P} \int_0^{\infty} V(t) dt \quad (2.2)$$

Beide Ansätze bergen jedoch Unsicherheiten. Die Bestimmung von  $V_S$  wird durch das Auftreten induktiver Effekte direkt nach dem Abschalten gestört. Die Integration ist gegen diese Effekte stabiler, aber das Signal kann zum einen nicht beliebig lange, zum anderen nur zu diskreten Zeiten aufgezeichnet werden, womit auch hier Ungenauigkeiten auftreten. Abbildung 2.2 deutet die endlichen Integrationsbereiche an. Rechts wird der erste Teil mit induktiven Effekten und der letzte, bei dem das Signal unter das Rauschniveau geht, gekürzt; links wird angedeutet, dass nur zu diskreten Zeitpunkten aufgezeichnet wird. Mit diesen Werten wird die Integration näherungsweise durchgeführt.

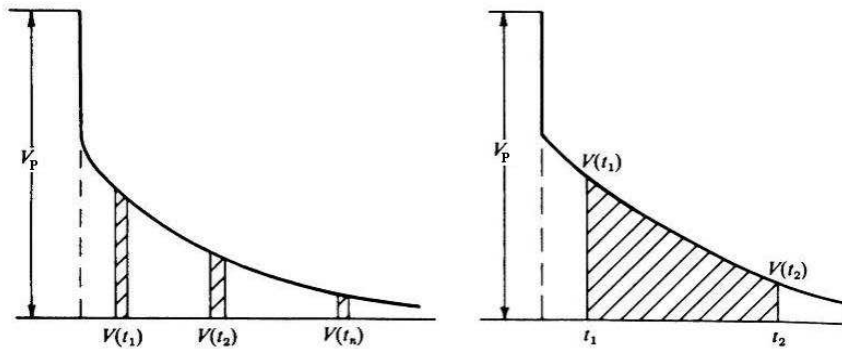


Abbildung 2.2: Schematischer Spannungsverlauf einer IP-Messung. Beschränkung auf diskrete Zeitpunkte und Begrenzung des Zeitbereichs. Zeichnung nach [Telford et al., 1990].

Den Aufladbarkeiten nach 2.1 und 2.2 kann auch noch mehr physikalische Bedeutung gegeben werden. Hierfür sind aber weitere Grundlagen aus 2.3 nötig und werden entsprechend erst dort erläutert.

## 2 Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation

Tabelle 2.1 stellt für einige Materialien Werte für die Aufladbarkeit zusammen, um die große Bandbreite von auftretenden Werten zu verdeutlichen.

Material	Chargeability	M	(ms)
20 % sulfides	2000	-	3000
8-20 % sulfides	1000	-	2000
2-8 % sulfides	500	-	1000
Volcanic tuffs	300	-	800
Sandstone, siltstone	100	-	500
Dense volcanic rocks	100	-	500
Shale	50	-	100
Granite, grandodiorite	10	-	50
Limestone, dolomite	10	-	20

Tabelle 2.1: Die Bandbreite der Aufladbarkeit  $M$  für verschiedene Gesteine, nach [Telford *et al.*, 1990].

### 2.2.2 Messung im Frequenzbereich mit zwei Frequenzen

Auch im Frequenzbereich zeigt sich der IP-Effekt. Hier betrachtet man die Amplituden der gemessenen Spannungen für verschiedene Frequenzen des (sinusförmigen) Einspeise-Stroms. Bei zunehmender Frequenz erwartet man eine abnehmende Maximalspannung. Im Weiteren ist der Begriff des spezifischen elektrischen Widerstandes von Bedeutung, einer Materialeigenschaft im Gegensatz zum elektrischen Widerstand selbst. Beide Parameter stehen jedoch in enger Beziehung:

Misst man z.B. an einem Zylinder mit Querschnittsfläche  $A$  und Länge  $L$ , durch den ein Strom  $I$  fließt, einen Spannungsabfall  $V$  zwischen den Endflächen, so ist der Widerstand  $R = V/L$  noch proportional zur Länge und antiproportional zur Querschnittsfläche. Der spezifische Widerstand  $\rho$  ist um diese geometrischen Abhängigkeiten korrigiert und kann geschrieben werden als:

$$\rho = \frac{A}{L} \cdot R = \frac{A}{L} \cdot \frac{V}{I} = K \cdot \frac{V}{I} . \quad (2.3)$$

Ist das Material nicht homogen, liefert der Term auf der rechten Seite von Gleichung 2.3 einen Mittelwert der beteiligten Materialien, den sogenannten scheinbaren spezifischen Widerstand  $\rho_a$ . Homogenes Material dieses spezifischen Widerstandes würde dieselbe gemessene Spannung (unter gleichen Messbedingungen) bewirken.

Analog kann für einfache 4-Elektroden-Anordnungen ein Geometriefaktor berechnet werden, der zusammen mit Strom und Spannung den (scheinbaren) spezifischen Widerstand liefert (siehe auch Gleichung 3.17). Im Falle von Topografie ist ein Konfigurationsfaktor im Allgemeinen nicht mehr analytisch zu bestimmen und andere Ansätze müssen verwendet werden (siehe 4.2).

Misst man bei einer sehr niedrigen Frequenz (nahe am Gleichstrom-, auch DC-Fall („direct current“ ) genannt) und einer sehr hohen die scheinbaren spezifischen Widerstände

$\rho_{\omega \rightarrow 0}$  bzw.  $\rho_{\omega \rightarrow \infty}$ , so kann man über die relative Differenz den sogenannten Frequenzeffekt definieren:

$$FE = \frac{\rho_{\omega \rightarrow 0} - \rho_{\omega \rightarrow \infty}}{\rho_{\omega \rightarrow \infty}} \quad (2.4)$$

Zwischen Aufladbarkeit und Frequenzeffekt besteht eine enge Beziehung. Wird der Einschaltvorgang (Einschalten des Stromes  $I_P$  zur Zeit  $t = 0$ ) betrachtet, so ist  $\lim_{t \rightarrow \infty} V(t) \propto \rho_{\omega \rightarrow 0}$  und  $\lim_{t \rightarrow 0} V(t) \propto \rho_{\omega \rightarrow \infty}$  (s.a. [Telford et al., 1990]). Entsprechend gilt (siehe auch Abbildung 2.1)

$$m = \frac{V_S}{V_P} = \frac{\lim_{t \rightarrow \infty} V(t) - \lim_{t \rightarrow 0} V(t)}{\lim_{t \rightarrow \infty} V(t)} = \frac{\rho_{\omega \rightarrow 0} - \rho_{\omega \rightarrow \infty}}{\rho_{\omega \rightarrow 0}} = \frac{FE}{FE + 1} \quad (2.5)$$

An dieser Stelle sei angemerkt, dass eine Beziehung zwischen Zeit- und Frequenzbereich sich als nicht unproblematisch erweist, wie die benutzte Grenzwertbildung jeweils von 0 bis  $\infty$  schon andeutet. Nur für unendliche breite Spektren und Zeitreihen lässt sich von einem Bereich exakt in den anderen transformieren. In der Praxis liegt oft nur eine Dekade zwischen den benutzten Frequenzen.

$FE$  nimmt zumeist kleine Werte an, womit  $FE \approx m$  gilt. Dies ist auch der Grund dafür, dass häufig der prozentuale Frequenzeffekt über  $PFE = 100 \cdot FE$  benutzt wird. Weiterhin existiert noch der sogenannte „Metallfaktor“ (eingeführt von Marshall and Madden [1959]). Dieser Parameter stammt noch aus dem Bereich der Erzexploration und gleicht das beobachtete Verhalten, dass bei kleinen Widerständen oft auch der Frequenzeffekt abnimmt, durch Normierung auf den DC-Wert aus. Entsprechend wird er eingeführt als:

$$MF = 2\pi \cdot 10^5 \frac{FE}{\rho_{\omega \rightarrow 0}} \quad (2.6)$$

Wie erwartet, hat der Metallfaktor einen großen Wertebereich. Einen Überblick gibt Tabelle 2.2. Auch innerhalb eines Materials ist die Schwankungsbreite größer als bei der Aufladbarkeit (vgl. 2.1).

### 2.2.3 Spektrale Messung im Frequenzbereich

Eine genauere Erfassung der Effekte ermöglicht die Aufzeichnung eines Frequenzspektrums, im Gegensatz zu den nur zwei aufgezeichneten Werten in der Frequenzbereichsmessung. Neben einem Spektrum für die Beträge des Widerstandes werden nun auch Phasenspektren aufgezeichnet. Der Betrag des scheinbaren spezifischen Widerstandes ergibt sich über das Verhältnis der Amplituden von Spannung ( $U_0$ ) und Strom ( $I_0$ ), multipliziert mit dem Konfigurationsfaktor  $K$ , der sich aus der Messgeometrie ergibt (analog zu Gleichung 2.3, bei der noch keine Phasenverschiebung betrachtet wurde):

$$|\rho_a| = K \frac{U_0}{I_0} \quad (2.7)$$

Die Phase ergibt sich aus der zeitlichen Verschiebung  $\Delta t$  des Spannungs- gegenüber dem Stromsignal. Eine Verschiebung um eine volle Periode  $1/f$  würde hierbei einer Phase

## 2 Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation

material	metal factor	M	(S/cm)
Fracture-filling sulfides	1000	-	10000
Porphyry copper	30	-	1500
Shale sulfides	3	-	300
Clays	1	-	300
Tuffs	1	-	100
Graphitic sandstone and limestone	4	-	60
Gravel	0	-	200
Alluvium	0	-	200
Granite, monzonite, diorite	0	-	60
Various Volcanics	0	-	80
Basic rocks (barren)	1	-	10
Groundwater			0

Tabelle 2.2: Die Variation des Metallfaktors  $MF$  bei verschiedenen Materialien, nach [Telford *et al.*, 1990].

$\phi = 2\pi$  entsprechen. Es ergibt sich folgende Beziehung:

$$\frac{\phi}{2\pi} = \frac{\Delta t}{1/f} \Rightarrow \phi = \omega \cdot \Delta t \quad (2.8)$$

Mit einem Messwert für Betrag und Phase ist es naheliegend, beide Werte zu einem komplexen Parameter zusammenzufassen. Der frequenzabhängige komplexe scheinbare spezifische Widerstand stellt sich dann dar als:

$$\rho(\omega) = \Re(\rho(\omega)) + i \cdot \Im(\rho(\omega)) \quad (2.9)$$

mit  $|\rho(\omega)|^2 = \Re(\rho(\omega))^2 + \Im(\rho(\omega))^2$  und  $\phi(\omega) = \arctan\left(\frac{\Im(\rho(\omega))}{\Re(\rho(\omega))}\right)$ .

Ein häufig auftretendes Spektralverhalten ist in Abbildung 2.3 dargestellt. Die Frequenzachse ist logarithmisch skaliert, die Achsen für Betrag und Phase linear. Mit steigender Frequenz nimmt der Widerstandsbetrag ab und nähert sich dann dem Grenzwert  $\rho_{\omega \rightarrow \infty}$ . Bei abnehmender Frequenz läuft der Wert gegen den Gleichstromwiderstand. Im Kurvenverlauf für den Betrag erkennt man einen Wendepunkt, der auf der Frequenzachse mit dem Minimum der Phase zusammenfällt. Für die extremalen Frequenzen geht der Phasenwert gegen Null. Es bleibt die Frage, wie sich das spektrale Verhalten erklären lässt.

### 2.3 Petrophysikalische und -chemische Grundlagen

Nachdem bisher die Effekte nur beschrieben wurden, sollen nun die Ursachen der Effekte genauer betrachtet werden.

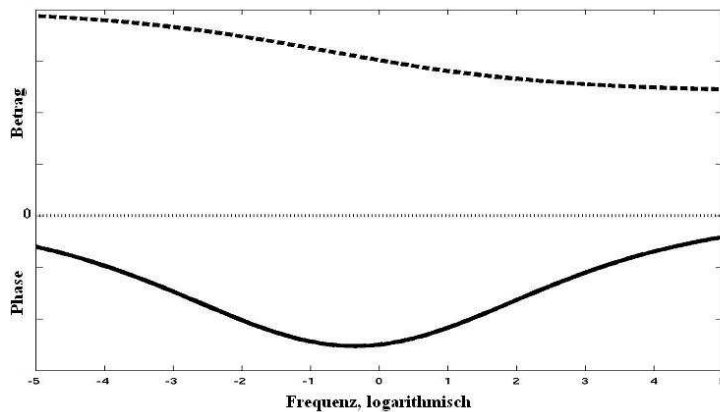


Abbildung 2.3: Beispielspektrum für Betrag und Phase, hier Cole-Cole Fall.

### 2.3.1 Leitungsmechanismen

Betrachtet man den Untergrund als elektrischen Leiter, so lässt er sich in verschiedene Anteile zerlegen, die sehr unterschiedlich zum Leitfähigkeitsverhalten beitragen. Der größte Volumenanteil kommt in der Regel der Gesteinsmatrix zu. Die Beiträge zur Leitfähigkeit sind dennoch meist vernachlässigbar. Bis auf wenige Ausnahmen existieren nicht die für einen Leitungsstrom benötigten freien Elektronen. Eine Ausnahme bilden einige Minerale, die aufgrund von ausreichend vielen freien Elektronen (z.B. bei reinen Metallen) oder Halbleitereigenschaften (z.B. bei einigen Silikaten) doch zu einem Leitungsstrom beitragen können. Wichtigste Vertreter sind hier die Erzminerale und Grafit (siehe z.B. [Telford *et al.*, 1990] oder [Knödel *et al.*, 1997]).

Eine weitaus wichtigere Rolle kommt aber dem Porenraum zu. Ist dieser mit Porenflüssigkeit gefüllt, mit einem hinreichenden Anteil gelöster Salze, so tritt mit Hilfe der Ionen elektrolytische Leitfähigkeit auf, die den Gesamtwiderstand im Vergleich zum Trockenzustand in der Regel drastisch heruntersetzt. Anfang der 40er Jahre formulierte Archie [1942] eine empirische Beziehung, in die der spezifische Widerstand der Matrix nicht einfließt. Sie wurde formuliert für gesättigte und teilgesättigte tonfreie Sedimente:

$$\rho_0 = \frac{a}{\Phi^m} \cdot \rho_w \cdot S^{-n} \quad (2.10)$$

Hierbei sind  $\rho_0$  und  $\rho_w$  der spezifische elektrische Widerstand des Sediments bzw. des Porenwassers,  $S$  der Sättigungsgrad und  $\Phi$  die effektive Porosität. „Effektiv“ ist insofern von Bedeutung, als dass wenige durchgehende Porenkanäle offensichtlich (bei angelegtem Gleichstrom) zum Leitungsstrom beitragen, im Gegensatz zu einer Vielzahl von unverbundenen Poren gleichen Gesamtvolumens. Der Proportionalitätsfaktor  $a$  (Wert zwischen 0,5 und 2,5, häufig 1 gesetzt) und der Zementationsexponent  $m$  (variiert zwischen 1,3 und 2,4 und nimmt in der Regel mit dem Verfestigungsgrad zu) sind empirisch zu ermitteln. Für den Sättigungsexponenten  $n$  setzt man meist  $n \simeq 2$ . Der Term  $a/\phi^m$  wird auch als Formationsfaktor bezeichnet und ist für  $S = 1$  als  $\rho_0/\rho_w$  definiert.

## 2 Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation

Den starken Unterschied zwischen der Leitfähigkeit in trockenem und nassem Zustand verdeutlicht Tabelle 2.3. Die Werte variieren durchaus um mehrere Größenordnungen.

Material	Wertebereich ( $\Omega m$ )	
Kies (wassergesättigt   trocken)	50	>10000
Sand (wassergesättigt   trocken)	50	>10000
Ton (erdfeucht   trocken)	3	>1000
Sandstein (klüftig, feucht   kompakt)	<50	>100000
Kalkstein (klüftig, feucht   kompakt)	100	>100000
Tonschiefer (klüftig, feucht   kompakt)	50	>100000
Magmatite, Metamorphite (verwittert, feucht   kompakt)	150	> 1000000
Steinsalz (feucht   trocken)	30	>1000000
Natürliche Wässer (von   bis)	10	300
Meerwasser (35‰ NaCl)		0,25

Tabelle 2.3: Die Variation des spezifischen Widerstandes bei verschiedenen Materialien in Abhängigkeit von der Feuchtigkeit, nach [Knödel et al., 1997].

Bei der Archie-Formel wurde die Beschränkung auf tonfreie Sedimente erwähnt. Sie begründet sich durch einen dritten Leitfähigkeitsmechanismus: die Grenzflächenleitfähigkeit. Sie entsteht durch die Wechselwirkung zwischen Porenflüssigkeit und Gesteinsmatrix.

Insbesondere bei Tonmineralen existieren verstärkt negative Oberflächenladungen, an die sich fest eine dünne Schicht (wenige Moleküllagen) aus Kationen aus dem Porenfluid anlagert. Die positive Schicht wird auch als „Stern-Schicht“ bezeichnet. An diese Schicht grenzt eine lose gebundene Schicht mit einer (nach außen) exponentiell abnehmenden Konzentration an Kationen. Diese drei Bereiche zusammen werden auch „elektrische Doppelschicht“ (EDL) genannt. (Allgemeines hierzu in [Knödel et al., 1997], detailliert in [Grahame, 1947].)

Während bei der elektrolytischen Leitung der Ladungstransport noch über das Porenvolumen stattfindet, ist bei der Grenzflächenleitung die innere Oberfläche des Gesteins die entscheidende Größe. Weiterer wichtiger Parameter in dieser Beziehung ist das Kationenaustauschvermögen (CEC, [Waxman and Smits, 1968]), das durch die Anzahl der Kationen aus der Doppelschicht gegeben ist, die ausgetauscht werden können.

Im theoretischen Modell fasst man die Leitfähigkeitsanteile über parallel geschaltete Widerstände zusammen, woraus sich mit der Grenzflächenleitfähigkeit  $\sigma_{int}$  eine Erweiterung der Archie-Formel (2.10) ergibt:

$$\Re(\sigma_0) = \frac{1}{F} \cdot \sigma_w \cdot S^n + \Re(\sigma_{int}) \quad (2.11)$$

Die Gleichung wurde zur Vereinfachung über die Leitfähigkeiten aufgestellt. Die Bildung des Realteils liegt in der komplexen Grenzflächenleitfähigkeit begründet, allerdings ist der imaginäre Anteil von  $\sigma_{int}$  in der Regel klein gegen den Realteil (s.a. Abschnitt 2.4.3). Zusammen mit dem großen Anteil der elektrolytischen Leitfähigkeit wäre eine Betragsbildung folglich noch immer eine gute Näherung für den Realteil.



## 2.3 Petrophysikalische und -chemische Grundlagen

Unter Einfluss von Wechselfeld zeigt die Oberflächenleitfähigkeit eine komplexe Frequenzabhängigkeit (z.B. [Vinegar and Waxman, 1984]). Nach Börner *et al.* [1996] kann die Grenzflächenleitfähigkeit dann in folgender Weise beschrieben werden:

$$\sigma_{int} = h(\sigma_w) \cdot \frac{S_{por}}{F} \cdot S^\nu \cdot (1 + i \cdot l) \quad (2.12)$$

$S_{por}$  ist hierbei die spezifische Oberfläche bezogen auf das Porenvolumen,  $h(\sigma_w)$  eine reellwertige Funktion der Salinität, und  $l$  das Verhältnis von Imaginär- zu Realteil der Grenzflächenleitfähigkeit,  $l = \Im(\sigma_{int})/\Re(\sigma_{int})$ . Für  $\nu$  vermutet man durch empirische Beobachtungen die Beziehung  $\nu = n - 1$  ([Knödel *et al.*, 1997]).

Den imaginären Anteil der Leitfähigkeit kann man nun in einem Ersatzschaltbild als parallel geschalteten Kondensator eintragen. Damit ergibt sich ein frequenzabhängiger Anteil der Leitfähigkeit, der den spektralen Charakter (wie z.B. in Abbildung 2.3) ausmacht. Desweiteren gibt es Ansätze, über die getrennten Anteile ( $\Re$  und  $\Im$ ) hydraulische Größen zu bestimmen.

### 2.3.2 Polarisationsarten

Um das spektrale Verhalten der Leitfähigkeit in einem Spannungsfeld besser zu verstehen, werden nun zwei Arten von auftretenden Polarisierungen eingeführt. Der Membranpolarisation kommt dabei im Bereich der Hydrogeophysik wesentlich größere Bedeutung zu als dem zweiten Mechanismus, der Elektrodenpolarisation, auch wenn bei letzterer die höheren Effekte gemessen werden.

Die Membranpolarisation hat ihre Ursache in der unterschiedlichen Beweglichkeit von Ionen im Porenraum und tritt insbesondere bei Vorhandensein von kleinen Porenweiten und starken Oberflächenladungen, wie z.B. bei tonhaltigen Mineralen ([Ogilvy and Kuzmina, 1972]), auf. Wichtiger Beitrag zur Gesamtleitfähigkeit ist hier folglich die bereits beschriebene Grenzflächenleitfähigkeit.

Aufgrund der negativen Oberflächenladung sammeln sich positive Ladungen an den Mineralkörnern und reichen bei Porenengstellen soweit in den Porenraum, dass dieser dort weitgehend blockiert wird.

Bei Anlegen einer äußeren Spannung können die positiven Ionen über Kationenaustausch durch die positive Ionenwolke wandern, während negative Ionen hiervon blockiert werden. Die elektrische Doppelschicht wirkt also als Membran, die von Kationen passiert werden kann, für Anionen aber blockierend wirkt. Durch die Behinderung der elektrolytischen Leitung wird bei den Engstellen Energie in Form von Ladungsansammlung gespeichert. Daher nennt man diese Bereich auch „aktive Zonen“, im Gegensatz zu den „passiven Zonen“, den Bereichen weiter Porenräume, bei denen solche Wechselwirkung nicht auftritt. Mit der Zeit wird das äußere Feld durch die sich immer stärker ausbildenden Raumladungen lokal kompensiert und dieser Leitungsmechanismus endet. Nach Abschalten der Spannung wandern die Ionen wieder zurück in ihre Ausgangsposition.

Offensichtlich ist der Effekt frequenzabhängig: Bei niedrigen Frequenzen ( $< 0,1\text{Hz}$ ) bleibt für die Prozesse hinreichend Zeit, um die Polarisierungen auszubilden, bei höheren Frequenzen ( $\gg 10\text{Hz}$ ) wird ein Gleichgewichtszustand nicht mehr erreicht ([Knödel *et al.*,

1997]). Entsprechend wird für höhere Frequenzen eine höhere Leitfähigkeit gemessen. Den Übergangsbereich im Spektrum, bei dem sich der Widerstand am stärksten mit der Frequenz ändert, nennt man „Warburg-Region“ ([Militzer and Weber, 1985]).

Wie schon erwähnt, besteht neben der Frequenzabhängigkeit auch eine Abhängigkeit von der Porenraumgeometrie. Hierbei bedeuten kleinere Poren nicht zwangsläufig einen größeren IP-Effekt. Detaillierte Ausführungen zu verschiedenen Modellen finden sich in [Klitzsch, 2004]. Auch ein wachsender Tonanteil hat nicht zwangsläufig einen größeren Effekt zur Folge. Mit steigendem Anteil nimmt zwar die Anzahl aktiver Zonen zu, aber der kleinere relative Abstand zu benachbarten Regionen führt schließlich zu wachsender Konnektivität, was dann die effektive Anzahl aktiver Zonen reduziert. Nach Schön [1983] treten in sandigen Lockersedimenten maximale IP-Effekte bei einem Tongehalt zwischen 3 und 8% auf.

Der in der Regel weitaus stärkere Effekt ist die Elektrodenpolarisation. Sie tritt allerdings seltener auf, weil hier die Elektronenleitung eine bedeutende Rolle spielt.

Das Prinzip ist ähnlich: Die Elektronenleitung in Metallkörnern transportiert Ladung viel schneller als die elektrolytische Leitung in der Umgebung. Entsprechend häufen sich bei angelegter Spannung entgegengesetzte Ladungen an gegenüberliegenden Seiten der Oberflächen der Metallkörner an und blockieren somit den Ionenfluss durch das Porenfluid. Eine dem äußeren Feld entgegenwirkende Polarisation wird erzeugt. Hier ist der Effekt am größten, wenn sich die Übergänge zwischen elektrolytischer und Elektronenleitfähigkeit stetig abwechseln, analog zu den aktiven und passiven Zonen bei der Membranpolarisation. Es finden allerdings auch Elektronentransfer-Reaktionen (Oxydation und Reduktion) statt, wodurch Ladungen durch die Grenzfläche fließen. Wieder ergibt sich eine Frequenzabhängigkeit über die Zeitkonstanten der Wechselwirkungen. Beide Polarisationsprozesse sind bei der Messung nicht zu unterscheiden.

Abbildung 2.4 stellt noch einmal beide Prozesse gegenüber. Das elektronenleitende Mineralkorn entspricht hier der Porenraumverengung im elektrolytischen Leiter.

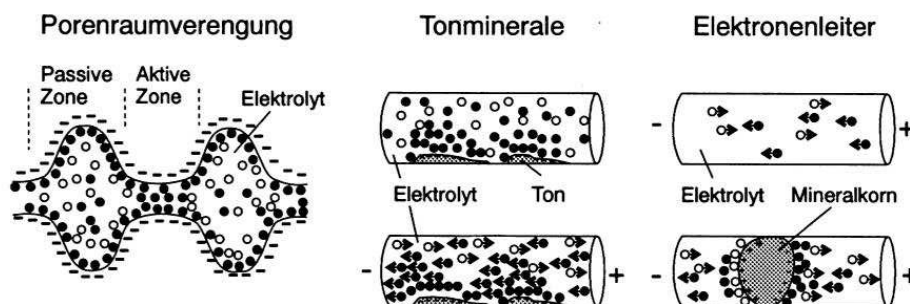


Abbildung 2.4: Prozesse des IP-Effektes. – sind negative Oberflächenladungen, o Anionen, • Kationen. Erläuterungen siehe Text. Zeichnung aus [Knödel et al., 1997].

### 2.3.3 Relaxationsmodelle

Die beobachteten Spannungskurven aus den Messungen im Zeitbereich (2.2.1) und die Vorstellung zu den Polarisationsmechanismen (2.3.2) haben dazu geführt, dass versucht wurde, mit Hilfe von Ersatzschaltbildern, insbesondere bestehend aus verschiedensten Anordnungen von RC-Gliedern, den Stromfluss im Untergrund zu erklären. Einen guten Überblick hierzu findet man in [Dias, 2000]. Hier sollen nur zwei häufig benutzte Modelle eingeführt werden, die auch später noch in Kapitel 5 benötigt werden.

Eines der ältesten, aber noch immer gebräuchlichen Modelle, ist das Cole-Cole Modell ([Cole and Cole, 1941]), das zunächst in anderem Zusammenhang aufgrund empirischer Beobachtungen aufgestellt worden war. Später wurde das Modell im Zusammenhang mit der Erzexploration eingesetzt, wobei es entsprechend die Gesteinstypen mit elektronenleitenden Mineralien beschreiben sollte. Nach mathematischen Überlegungen (z.B. [Seigel, 1959] zu den Grenzen einzelner Parameterbereiche) und Erweiterungen in der Anwendung (z.B. [Pelton et al., 1978b] mit multiplen Termen) fand die Formulierung mehr und mehr Anwendung.

Das Schaltbild, mit zugehörigem Gesteinsmodell in Abbildung 2.5 dargestellt, besteht aus einer Parallelschaltung von einem ohmschen Widerstand  $R_0$ , der die ungestörte elektrolytische Leitung repräsentiert, und einer Reihenschaltung eines weiteren ohmschen Widerstandes,  $R_1$ , und einem komplexen Glied  $(i\omega X)^{-c}$ , das für den aktiven Bereich, z.B. eines Metallkorns, steht.

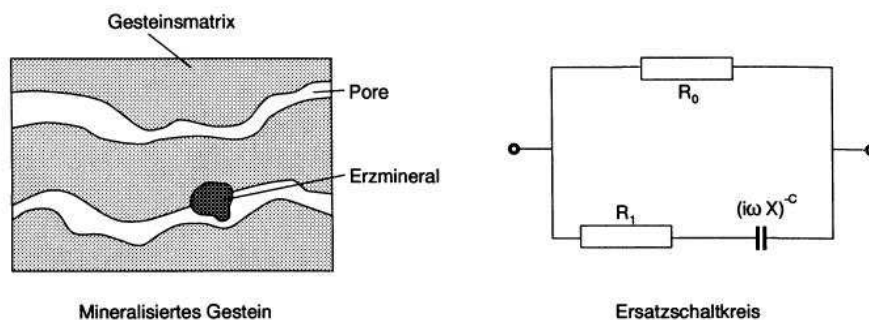


Abbildung 2.5: Modell eines Untergrundes (links) mit zugehörigem Ersatzschaltbild (rechts). Die ohmschen Widerstände  $R_0$  und  $R_1$  stehen für die Reibungsverluste,  $(i\omega\tau)^c$  steht für die Polarisationseffekte in der Nähe des Mineralkorns. Zeichnung nach [Pelton et al., 1978b].

Nach den üblichen Gesetzen zur Bildung des Gesamtwiderstandes  $R(\omega)$  bei Parallel- bzw. Reihenschaltung ergibt sich folgende Relation:

$$\frac{1}{R(\omega)} = \frac{1}{R_0} + \frac{1}{R_1 + (i\omega X)^{-c}} \quad (2.13)$$

## 2 Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation

Durch Umstellen erhält man den Zwischenschritt

$$R(\omega) = R_0 - \frac{R_0^2}{R_0 + R_1} + \frac{R_0^2}{(R_0 + R_1)(1 + (i\omega X)^c(R_0 + R_1))}. \quad (2.14)$$

Nun ersetzt man

$$m := \frac{R_0}{R_0 + R_1} \quad \text{und} \quad \tau := X \left( \frac{R_0}{m} \right)^{1/c}$$

und erhält die sogenannte Cole-Cole Formel in der Form

$$R(\omega) = R_0 \left( 1 - m \left( 1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau)^c} \right) \right). \quad (2.15)$$

$m$  ist hierbei wieder die Aufladbarkeit, die bereits in Gleichung 2.5 eingeführt wurde. An die Stelle der spezifischen Widerstände treten hier die Widerstände  $R_0$  und  $R_1$ . Für  $\omega \rightarrow 0$  wird der Gesamtwiderstand zu  $R_0$ , da der kondensatorartige Anteil sperrt, bei  $\omega \rightarrow \infty$  ist der Gesamtwiderstand  $(R_0 \cdot R_1)/(R_0 + R_1)$ , da der imaginäre Anteil verschwindet.  $m$  entspricht also auch hier  $m = (R_{\omega \rightarrow 0} - R_{\omega \rightarrow \infty})/R_{\omega \rightarrow 0}$  und eine weitere alternative Schreibweise für den frequenzabhängigen Gesamtwiderstand ergibt sich:

$$R(\omega) = R_{\omega \rightarrow \infty} + \frac{R_{\omega \rightarrow 0} - R_{\omega \rightarrow \infty}}{1 + (i\omega\tau)^c} \quad (2.16)$$

In dieser Art findet sich die Gleichung z.B. in [Pelton et al., 1978b], im Gegensatz zur Schreibweise nach Cole and Cole [1941], wo anstelle der Widerstände Dielektrizitäten verwendet wurden, per Laplace Transformation abgeleitet aus dem Zeitverhalten einer Polarisation. Damit stellt  $\tau$  die Zeitkonstante dar, also die Relaxationszeit des Prozesses mit der Einheit Sekunden.

Auch das spektrale Verhalten der Phasen aus Abbildung 2.3 wird anhand des Ersatzschaltbildes (Abbildung 2.5, rechts) klar: Bei niedrigen Frequenzen kann die Polarisation dem äußeren Feld (bzw. die Spannung dem Strom) folgen und es entsteht keine Phasenverschiebung. Für sehr hohe Frequenzen bleibt keine Zeit für den Aufbau von Polarisationen, was ebenfalls zu keiner Phasenverschiebung führt. Nur zwischen diesen Extrema gibt es messbare Phaseneffekte.

Zu klären bleibt die Funktion des Parameters  $c$ . Offenbar hängt dieser mit der Verteilung verschiedener Relaxationsprozesse zusammen. Für  $c = 1$  erhält man eine (einzelne) Kapazität, für  $c = 0$  ergibt sich ein konstanter Widerstand bzw. ein sehr stark verbreitertes Spektrum von Relaxationszeiten. Zwischen 0 und 1 liegen auch die theoretischen Grenzen für diesen Parameter, den man als „Frequenzexponenten“ bezeichnet. In den frühen Beschreibungen (z.B. [Marshall and Madden, 1959]) wurde meist  $c = 0,5$  gesetzt und damit eine Warburg-Impedanz gewählt, die für rein diffusionskontrollierte elektrochemische Prozesse steht. Mit der Zeit wurden aber vermehrt Werte für  $c$  zwischen 0,25 und 0,35 gemessen (z.B. [Pelton et al., 1978b]) und schließlich ist festzuhalten, dass für die meisten mineralisierten Gesteine  $c$  bei einem Mittelwert von 0,25 zwischen 0,1 und 0,6 liegt.

### 2.3 Petrophysikalische und -chemische Grundlagen

Die Abhängigkeit des Spektrums von  $c$  wird in Abbildung 2.6 dargestellt. Bei wachsendem  $c$  wird sowohl das Magnituden- als auch das Phasenspektrum steiler (insbesondere im Bereich des Phasenminimums, das in etwa bei  $\omega_{min} = 1/\tau$  liegt).

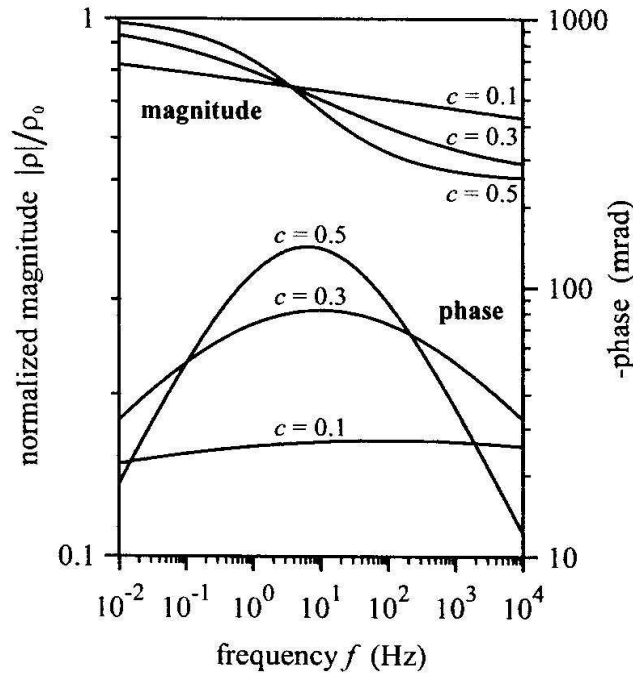


Abbildung 2.6: Abhängigkeit des Betrags- und Phasenspektrums vom Cole-Cole Parameter  $c$ . Zeichnung aus [Kemna, 2000].

In Verbindung mit EM-Kopplungen, induktiven Effekten oder kapazitiven Kopplungen von Kabeln untereinander oder mit dem Boden, treten allerdings auch Werte für  $c$  nahe 1 auf. In diesem Fall findet man auch sehr kleine Werte für  $\tau$  ( $< 10^{-4}s$ ) im Vergleich zu den sonst üblichen Werten (zwischen  $10^{-3}$  und  $10^4s$ ). Durch die weit auseinander liegenden Phasenmaxima von Gestein und EM-Kopplung besteht die Möglichkeit, durch Erweiterung des Cole-Cole Modells um weitere, sogenannte Dispersionsterme, nach Bestimmen der Kurvenparameter die Kopplungsanteile rechnerisch zu entfernen (dazu [Telford et al., 1990]). Der frequenzabhängige spezifische Widerstand stellt sich dann dar als:

$$\rho(\omega) = \rho_0 \left( 1 - m_1 \left( 1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau_1)^{c_1}} \right) - m_2 \left( 1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau_2)^{c_2}} \right) + \dots \right) . \quad (2.17)$$

Details zu diesem Thema finden sich in 5.1.

Neben dem Cole-Cole Modell, das zum Beschreiben des Spektralverhaltens besonders im Fall elektronenleitender Materialien in der Erzexploration erfolgreich verwendet wurde, gibt es andere Modelle, die im Fall von Sedimentgestein das Frequenzverhalten besser anpassen. Ein spektraler Verlauf, der häufig beobachtet wurde, besteht in einer sehr langsam mit der Frequenz variierenden Phase (z.B. [Vinegar and Waxman, 1984]). Wichtig

## 2 Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation

ist hierbei allerdings der Frequenzbereich. Bereits früher ([*Voorhis et al.*, 1973]) wurde ein Verhalten der Form

$$\rho(\omega) = k \cdot (i\omega)^{-b} \quad (2.18)$$

beschrieben, mit der Beschränkung der Gültigkeit auf den „Frequenzbereich von Interesse“.  $k$  ist hierbei eine Konstante,  $b$  positiv und kleiner 1. Im gleichen Artikel wird allerdings beschrieben, dass das gesamte Spektrum sich gut an das Drake-Modell in der Form

$$\rho(\omega) = k \cdot (i\omega + \omega_l)^{-b} \quad (2.19)$$

anpassen lässt.  $\omega_l$ , bezeichnet als „low-frequency pole“, ist die Frequenz, oberhalb derer der Phasenverlauf hinreichend als konstant angesehen werden kann, bzw. 2.18 gilt. Überlegungen von der mathematischen Seite finden sich z.B. in [*Shuey and Johnson*, 1973] bei denen das Spektralverhalten in Abhängigkeit der Verteilung der Relaxationszeiten betrachtet und dessen analytische Beschreibungen aufgestellt werden.

Das Modell der konstanten Phase, CPA („constant phase angle“), besitzt allerdings nicht nur das Phasenverhalten, das ihm seinen Namen gab, sondern auch ein bestimmtes Verhalten im Betrag. So gehorchen nach *Börner* [1991] Real- und Imaginärteil praktisch demselben Potenzgesetz bezüglich ihrer Frequenzabhängigkeit. Mit  $e^{i\phi} = \cos \phi + i \sin \phi$  und  $i = e^{i\frac{\pi}{2}}$  ergibt sich unmittelbar aus 2.18

$$\phi(\omega) = -\frac{\pi}{2}b \quad \text{und} \quad |\rho(\omega)| = \rho_n \left(\frac{\omega_0}{\omega}\right)^b. \quad (2.20)$$

Hierbei wurde  $k$  aus 2.18 durch  $\rho_n \omega_0^b$  ersetzt, um der Konstanten mehr Bedeutung zu geben.  $\omega_0$ , das ursprünglich mit  $\omega_l$  aus 2.19 zusammenhängt, ist eine (beliebige, aber oft auf 1Hz gesetzte) Referenzfrequenz, bei der  $\rho(\omega)$  den Betrag  $\rho_n$  annimmt.

Auch zum CPA-Modell gibt es petrologische Modellvorstellungen, die allerdings recht komplexe Gestalt annehmen. Das Bild besteht aus einer Kette von fraktal geschachtelten ohmschen Widerständen und Kapazitäten, analog zu der Porenraumstruktur, die in [*Paape et al.*, 1987] bereits als selbstähnlich beschrieben wurde. *Liu* [1985] beschreibt dann die Polarisation einer Elektrode mit fraktaler Oberflächenstruktur. *Kulenkampff* [1994] zeigt, dass die fraktalen Eigenschaften der Porenraumstruktur bis zu den Größenordnungen des effektiven hydraulischen Radius vorherrschen, womit diese Gesetzmäßigkeit also bis zu den kleinsten, für den Transport relevanten Strukturen, gültig ist.

Der elektrische Ersatzschaltkreis wird so aufgestellt, dass ein Zusammenhang zwischen Widerständen und Kondensatoren einerseits und Teilvolumina eines fraktalen Porenraummodells andererseits besteht. Widerstände stehen für die auftretenden Reibungsprozesse, Kondensatoren für die elastischen Vorgänge. Die Modellvorstellung zum Porenraummodell ist in Abbildung 2.7 dargestellt. Details finden sich in [*Klitzsch*, 2004].

Festzuhalten bleibt, dass das CPA-Modell häufig Messdaten gut anpasst, aber im Frequenzbereich nach oben und unten beschränkt wird. Wie erwähnt, erwartet man in beiden Richtungen Phasen, die gegen Null gehen. *Voorhis et al.* [1973] zeigen an Porphyry eine untere Gültigkeitsgrenze um 0,01Hz; im oberen Bereich wurde nur bis 10Hz gemessen, wo das Modell noch gültig war. *Börner* [1991] erweitert die Aussage durch Messungen an Sedimentgesteinen auf bis zu 1kHz.

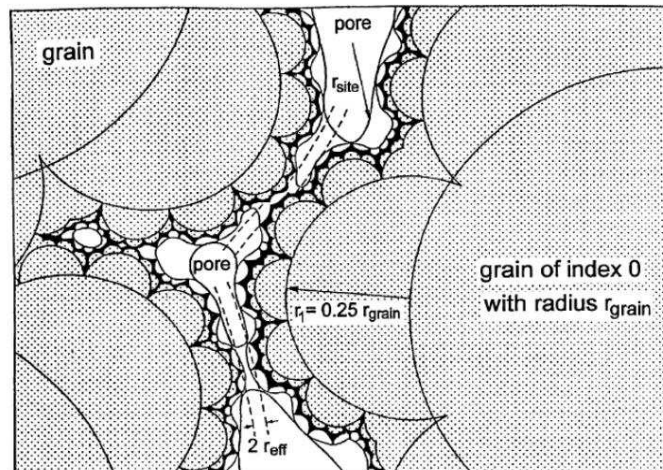


Abbildung 2.7: Fraktales Modell einer hierarchischen Struktur in einem Sedimentgestein. Geometrische Poren mit Radius  $r_{site}$ , Kapillaren des hydraulischen Modells mit effektivem Radius  $r_{eff}$ . Zeichnung aus [Pape et al., 1999].

## 2.4 Anwendungsmöglichkeiten

Die Anwendungsmöglichkeiten für die Induzierte Polarisation haben sich durch immer weiter verbesserte Messtechnik im Laufe der Jahre stark erweitert. Zu Beginn wurde IP besonders im Bereich der Exploration eingesetzt, nicht zuletzt, weil hier die Messfehler sehr groß waren. Später kamen dann die Bereiche der Umweltgeophysik und, mit Entdecken von Korrelationen zu Parametern aus der Hydrogeologie, auch dieses Gebiet hinzu.

### 2.4.1 Mineral-, Öl-, und Gasprospektion

Vor allem in den Büchern [Luo and Zhang, 1998] und [Telford et al., 1990] finden sich eine Vielzahl von Feld- und auch synthetischen Beispielen aus dem Bereich der klassischen IP-Anwendung.

Im Falle von elektronenleitenden Materialien treten die Vorteile der IP gegenüber der Geoelektrik deutlich auf. Neben dem Betrag der Leitfähigkeit heben sich die gesuchten Materialien (Beispiele für Kupfer, Eisen, Pyrit und Grafit in der o.g. Literatur) oftmals durch große Werte der Aufladbarkeit (z.T. über 60%) vom Hintergrund ( $m < 5\%$ ) ab. Besonders signifikant ist aber die Zeitkonstante. Hier finden sich häufig Werte über  $\tau = 1s$ , die damit um gut ein bis zwei Größenordnungen über dem Hintergrundwert liegen. In [Seigel et al., 1997] finden sich auch Beispiele mit  $\tau > 100s$ , wobei auf künstliche Quellen, wie z.B. Pipelines oder Stromleitungen im Untergrund, hingewiesen wird, die ebenfalls diese Effekte erzeugen können.

Im Bereich der Erdöl- und Erdgasprospektion wurde IP auch erfolgreich eingesetzt. Hier liegt der entscheidende Effekt nach Luo and Zhang [1998] im sekundären Pyrit, das sich

durch Reaktion von Sulfaten oder Eisen im Deckgestein mit Öl oder Gas bildet, welches aus dem Reservoir aufgestiegen ist. Eine Charakteristik ist hier ein großer Wert für den Frequenzexponenten  $c$  bis 0,75.  $\tau$  und  $m$  (Beispiele  $\tau < 1s$ ,  $m < 0,1$ ) haben hier deutlich weniger Aussagekraft.

### 2.4.2 Umweltgeophysik

Im Bereich der Umweltgeophysik tritt, bedingt durch die verschiedenen Stoffkombinationen, die z.B. in einer Mülldeponie auftreten, eine Vielzahl von IP-Effekten auf.

Wie schon bei der Erzexploration, findet man erhöhte Aufladbarkeiten bei Vorhandensein von elektronenleitenden Materialien, z.B. Metallschrott in einer Altlast. Die Werte sind allerdings weit niedriger als in der Exploration. Ein Beispiel einer Altlast findet sich z.B. in [Knödel et al., 1997], wobei schon Aufladbarkeiten um 3% sich sehr deutlich vom Hintergrund abheben.

Neben den elektronenleitenden Materialien bewirken auch Änderungen im elektrolytischen Leiter Messeffekte. Werden lösliche anorganische Kontaminanten in die Porenflüssigkeit eingebracht, steigt entsprechend die Ionenkonzentration und damit die elektrolytische Leitfähigkeit. Nach *Grahame* [1947] nimmt mit steigender Ionenkonzentration auch die Dicke der Doppelschicht und damit der IP-Effekt ab. Die Doppelschichtdicke  $d$  wird dabei berechnet als

$$d = \sqrt{\frac{\epsilon_0 \epsilon_r k_B T}{2ne^2\nu^2}}. \quad (2.21)$$

Hierbei ist  $\epsilon_0$  die Dielektrizitätskonstante des Vakuums,  $\epsilon_r$  die relative Dielektrizitätszahl,  $k_B$  die Boltzmann-Konstante,  $T$  die absolute Temperatur,  $n$  die Anzahl der Ionen pro  $m^3$  des Elektrolyts,  $e$  die Elementarladung und  $\nu$  die Wertigkeit der Ionen.

Aus dieser Gleichung erkennt man gleichzeitig einen anderen Effekt: Die Dicke der Doppelschicht nimmt nicht nur mit steigender Ionenkonzentration ab, sondern auch mit abnehmender Dielektrizitätszahl. Dies wird besonders im Zusammenhang mit organischen Kontaminationen beobachtet, die nicht löslich sind. Petroleum hat z.B. einen Wert von  $\epsilon = 2,1$  (bei  $18^\circ C$ , [Vogel, 1997]) und senkt damit gegenüber Wasser ( $\epsilon = 81,1$ ) die Dicke der Doppelschicht um einen Faktor  $> 6$ , wenn es das Wasser als Porenflüssigkeit ersetzen würde. Diese Überlegungen werden bestätigt durch Messungen an organisch kontaminiertem glazigenen Till ([Vanhala et al., 1992]). Hier wurden (im Frequenzbereich  $< 10Hz$ ) verstärkt kleinere Phasen gemessen. Für höhere Frequenzen wurde allerdings auch ein Anstieg der Phase beobachtet, was noch einmal die komplexen Vorgänge bei Kontaminationen unterstreicht. So maßen *Börner et al.* [1993] an ölkontaminierten Tonen und Sandsteinen. Als Resultat ergab sich ein erhöhter IP-Effekt bei den Tonen, eine Erniedrigung bei den Sandsteinen (für Sandsteine auch bestätigt von *Vanhala* [1997]).

Insgesamt bleibt festzuhalten, dass bei der Anwendung im Bereich der Umweltgeophysik oft signifikante IP-Effekte auftreten, aber schon das qualitative Verhalten, z.B. bei der Phase, aufgrund der komplexen Vorgänge unterschiedlich sein kann. Bei Deponieuntersuchungen hebt sich der Körper gegen den ungestörten Hintergrund neben IP-Effekten auch oft durch stärkere laterale Variationen aufgrund der Heterogenität des Materials ab. Ein Beispiel für eine Deponie, die sich in der Aufladbarkeit deutlich besser abzeichnet als im



Widerstand, wie man ihn bei einer Gleichstrommessung erhalten würde, ist in Abbildung 2.8 gezeigt. Hier wird der Vorteil der zusätzlichen Informationen einer IP- gegenüber einer DC-Messung klar. Der Bereich der Deponie hebt sich bei der verwendeten Auslagenweite nicht merklich gegen die Umgebung ab, zeigt aber starke IP-Effekte, die auf eine dünne Schicht metallischer Inhaltsstoffe zurückzuführen sind. Eine andere Arbeit, die sich mit der Problematik der Deponieerkundung mittels IP-Messung im Zeitbereich beschäftigt, ist [Hönig, 2002].

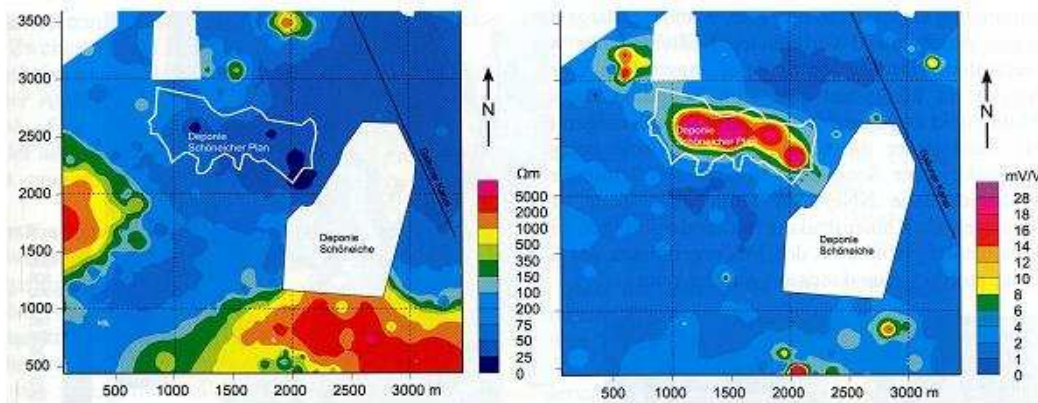


Abbildung 2.8: Betrag des scheinbaren spezifischen Widerstandes und Aufladbarkeit  $m$  über einem Deponiegebiet. Zeichnung aus [Knödel et al., 1997].

### 2.4.3 Hydrogeologie

In Unterkapitel 2.3 wurde bereits mehrfach der Zusammenhang zwischen Porenraumstruktur und IP-Effekt angesprochen, sodass man auch einen Zusammenhang zwischen hydraulischer und komplexer elektrischer Leitfähigkeit vermuten kann. Bei überwiegend elektrolytischer Leitfähigkeit entsprechen die Wege des elektrischen denen des hydraulischen Stroms. Um diese Zusammenhänge besser zu verstehen, sollen zunächst einige Parameter aus der Hydrogeologie eingeführt werden.

Die hydraulische Permeabilität  $K_H$ , mit der Einheit  $m^2$  (bzw. auch häufig in Darcy mit  $1D = 10^{-12}m^2$  angegeben, aufgrund der oftmals kleinen Werte), ist ein Maß für die Durchlässigkeit eines porösen Mediums gegenüber einem Fluid. Für ein einfaches Kapillarröhren-Modell setzt die Kozeny-Carman Gleichung ([Kozeny, 1927], [Carman, 1956]), die die Permeabilität mit der Porosität koppelt, in abgewandelter Form  $K_H$  in Beziehung zum effektiven Porenradius  $r_{eff}$  und dem Formationsfaktor  $F$  (z.B. [Pape et al., 1999]):

$$K_H = \frac{r_{eff}^2}{8F} \quad (2.22)$$

In einer ursprünglicheren Form trat die Beziehung

$$K_H = \frac{1}{2FS_{por}^2} \quad (2.23)$$

## 2 Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation

auf. Hierbei ist  $S_{por}$  die auf das Volumen normierte innere Oberfläche. Für eine zylindrische Kapillare mit Radius  $r_{eff}$  und Länge  $l$  ist dann  $S_{por} = (2\pi r_{eff}l)/(\pi r_{eff}^2 l) = 2/r$  und es folgt 2.22.

Der Formationsfaktor  $F$ , der schon in 2.10 eingeführt wurde, stellt für den Fall der Voll-sättigung ( $S = 1$ ) den Proportionalitätsfaktor zwischen spezifischem Widerstand des Gesteins und des Porenfluids dar, eine fast ausschließlich elektrolytische Leitfähigkeit vorausgesetzt.

Berücksichtigt man weiterhin den fraktalen Charakter der Porenraumstruktur, ändern sich die Proportionalitäten zwischen  $K_H$  und  $S_{por}$  zu ([Pape et al., 1987]):

$$K_H \propto \frac{1}{F S_{por}^{2/(3-D)}} \quad (2.24)$$

Hierbei ist  $D$  die fraktale Dimension der inneren Oberfläche, die für die meisten Gesteine zwischen 2,0 und 2,5 variiert ([Pape et al., 1999]). An Sandsteinproben wurde ein Wert von 2,36 gemessen und führt damit auf eine Potenz von etwa 3,1 für  $S_{por}$  im Unterschied zum einfachen Modell nach 2.23.

Zur Bestimmung von  $K_H$  werden noch Werte für  $S_{por}$  und  $F$  benötigt. Aufgrund der Beziehungen zwischen Grenzflächenleitfähigkeit, Imaginärteil der Leitfähigkeit und Größe der Grenzfläche, erwartet man einen Zusammenhang zwischen  $S_{por}$  und  $\Im(\sigma)$  und auch weitere zu  $F$  bzw. dann  $K_H$ . Vorab soll noch der Schritt von der Permeabilität zum Durchlässigkeitsbeiwert  $k_f$  gemacht werden, da er die Proportionalitäten hier noch unverändert lässt.

Bei der Berechnung von  $k_f$  werden die Eigenschaften des Porenfluids berücksichtigt, wie Dichte  $\rho_{m,fl}$  und dynamische Viskosität  $\eta$ . Auch die Schwerebeschleunigung  $g$  fließt ein. Damit lässt sich der  $k_f$ -Wert schreiben als:

$$k_f = \frac{K_H \cdot \rho_{m,fl} \cdot g}{\eta} . \quad (2.25)$$

Bei Standardbedingungen ( $g = 10 \frac{m}{s^2}$ ,  $\rho_{m,fl} = 1000 \frac{kg}{m^3}$  und  $\eta = 10^{-3} Pa \cdot s$ ) entspricht damit ein Darcy etwa  $10^{-5} \frac{m}{s}$ . Die Einheit  $m/s$  entspricht einem auf die Querschnittsfläche  $A$  normierten Volumenstrom  $Q$  ( $m/s = m^3/s / 1/m^2$ ), womit sich  $k_f$  auch in der Form

$$k_f = \frac{Q}{A} \cdot \frac{\Delta l}{\Delta h} . \quad (2.26)$$

darstellen lässt. Der hintere Term steht dabei für das Reziproke des hydraulischen Gradienten  $\Delta h/\Delta l$  mit Höhenunterschied  $\Delta h$  und Fließlänge  $\Delta l$ . Aufgrund der Unabhängigkeit der weiteren Parameter übertragen sich die Proportionalitäten von  $K_H$  auf  $k_f$ . Im Weiteren wurden verschiedene empirische Relationen formuliert, um  $k_f$  zu berechnen.

Börner et al. [1996] zeigen eine Möglichkeit der  $k_f$ -Bestimmung auf, die einigen Einschränkungen unterworfen ist:

- Das CPA-Modell sei anwendbar für Frequenzen unter  $1kHz$ .

- Grenzflächenleitfähigkeit und imaginärer Anteil der Leitfähigkeit seien linear abhängig von  $S_{por}$ .
- $l$ , das bereits im Zusammenhang mit 2.12 benutzte Verhältnis von Imaginär- zu Realteil der Grenzflächenleitfähigkeit, sei unabhängig von der Zusammensetzung und Verteilung des Porenfluids.

Für Lockersedimente (Kies, Sand und Silt) wird dann die Beziehung

$$k_f = \frac{1}{FS_{por}^c} \quad (2.27)$$

eigeführt, mit  $2,8 \leq c \leq 4,6$ . Verglichen mit Gleichung 2.24 entspricht dies einer fraktalen Dimension  $D$  zwischen etwa 2,29 und 2,57 und diese liegt damit in einem sinnvollen Bereich zwischen 2 und 3, auch wenn man genauer einen Wert unter 2,36 der Sedimentgesteine und damit  $c < 3,1$  erwarten würde.

Die Bestimmung von  $F$  geschieht über Umstellen der Gleichung 2.11 unter der Annahme von Vollsättigung. Entsprechend ergibt sich der Formationsfaktor zu

$$F = \frac{\sigma_w}{\Re(\sigma_0) - \Im(\sigma_0)/l} \left( = \frac{\sigma_w}{\Re(\sigma_0) - \Im(\sigma_{int})/l} = \frac{\sigma_w}{\Re(\sigma_0) - \Re(\sigma_{int})} \right) . \quad (2.28)$$

Hierbei ist  $\sigma_w$  wieder die Fluidleitfähigkeit,  $\sigma_0$  die Gesamtleitfähigkeit (bei Abwesenheit von Elektronenleitern) und  $\sigma_{int}$  die Grenzflächenleitfähigkeit. Aufgrund der rein reellen elektrolytischen Leitfähigkeit ist der Imaginärteil der Gesamtleitfähigkeit gleich dem der Grenzflächenleitfähigkeit.  $l$  variiert hierbei zwischen 0,01 und 0,15, wobei für Lockersedimente meist ein Wert von 0,1 gewählt werden kann.

Die Bestimmung von  $S_{por}$  stellt sich als direkte Abhängigkeit von der imaginären Leitfähigkeit dar. Dies macht insofern Sinn, als dass die innere Oberfläche und die imaginäre Leitfähigkeit eng zusammenhängen. Bei nicht starker Variation der Zusammensetzung des Porenwassers und des Formationsfaktors finden *Börner et al.* [1996]:

$$S_{por} = a \cdot \Im(\sigma_0) \quad , \quad \text{mit} \quad a = 8,6 \cdot 10^4 \left( \frac{S}{m} \right)^{-1} \cdot \frac{1}{\mu m} . \quad (2.29)$$

Unter den erwähnten Einschränkungen lassen sich also über Real- und Imaginärteil der (Gesamt-)Leitfähigkeit Formationsfaktor  $F$  (2.28), die auf das Volumen normierte innere Oberfläche  $S_{por}$  (2.29) und schließlich der Durchlässigkeitsbeiwert  $k_f$  (2.27) bestimmen.

Ein weiteres Modell ist das so genannte Korngrößen-Modell nach *Slater and Lesmes* [2002]. Es wird aus Labormessungen für Lockersedimente aufgestellt. Analog zu dem bereits besprochenen Ansatz wird versucht,  $\Im(\sigma_0)$  in Beziehung zu  $S_{por}$  zu setzen. Die lineare Beziehung (2.29) kann dabei für die verwendeten Proben (Silt, Sand, Till in natürlichem Zustand wie in künstlichen Mischungen) nicht bestätigt werden. An diese Stelle tritt

$$S_{por} \approx 2000 \cdot (\Im(\sigma_0(1Hz)))^p . \quad (2.30)$$

## 2 Grundlagen zur Spektralen Induzierten Polarisation

Hierbei gilt  $p = 0,5 \pm 0,2$ . Es wird hier kein Spektrum, sondern nur ein Wert für  $1Hz$  benötigt. Auf dem Weg zur Bestimmung von  $k_f$  wird (im Gegensatz zu 2.27) nur eine sehr leichte Abhängigkeit von  $F$  festgestellt, sodass  $k_f$  über  $S_{por}$  (2.30) direkt in Bezug zum Imaginärteil der Leitfähigkeit gesetzt werden könnte.

Es ist allerdings so, dass auch die Beziehung zu  $S_{por}$  gemieden und dafür die stärkere Korrelation zwischen  $\Im(\sigma_0)$  und  $d_{10}$  genutzt wird. Mit  $d_{10}$  wird die Korngröße bezeichnet, bei der 10 Gewichtsprozent der Probe kleiner sind. Die festgestellte Beziehung ist nun

$$\Im(\sigma_0) = 0,005 \cdot (d_{10})^{-b} . \quad (2.31)$$

Mit  $d_{10}$  in  $mm$  und  $b = 1,0 \pm 0,1$  ergibt sich  $\Im(\sigma_0)$  in  $\mu S/cm$ .

Im Weiteren wird eine Beziehung zwischen  $k_f$  und  $d_{10}$  benutzt, die (bis auf die fehlende Temperaturabhängigkeit) in der Form der Hazen-Gleichung (z.B. [Höltling, 1996]) entspricht. Es ergibt sich die Beziehung

$$k_f = 0,002 \cdot (d_{10})^d , \quad (2.32)$$

die zusammen mit 2.31 den gesuchten Bezug herstellt. Hierbei gilt  $d = 1,3 \pm 0,2$ . Ohne direktes Benutzen von  $S_{por}$  folgt die Gleichung

$$k_f = m \cdot (\Im(\sigma_0))^{-n} . \quad (2.33)$$

Es ist  $m = 0,0002 \pm 0,00003$  (Toleranz korrigiert nach [Klitzsch, 2004]) und  $n = 1,1 \pm 0,2$ . Für  $\Im(\sigma_0)$  in  $\mu S/m$  ergibt sich  $k_f$  in  $m/s$ .

Man erhält also eine Beziehung, die keine direkte Abhängigkeit zum Realteil der Leitfähigkeit beinhaltet. Dies ist insofern bemerkenswert, als dass der Realteil enger mit dem Porenraum, der Imaginärteil mit der Grenzfläche zusammenhängt. Die Permeabilität ist zwar mehr Volumen-korreliert (ebenso wie  $d_{10}$ ), aber die starke Beziehung 2.31 ermöglicht ein Wegfallen des Real- zugunsten des Imaginärteils.

Neben den beiden vorgestellten Ansätzen gibt es noch eine Vielzahl weiterer empirischer Modelle. So korrelieren z.B. *Sturrock et al.* [1999] die Relaxationszeit  $\tau$  eines angepassten Cole-Cole Modells (siehe 2.3.3) mit der mittleren Korngröße,  $c$  hängt mit der Breite der Verteilung zusammen. Mehr dazu findet sich unter anderem in [Kemna, 2000] und [Zisser, 2005]. In Letzterem werden auch Felddaten benutzt, insbesondere auch Daten, die in dieser Arbeit unter dem Gesichtspunkt der Inversion zur komplexen Leitfähigkeit des Untergrundes benutzt werden. Es zeigte sich, dass für diese Daten die Anpassung nach [Börner et al., 1996] günstiger ist als nach [Slater and Lesmes, 2002].

Insgesamt bleibt festzuhalten, dass bei den verschiedenen Modellen oftmals die Gültigkeit einer Vielzahl von Annahmen gefordert wird und die Anpassung nur für bestimmte Materialien im Labor erprobt ist. Die SIP bietet zwar theoretisch eine nichtinvasive Methode zur  $k_f$ -Bestimmung, die zudem kostengünstig und schnell ist und auch keine Labormessungen erfordert, aber in der Realität ist man von den Idealfällen meist entfernt.

Probleme in der Anwendung sind z.B. das Skalenproblem (Übertragen der Laborergebnisse ins Feld), der Einfluss der Zusammensetzung des Porenfluid (s.a. 2.4.2), die Sättigung

(in [Kemna *et al.*, 2004] wird sie in einem Ansatz ins Börner-Modell einbezogen), die Anwesenheit von Elektronenleitern oder auch hydraulisch ineffektive Porenräume, die aber einen IP-Effekt verursachen.

Insgesamt kann man also noch nicht erwarten, mit den bestehenden Erkenntnissen nur aufgrund von IP-Messungen direkt den  $k_f$ -Wert zu bestimmen. Es ist vermutlich aber möglich, die Anzahl der nötigen Bohrungen und Gesteinsproben deutlich zu reduzieren. Auch dies wäre ein großer Schritt.

Abschließend sei noch mit Tabelle 2.4 ein Überblick über in der Praxis auftretende Werte für  $k_f$  gegeben. Ähnlich wie die elektrische Leitfähigkeit, variiert der Parameter über viele Größenordnungen.

Material	$\log_{10}(k_f)$ (m/s)	
reiner Kies	-2	-1
grobkörniger Sand		$\approx -3$
mittelkörniger Sand	-4	-3
feinkörniger Sand	-5	-4
siltiger Sand	-7	-5
toniger Silt	-8	-6
Ton		<-8

Tabelle 2.4:  $k_f$ -Werte aus dem Bereich der Lockersedimente, nach [Zisser, 2005].



## 3 Theorie zur Inversion

Ein allgemeines Inversionsschema besteht aus einer wiederholt durchlaufenen Schleife von der Berechnung synthetischer Messdaten zu einem gegebenen Untergrundmodell, dem Vergleich zu den realen Messdaten und der Veränderung des Modells bis die Modellantwort hinreichend mit den beobachteten Werten übereinstimmt. Der Teil des Zyklus, der dabei aus dem bekannten Untergrundmodell die synthetischen Messdaten berechnet, ist die sogenannte Vorwärtsrechnung. Der Gesamtprozess, die Inversion, hat die dazu gegenläufige Aufgabe der Bestimmung des unbekannten Modells zu gegebenen Messdaten.

### 3.1 Die Vorwärtsrechnung

Die Vorwärtsrechnung hat zur Aufgabe, aus einer bekannten Leitfähigkeitsverteilung des Untergrundes bei bekannter Messkonfiguration (Elektrodenpositionen, Stromstärke, etc.) die Werte für die komplexen scheinbaren Widerstände zu berechnen, die man bei gegebenem Modell beobachten würde. Hierbei werden die durch die Stromeinspeisung verursachten Potentiale an den Potentialelektroden berechnet und addiert, danach die Spannung als Potentialdifferenz zwischen den Spannungselektroden bestimmt. Über die bekannte Messgeometrie und den zugehörigen Konfigurationsfaktor ermittelt man dann den scheinbaren Widerstand.

Um die Potentiale berechnen zu können, werden in 3.1.1 die geltenden Gleichungen eingeführt, 3.1.2 zeigt dann eine Möglichkeit der numerischen Umsetzung.

#### 3.1.1 Physikalische Grundgleichungen

Grundlage der Berechnung sind die Maxwell'schen Gleichungen:

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{j} \quad (3.1)$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3.2)$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (3.3)$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = q \quad (3.4)$$

Hier sind  $\vec{H}$  die magnetische Feldstärke,  $\vec{E}$  die elektrische Feldstärke,  $\vec{B}$  die magnetische Flussdichte,  $\vec{D}$  die elektrische Verschiebungsdichte,  $\vec{j}$  die Stromdichte und  $q$  die elektrische Raumladungsdichte.

Zunächst soll das Ampèresche Gesetz (3.1) weiter betrachtet werden. So lässt sich die Stromdichte in drei Anteile aufspalten: Leitungsstromdichte  $\vec{j}_l$ , Verschiebungsstromdichte  $\vec{j}_v$  und Quellstromdichte  $\vec{j}_s$  (Notation weitgehend nach [Knödel et al., 1997], in Teilen

### 3 Theorie zur Inversion

nach [Telford et al., 1990]). Die Anteile lassen sich jeweils noch über elektrische Größen beschreiben und man erhält

$$\vec{j} = \vec{j}_l + \vec{j}_v + \vec{j}_s = \sigma \vec{E} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{d} \cdot \delta(\vec{r} - \vec{r}_s), \quad (3.5)$$

mit elektrischer Leitfähigkeit  $\sigma$ ,  $\vec{d}$  Strommoment,  $\vec{r}_s$  Position des Dipols und  $\delta$  Delta-Funktion in drei Dimensionen ( $[ ] = m^{-3}$ ).  $\vec{d}$  ist von der negativen zur positiven Elektrode gerichtet, sein Betrag ist das Produkt von Stromstärke und Dipollänge.  $\delta$  steht für die Singularität des Quellstroms. (Eine Integration liefert 1, falls der Ursprung, also  $\vec{r} = \vec{r}_s$ , eingeschlossen ist.)

Will man nun die Größenverhältnisse bei einer sinusförmigen Zeitabhängigkeit  $e^{i\omega t}$  zwischen Leitungs- und Verschiebungsanteil vergleichen, so kann man

$$\vec{D} = \epsilon(\omega) \cdot \vec{E} \quad (3.6)$$

benutzen, mit der Dielektrizitätskonstante  $\epsilon$  ( $\epsilon = \epsilon_r \cdot \epsilon_0$ ,  $\epsilon_0$  Dielektrizitätskonstante des Vakuums und  $\epsilon$  relative Dielektrizitätszahl) und erhält das sogenannte „magnitude ratio“ ([Lowrie, 1997])

$$\frac{|\vec{j}_v|}{|\vec{j}_l|} \approx \frac{\omega |\epsilon(\omega)|}{|\sigma(\omega)|}. \quad (3.7)$$

Für ein extrem großes Verhältnis (hohe Frequenz und niedrige Leitfähigkeit) für unsere Anwendungen von  $\omega = 2\pi \cdot 1000 \text{ Hz}$ ,  $|\epsilon(\omega)| = 10 \cdot 8,852 \cdot 10^{-12} \text{ As/Vm}$  und  $|\sigma(\omega)| = 10^{-4} \text{ S/m}$  ergibt sich noch immer ein Wert von etwa  $0,006 \ll 1$ , der zumeist noch deutlich unterschritten wird.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass  $\epsilon$  und  $\sigma$  nicht, wie im allgemeinsten Fall nötig, als Tensoren, die zudem Funktion von Temperatur, Druck, etc. sein können, angenommen werden, sondern als komplexwertige skalare Größen. Bereits in 2.3 wurde festgestellt, dass das angelegte elektrische Feld und die Stromdichte nicht immer in Phase sind und  $\sigma$  als komplexwertig eingeführt.

Bildet man die Divergenz von 3.1 unter Vernachlässigung der Verschiebungsanteile, so ergibt sich

$$\nabla \cdot \vec{j}_l = -\nabla \cdot \vec{j}_s. \quad (3.8)$$

Außerhalb der Quellen folgt dann mit  $\vec{j}_l$  aus 3.5 die Gleichung, die das elektrische Feld direkt mit der Stromdichte verbindet, das Ohmsche Gesetz:

$$\vec{j} = \sigma(\omega) \cdot \vec{E} \quad (3.9)$$

Analog zur Stromdichte folgt auch die elektrische Verschiebungsdichte nicht unmittelbar dem elektrischen Feld und ist komplexwertig. Mit Einsetzen für  $\vec{j}_l$  in 3.8 ergibt sich als quasi-statische Näherung

$$\nabla \cdot (\sigma(\omega) \cdot \vec{E}) + \nabla \cdot \vec{j}_s = 0. \quad (3.10)$$

Hierbei beinhaltet die komplexe Leitfähigkeit nun alle relevanten Effekte im betrachteten Frequenzbereich, inklusive der Beiträge der Polarisation im Imaginärteil. Mehr zur



Überlegung, wie die komplexen Anteile von  $\epsilon$  und  $\sigma$  interpretiert werden können, findet sich in [Kemna, 2000]. Der Zusammenhang zwischen Zeit- und Frequenzbereich über Faltungsintegrale und Laplace- bzw. Fourier-Transformation ist z.B. in [Shuey and Johnson, 1973] beschrieben.

In der numerischen Umsetzung wird aus Gründen der Vereinfachung weiterhin angenommen, dass induktive Effekte vernachlässigbar sind und also

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \quad (3.11)$$

gelte. Damit kann  $\vec{E}$  über ein Potentialfeld  $U$  dargestellt werden:

$$\vec{E} = -\nabla U \quad (3.12)$$

Die Annahme, dass keine induktive Kopplung berücksichtigt werden muss, ist dadurch zu erfüllen, dass die gewählten Frequenzen hinreichend klein sind (in der Regel für  $< 10Hz$  erfüllt) oder die Daten vor der weiteren Betrachtung korrigiert werden. Zu Letzterem mehr in Unterkapitel 5.1.

Es ergibt sich die Gleichstrom-Grundgleichung aus 3.10 zu

$$\nabla \cdot (\sigma(\omega) \cdot \nabla U) = \nabla \cdot \vec{j}_s \quad (3.13)$$

Mit dem Ohmschen Gesetz (3.9) ergibt sich für eine Punktquelle auf einem homogenen Halbraum ein elektrisches Feld mit radialer Ausrichtung:

$$E_r = \frac{I}{2\pi r^2 \sigma} = -\frac{\partial U}{\partial r} \quad (3.14)$$

und damit das Potential

$$U(r) = \frac{I}{2\pi \sigma r} \quad (3.15)$$

In der Praxis hat man meist zwei Elektroden, an denen Strom in den Boden gespeist wird und zwei weitere, zwischen denen eine Potentialdifferenz gemessen wird. Hierbei addieren sich die Potentiale der Stromelektroden skalar und für eine allgemeine Konfiguration, wie sie in Abbildung 3.1 dargestellt ist, ergibt sich unter entsprechender Benutzung von 3.15 die gemessene Spannung  $V$  zu

$$V = \rho I \left( \frac{1}{2\pi} \left( \left( \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_3} \right) - \left( \frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_4} \right) \right) \right) \quad (3.16)$$

Der Konfigurationsfaktor  $K$  setzt nun den spezifischen Widerstand mit dem Verhältnis von Spannung und Stromstärke in direkte Beziehung:

$$\rho = K \frac{V}{I} = \frac{V}{I} \cdot \left( \frac{1}{2\pi} \left( \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r_4} \right) \right)^{-1} \quad (3.17)$$

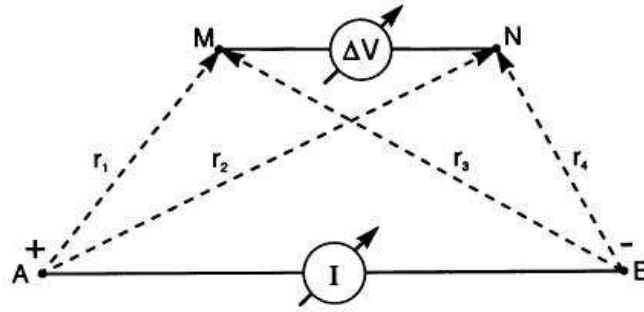


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung einer allgemeinen Vierpunktanordnung. Zeichnung aus [Knödel et al., 1997].

Falls kein homogener Halbraum vorliegt, ergibt sich bei Berechnen von  $\rho$  nach 3.17 der bereits zuvor erwähnte scheinbare spezifische Widerstand  $\rho_a$  (siehe auch [Spies and Eggers, 1986]). In der Realität werden sich meist Effekte aus Gebieten besserer und schlechterer Leitfähigkeiten zu diesem Wert überlagern.

In dieser Tatsache zeichnet sich bereits ab, dass es oftmals mehrere Untergrundmodelle geben kann, die bei der Messung denselben scheinbaren Widerstand bzw. dieselbe Spannung (bei gleicher Stromspeisung) erzeugen. Wie dieses Mehrdeutigkeitsproblem behandelt werden kann, ist ein Schwerpunkt von Unterkapitel 3.2.

### 3.1.2 Umsetzung mittels Finiten Elemente

Da weite Teile des Basisprogrammes unter Benutzung von [Kemna, 2000] als Vorlage erstellt wurden, soll auch im Folgenden die Notation weitgehend übernommen werden.

Jede Vorwärtsrechnung hat im Prinzip bei gegebenem Untergrundmodell für die Leitfähigkeit  $\sigma$  und bekanntem Einspeisestrom die Potentiale an den Spannungselektroden zu berechnen. Dazu muss die Differentialgleichung 3.13 gelöst werden. Vom Typ her handelt es sich dabei um eine Poisson-Gleichung ( $\Delta u = -f$ ), in drei Dimensionen ausgeschrieben als

$$\partial_x(\sigma\partial_x U) + \partial_y(\sigma\partial_y U) + \partial_z(\sigma\partial_z U) = -I\delta(x - x_s)\delta(y - y_s)\delta(z - z_s) . \quad (3.18)$$

$\partial_i$  wird hierbei abkürzend verwendet für  $\frac{\partial}{\partial_i}$ . Die gegebenen Randbedingungen haben dabei allgemein die Form

$$\sigma\partial_n U + \beta_{FE}U = 0 , \quad (3.19)$$

mit  $n$  als äußere Normalenrichtung und  $\beta_{FE}$  als eine (reellwertige) Konstante, die den Randtyp festlegt.  $\beta_{FE} = 0$  führt z.B. zu der Forderung  $\partial_n U = 0$  (da  $\sigma \neq 0$ ) und fordert damit, dass kein Strom senkrecht zur Oberfläche fließt. Mehr hierzu zum Ende des Unterkapitels.

Oftmals ist eine Behandlung in drei (räumlichen) Dimensionen numerisch noch zu aufwändig oder aufgrund der geologischen Verhältnisse nicht nötig. Geschieht dann die Lösung in zwei Dimensionen, wird das Potential aus den drei räumlichen in zwei räumliche Dimensionen und Wellenzahlbereich transformiert. Weil es sich um eine gerade Funktion handelt (punktsymmetrisches Potentialfeld), kann eine Fourierkosinustransformation benutzt werden (Streichrichtung sei  $y$ ):

$$\tilde{U}(x, k, z) = 2 \int_0^{\infty} U(x, y, z) \cos(ky) dy \quad (3.20)$$

Es sind  $k$  die Wellenzahl und  $\tilde{U}$  das transformierte Potential. Unter Verwendung von 3.20 ergibt sich eine Gleichung vom Helmholtz-Typ ( $\Delta u + k^2 u = -f$ ) mit

$$\partial_x(\sigma \partial_x \tilde{U}) - \sigma k^2 \tilde{U} + \partial_z(\sigma \partial_z \tilde{U}) = -I \delta(x - x_s) \delta(z - z_s) . \quad (3.21)$$

Die Transformation erfolgt für diskrete Wellenzahlwerte (typische Größenordnung:  $\approx 12$ ) und es folgt die Rücktransformation nach

$$U(x, y, z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{U}(x, k, z) \cos(ky) dk . \quad (3.22)$$

Die Notation folgt hierbei weitgehend [Kemna, 2000] bzw. [Hohmann, 1988] (bildet aber keinen Unterschied zur auch auftretenden Schreibweise mit Faktor  $\sqrt{\frac{2}{\pi}}$  für beide Transformationsteile). Erstere Arbeit beinhaltet auch im Anhang eine Betrachtung des Fehlers in Abhängigkeit von der Anzahl der diskreten Wellenzahlen. Die Integration wird -ähnlich zu dem Vorschlag von *LaBrecque et al.* [1996]- aufgespalten in einen Bereich kleiner Wellenzahlen ( $k < 1/(2r_{min})$ , mit  $r_{min}$  kleinster Abstand zwischen zwei Elektroden in der Anordnung) und einen großer Wellenzahlen. Dies begründet sich in dem unterschiedlichen Verhalten der Funktion, insbesondere einer logarithmischen Singularität bei Null. Die unteren Wellenzahlen werden über Gauß-Quadratur, die oberen über Gauß-Laguerre Polynome bestimmt. Mehr zu den mathematischen Zusammenhängen und der numerischen Umsetzung findet sich in [Bronstein and Semendjajew, 1991] bzw. [Press et al., 1992].

Die numerische Lösung der Differentialgleichungen 3.18 bzw. 3.21 unter Berücksichtigung der entsprechenden Randbedingungen kann auf verschiedene Weisen erfolgen. Eine der bekanntesten Methoden ist die der Finiten Differenzen (FD). Bei dieser Methode wird die Differentialgleichung direkt gelöst. Der Raum wird in (quaderförmige bzw. rechteckige) Gitterzellen zerlegt und darauf die diskreten Werte für Leitfähigkeitsgradienten, Ableitungen (erste und zweite) der Potentiale und Quellterme bestimmt. Zusammen mit den Randbedingungen ergibt sich ein dünnbesetztes lineares Gleichungssystem, das nach bekannten Verfahren gelöst werden kann. *Spitzer* [1995] zeigt eine Anwendung für die Gleichstromgeoelektrik, bei der das System symmetrisiert und dann mittels konjugierter Gradienten gelöst wird.

Eine nicht direkte Lösung stellt die Randintegralmethode dar, die für eine Fülle von

### 3 Theorie zur Inversion

technischen Anwendungen geeignet ist und die Differentialgleichung auf einem Gebiet in eine Integralgleichung auf den Rand des Gebietes transformiert. Eine flexible Anwendung aus dem Geoelektrik-Bereich, die auch für Bohrlochdaten geeignet ist, findet sich in [Lesur et al., 1999].

Die in dieser Arbeit verwendete Methode ist die der Finiten Elemente (FE). Ähnlich wie bei der FD-Methode, wird das Gebiet zunächst wieder in kleine und geometrisch einfache Teilgebiete zerlegt. In diesem Fall ist die Netzgenerierung allerdings flexibler und es sind auch Dreiecke erlaubt, die darüberhinaus auch mit anderen Elementen kombiniert werden können. Es sind sogar krummlinige Elemente möglich (z.B. [Schwarz, 1984]). Damit kann grundsätzlich (unter Berücksichtigung bestimmter geometrischer und topologischer Bedingungen) jede beliebige Form nachgebildet werden. Insbesondere im Falle von Messungen auf unebenem Gelände ist dies von Vorteil.

Bei der FE-Methode wird benutzt, dass die Lösung der Differentialgleichung unter Berücksichtigung der Randbedingungen gleichzeitig Lösung eines Variationsproblems ist. Für das Verständnis der FE-Methode ist dabei folgender Satz von zentraler Bedeutung (z.B. [Richter, 1995]):

**Satz 1** *Im Gebiet  $G \subset R^3$  seien  $a_1, a_2, a_3, f$  und  $g$  als Funktionen der Raumkoordinaten  $(x, y, z)^t \in G$  gegeben. Die Oberfläche  $\partial G$  des Gebietes besitze die Parameterdarstellung*

$$\partial G = \{(x, y, z)^t; x = x(s_1, s_2), y = y(s_1, s_2), z = z(s_1, s_2)\}$$

*mit  $(s_1, s_2)^t \in S$ . Auf ihr seien  $b_1$  und  $b_2$  als Funktionen der Oberflächenkoordinaten  $s_1$  und  $s_2$  gegeben.*

*Unter allen zweimal stetig differenzierbaren Funktionen  $w$ , die zu einer vorgegebenen Funktion  $h$  die Randbedingung*

$$w = h(s_1, s_2) \text{ auf } \partial G_1 \subset \partial G$$

*erfüllen, sei diejenige Funktion gesucht, die den Ausdruck*

$$\begin{aligned} I(w) &= \int_G \left( \frac{1}{2} \cdot (a_1 \partial_x^2 w + a_2 \partial_y^2 w + a_3 \partial_z^2 w - f w^2) - g w \right) dx dy dz \\ &+ \int_{\partial G} \left( \frac{1}{2} b_1 w^2 - b_2 w \right) ds_1 ds_2 \end{aligned} \quad (3.23)$$

*extremal werden lässt. Die gesuchte Funktion  $u$  genügt dann in  $G$  der Randwertaufgabe, bestehend aus der Differentialgleichung*

$$\partial_x(a_1 \partial_x u) + \partial_y(a_2 \partial_y u) + \partial_z(a_3 \partial_z u) + f \cdot u + g = 0$$

*und den beiden Randbedingungen*

$$u = h(s_1, s_2) \text{ auf } \partial G_1 \text{ und}$$

$$a_1 \partial_x u n_x + a_2 \partial_y u n_y + a_3 \partial_z u n_z + b_1 u - b_2 \text{ auf } \partial G_2 = \partial G \setminus \partial G_1.$$

Hierbei sind  $n_x, n_y$  und  $n_z$  die Komponenten des Normalenvektors  $n$ , der von der Teiloberfläche  $\partial G_2$  nach außen weist.

Mit diesem Satz (Beweis siehe z.B. [Richter, 1995]) ist die Lösung der Differentialgleichung auf ein Variationsproblem zurückgeführt. Man erkennt deutlich den Zusammenhang zur zu lösenden Differentialgleichung 3.18, indem man  $a_1 = a_2 = a_3 = \sigma$ ,  $u = U$ ,  $f = 0$  setzt und  $g$  mit dem Quellterm identifiziert. Im Allgemeinen besteht über die Wahl verschiedener Werte für  $a_1$ ,  $a_2$  und  $a_3$  die Möglichkeit, die Lösung für anisotrope Leitfähigkeiten zu bestimmen.

Das Problem ist nun, aus der Vielzahl der möglichen Funktionen die Lösung zu finden. Der Ansatz von Ritz (z.B. [Schwarz, 1984]) begnügt sich mit einer Näherungslösung und schränkt den Lösungsraum ein. Diese Lösung  $u^*$  soll dargestellt werden als Linearkombination eines Satzes linear unabhängiger Funktionen  $(\varphi_0(x), \dots, \varphi_m(x), x \in G)$ :

$$u^*(x) = \varphi_0(x) + \sum_{k=1}^m \alpha_k \cdot \varphi_k(x) , x \in G . \quad (3.24)$$

Die Koeffizienten  $\alpha_k$  sind noch zu bestimmen.  $\varphi_0$  soll hierbei die vorgegebenen (inhomogenen) Randbedingungen erfüllen, die restlichen Ansatzfunktionen sollen auf dem Rand verschwinden. Das zugrunde liegende Variationsproblem wird in diesem Ansatz noch verallgemeinert. Gesucht ist nun unter allen Funktionen diejenige Funktion  $u^*$ , für die der Ausdruck

$$\int_G F(x_1, \dots, x_N, u, \partial_{x_1} u, \dots, \partial_{x_N} u, \dots) dV_N$$

extremal wird. Die Ableitungen des Integrals nach  $\alpha_j$  ( $j = 1, \dots, m$ ) werden Null gesetzt und im Falle linearer Differentialgleichungen erhält man ein lineares Gleichungssystem für die gesuchten Koeffizienten.

Auch dieser Ansatz erweist sich allerdings nur als bedingt praktikabel. Die Schwachstellen sind:

- Für komplex strukturierte Ränder sind Ansatzfunktionen, die den Randbedingungen genügen, schwierig zu finden.
- Die Ansatzfunktionen können im Allgemeinen nur schwer integriert werden.
- Für eine hinreichend genaue Näherungslösung werden zu viele Ansatzfunktionen benötigt. Das Gleichungssystem wird (bei im Allgemeinen vollbesetzter Koeffizientenmatrix) zu groß.

Entsprechend muss der Ansatz weiter optimiert werden. Der Ansatz von Galerkin bietet eine Erweiterung auf Differentialgleichungen wie aus Satz 1, allerdings mit  $a_0 \partial_t u$  auf der rechten Seite. Die hier gemachten Verallgemeinerungen sind aber noch nicht hinreichend. Der entscheidende Schritt zur FE-Methode ist es, die Forderung nach Stetigkeit oder sogar Differenzierbarkeit der Ansatzfunktionen auf dem Gebiet  $G$  aufzugeben. Mit Ansatzfunktionen, die in einem Teilbereich (dem jeweiligen Element) polynomial und außerhalb Null sind, lösen sich die aufgeführten Schwierigkeiten. Unter Hinzunahme von

### 3 Theorie zur Inversion

Stetigkeits- und Glattheitsbedingungen ergibt sich ein eindeutig lösbares Gleichungssystem für die Polynomkoeffizienten. Der Weg zum Aufstellen des Gleichungssystems soll für ein allgemeines Beispiel in zwei Dimensionen kurz skizziert werden. Danach kann der Bezug zu den hier benötigten Differentialgleichungen hergestellt werden.

Gegeben sei die Differentialgleichung

$$\partial_x(a_1 \cdot \partial_x u) + \partial_y(a_2 \cdot \partial_y u) + f \cdot u + g = 0, \quad (3.25)$$

mit  $(x, y) \in G \subset \mathbb{R}^2$ . Hier kann über  $a_1 = a_2 = \sigma$ ,  $u = \tilde{U}$ ,  $g$  Quellterm und  $f = \sigma k^2$  der Bezug zu Gleichung 3.21 hergestellt werden. Erneut besteht die Möglichkeit zur Verwendung von Anisotropie und das Problem soll allgemein gelöst werden. Auf  $\partial G$  seien weiterhin die Randbedingungen  $a_1 \partial_x u n_x + a_2 \partial_y u n_y + b_1 u = b_2$  zu erfüllen. Dann wird die Variationsaufgabe

$$I(u) = \int_G \left( \frac{1}{2} (a_1 \partial_x^2 u + a_2 \partial_y^2 u - f u^2) - g u \right) d(x, y) + \int_{\partial G} \left( \frac{1}{2} b_1 u^2 - b_2 u \right) ds \quad (3.26)$$

zugewiesen. Nach Zerlegung des Gebietes in  $m$  Elemente  $D_1, \dots, D_m$ , auf denen die Koeffizienten der Differentialgleichung als konstant angesehen werden, schreibt man die Näherungslösung  $u^*$  als  $u^* = \sum_{j=1}^m \varphi_j(x, y)$ . Hierbei ist  $\varphi_j$  die Ansatzfunktion, die auf  $D_j$  polynomial ist und sonst Null. Gleichung 3.26 wird damit zu

$$\begin{aligned} I(u^*) &= \sum_{j=1}^m \int_{D_j} \frac{1}{2} (a_1 (\partial_x \varphi_j)^2 + a_2 (\partial_y \varphi_j)^2 - f \varphi_j^2) d(x, y) \\ &+ \sum_{j=1}^m \int_{D_j} (-g \varphi_j) d(x, y) + \sum_{j=1}^m \int_{\partial G \cap \partial D_j} \left( \frac{1}{2} b_1 \varphi_j^2 - b_2 \varphi_j \right) ds \\ &=: \sum_{j=1}^m I_j. \end{aligned} \quad (3.27)$$

Für einfache Elemente ist eine lineare Transformation auf ein Standardelement möglich. Ohne Randterm lässt sich das  $j$ . Teilintegral dann schreiben als

$$\begin{aligned} I_{j,D} &= \vec{u}^{(j)t} \cdot \frac{1}{2} \cdot (\sigma_{j,11} \bar{S}_{11} + 2\sigma_{j,12} \bar{S}_{12} + \sigma_{j,22} \bar{S}_{22} - \mu_j \bar{M}) \cdot \vec{u}^{(j)} \\ &- \vec{u}^{(j)t} \cdot (\gamma \vec{b}). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Hierbei sind  $\sigma_{j,11}$ ,  $\sigma_{j,12}$  und  $\sigma_{j,22}$  Größen, die von  $a_1$  und  $a_2$  aus der Differentialgleichung sowie von der Lage des jeweiligen Elements abhängen.  $\mu_j$  hängt anstatt von  $a_1$  bzw.  $a_2$  von  $f$  ab,  $\gamma_j$  von  $g$  und  $\rho_j$  von  $a_0$ . Die Matrizen  $\bar{S}_{11}$ ,  $\bar{S}_{12}$ ,  $\bar{S}_{22}$  und  $\bar{M}$  sind dagegen konstant und hängen nur vom Elementtyp (z.B. Dreieck oder Parallelogramm) und Grad der Ansatzfunktion (z.B. linear oder quadratisch) ab. Für ein trianguliertes Gebiet mit linearer Ansatzfunktion sind die Steifigkeitselementmatrizen ( $\bar{S}_{ij}$ ) und die Massenelementmatrix ( $\bar{M}$ ) konstant. Die Namen kommen noch aus dem frühen Anwendungsbereich der FE-Methode, der Baustatik.

Durch Nullsetzen der Ableitungen kann nun das Variationsproblem gelöst werden:

$$0 = (\sigma_{j,11} \bar{S}_{11} + 2\sigma_{j,12} \bar{S}_{12} + \sigma_{j,22} \bar{S}_{22} - \mu_j \bar{M}) \cdot \vec{u}^{(j)} - \gamma \vec{b}. \quad (3.29)$$

### 3.1 Die Vorwärtsrechnung

Durch Auffüllen von Nullen können die Vektoren  $\vec{u}^{(j)}$  und die symmetrischen Matrizen ( $\bar{S}_{11}$ ,  $\bar{S}_{12}$ ,  $\bar{S}_{22}$  und  $\bar{M}$ ) sowie  $\vec{b}$  nun in einem Gleichungssystem zusammengefasst werden. Für die Randbedingungen in Gleichung 3.19 ist noch  $b_1$  durch  $\beta_{FE}$  und  $b_2$  durch 0 zu ersetzen. Die Ableitung der Randintegrale führt auf Gleichungen der Form  $\vec{0} = \beta_j \cdot \bar{C} \cdot \vec{u}^{(\partial D_j)}$ , wobei  $\bar{C}$  eine symmetrische Matrix ist, die von der Kantenlänge des Randstückes abhängt. Diese Gleichungen fließen noch in die Gesamtmatrix ein. (Details weiter unten.) Das vollständig Problem besitzt dann die Form

$$\bar{S} \cdot \vec{U} = \vec{c}, \quad (3.30)$$

mit einer symmetrischen Matrix  $\bar{S}$  und einem konstanten Vektor  $\vec{c}$ . Die Lösung des Systems erfolgt nun nach Bandbreitenreduktion durch einen Cuthill-McKee Algorithmus (ähnlich in [Schwarz, 1991]) über eine komplexe Version der Cholesky-Zerlegung und nachfolgendem Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen. Als einfache und effiziente Vorkonditionierung wurde diagonales Skalieren gewählt. Mehr zu den mathematischen Einzelheiten z.B. in [Schwarz, 1997].

Auf der physikalischen Seite sind noch die Behandlung der Stromquelle und der Randbedingungen näher zu betrachten.

Die Delta-Distribution kann im diskretisierten Raum nicht hinreichend genau wiedergegeben werden. Entsprechend treten im Bereich der modellierten Singularität numerische Fehler auf. Diese können durch Benutzen einer analytischen Lösung verringert werden. Das Konzept des „singularity removal“ ([Lowry et al., 1989]) sieht vor, das Potential eines homogenen Halbraums mit Hintergrundleitfähigkeit  $\sigma_0$  analytisch zu bestimmen und dann die weitere Berechnung als Bestimmung von sekundären Potentialen aufgrund von Abweichungen der Leitfähigkeit gegenüber dem homogenen Hintergrund anzusehen. Im letzten Schritt wird dann das primäre (analytisch bestimmte Potential) addiert. Mit  $\tilde{U} = \tilde{U}_p + \tilde{U}_s$  und  $\sigma = \sigma_0 + \Delta\sigma$  ergibt sich für den 2D-Fall

$$\partial_x(\sigma\partial_x\tilde{U}_s) - \sigma k^2\tilde{U}_s + \partial_z(\sigma\partial_z\tilde{U}_s) + \partial_x(\Delta\sigma\partial_x\tilde{U}_p) - \Delta\sigma k^2\tilde{U}_p + \partial_z(\Delta\sigma\partial_z\tilde{U}_p) = 0. \quad (3.31)$$

(Der  $\delta$ -Term fällt weg!). Die zugehörigen Randbedingungen haben die Form

$$\sigma\partial_n\tilde{U}_s + \beta_{FE}\tilde{U}_s = 0. \quad (3.32)$$

An dieser Stelle sei noch einmal hervorgehoben, dass „2D“ sich ausschließlich auf die Leitfähigkeitsverteilung bezieht. Die analytischen Potentiale gehen von einer Punktquelle (und nicht Linienquelle) aus. Es findet sich hierfür auch die Bezeichnung 2,5D.

Die Randbedingungen können unterschiedlich angesetzt werden. An der Erdoberfläche fordert man  $\partial_n U = 0$ , eine homogene Neumannsche Randbedingung. Damit ist gemeint, dass kein Strom senkrecht zur Oberfläche fließt. (In der Umsetzung ist damit  $\beta_{FE} = 0$  und in der Gesamtmatrix müsste  $0 = 0$  zugefügt werden und somit bleibt sie unverändert.)

Im Falle großer Berechnungsgitter, deren Grenzen weit von der Quelle entfernt sind, kann man die homogene Dirichletsche Randbedingung mit  $U = 0$  setzen. Dies ist ebenfalls einfach umzusetzen, durch eine Null an der entsprechenden Stelle im Konstantenvektor und

eine Eins in der Matrix. Bei beiden Typen von Randbedingungen fließt nicht die Lage der Quelle ein. Somit bleibt die Abhängigkeit bis hier auf den Quellterm beschränkt und die Gesamtmatrix (im Gegensatz zum Konstantenvektor) für die Potentialberechnung aller einzelnen Elektroden gleich, was von großem Vorteil für die Rechenlaufzeit ist.

Anders als bei Benutzung einer homogenen Dirichletschen Randbedingung, lässt sich auch Rechenzeit durch kleinere Gebiete sparen. Dies ist teilweise sogar nötig, um das Problem in noch handhabbarer Größe zu halten, insbesondere für 3D-Rechnungen. Es gilt dann am Rand allerdings nicht mehr  $U = 0$ , sondern man benutzt sogenannte gemischte Randbedingungen, die  $\beta_{FE}$  über das asymptotische Verhalten des Potentials in einem homogenen Halbraum bestimmen. Dies hat andererseits den klaren Nachteil, dass Terme in die Gesamtmatrix hinzukommen und für jede Stromelektrode erneut die Matrix aufgestellt und zerlegt werden muss. Ein weiteres Problem tritt z.B. bei starker Topografie auf, wenn das analytische Potential für einen Halbraum nicht mehr hinreichend das Abklingverhalten wiedergibt. Analog ist in diesem Fall auch das singularity removal problematisch. Man muss also eine Abwägung treffen zwischen vielen Rechnungen auf kleineren Gittern (gemischte Randbedingungen) oder einem großen Problem (Neumannsche Bedingungen). Für den 3D-Fall waren auf den heutigen Standard-PCs keine Gebiete mehr zu rechnen, bei denen die Neumannschen Bedingungen hinreichend erfüllt gewesen wären. Hier musste das kleine Gitter mit Rechenzeiten von über einer Woche bezahlt werden. Mehr zu Rechnungen in drei Dimensionen wird in 6.2 erläutert.

Der Themenbereich der Topografie mit besonderer Betrachtung der Randeffekte wird erst in 4.2 besprochen, da hier auch der Inversionsablauf noch geändert wird. Eine Anwendung der gemischten Randbedingungen in drei Dimensionen findet sich bei [Dey and Morrison, 1979]. Hier wird auch der Vorschlag gemacht, analytisches Potentialverhalten nicht nur von homogenen, sondern z.B. auch von geschichteten Halbräumen zu benutzen.

Damit ist der Ansatz zur Berechnung der Potentiale für bekannten Untergrund und Messkonfiguration für Standardfälle dargestellt. Spezialfälle, wie z.B. der Umgang mit Topografie, sind direkt in den entsprechenden Abschnitten eingefügt, dort finden sich auch Studien der Vorwärtsrechnung für synthetische Modelle in den Fällen, in denen der Algorithmus gegenüber dem Basisalgorithmus aus [Kemna, 2000] stark verändert wurde (z.B. 3D). Ansonsten besteht der Schwerpunkt dieser Arbeit in Betrachtungen zur Inversionsrechnung.

## 3.2 Umsetzung der Inversion

### 3.2.1 Allgemeine Einordnung

Im Gesamtzusammenhang bildet die Inversion das Gegenstück zur Vorwärtsrechnung. Hierbei soll zu einem bekannten Satz von Messdaten das (bis auf evtl. Vorinformationen) unbekannte Untergrundmodell gefunden werden, welches die Beobachtungen erklärt. Zu diesem Zweck wird das Inversionsgebiet (wie bereits bei der Vorwärtsrechnung) in Elemente unterteilt, denen jeweils Untergrundparameter zugewiesen werden. Diese Parameter können Werte des komplexen Widerstandes (Betrag und Phase, z.B. [Kemna, 2000])



oder [Weller et al., 1999] ) sein, Cole-Cole Parameter (z.B. [Yuval and Oldenburg, 1997] oder [Routh and Oldenburg, 1998]) oder andere Werte, die das System so beschreiben, dass aus dem Untergrundmodell eine Vorwärtsrechnung durchgeführt werden könnte.

In den Anfängen wurde meist nur nach dem Gleichstromwiderstand und dem Frequenzeffekt (s. 2.4) invertiert (z.B. [Pelton et al., 1978a]), alternativ auch nach der Aufladbarkeit (z.B. [Oldenburg and Li, 1994]), die eng mit dem Frequenzeffekt zusammenhängt (s. 2.5). In diesem Fall konnte ein einfacher Vorwärtsoperator aus der Gleichstromgeoelektrik verwendet werden.

Neben der Parameterwahl unterscheiden sich die Inversionen auch in der Dimension des Inversionsraumes. Hier bestimmt sich auch das Verhältnis von Gleichungen zu Unbekannten. Für eine 1D-Zerlegung (geschichteter Halbraum) hat man in der Regel mehr Messwerte (Gleichungen) als Schichtwiderstände (Unbekannte sind evtl. noch Schichtdicken). Damit findet man eine eindeutige Lösung für ein Modell, welches die Messdaten am besten erklärt.

Im Fall von zwei (z.B. [Kemna, 2000] oder [Oldenburg and Li, 1994]) oder drei (z.B. [Weller et al., 1999] oder [Li and Oldenburg, 2000]) räumlichen Dimensionen oder Benutzung eines Frequenzspektrums (z.B. [Yuval and Oldenburg, 1997] oder [Routh and Oldenburg, 1998]) ist das Gleichungssystem meist stark unterbestimmt, weshalb es keine eindeutige Lösung für das Problem der bestmöglichen Anpassung gibt. Vielmehr muss ein zusätzliches Kriterium eingeführt werden, das die (unendlich vielen) gleichguten Anpassungen unterscheidet und so das Bestimmen einer besten Lösung ermöglicht. (Es gibt auch Anwendungen dieser Art bereits für den 1D-Fall) Die Inversion stellt sich dann als Optimierungsproblem der Form

$$\Psi(\vec{m}) = \Psi_d(\vec{m}) + \lambda \cdot \Psi_m(\vec{m}) \quad (3.33)$$

dar. Die Zielfunktion  $\Psi(\vec{m})$ , die vom Vektor der Modellparameter abhängt, ist dabei zu minimieren. Ein Teil der Funktion besteht in der Anpassung der Messdaten und ist mit  $\Psi_d$  bezeichnet.  $\Psi_m$  beinhaltet das zusätzliche Kriterium, das das Endmodell erfüllen soll,  $\lambda$  stellt eine Gewichtung zwischen den beiden Teilen dar und kann im Laufe der Inversion verändert werden. Hierbei steht ein großer Wert von  $\lambda$  für eine starke Regularisierung.

#### 3.2.2 Beschreibung von Datenanpassung und Regularisierung in der Zielfunktion

Im Gegensatz zu  $\Psi_m$ , das sehr viele Freiheiten zur Definition lässt, wird die Umsetzung der Datenanpassung in  $\Psi_d$  meist recht ähnlich realisiert. Eine Formulierung ist

$$\Psi_d(\vec{m}) = \sum_{i=1}^N \frac{|d_i - f_i(\vec{m})|^2}{|\epsilon_i|^2} . \quad (3.34)$$

Hierbei ist  $N$  die Anzahl der Messdaten  $d_i$ ,  $f$  der Vorwärtsoperator und  $\epsilon_i$  die jeweilige Standardabweichung des Messdatums. Bei guter Anpassung liegt  $|d_i - f_i(\vec{m})|$  im Bereich

### 3 Theorie zur Inversion

von  $|\epsilon_i|$  und  $\Psi_d$  erhält einen Wert um  $N$ . Offensichtlich gibt es auch einen einfachen Bezug zum RMS-Fehler:

$$\epsilon^{RMS}(\vec{m}) = \sqrt{\frac{\Psi_d(\vec{m})}{N}} \quad (3.35)$$

Einige Details dieser Formulierung müssen allerdings noch betrachtet werden: Schon die Wahl der  $L_2$ -Norm für die Datenanpassung kann problematisch sein. Falls Ausreißer vorliegen, wird durch die Quadratur die Summe evtl. bereits so groß, dass ein RMS-Wert von 1 nicht mehr erreicht werden kann. Alternativ kann in Gleichung 3.34 die  $L_1$ -Norm benutzt werden, die wesentlich weniger sensitiv gegenüber Ausreißern, aber auch schwerer zu implementieren ist. Einen Mittelweg bietet ein iteratives Umgewichten der Standardabweichungen, um die robuste Inversion (mit  $L_1$ -Norm) zu simulieren. Diese Option bot bereits das Basisprogramm und wurde nicht wesentlich verändert. Mehr hierzu findet sich in 3.2.3, da dieser Ansatz nicht direkt mit der Zielfunktion zusammenhängt.

Als Nächstes soll die günstigste Form für Modellparameter und Messwert gefunden werden. Als Messwert wird die Spannung dem scheinbaren Widerstand vorgezogen, um eine im Falle von starker Topografie schwierige Berechnung der Konfigurationsfaktoren zu umgehen. Als Untergrundmodell wird den Zellen eine Leitfähigkeit zugeschrieben. Beide Parameter variieren ggf. über mehrere Größenordnungen, weshalb sich eine logarithmische Darstellung anbietet. Dabei wird aus den komplexen Argumenten der Form  $z = \Re(z) + i \cdot \Im(z) = |z|e^{i\phi(z)}$  die Darstellung  $\ln(z) = \ln(|z|) + i \cdot \phi(z)$ . Im Realteil findet sich der Logarithmus des Betrags, im Imaginärteil der Phasenwert. Ein Wechsel zwischen Widerstand und Leitfähigkeit unterscheidet sich nur durch ein Vorzeichen und ist algorithmisch gleichwertig.

Ein weiteres Problem stellt der komplexe Wertebereich bei der Anpassung dar. Eine Verkleinerung der Differenz im Zähler von 3.34 bedeutet nicht eine gleichzeitige Verkleinerung der Differenzen von Real- und Imaginärteil, sondern des gesamten Abstandes in der komplexen Ebene. Es kann zwar nach den Gesetzen der Fehlerfortpflanzung ein komplexer Fehler berechnet werden (z.B. [Kemna, 2000]), aber in Gleichung 3.34 wird wieder nur der Betrag verwendet. Ist also die Standardabweichung des (logarithmierten) Betrages wesentlich größer als die der Phase (im Bogenmaß), was häufig der Fall ist ( $1\% \simeq 10\text{mrad}$ ), kann die Inversion hinreichend konvergiert sein, ohne die Phasen ausreichend anzupassen, da die Gesamtanpassung extrem von der Betragsanpassung dominiert wird. Es gibt zwei Möglichkeiten, diesem Problem zu begegnen.

Kemna [2000] schlägt vor, in einem sogenannten „final phase improvement“, nach hinreichender Konvergenz bei den Beträgen, diese festzuhalten und im Folgenden nur noch nach den Phasen zu invertieren. Dieses Verfahren erweist sich als praktikabel, bricht aber mit der Philosophie, das Gesamtproblem mathematisch elegant in einer einzigen komplexen Inversion zu lösen.

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, zwar Real- und Imaginärteil weiterhin gleichzeitig zu invertieren, aber die Parameter ( $\ln|\rho|$  bzw.  $\phi$ ) als getrennte reellwertige Variablen aufzufassen. Aus 3.34 wird dann

$$\Psi_d(\vec{m}) = \sum_{i=1}^N \left( \frac{|\Re(d_i) - \Re(f_i(\vec{m}))|^2}{|\epsilon_{\Re,i}|^2} + \frac{|\Im(d_i) - \Im(f_i(\vec{m}))|^2}{|\epsilon_{\Im,i}|^2} \right). \quad (3.36)$$

Eine hinreichende Konvergenz erhält man nun nur noch bei gleichzeitiger Konvergenz von Betrag (über Realteil) und Phase (Imaginärteil). Dieser Ansatz der getrennten reellwertigen Anpassung wird in Kapitel 5 für die Multifrequenzinversion verwendet.

Nachdem über  $\Psi_d$  die hinreichende Datenanpassung gewährleistet ist, sorgt  $\Psi_m$  aus dem Tikhonov-Ansatz (z.B. [Zhdanov, 1993]) in 3.33 für die gewünschte Modellcharakteristik. Hier gibt es große Freiheiten in der Wahl. Mathematisch hat dieser Teil die Aufgabe, das unterbestimmte Gleichungssystem bei der Inversion zu stabilisieren.

Ein klassischer Ansatz versucht das einfachste Modell zu finden, welches die Messdaten erklären kann. Der Ansatz wird nach William of Occam („*It is vain to do with more what can be done with fewer.*“) benannt, dessen Aussage aus dem frühen 14. Jahrhundert modern interpretiert wird. Mit einer Occam-Bedingung ist dabei ein möglichst glattes Modell gemeint. Realisiert wird dies über

$$\Psi_{m,occ}(\vec{m}) = \int_V |\nabla \vec{m}|^2 dv . \quad (3.37)$$

Dieses Funktional bewirkt, dass sich die Parameter  $m$  von Zelle zu Zelle möglichst wenig ändern, da anderenfalls ein großer Gradient, der quadratisch in die Zielfunktion einfließt, eine Minimierung verhindern würde. Resultat ist eine glatte Struktur.

In der Praxis ist es allerdings so, dass oftmals keine glatten Modelle erwartet werden, z.B. bei scharfen Schichtungen des Untergrundes oder klar begrenzten Störkörpern. Eine Occam-Bedingung ist in diesen Fällen eher hinderlich. Hat man gute Vorkenntnisse zu der erwarteten Struktur, kann man zur Stabilisierung die Differenz zu einem a priori-Modell minimieren:

$$\Psi_{m,apr}(\vec{m}) = \int_V |\vec{m} - \vec{m}_{apr}|^2 dv \quad (3.38)$$

Sind nur die Grenzen der Gebiete (z.B. durch Seismikmessungen), nicht aber die Parameterwerte dort bekannt, können einfach die Summanden weggelassen werden, bei denen in der Gradientenbildung benachbarte Zellen aus verschiedenen Gebieten beteiligt sind. Die weggelassenen Terme dürfen natürlich nicht zu viele sein, damit die Zielfunktion nicht instabil wird. Die Effekte bei der Verwendung von Vorinformationen dieser Art sind sehr deutlich und Beispiele finden sich in Kapitel 4.

Bei weniger Vorinformationen muss die Regularisierung allgemeiner formuliert werden. Eine oft gemachte Annahme besagt, dass der Untergrund stärker vertikal als lateral variiert. *Smith et al.* [1999] schlagen vor, den Parameterraum einzugrenzen, indem in bestimmten Abständen jedem Punkt an der Oberfläche ein 1D-Schichtmodell des Untergrundes mit einer konstanten Anzahl von Schichten zugeordnet wird. Schichtgrenzen und -leitfähigkeiten werden dann zu den Nachbarn interpoliert. Gesucht wird das Modell, bei dem die Schichttiefen und -leitfähigkeiten am wenigsten in lateraler Richtung variieren. *Auken and Christiansen* [2004] präsentieren einen ähnlichen Ansatz unter Einbeziehung von Vorinformationen und diskutieren die Vor- und Nachteile der Inversion nach Schichttiefen oder -dicken. Ein vertikaler Versatz in der Schichtung hätte beispielsweise wenig Auswirkung bei einer Inversion nach Schichtdicken, wohl aber nach Schichttiefen. Auch *de Groot-Hedlin and Constable* [2004] stellen Jahre nach ihrem bekannten Artikel zur

### 3 Theorie zur Inversion

Occam-Inversion ([de Groot-Hedlin and Constable, 1990]) einen Ansatz für Modelle mit scharfem Leitfähigkeitskontrast vor. Hier bleiben bei konstanter Schichtanzahl auch die Leitfähigkeiten der Schichten konstant und es wird praktisch nur nach den Schichttiefen invertiert und diese lateral geglättet.

Die oben erwähnten quasi-Schichtmodelle haben für allgemeine Untergrundstrukturen einige Nachteile. Zum einen muss die Schichtanzahl vorher gewählt werden, zum anderen wird von einer Art Schichtlagerung ausgegangen. Isolierte Störkörper, Verwerfungen oder wechselnde Schichtanzahlen stellen deutliche Probleme dar. Wenn also nicht bekannt ist, dass die Voraussetzung für eine Schichtlagerung gegeben ist, muss die regularisierende Bedingung noch allgemeiner formuliert werden. Einen Vorschlag hierzu findet man in [Portniaguine and Zhdanov, 1999]. Basierend auf dem Artikel [Last and Kubik, 1983], bei dem die Autoren Gravimetriedaten zu einem Untergrundmodell mit möglichst kompakten Strukturen invertieren wollten, wird das regularisierende Funktional auf den sogenannten „minimum gradient support“ (mgs) erweitert und geschrieben als

$$\Psi_{m,mgs}(\vec{m}) = \int_V \frac{|\nabla \vec{m}|^2}{|\nabla \vec{m}|^2 + \beta^2} dv . \quad (3.39)$$

Hierbei ist  $\beta$  eine kleine reelle Konstante. Dies bedeutet insbesondere für den zu integrierenden Term:

$$\lim_{\beta \rightarrow 0} \frac{|\nabla \vec{m}|^2}{|\nabla \vec{m}|^2 + \beta^2} = \begin{cases} 0 & \text{für } \nabla \vec{m} = 0 \\ 1 & \text{für } \nabla \vec{m} \neq 0 \end{cases} . \quad (3.40)$$

Entsprechend der Formulierung fließen im Grenzfall  $\beta \rightarrow 0$  bereits sehr kleine Parameterdifferenzen zu den Nachbarzellen (bzw. Gradienten) so in die Modellfunktion ein, wie sehr große. Als Folge entstehen in der Inversion wenige, sehr homogene Gebiete mit praktisch beliebig starken Kontrasten untereinander. Vergrößert man  $\beta$ , so geht der Ansatz im Extremfall in eine Occam-Glättung über (Nenner  $\approx \beta$ , konstant). Damit ist  $\beta$  ein entscheidender Parameter, um die Fokussierung zu regulieren. Für verschiedene Werte von  $\beta$  soll nun mgs mit der häufig benutzten Occam-Bedingung und der  $L_1$ -Norm verglichen werden. Letztere ist gegeben als

$$\Psi_{m,L_1}(\vec{m}) = \int_V |\nabla \vec{m}| dv . \quad (3.41)$$

Wie Abbildung 3.2 zeigt, hängt der maximale Beitrag zur Zielfunktion nicht von  $\beta$  ab, allerdings variiert die Form der Kurve. Ein mittlerer Wert (hier  $\beta_0$  genannt) bestraft zwar schon recht kleine Gradienten stärker als es bei den anderen Normen der Fall ist; bei sehr kleinen Variationen liegt der Beitrag aber zumindest unter dem der  $L_1$ -Norm. Als Effekt bleiben große Gradienten erhalten, weil sich hier bei leichter Veränderung der Beitrag zur Zielfunktion nicht merklich ändert. Bei kleinen Gradienten wird zunächst viel durch weitere Verkleinerung gewonnen (Bereich des steilen Kurvenverlaufs), dann aber bringt eine weitere Glättung kaum noch Vorteile. Damit gibt es nicht nur Fokussierung und Bildung vollständig homogener Bereiche, sondern innerhalb der homogenen Gebiete werden auch leichtere Variationen zugelassen. Folge ist ein geologisch glaubwürdiges

Bild ohne Beschränkung auf horizontale Schichtungen. Es werden also nicht nur scharfe Schichtgrenzen erlaubt, sondern auch glattere Übergänge und damit sehr allgemeine Untergrundmodelle.

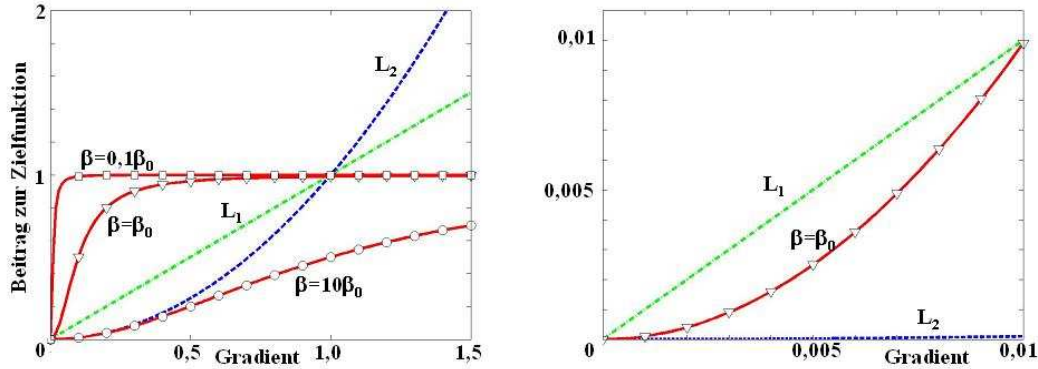


Abbildung 3.2: Beitrag zur Zielfunktion in Abhängigkeit vom Parametergradienten (willkürliche Einheiten). Vergleich zwischen Occam-Glättung,  $L_1$ -Norm und mgs für verschiedene  $\beta$ . Rechts: Vergrößerter Ausschnitt für kleine Gradienten.

Da der mgs-Ansatz über  $\beta$  in eine Occam-Glättung überführt werden kann, ist es durchaus denkbar (und für 2D-Rechnungen einer Frequenz zur Zeit schon vom Rechenaufwand akzeptabel), von großen Werten aus  $\beta$  stetig zu verkleinern und das Bild so lange zu fokussieren, bis das Ergebnis unglaublich scharf wird. Eine Studie hierzu findet sich in Kapitel 4. Dabei erweist sich ein möglichst kleiner (und fester) Wert für  $\beta$  wie in [Portniaguine and Zhdanov, 1999] nicht notwendigerweise als optimal. Findet man bei der Variation einmal einen Wert, der glaubwürdige Resultate liefert, kann dieser für ähnliche Regionen erneut verwendet werden. Eine Abhängigkeit von der Gitterdiskretisierung besteht nicht, da der Gradient in Gleichung 3.39 konstant bleibt. Für ähnliche Parameterkontraste kann also der Wert für  $\beta$  beibehalten werden. In den Fällen, in denen Parametergradienten in einem breiteren oder schmalen Bereich geglättet werden sollen, muss allerdings eine Anpassung durchgeführt werden.

In [Mehanee and Zhdanov, 2002] wird der mgs-Ansatz noch einmal aufgegriffen und über eine variable Umgewichtung formuliert. Ein weiterer Aspekt ist,  $m - m_{apr}$  an Stelle von  $\nabla m$  zu benutzen. Damit erzielt man Bilder, die meist exakt den Vorinformationen entsprechen und nur an einigen Stellen, dann aber beliebig stark, abweichen.

Neben den beiden Anteilen  $\Psi_d$  und  $\Psi_m$  der Zielfunktion ist auch die Gewichtung zwischen diesen von großer Bedeutung. Sie geschieht über den Regularisierungsparameter  $\lambda$ , der dem Kehrwert des Lagrange-Faktors  $\mu$  aus der Optimierungstheorie entspricht. Nach Constable et al. [1987] schreibt sich in letzterer Form die Zielfunktion als  $\Psi'(\vec{m}) = \mu \cdot (\Psi_d(\vec{m}) - \Psi_d^{opt}) + \Psi_m(\vec{m})$ . Dabei wird (mathematisch korrekter) die Datenanpassung nicht beliebig verbessert, sondern nur bis zu einem Wert  $\Psi_d^{opt}$ , der sich durch

bekannte Fehlerbehaftung der Messwerte ergibt. Bei nicht abzuschätzendem Fehler wird man in der Regel einen kleinen Wert wählen und der Ansatz geht in 3.33 über. Hierbei entspricht ein großer Wert für  $\lambda$  einer starken Regularisierung.

Da das Widerstandsproblem nicht linear ist, wird die Minimierung der Zielfunktion  $\Psi$  iterativ ausgeführt. Hierbei wird eine Näherung von  $\Psi$  in quadratischer Ordnung benutzt. In dem hier verwendeten Ansatz wird  $\lambda$  verkleinert, bis der maximale Wert gefunden ist, der zur gewünschten Anpassung der Daten führt (oder diese lokal minimiert). Mit diesem Wert wird die Modellverbesserung bestimmt und angebracht, danach die neue Iteration gestartet. Einige Details hierzu finden sich noch in 3.2.3.

Eine interessante Überlegung zur Wahl und Variation von  $\lambda$  findet sich noch in [Yi *et al.*, 2003]. Hier wird vorgeschlagen,  $\lambda$  räumlich variabel zu halten und von der Sensitivität abhängig zu machen. Mit Sensitivität ist hierbei die Abhängigkeit der Messdaten von den Modellparametern gemeint. In hoch sensitiven Bereichen ändert sich ein Messdatum stark bei Variation der Leitfähigkeit in dieser Region. In gut aufgelösten Bereichen ist demnach keine starke Regularisierung erforderlich, in Gebieten geringer Sensitivität dagegen kann  $\lambda$  groß gewählt werden. Dieser Ansatz wird nun in abgewandelter Form umgesetzt und eine Funktion  $f$  definiert, die von den räumlichen Koordinaten abhängt und Werte  $> 1$  liefert, steigend mit fallender Sensitivität:

$$f(i, j) = 1 + \frac{|S_i| + |S_j|}{|S_\theta|} \quad (3.42)$$

Hierbei sind  $S_i$  und  $S_j$  die auf das Maximum normierten und über alle Messdaten gewichtet gemittelten, logarithmierten Sensitivitäten für die an der Bildung der jeweiligen  $\nabla\vec{m}$ -Komponente beteiligten Zellen  $i$  und  $j$ . Aufgrund der Komplexwertigkeit wurde mit dem komplex Konjugierten multipliziert, also  $sens(i, j) \cdot \overline{sens(i, j)}$  verwendet.  $S_\theta$  ist der Mittelwert über den gesamten Raum. Die Addition von 1 hat stabilisierende Wirkung, da der zweite Summand Werte gegen Null annehmen kann. Eine typische Sensitivitätsverteilung einer Oberflächenmessung ist in Abbildung 3.3 gezeigt.  $S_\theta$  liegt etwa bei  $-5$ , womit  $f$  zwischen 1 und etwa  $1 + 2 \cdot (|-8|)/(|-5|) = 4,2$  variiert.

Mit  $f$  ergibt sich die folgende Erweiterung für die Regularisierung:

$$\frac{|\nabla\vec{m}|^2}{|\nabla\vec{m}|^2 + \beta^2} \Rightarrow \frac{1}{f^2(r)} \cdot \frac{|\nabla\vec{m}|^2}{|\nabla\vec{m}|^2 + \left(\frac{\beta}{f(r)}\right)^2} \quad (3.43)$$

Damit wird Folgendes erreicht: Im Bereich niedrigerer Sensitivität wird, abgesehen vom Vorfaktor ( $1/f^2$ ),  $\beta$  praktisch verkleinert und damit das Bild schärfer. Dies ist z.B. von Vorteil, um Untergrenzen von Störkörpern aufzulösen, wenn an der Oberfläche gemessen wurde (geringere Sensitivität in der Tiefe). Um zu vermeiden, dass schlecht aufgelöste Regionen vollständig homogen werden, senkt der Vorfaktor in 3.43 den Maximalwert des Beitrags zur Zielfunktion. Abbildung 3.4 zeigt das Verhalten der Regularisierung für verschiedene Werte von  $f$ .

Kleine Gradienten werden unabhängig von  $f$  gleich behandelt, größere mit wachsendem  $f$  weniger bestraft, damit die Bereiche geringerer Sensitivität nicht zu sehr an Schärfe

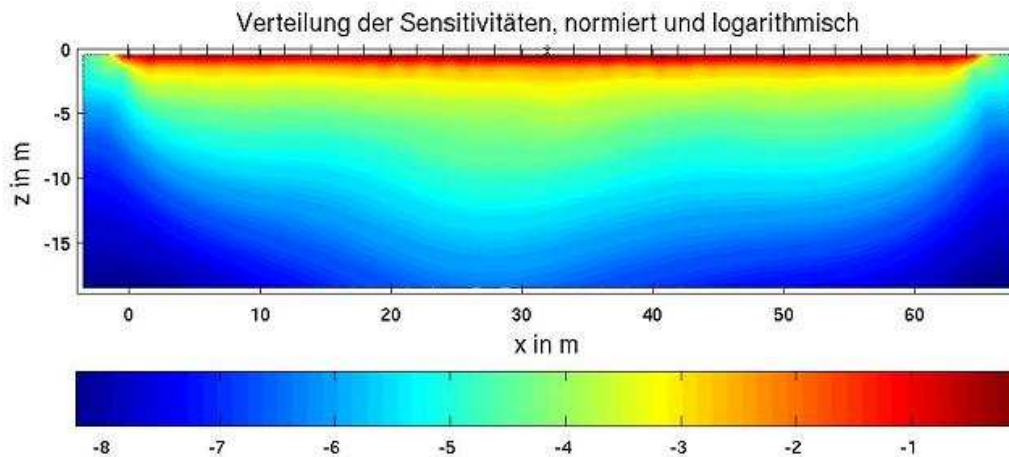


Abbildung 3.3:  $\log_{10}$  der auf das Maximum normierten Sensitivität für eine typische Dipol-Dipol Messung mit Auslagen bis 15m Pseudotiefe. Es wurde gewichtet über alle Messdaten gemittelt und das Betragsquadrat der komplexen Sensitivität verwendet. Die Striche markieren die Elektrodenpositionen.

verlieren. Dieser Ansatz birgt offensichtlich das Risiko der Überinterpretation, da Fokussierung in Regionen versucht wird, wo rein physikalisch das Auflösungsvermögen sehr gering ist. Zumindest aber leichte Verbesserungen lassen sich erzielen, wie einige Anwendungen auf synthetische Daten (also mit bekanntem Untergrund) in Kapitel 4 zeigen. Klar ist aber auch, dass die entscheidende Veränderung in der Regularisierung die Einführung des  $mgs$  ist. Der sensitivitätsabhängige Anteil bringt eine weniger deutliche Veränderung gegenüber einer typischen Occam-Inversion.

Auch bei Benutzen des  $mgs$ -Funktionals gibt es Möglichkeiten, die in der Praxis oft auftretenden horizontalen Schichtungen zu bevorzugen. Das Mittel ist eine anisotrope Glättung. Der Gradient in 3.39 wird diskret berechnet, ebenso wie das Integral in eine Summe übergeht. Betrachten wir zwei benachbarte Zellen, die (wie es in der FE-Methode möglich ist) eine beliebige Lage im Raum und weiterhin verschiedene Form haben. Eine Skizze hierzu bietet Abbildung 3.5:

Der Gradient bildet sich nun per Differenzenquotient als  $(p(i) - p(j)) / \Delta c$ , mit  $p(k)$  Parameterwert an der Stelle  $k$ . Die Parameterdifferenz ist somit direkt gegeben, der Abstand wird über den Abstand der Schwerpunkte der Zellen  $\Delta c$  bestimmt. Für die spätere Integration ist noch die Proportionalität zur Länge der Verbindungskante  $\Delta b$  wichtig. Die Anisotropie kann durch Multiplizieren des Beitrages mit einem Faktor  $\alpha_r$  erreicht werden, der sich über den Winkel  $\phi$  der Verbindungslinie der Schwerpunkte mit der  $x$ -Achse und den Glättungsfaktoren in horizontaler und vertikaler Richtung ( $\alpha_x$  bzw.  $\alpha_y$ ) berechnet:

$$\alpha_r = \sqrt{(\alpha_x \cos \phi)^2 + (\alpha_y \sin \phi)^2} \quad (3.44)$$

### 3 Theorie zur Inversion

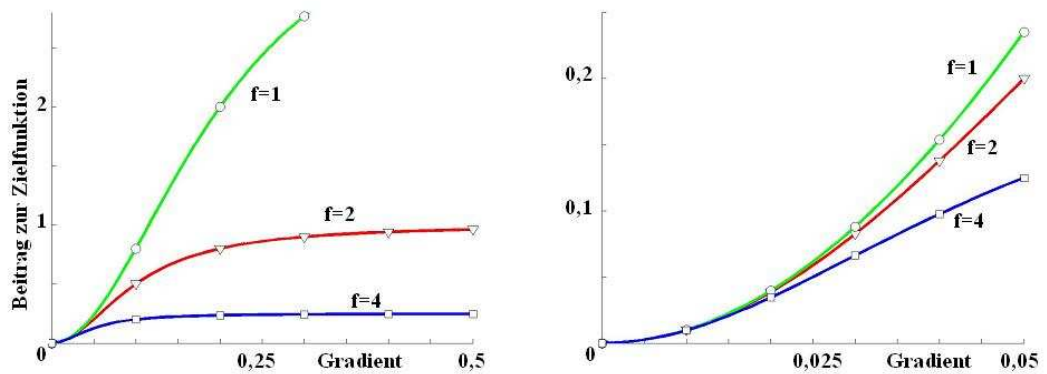


Abbildung 3.4: Beitrag zur Zielfunktion in Abhängigkeit vom Parametergradienten. Vergleich für verschiedene Werte von  $f$ . Rechts: Vergrößerter Ausschnitt für kleine Gradienten.

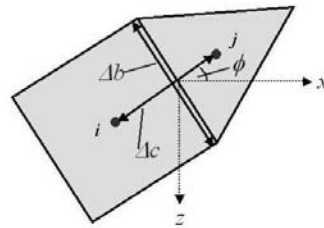


Abbildung 3.5: Grenzbereich zwischen zwei Zellen. Größen der anisotropen Glättung.

Um in vertikale Richtung schwächer zu glätten und so horizontale Schichtungen stärker zu unterstützen, muss in diesem Fall  $\alpha_x > \alpha_y$  gewählt werden. Grundsätzlich wäre auch eine Glättung mit Hauptrichtungen denkbar, die nicht horizontal und vertikal verlaufen. Dafür sollte die Geologie allerdings mit den entsprechenden Einfallswinkeln der Schichten bekannt sein.

#### 3.2.3 Der Inversionsablauf

Zum Durchführen der Inversion wird die zu minimierende Zielfunktion aus 3.33 zunächst auf eine numerisch handhabbare Form gebracht:

$$\Psi(\vec{m}) = (\vec{d} - f(\vec{m}))^H \bar{W}_d^H \bar{W}_d (\vec{d} - f(\vec{m})) + \lambda \cdot \vec{m}^H \bar{W}_m^T \bar{W}_m \vec{m} . \quad (3.45)$$

Die Formulierung folgt hier weitgehend den Ansätzen aus [Kemna, 2000] mit Benutzung der komplexen Variablen auch in der Datenanpassung. Entsprechend bedeutet  $H$  die Hermitesche der Matrix, also die komplexkonjugierte Transponierte. Mit Imaginärteil Null ist dies auch in der reellwertigen Formulierung gültig. Diese wird an entscheidenden Stellen zusätzlich genannt.



### 3.2 Umsetzung der Inversion

Die Datenanpassung geschieht über den ersten Summanden.  $W_d$  hat dabei die Form einer Diagonalmatrix:

$$\bar{W}_{d,C} = \text{diag}(1/\epsilon_{1,C}, \dots, 1/\epsilon_{N,C}) \quad (3.46)$$

Hierbei ist  $\epsilon_{i,C} = \frac{\partial d_i}{\partial \ln |Z_i|} \Delta \ln |Z_i| + \frac{\partial d_i}{\partial \varphi_i} \Delta \varphi_i$  der komplexe Fehler, mit  $Z_i = \frac{V_i}{I_i}$  der Impedanz.

Um explizit Betrag *und* Phase anzupassen, ist eine Formulierung der Art

$$\bar{W}_{d,R} = \text{diag}(1/\epsilon_{1,||}, \dots, 1/\epsilon_{N,||}, 1/\epsilon_{1,\varphi}, \dots, 1/\epsilon_{N,\varphi}) \quad (3.47)$$

möglich. Hierbei sind  $\epsilon_{i,||}$  und  $\epsilon_{i,\varphi}$  die Fehler in Betrag bzw. Phase. Entsprechend muss  $\vec{d} - f(\vec{m})$  als  $(d_{1,||} - f_{1,||}(\vec{m}), \dots, d_{N,||} - f_{N,||}(\vec{m}), d_{1,\varphi} - f_{1,\varphi}(\vec{m}), \dots, d_{N,\varphi} - f_{N,\varphi}(\vec{m}))^T$  gesetzt werden. Der Unterschied beider Versionen besteht im Wesentlichen (neben geänderter Matrixgröße und Wertigkeit der Variablen) darin, dass in der komplexen Variante Real- und Imaginärteil der gleiche Fehler zugeordnet wird, in der reellen Variante ist dieser für beide Teile unterschiedlich.

Der zweite Summand stellt den Teil der Zielfunktion dar, der für die gewünschte Modellcharakteristik sorgt ( $\Psi_m$  aus 3.33). Zunächst soll die Funktion für eine Occam-Bedingung aufgestellt werden; die Erweiterung auf eine mgs-Form ist dann problemlos. Für die Glättungsbedingung stellt man auf:

$$\Psi_{m,occ}(\vec{m}) = \sum_{j=1}^M \sum_{i=nb(j)} \alpha_{r,ij} \left| \frac{m_j - m_i}{\Delta c_{ij}} \right|^2 \Delta b_{ij} \Delta c_{ij} \quad (3.48)$$

Die Bezeichnungen folgen denen aus 3.5, der Index steht für die beteiligten Zellen. Die erste Summe läuft über alle  $M$  Zellen, die zweite über alle Nachbarn des jeweiligen Elements. In der Matrixschreibweise gilt nun

$$W_{m,occ,ij} = \begin{cases} -\sqrt{\alpha_{r,ij} \frac{\Delta b_{ij}}{\Delta c_{ij}}} & \text{für } i \neq j \\ ++ \sqrt{\alpha_{r,ij} \frac{\Delta b_{ij}}{\Delta c_{ij}}} & \text{für } i = j \end{cases} \quad (3.49)$$

An dieser Stelle meint  $++$ , dass dieser Term zu ggf. bereits existierenden hinzuaddiert werden muss. Das Bilden von  $\vec{m}^H \bar{W}_m^T \bar{W}_m \vec{m}$  liefert dann (das Doppelte von)  $\Psi_{m,occ}$  nach 3.48.

Analog ist die Formulierung für die erweiterte mgs-Formulierung. Man ersetzt

$$W_{m,mgs,ij} = \sqrt{\alpha_{r,ij} \frac{\Delta b_{ij}}{\Delta c_{ij}}} \rightarrow \sqrt{\alpha_{r,ij} \frac{\Delta b_{ij}}{\Delta c_{ij}} \cdot \frac{1}{f_{ij}^2 \cdot \left( \left( \frac{|m_i - m_j|}{\Delta c} \right)^2 + \left( \frac{\beta}{f_{ij}} \right)^2 \right)}}, \quad (3.50)$$

analog zum Übergang von 3.37  $\rightarrow$  3.39  $\rightarrow$  3.43. Grundsätzlich ist die neue Formulierung nur eine andere Gewichtung bei der Berechnung der Rauigkeit, also des mittleren Parametergradienten.

### 3 Theorie zur Inversion

Nachdem die Zielfunktion nun in Matrixschreibweise (3.45) vorliegt, kann sie minimiert werden. Das Nullsetzen der ersten Ableitungen würde auf ein System von  $M$  nichtlinearen Gleichungen führen. Dieses wird umgangen, indem der Vorwärtsoperator linearisiert bzw. die Zielfunktion über eine Taylorentwicklung in den ersten Ordnungen benutzt wird. Die Inversion wird dann mit einem Gauss-Newton Verfahren (z.B. [Schwarz, 1997]) iterativ ausgeführt. Die Entwicklung geschieht bis zur zweiten Ordnung:

$$\Psi(\vec{m}_k + \Delta\vec{m}_k) \approx \Psi(\vec{m}_k) + \frac{\partial\Psi(\vec{m}_k)}{\partial\vec{m}}\Delta\vec{m}_k + \frac{1}{2}\Delta\vec{m}_k^H \frac{\partial}{\partial\vec{m}^H} \frac{\partial\Psi(\vec{m}_k)}{\partial\vec{m}}\Delta\vec{m}_k . \quad (3.51)$$

Hierbei ist  $\vec{m}_k$  das aktuelle Modell,  $\Delta\vec{m}_k$  die Modelländerung. Mit der Bedingung  $\frac{\partial\Psi}{\partial\Delta\vec{m}_k} = 0$  (unter Vernachlässigung höherer Ableitungen) ergibt sich

$$\bar{B}_k\Delta\vec{m}_k = \vec{b}_k \quad (3.52)$$

als lineares Gleichungssystem für  $\Delta\vec{m}$  mit

$$\bar{B}_k = \bar{A}_k^H \bar{W}_d^h \bar{W}_d \bar{A}_k + \lambda \bar{W}_m^T \bar{W}_m \quad (3.53)$$

und

$$\vec{b}_k = \bar{A}_k^H \bar{W}_d^H \bar{W}_d (\vec{d} - f(\vec{m}_k)) - \lambda \bar{W}_m^T \bar{W}_m \vec{m}_k . \quad (3.54)$$

Hier steht  $\bar{A}_k$  für  $\frac{\partial f}{\partial\vec{m}}(\vec{m}_k)$ .  $\bar{B}_k$  ist eine hermitesche, positiv definite Matrix. Eine Herleitung der Gleichungen findet sich in [Kemna, 2000].

Im Unterschied zu dieser Quelle ist  $\bar{W}_m$  nun streng genommen abhängig von  $\vec{m}$ . Diese Abhängigkeit wird jedoch nicht weiter berücksichtigt und die Werte für den jeweiligen Inversionsschritt als konstant angenommen. Vorteil ist, dass die inneren Ableitungen nicht ausgeführt werden müssen, und durch diese Ungenauigkeit wird im schlimmsten Fall eine langsamere Konvergenz erwartet, die aber im Vergleich zur Occam-Inversion nicht beobachtet wird. Die Qualität des Ergebnisses wird nicht beeinflusst, da der Vorwärtsoperator entscheidend für die Datenanpassung ist und unverändert bleibt. Zum Aufstellen des Gleichungssystems 3.52 wird noch die Jacobi-Matrix ( $\bar{A}$ ) benötigt. Theoretisch könnte über mehrfache Vorwärtsrechnung mit jeweils leicht geändertem Modell (in einer Zelle) ein Differenzenquotient als Näherung für die benötigte Ableitung berechnet werden. Aufgrund der Vielzahl von Zellen ist dieser Ansatz so allerdings numerisch sehr aufwendig, und ein anderer Ansatz wird verfolgt. Dieser benutzt das Reziprozitätsprinzip, wonach man, wenn Strom über zwei Elektroden in den Boden eingespeist und die Spannung an zwei anderen Elektroden gemessen wird, dasselbe Ergebnis erhält, als wenn man Spannungs- und Stromelektroden vertauscht. Eine Überprüfung mit Messdaten findet sich z.B. in [Habberjam, 1967].

Bei der Verwendung des Prinzips wird in 3.30 nach der komplexen Leitfähigkeit abgeleitet und es ergeben sich Terme der Form  $\partial V/\partial\sigma$ . Die Benutzung des Reziprozitätsprinzips findet sich z.B. in [Tripp et al., 1984] oder [Sasaki, 1994], letzterer verwendet im 3D-Fall als Näherung Sensitivitäten von einen Halbraumfall, um weitere Rechenzeit zu sparen. Eine nicht unwichtige Bemerkung zur Berechnung der Sensitivitäten mittels Reziprozitätsprinzips findet sich in [Schwarzbach and Kemna, 2005]. Hier wird darauf hingewiesen,

dass bei Verwendung von gemischten Randbedingungen, aufgrund der von den Positionen der Stromquellen abhängigen Randbedingungen, die Symmetrie durchbrochen wird und entsprechend das Reziprozitätsgesetz nicht mehr gültig ist. Diese Erkenntnis konnte im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr verwendet werden. Da der Vorwärtsoperator von dieser Aussage aber unberührt bleibt, ist (auch hier) schlechtestenfalls eine langsamere Konvergenz aufgrund der fehlerhaften Sensitivitäten zu erwarten. Unter Berücksichtigung der Aussagen in [Sasaki, 1994] (Verwendung der Sensitivitäten eines homogenen Halbraums) scheint dies akzeptabel.

Erfolgt die Berechnung im Komplexen, können in  $\bar{A}$  (3.53 und 3.54) die komplexen Sensitivitäten eingesetzt werden. Bei der Berechnung im Reellen (Ansatz nach 3.47) werden die Ableitungen von Real- und Imaginärteilen getrennt benötigt. Hierbei kann benutzt werden, dass die Cauchy-Riemann Bedingungen erfüllt sind. Danach ist eine Funktion  $f(z = x + i \cdot y) = u(x, y) + i \cdot v(x, y)$  genau dann differenzierbar, wenn  $u$  und  $v$  in  $z$  stetige partielle Ableitungen (nach  $x$  und  $y$ ) besitzen und  $\partial u / \partial x = \partial v / \partial y$ ,  $\partial u / \partial y = -\partial v / \partial x$  gilt. Die Ableitung von  $f$  nach  $z$  kann dann dargestellt werden als

$$\frac{df}{dz} = \frac{\partial u}{\partial x} + i \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} - i \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial x} - i \frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial y} + i \frac{\partial v}{\partial x} . \quad (3.55)$$

Mit der Zerlegung der komplexen Ableitung in Real- und Imaginärteil kann auch die Jacobi-Matrix getrennt aufgestellt werden, womit nun 3.52 für beide Varianten vollständig gegeben ist.

Das Gleichungssystem (3.52) wird mit der Methode der konjugierten Gradienten (CG) iterativ gelöst (hierzu [Hestenes and Stiefel, 1952] oder als späteres Lehrbuch [Stiefel, 1976]). Dabei gilt, dass die Lösung  $\vec{x}$  von

$$\bar{A}\vec{x} + \vec{b} = 0 \quad (3.56)$$

( $\bar{A}$  symmetrisch und positiv definit) Minimum der quadratischen Form

$$F(\vec{v}) = \frac{1}{2}(\vec{v}, \bar{A}\vec{v}) + (\vec{b}, \vec{v}) \quad (3.57)$$

ist. Zudem ist ein Minimum von  $F(\vec{v})$  Lösung des Gleichungssystems. Die Lösung von 3.56 wird damit auf die Minimierung von 3.57 verschoben. Zu einem gegebenen Näherungsvektor  $\vec{v}$  und einem noch festzulegenden Richtungsvektor  $\vec{p}$  wird  $F$  in dieser Richtung minimiert. Gesucht wird ein  $t$ , sodass  $\vec{v}' := \vec{v} + t\vec{p}$  den Wert für  $F(\vec{v}') = F(\vec{v} + t\vec{p})$  minimal werden lässt. Für festes  $\vec{v}$  und  $\vec{p}$  ergibt sich eine Bedingung an  $t$ , die dazu führt, dass im Minimalpunkt  $\vec{v}'$  der zugehörige Residuenvektor  $\vec{r}' = \bar{A}\vec{v}' + \vec{b}$  orthogonal zum Richtungsvektor  $\vec{p}$  steht (Details jeweils in [Schwarz, 1997]).

Eine geometrische Interpretation ist in Abbildung 3.6 dargestellt. Die Niveaulinien von  $F(\vec{v})$  sind konzentrische Ellipsen (bei großer Konditionszahl sehr langgestreckt) mit dem Minimumpunkt  $x$  als Mittelpunkt. Ausgehend von  $\vec{v}$  mit Richtungsvektor  $\vec{p}$  bildet dann  $\vec{p}$  im neuen Ort  $\vec{v}'$  die Tangente an die Niveaulinie durch  $\vec{v}'$  (da  $F(\vec{v}')$  minimal und  $\vec{r}'$  orthogonal zu  $\vec{p}$  ist). Es muss noch ein geeigneter Richtungsvektor gefunden werden. Der

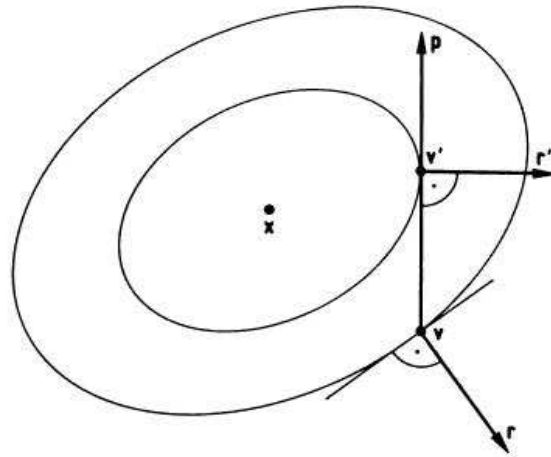


Abbildung 3.6: Geometrische Interpretation eines allgemeinen Iterationsschrittes im konjugierten Gradienten Verfahren. Der Schritt erfolgt von  $\vec{v}$  in Richtung  $\vec{p}$  bis zum minimalen Wert von  $F$ , der bei  $\vec{v}'$  erreicht wird.  $\vec{p}$  ist hier Tangente an die Niveaulinie, der Residuenvektor  $\vec{r}'$  orthogonal dazu. Zeichnung aus [Schwarz, 1997].

naheliegender Ansatz  $\vec{p} = -\nabla F(\vec{v}) = -(\bar{A}\vec{v} + \vec{b}) = -\vec{r}$  (Methode des steilsten Abstiegs) ist insbesondere für große Konditionszahlen ungeeignet, wie Abbildung 3.7 zeigt. Die neue Richtung ist stets senkrecht zur alten und macht ggf. eine unnötige Vielzahl von sehr kleinen Schritten. Man sucht also eine neue Richtung, die die alte (und damit auch alle vorherigen) berücksichtigt. Die Lösung bietet die Methode der konjugierten Gradienten. Diese benutzt, dass diejenige Richtung  $\vec{p}$ , die von  $\vec{v}$  aus den Mittelpunkt der Ellipsen ( $x$ ) trifft, mit der Tangentenrichtung in  $\vec{v}$  konjugiert ist. Dabei heißen zwei Vektoren  $\vec{p}$  und  $\vec{q}$  konjugiert (bzgl.  $A$  oder  $\bar{A}$ -orthogonal für  $\bar{A}$  positiv definit), wenn  $(\vec{p}, \bar{A}\vec{q}) = 0$  gilt. Für die Ebene bedeutet dies, dass  $\vec{p}$  direkt auf den Mittelpunkt der Ellipse zeigt und in einem Schritt  $x$  gefunden wird.

Allgemein bilden die Residuenvektoren  $\vec{r}$  ein Orthogonalsystem mit paarweise konjugierten Richtungsvektoren. Entsprechend liefert die Methode der konjugierten Gradienten für ein Gleichungssystem mit  $m$  Unbekannten in höchstens  $m$  Schritten die Lösung. Die  $k$ . Iterierte  $x^{(k)}$  minimiert dabei die Funktion  $F(v)$  in Bezug auf den Unterraum  $UR_k := \text{span}\{p^{(1)}, p^{(2)}, \dots, p^{(k)}\}$ .

In der Praxis wird die Konvergenz hier als hinreichend betrachtet, wenn der Betrag des Residuenvektors vom Beginn auf  $1/10000$  gefallen ist (Dies hat sich als günstig im Verhältnis zwischen Genauigkeit und Rechenzeit erwiesen). Den Zielwert erreicht man meist in unter  $m/10$  Schritten. Ein Diagonalskalieren hilft hier bei der Verbesserung der Konditionszahl. Eine genauere Konvergenz ist nicht erforderlich, da nur eine Modellverbesserung im Gauss-Newton Schema berechnet wird.

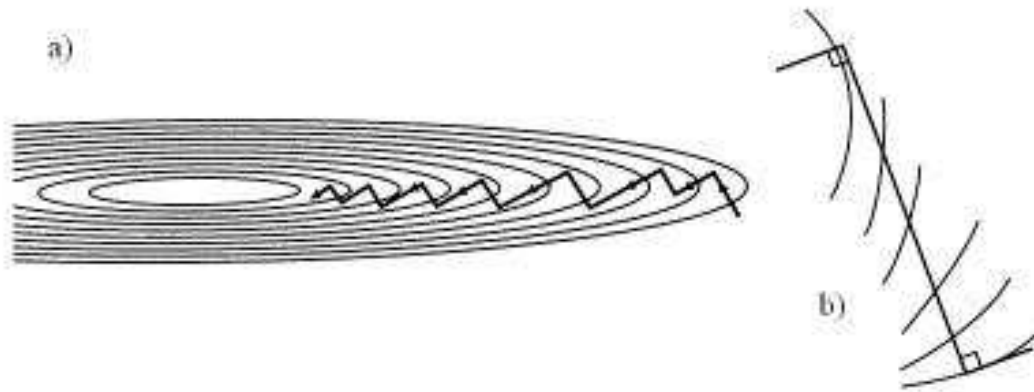


Abbildung 3.7: Nachteil der Methode des steilsten Abstiegs bei schlechter Konditionszahl. Es werden unnötig viele Schritte benötigt (a)). Die Richtung ändert sich stets im rechten Winkel (b)). Die Methode der konjugierten Gradienten findet die Mitte hier in einem Schritt. Zeichnung aus [Press et al., 1992].

Im Gesamtablauf der Inversion wird also, ausgehend von einem Startmodell, (vorgegebenes Modell oder Halbraum aus gewichtetem Mittelwert der scheinbaren Widerstände) und einem Startwert für  $\lambda$  (Überlegungen hierzu in [Newman and Alumbaugh, 1997] und [Kemna, 2000]) eine Vorwärtsrechnung (mittels FE) ausgeführt und der Wert von  $\Psi_d$  bestimmt. Dann werden für verschiedene Werte von  $\lambda$  nach 3.52 die Modellverbesserungen  $\Delta m_k$  (mittels konjugierter Gradienten) berechnet und Vorwärtsrechnungen zur Bestimmung der Datenanpassung ausgeführt, bis das maximale  $\lambda$  gefunden ist, das die Datenanpassung lokal minimiert bzw. den Zielwert erreicht.

Nachdem das optimale  $\lambda$  feststeht, wird für die zugehörige Modellverbesserung  $\Psi$  berechnet, ebenso für eine Verbesserung um  $\Delta m_k/2$ . Mit dem bekannten Wert aus der vorherigen Iteration kann dann eine Parabelanpassung durchgeführt werden, die einen Wert für  $s$  ( $\in (0, 1]$ ) bestimmt, sodass  $m_{k+1} = m_k + s\Delta m_k$  oftmals einen besseren Wert für  $\Psi$  liefert, als das mit direkter Benutzung von  $\Delta m_k$  (also  $s = 1$ ) der Fall ist. Der Grund ist, dass  $\Psi$  lediglich quadratisch genähert wurde und auf diese Weise die Genauigkeit in etwa um eine Ordnung erhöht wird. Dieser Ansatz wird häufig benutzt, so auch bereits in [Kemna, 2000].

Im Folgenden wird  $m_k$  aktualisiert und mit dem letzten Wert für  $\lambda$  als neuem ersten Wert der nächste Gauss-Newton Schritt vollzogen. Dies wiederholt sich, bis die Schrittlängen zu klein werden (Modell praktisch konstant), die Anpassung sich nicht mehr merklich verbessert oder im Idealfall eine Anpassung von  $\epsilon^{RMS} = 1$  erreicht wird. Wie der Algorithmus endet, hängt u.a. stark von den angenommenen Fehlern ab. Um eine schlechte Anpassung aufgrund weniger Ausreißer zu vermeiden, gibt es die sogenannte robuste Inversion. Dies meint, dass bei der Berechnung der Datenanpassung nach 3.34 die Fehler  $\epsilon_i$  in der  $L_1$ -Norm so umverteilt werden können, dass diese als Summe konstant bleibt, aber den wenigen Ausreißern eine deutlich größere Standardabweichung zugeteilt wird

### 3 Theorie zur Inversion

und dem Rest jeweils eine etwas kleinere. Insgesamt führt das bei einer Berechnung nach 3.34 zu einer besseren Datenanpassung. Weitere Details hierzu, zur Wahl der Änderung der Schrittlänge bei der Suche nach dem optimalen  $\lambda$  und dem bereits angesprochenen final phase improvement findet sich in [Kemna, 2000].

Die Berechnung der Sensitivitäten für die Anpassung an ein Cole-Cole bzw. CPA Modell wird in Kapitel 5 besprochen.

## 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

Der grundlegende Ablauf der Inversion, zusammen mit der Vorwärtsrechnung, wurde bereits in Kapitel 3 beschrieben. Dieses Kapitel bezieht sich damit auf spezielle Details und synthetische sowie Messbeispiele.

Für einen ersten Überblick nach einer Messung genügt oft schon die Inversion einer Frequenz in zwei Dimensionen. Dies liegt zu einem daran, dass oft die Frequenzeffekte bzw. Aufladbarkeiten recht gering sind und zum anderen der Untergrund häufig in erster Näherung gut als 2D-Fall angesehen werden kann.

Der erste Abschnitt (4.1) vergleicht verschiedene Arten der Regularisierung. Abschnitt 4.2 behandelt die Inversion bei nicht ebenen Gebieten. Im letzten Abschnitt (4.3) werden Messdaten aus dem Feld behandelt.

### 4.1 Regularisierung

Eine sehr bekannte Art der Regularisierung ist die Occam-Glättung (s. z.B. Gleichung 3.37). Sie versucht, die Parameterdifferenz zwischen benachbarten Zellen zu minimieren. In Fällen von starken Kontrasten wirkt das dem Erreichen des wahren Modells entgegen. In Kapitel 3 wurde bereits eine neue Regularisierung vorgeschlagen, die auch scharfe Grenzen als solche auflösen kann. Hier soll nun anhand von synthetischen Beispielen der Unterschied deutlich gemacht werden.

In Abbildung 4.1 ist das Ergebnis einer Inversion bei Benutzung der Occam-Glättung dargestellt. Das Modell beinhaltet einen Störkörper mit  $10\Omega m$ ,  $-15\text{mrad}$  (Grenzen eingezeichnet), eingebettet in einen homogenen Halbraum von  $100\Omega m$ ,  $-5\text{mrad}$ . Es wurde Gaußsches Rauschen (1%,  $0,3\text{mrad}$ ) auf die zu invertierenden Daten gelegt. Die Occam-Bedingung verschmiert die scharfen Grenzen, sodass der Körper nicht nur schlecht räumlich einzugrenzen ist, sondern auch der Kontrast zu gering wiedergegeben wird.

Eine einfache und sehr effektive Möglichkeit, das Verschmieren zu verhindern, ist es, über die Grenzen des Störkörpers nicht zu glätten. Dazu muss die Existenz und Lage bekannt sein. Sind die Untergrundstrukturen (Lage der Schichtgrenzen, Störkörper, etc.) gegeben (z.B. durch Seismik-Messungen o.ä.), kann dies in der Inversion berücksichtigt werden, und man glättet nicht über die entsprechenden Grenzen. Der Effekt ist enorm und in Abbildung 4.2 dargestellt. Der Körper wird in Lage und Kontrast praktisch perfekt wiedergegeben. Es wird nur in den Bereichen geglättet, in denen das Modell auch homogen ist.

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

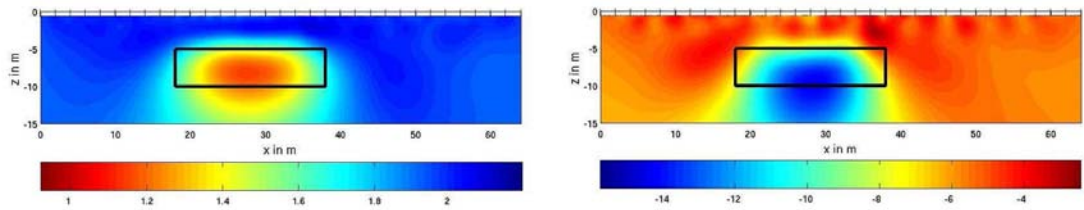


Abbildung 4.1: Inversionsergebnis für Betrag (links,  $\Omega m, \log_{10}$ ) und Phase (rechts,  $mrad$ ) bei Occam-Glättung. Modell ist ein Störkörper (eingezeichnet) im homogenen Halbraum.

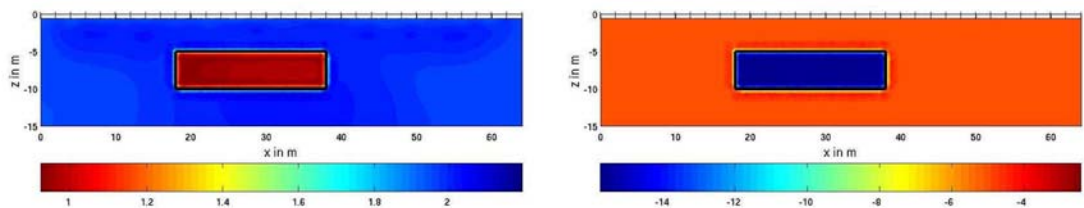


Abbildung 4.2: Inversionsergebnis für Betrag (links,  $\Omega m, \log_{10}$ ) und Phase (rechts,  $mrad$ ) bei Occam-Glättung und bekannter Störkörpergrenze.

Dieses Vorgehen birgt ein Risiko. Abbildung 4.3 verdeutlicht das Problem. Es werden weiterhin die Grenzen als bekannt vorausgesetzt („x“), der wahre Körper liegt allerdings entgegen der Annahme leicht versetzt (gestrichelte Linie). Die Inversion innerhalb und außerhalb der angenommenen Grenzen ist so unabhängig, dass der Körper wieder an der gleichen Stelle (also der angenommenen) erscheint. Da innerhalb der vermuteten Störkörpergrenzen eine Art Mittelwert angenommen wird, in den auch ein Teil des Halbraumes einfließt, fällt der Kontrast schwächer aus und ist nur im Bereich der wahren Position des Körpers besonders groß. Außerhalb der angenommenen Grenzen liegt auch ein Teil des Körpers (unten und rechts). Hier baut die Glättungsbedingung analog zu Abbildung 4.1 den Kontrast ab, sodass zwar eine Veränderung zum Hintergrund sichtbar wird, der Körper wird aber hauptsächlich im Bereich der (falsch) angenommenen Grenzen vermutet.

Es ist also wichtig zu erkennen, dass aufgrund des stark unterbestimmten Gleichungssystems die Regularisierung einen starken Einfluss hat (alle Inversionsergebnisse passen die Daten gleich gut und bis zum Rauschniveau an) und ggf. bei falscher Verwendung Artefakte entstehen, die nichts mit der Realität gemein haben. Durch gesicherte Vorinformationen kann die Auflösung jedoch wesentlich verbessert werden.

Selbst wenn die Grenzen der Schichten bekannt sind, bedarf es einer flexiblen Elemententeilung, um die Grenzen im Inversionsgitter nachzubilden. Die Schichtgrenzen sollten immer mit Elementkanten zusammenfallen. Die FE-Methode bietet grundsätzlich diese Möglichkeiten, war aber bisher nicht in der Inversion realisiert, sodass dieser Teil umgeschrieben und erweitert wurde. (Zu den verschiedenen Elementtypen z.B. [Richter, 1995].) Zwei Bilder sollen stellvertretend für eine große Testreihe stehen, die sowohl Vorwärts-



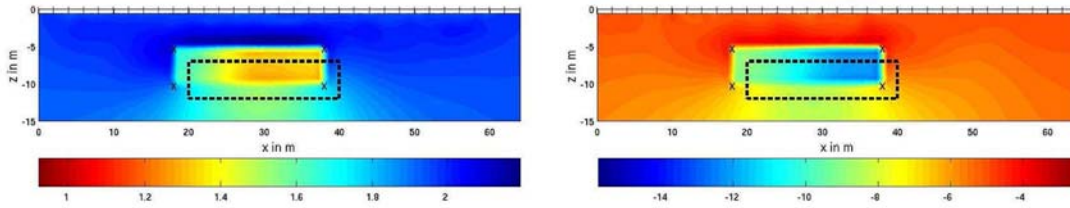


Abbildung 4.3: Inversionsergebnis für Betrag (links,  $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ ) und Phase (rechts,  $mrad$ ) bei Occam-Glättung und bekannten aber falsch angenommenen ('x') Störkörpergrenzen (wirklich: getrichelt).

rechnungen als auch Inversionen unter Benutzung von triangulierten bzw. regelmäßigen Rechteckgittern vergleicht. In Abbildung 4.4 ist die Abweichung der Vorwärtsrechnungen bei Benutzen eines Rechteckgitters (als hinreichend genau bekannt) von der bei Verwendung eines (mit etwa gleich vielen Zellen) triangulierten Gebietes dargestellt. Die Zellenanzahl wurde zur Abschätzung nach oben minimal gewählt (zwei Zellen zwischen zwei Elektroden). Das Modell ist, wie zuvor, der Störkörper im homogenen Halbraum.

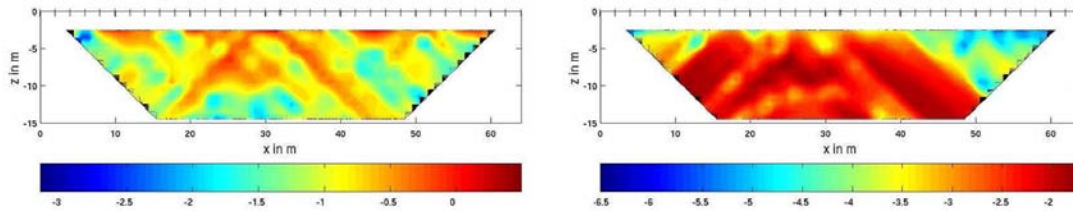


Abbildung 4.4: Abweichung der Vorwärtsrechnungen zwischen Rechteckgitter und trianguliertem Gebiet für Betrag (links, %,  $\log_{10}$ ) und Phase (rechts,  $mrad$ ,  $\log_{10}$ ).

Im Betrag sieht man Abweichungen von meist deutlich unter 1%, wobei die meisten Ungenauigkeiten im oberflächennahen Bereich auftreten. Insgesamt sind die Abweichungen unter einem zu erwartenden Rauschniveau. Sehr gut ist die Übereinstimmung in der Phase, mit Abweichungen unter 0,01  $mrad$ .

Das Vorwärtsmodul wurde bereits detailliert (für Rechtecksgitter) in [Kemna, 2000] getestet und hat sich (für übliche Anforderungen an Genauigkeit) als hinreichend exakt erwiesen. Ein Beispiel für die Qualität soll aber auch hier angeführt werden. Grundlage ist ein homogener Halbraum. Die Phasenwerte sind praktisch ohne Fehler (im Rahmen von sechs abgespeicherten Nachkommastellen), deswegen sind in Abbildung 4.5 nur die Fehler im Betrag dargestellt.

Die größten Fehler aufgrund der Diskretisierung treten im Bereich kleiner Abstände zwischen den Elektroden, also geringer Pseudotiefen und damit, wie schon zuvor festgestellt, oberflächennah auf. Die Schwankungen in größeren Tiefen liegen in einem zu vernachlässigenden Bereich und werden auch durch numerische Ungenauigkeiten (also selbst bei feinerer Diskretisierung) verursacht.

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

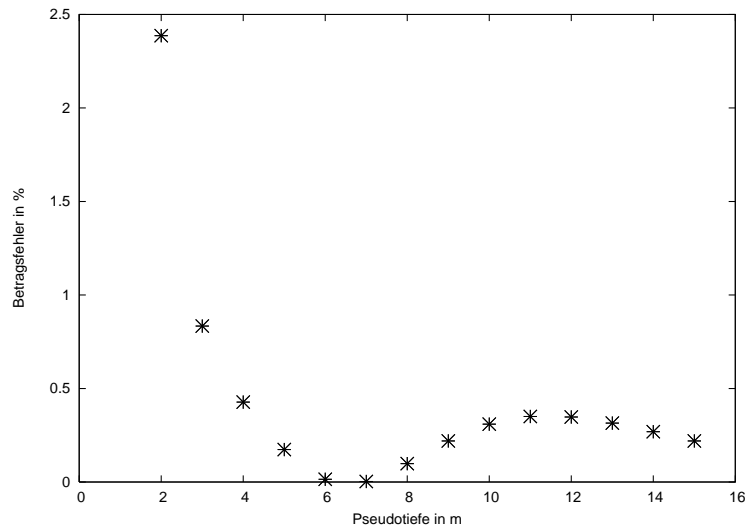


Abbildung 4.5: Fehler im Betrag bei Vorwärtsrechnung über einem homogenen Halbraum mit grobem (zwei Zellen pro Elektrodenabstand) Rechteckgitter.

Nachdem sich auch das Inversionsmodul für triangulierte Gebiete als hinreichend genau erwiesen hat, kann ein Einbeziehen von Vorinformationen nun auch für fast beliebig geformte Grenzen erfolgen. Weiterhin können die Elektroden auch (Bohrlochelektroden können ebenfalls gerechnet werden) flexibler gesetzt werden. Ein Beispiel für ein trianguliertes Gebiet ist in 4.6 dargestellt. Die Störkörpergrenzen fallen mit Elementkanten zusammen, weiterhin wird Rechenzeit gespart, weil die Elemente in der Tiefe größer werden.

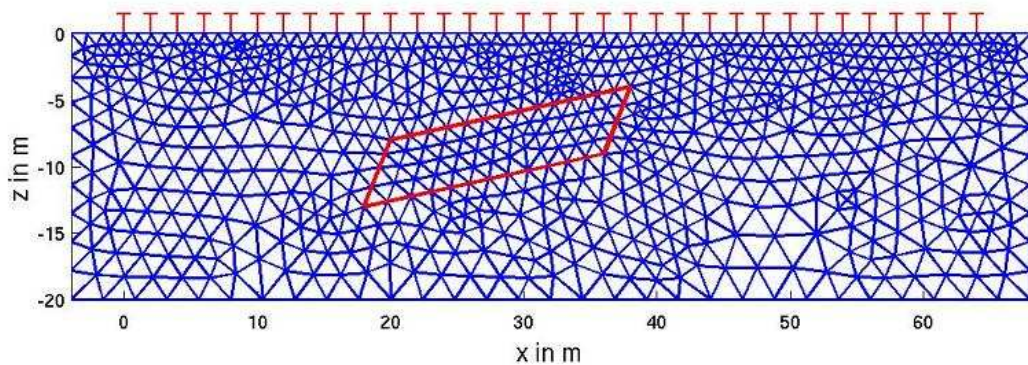


Abbildung 4.6: Optimal an bekannte Störkörpergrenzen (rot) angepasstes Inversionsnetz. An der Oberfläche sind die Elektrodenpositionen eingezeichnet.

Die Inversion mit dem parallelogrammförmigen Körper unter Benutzung bekannter Grenzen läuft so erfolgreich wie bereits bei dem rechteckigen Körper. Abbildung 4.7 zeigt die Ergebnisse. Die Leitfähigkeiten sind wie zuvor.

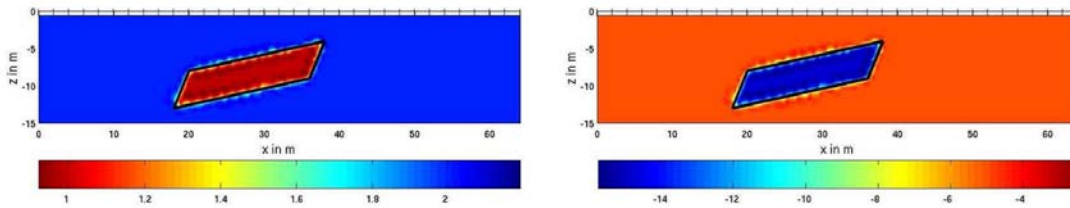


Abbildung 4.7: Inversionsergebnis für Betrag (links,  $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ ) und Phase (rechts,  $mrad$ ) bei Occam-Glättung und bekannter Störkörpergrenze.

Hauptproblem des bisherigen Ansatzes ist, dass die Grenzen der Schichten und Körper oftmals nicht bekannt oder sogar Ziel der Untersuchung sind. Um die Effekte der bekannten Diskontinuitäten zumindest teilweise nutzen zu können, wurde eine Vielzahl von Ansätzen verfolgt, bis das Optimum in einer Kombination aus minimum gradient support und active constraint balancing (beschrieben in 3.2.2) gefunden wurde. Um den Weg dorthin besser nachvollziehen zu können, soll zumindest ein Zwischenschritt aufgeführt werden, wenn dieser Ansatz auch später aus verschiedenen Gründen nicht weiter verfolgt wurde.

Die Idee bei bekannten Diskontinuitätsgrenzen ist, dass über diese Grenzen nicht geglättet werden soll. Ein großer Kontrast entsteht. Ein Ansatz bei nicht bekannter Grenze war, die Kontraste zu beobachten, die sich bei einfacher Occam-Bedingung im Laufe der Inversion aufbauen. Man kann dann eine Grenze festlegen, dass z.B. über die 5% der Kanten mit dem höchstem Kontrast nicht mehr geglättet wird. Oder es wird ein Schwellenwert für den Gradienten festgelegt, ab dem nicht mehr geglättet wird. Als Folge werden starke Kontraste gefördert. Ein Problem war hier, einen sinnvollen Schwellenwert festzulegen. Weiterhin war die Frage, wann im Inversionslauf die Grenzen gezogen werden sollten, über die nicht mehr geglättet wird. Geschieht dies zu früh, ist der Kontrast noch nicht weit genug ausgebildet; erfolgt die Festlegung zu spät, ist die Konvergenz schon erreicht. Grundsätzlich könnten die Grenzen auch nach jeder Iteration neu festgesetzt werden. Folge ist allerdings, dass der Beitrag von  $\Psi_m$  zur Zielfunktion dann stark springt und die Inversion sehr unruhig konvergiert. Denn Gradienten knapp unter dem Schwellenwert, die einen sehr großen Beitrag (zur Zielfunktion) liefern, können eine Iteration später knapp über dem Grenzwert liegen und bleiben unberücksichtigt. Trotz allem konnten gegenüber der Occam-Glättung verbesserte Ergebnisse produziert werden. Ein Beispiel zeigt Abbildung 4.8. Das Modell ist wiederum ein  $100\Omega m / -5mrad$  Halbraum mit  $10\Omega m / -15mrad$  Störkörper (Grenzen eingezeichnet). Der Verlauf ist etwas unförmig, aber insgesamt wird die Lage gut erkannt und bis auf wenige Stellen, an denen der Parameterkontrast deutlich stärker als im Modell ist, werden Betrag und Phase auch gut wiedergegeben.

In Abbildung 4.9 sind die Grenzen dargestellt, die algorithmisch erkannt wurden (schwarz) und die wahren Grenzen des synthetischen Modells (grün). Hier zeigt sich ein weiteres Problem: Das Gebilde ist nicht geschlossen - ein Grund dafür, dass der Kontrast „ausfließen“ kann. Als Konsequenz bietet sich ein manuelles Verfahren an, das darin besteht, die Inversion laufen zu lassen, die erkannten Diskontinuitäten zu beobachten und ggf. von Hand zu ergänzen. Zusammen mit den bereits erwähnten Problemen bleibt dieses Verfahren trotz z.T. guter Ergebnisse insgesamt nicht zufriedenstellend. Trotz der

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

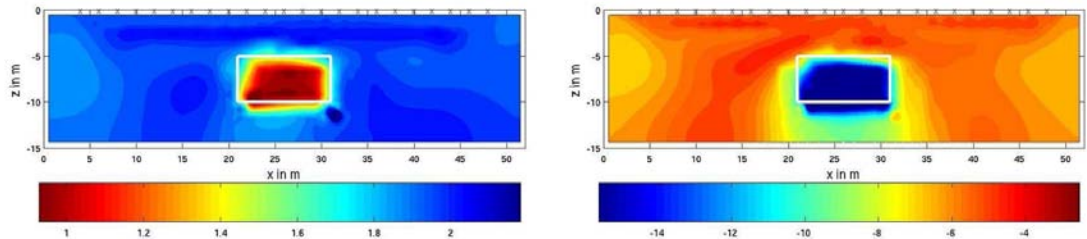


Abbildung 4.8: Inversionsergebnis für Betrag (links,  $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ ) und Phase (rechts,  $mrad$ ) bei Occam-Glättung mit selbsterkannten Störkörpergrenzen.

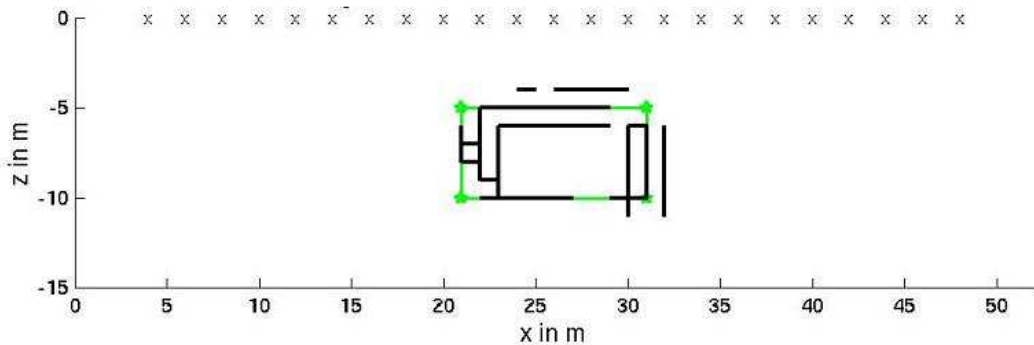


Abbildung 4.9: Algorithmisch erkannte Diskontinuitäten (schwarz) im Vergleich zur wahren Lage (grün). An der Oberfläche sind die Elektrodenpositionen eingezeichnet.

Schwierigkeiten kann man einige Ansätze im Weiteren verwenden. Das eine ist die Erkenntnis, dass größere Gradienten unterproportional „bestraft“ werden sollten. Die zweite Erkenntnis (aus dem Springen der Konvergenz) ist, dass Kanten nicht nur voll oder gar nicht berücksichtigt werden sollten (wie bei gut bekannten Störkörpergrenzen machbar), sondern es sollten auch kontinuierliche Zwischenwerte möglich sein. Sieht man den Unterschied zwischen Occam-Glättung (3.37) und mgs (3.39) nur in einer Änderung der Gewichtung, bei konstantem Gewicht im Occam-Fall und Gradienten-abhängigem Gewicht im mgs-Fall, so ergibt sich die Darstellung in Abbildung 4.10. Bei der Occam-Glättung ist das Gewicht unabhängig vom Gradienten (für den Beitrag zur Zielfunktion muss jeweils noch das Quadrat des Gradienten multipliziert werden), bei dem Schwellenwert-Ansatz fällt das Gewicht oberhalb des Grenzwertes sprunghaft auf Null. Der mgs-Ansatz ist eine kontinuierliche Zwischenlösung, die die Konvergenz stabilisiert und die positiven Effekte der bekannten Diskontinuität beinhaltet.

Ohne den Zwischenschritt über den Schwellenwert wurde auch schon erwähnt, dass für wachsendes  $\beta$  mgs zur Occam-Glättung übergeht (s.a. Abbildung 3.2, links). Eine Studie an dem bekannten synthetischen Modell soll nun die Veränderung des Inversionsergebnisses mit wachsendem  $\beta$  darstellen (Abbildung 4.11).

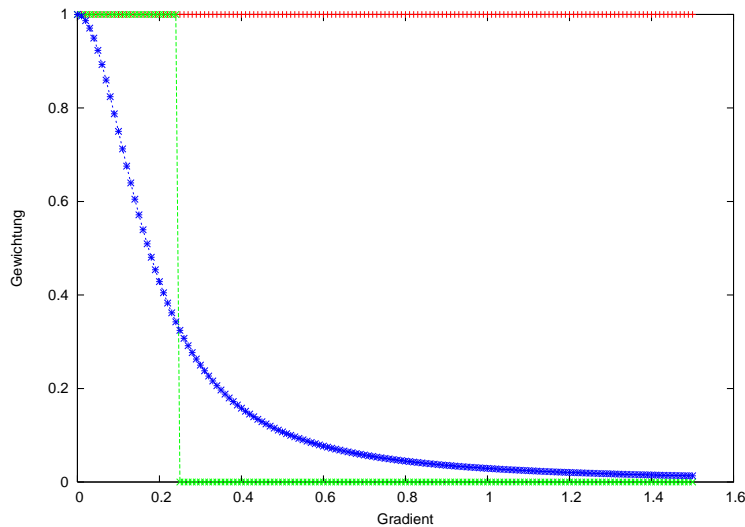


Abbildung 4.10: Verlauf der verschiedenen Gewichtungen des Parametergradienten. Occam: rot, Schwellenwert: grün, mgs: blau. (vgl. Gleichungen 3.39, 3.37 und siehe Text)

Man sieht deutlich, wie die Schärfe mit abnehmendem  $\beta$  zunimmt, bis zuletzt praktisch nur noch zwei homogene Gebiete mit verringertem Kontrast gegenüber den wirklichen Werten auftreten. Aufgrund der geringen Sensitivität im unteren Bereich wird der Block in die Tiefe verlängert, um noch weniger Kanten mit einem von Null verschiedenen Gradienten zu erhalten. Für den größten Wert von  $\beta$  erreicht man Ergebnisse wie bei einer Occam-Glättung. Ein geringeres  $\beta$  bedeutet folglich schärfere Bilder; diese können aber auch unrealistisch werden. Damit ist die Wahl eines möglichst kleinen Wertes für  $\beta$ , wie in [Portniaguine and Zhdanov, 1999] vorgeschlagen, nicht zwangsläufig optimal.

Wenn die Rechenzeit es zulässt (in zwei Dimensionen bei einer Frequenz auf einem aktuellen Standard-PC unproblematisch), sollten also durchaus mehrere Inversionsläufe (mit fallendem  $\beta$ ) vollzogen werden, um den Einfluss der Regularisierung besser abschätzen zu können. Da der Parametergradient (z.B. in Gleichung 3.39) unbeeinflusst von der Gitterdiskretisierung ist, kann in der Regel ein Wert für  $\beta$ , der sich als günstig erwiesen hat, auch auf ähnliche Regionen übertragen werden. Lediglich wenn die Kontrastverhältnisse deutlich unterschiedlich sind und in wesentlich schmalere oder breitere Gradientenbereichen geglättet werden soll, muss eine Anpassung vorgenommen werden.

Es sei noch darauf hingewiesen, dass eine bessere räumliche Eingrenzung als im mittleren Bild kaum möglich ist, da die Diskretisierung (gilt auch im Folgenden, wenn nichts anderes erwähnt wird) des Raumes für die Inversionsrechnung so gewählt wurde, dass sie nicht mit der Vorwärtsrechnung übereinstimmt. Dies ist in Fällen nicht bekannter Grenzen sicherlich ein realistischer Fall.

Nachdem die Auswirkungen des mgs-Anteils betrachtet wurden, sollen nun die des Sensitivitäts-Anteil isoliert betrachtet werden. Im Zusammenhang mit Gleichung 3.42 wurde die Überlegung von Yi *et al.* [2003] vorgestellt, in gut aufgelösten Bereichen die

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

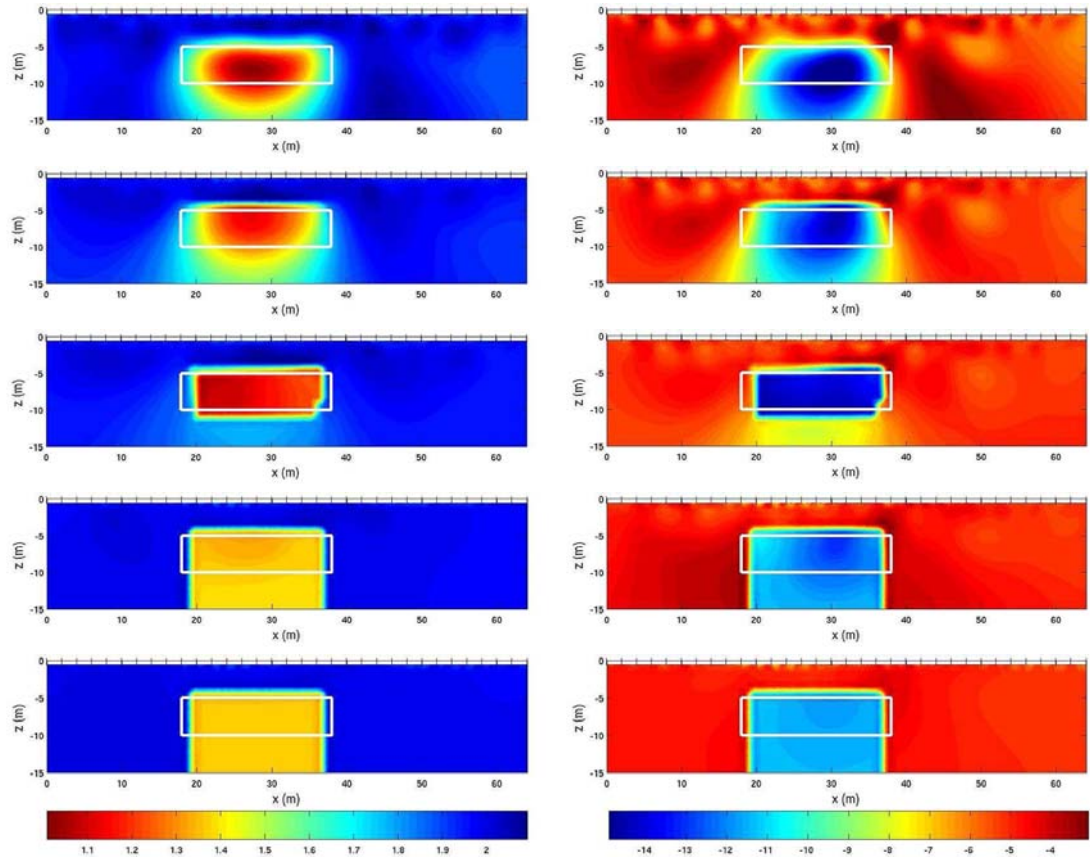


Abbildung 4.11: Inversionsstudie für variierendes  $\beta$ . Ergebnis für Betrag (links,  $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ ) und Phase (rechts,  $mrad$ ).  $\beta$  von oben nach unten bei Optimalwert  $\beta_0$ :  $10\beta_0$ ,  $3\beta_0$ ,  $1\beta_0$ ,  $0,3\beta_0$ ,  $0,1\beta_0$ .

Glättung zu verringern, da dieser Bereich entscheidend für die Datenanpassung in der Zielfunktion ist. Im Gegenzug sollte in Bereichen geringer Aussagekraft mehr geglättet werden.

Man kann aber auch eine gegenteilige Variante benutzen und es vermeiden, in wenig sensitiven Bereichen, in denen sich ein Kontrast (aus einem homogenen Starthalraum) bereits nur sehr schwierig aufbaut, zusätzlich zu glätten. Stärkere Glättung erfolgt in besser aufgelösten Bereichen, um zu verhindern, dass die Messwerte sogar bis ins Rauschen nachgebildet werden und sich vermehrt Artefakte aufbauen. Die Schärfe wird mehr in weniger sensitive Bereiche verteilt.

Um nicht von den mgs-Effekten überlagert zu werden, wird  $f$  nun nicht nach Gleichung 3.43 eingesetzt, sondern in Gleichung 3.37 direkt auf  $\nabla m$  angewendet.

Beide Ansätze haben Berechtigung. Die Version nach *Yi et al.* [2003] erhöht die Schärfe im oberflächennahen Bereich und glättet in Bereichen, in denen die Aussage zu unsicher wird; beim umgekehrten Ansatz werden bereits sehr scharfe oberflächennahe Bereiche



mehr geglättet; im Untergrund wird versucht, die geringe Schärfe zu verstärken, mit der Gefahr von Überinterpretation. In Abbildung 4.12 werden die verschiedenen Ansätze verglichen.

Der acb-Ansatz nach *Yi et al.* [2003] (Mitte) bringt gegenüber einer Occam-Glättung ohne zusätzliche Sensitivitätsabhängigkeit kaum Verbesserungen im oberflächennahen Bereich, dagegen „fließt“ der Kontrast durch die stärkere Glättung in der Tiefe deutlich aus. Beim gegenteiligen Ansatz (unten) wird die Untergrenze deutlich besser aufgelöst, in den tieferen Randbereichen bilden sich allerdings leichte Kontraste auf, die im Modell nicht vorhanden sind. Hier besteht die Gefahr von Artefakten durch zu geringe Glättung.

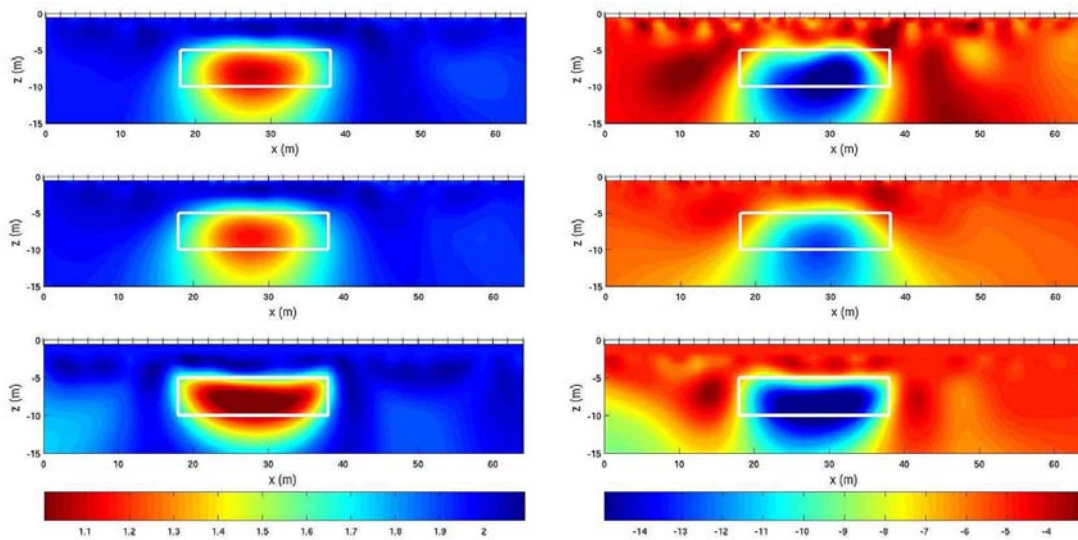


Abbildung 4.12: Inversionsstudie für variierende Sensitivitätsabhängigkeit. Ergebnisse für Betrag ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ , links) und Phase ( $mrad$ , rechts). Oben: keine Abhängigkeit, Mitte: höheres Gewicht bei größerer Sensitivität, unten: höheres Gewicht bei geringerer Sensitivität.

Insgesamt haben beide Ansätze eine Berechtigung. Bei der Implementierung der Sensitivitätsabhängigkeit in die mgs-Funktion muss nun entschieden werden zwischen dem sehr stabilen acb-Ansatz, der speziell hoch sensitive Bereiche gut auflöst, und der gegenteiligen Version, die in der Tiefe mehr Schärfe bringt, mit der Tendenz zu Artefakten und ggf. instabilerer Konvergenz der Inversion. Nach verschiedenen Tests fällt die Wahl auf letzteren Ansatz, da der Vorteil der besseren Auflösung in der Tiefe bedeutender als der Nachteil evtl. Artefakte erscheint.

Die Umsetzung dieser Sensitivitätsgewichtung wurde bereits detailliert im Zusammenhang mit 3.42 bzw. 3.43 erläutert. Der Ansatz soll in weniger sensitiven Regionen versuchen, den Kontrast zu erhöhen. Abbildung 4.13 macht den Einfluss der Sensitivitätsgewichtung bei Implementierung in den mgs-Ansatz deutlich. Die Veränderungen (von der

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

zweiten zur dritten Zeile) sind nicht so stark wie zwischen Occam-Glättung und mgs-Ansatz, aber doch merklich. Insbesondere die Unterseite wird besser aufgelöst und der Kontrast noch weiter optimiert.

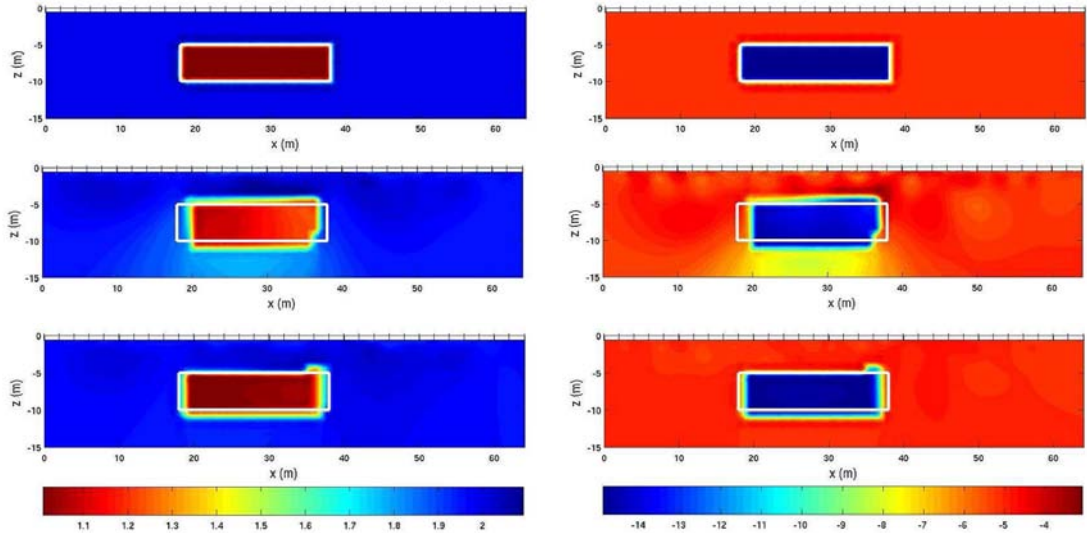


Abbildung 4.13: Inversionsergebnisse für Betrag ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ , links) und Phase (mrad, rechts) im Vergleich zum Modell. Oben: Modell, Mitte: Benutzung des mgs-Ansatzes, unten: zusätzliche Berücksichtigung der Sensitivität.

Weitere Rechnungen haben gezeigt, dass die gewählte Kombination eine sehr deutliche Verbesserung gegenüber der Occam-Bedingung darstellt, wenn es darum geht, scharfe Strukturen zu erkennen. Trotz allem ist auch eine Inversion mit Occam-Bedingung in der Lage, die Daten hinreichend gut anzupassen. Der RMS-Wert für beide Regularisierungen ist jeweils der gleiche (und erreicht das Rauschniveau), dennoch lohnt sich ein detaillierter Blick auf die Datenanpassung. Abbildung 4.14 zeigt deutlich, dass im Falle der Occam-Glättung (oben) die Daten im Bereich des Störkörpers wesentlich schlechter angepasst sind als bei Verwenden der kombinierten Regularisierung (unten), bei der sich der Fehler homogener auf das Niveau des Gaußschen Rauschens von 1% im Betrag verteilt. Trotz gleicher RMS-Anpassung erkennt man auch hier einen qualitativen Unterschied in den Inversionsergebnissen, da ein unstrukturiert verteilter Fehler bei gleichmäßig verteiltem Gaußschen Rauschen auf den Daten einem Fehler, der mit dem Modell korreliert, vorzuziehen ist.

Nachdem nun die Regularisierung vollständig eingeführt ist, sollen noch zwei weitere Beispiele die Bandbreite der Einsatzmöglichkeiten verdeutlichen. Im ersten Fall handelt es sich um eine Struktur aus drei Schichten (siehe auch Abbildung 4.15, oben). Die obere Schicht hat einen spezifischen Widerstand von  $100\Omega m$ ,  $-5\text{mrad}$ , die untere von  $500\Omega m$ ,  $-30\text{mrad}$ . In der Mitte gibt es eine dünne, im mittleren Bereich von links nach rechts ansteigende Schicht, mit  $15\Omega m$ ,  $-15\text{mrad}$  und zwei Variationen, an denen der Wert auf  $10\Omega m$ ,  $-20\text{mrad}$  wechselt. Die Schwierigkeit besteht darin, einen schlechten Leiter unter



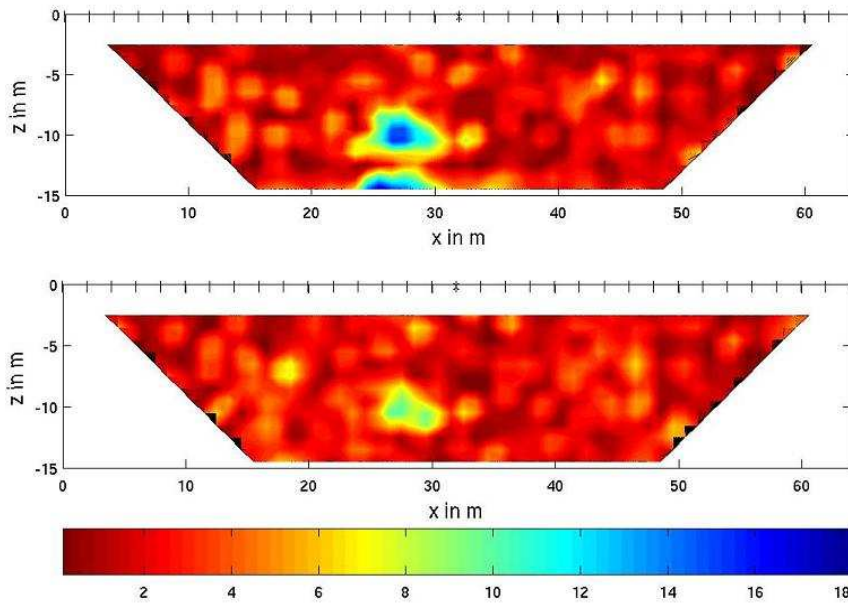


Abbildung 4.14: Relative Abweichungen der synthetischen Spannungsbeträge von den Modelldaten in %. Oben: Benutzung einer Occam-Bedingung, unten: kombinierte Regularisierung.

einem guten aufzulösen, weiterhin die dünne Schicht als eigenständigen Bereich zu erkennen. Der leichte Wechsel innerhalb der zweiten Schicht soll erkannt werden, darf aber nicht zu kontrastreich interpretiert werden.

Um einen Vergleich zu haben, ist in Abbildung 4.15 noch das Ergebnis einer Inversion mit Occam-Glättung beigelegt.

In der kombinierten Regularisierung lassen sich die drei Schichten klar voneinander trennen, wobei die Breite der mittleren Schicht etwas zu groß wiedergegeben wird, worunter der Kontrast im Betrag (sollte im logarithmischen etwa bei 1,2 liegen) leidet. Sowohl in Betrag als auch in der Phase kann im rechten Bereich die Variation in der zweiten Schicht erkannt werden; im linken Teil liegt sie in einem zu wenig sensitiven Bereich und kann nicht aufgelöst werden.

Im Vergleich dazu liefert die Occam-Glättung deutlich schlechtere Ergebnisse, wie das immer auch für scharfe Grenzen erwartet wird. In der Phase vermutet man einen Zweischichtfall, die Variationen sind nicht zu erkennen; im Betrag deutet sich der Dreischichtfall an, wobei die tiefere Seite in einem Zweischichtfall ausläuft. Die rechte Variation hebt sich leicht ab, die linke variiert sogar qualitativ falsch. Die Kontraste sind durchgehend zu gering.

Zum Abschluss soll ein Modell gewählt werden, das keine scharfen Kontraste beinhaltet und somit vom Ansatz her nicht gut für die kombinierte Regularisierung geeignet ist. Es wurde allerdings im Zusammenhang mit Abbildung 3.2 gezeigt, dass für kleine Parametergradienten ein Erhalten von glatten Modellen möglich ist.

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

Das Modell besteht nun aus einer linearen Variation der Phase mit der Tiefe von  $-0.25\text{mrad}$  an der Oberfläche bis  $-14.75\text{mrad}$  in 20m Tiefe. Bei 15m (Untergrenze der Darstellung) liegt der Wert bei  $-11.25\text{mrad}$ . Der Betrag variiert logarithmisch von etwa  $100\Omega m$  bis  $10\Omega m$ . Bei 15m erreicht er einen Wert von  $17.8\Omega m$  (logarithmisch: etwa 1.25). Abbildung 4.16 zeigt das Modell (oben), das Ergebnis bei kombinierter Regularisierung (Mitte) und zum Vergleich die Occam-Glättung. Die Beträge erhielten in diesem Fall sogar 3% Gaussches Rauschen.

Die Occam-Bedingung liefert für dieses Modell in seiner Eigenschaft als Glättungsbedingung gute Ergebnisse; aber auch der kombinierte Ansatz lässt erkennen, dass in diesem Fall keine scharfen Schichtgrenzen vorliegen. Wäre dies im vorhinein bekannt, würde man durch die Wahl eines größeren Wertes für  $\beta$  auch das Ergebnis der Occam-Glättung erhalten können. Die Strategie eines variierenden  $\beta$  ist auch auf glatte Modelle anwendbar. Für scharfe Kontraste ist die kombinierte Regularisierung also einer Glättungsbedingung überlegen; für glatte Modelle werden noch immer akzeptable Ergebnisse erzeugt. Bei entsprechender Variation von  $\beta$  kann der kombinierte Ansatz auch erfolgreich für sehr glatte Modelle eingesetzt werden. Die Benutzung einer völlig anderen Regularisierung ist nicht notwendig.

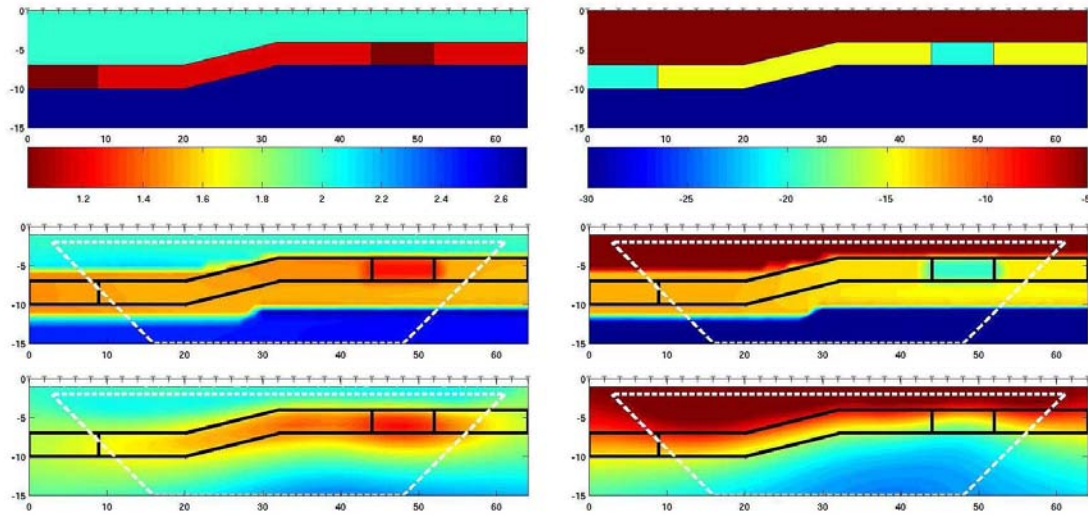


Abbildung 4.15: Modell und Inversionsergebnisse für Betrag ( $\Omega m, \log_{10}$ , links) und Phase ( $mrad$ , rechts). Oben: Modell, Mitte: kombinierte Regularisierung, unten: Occam-Glättung. Die Modellgrenzen (schwarz) und der Bereich der Pseudopunkte (weiß) sind eingezeichnet.

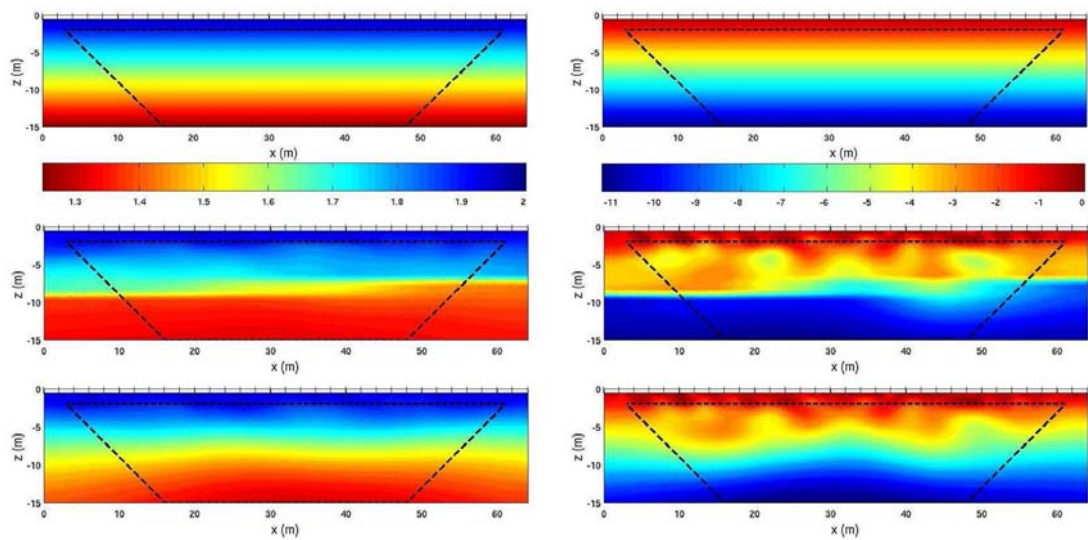


Abbildung 4.16: Inversionsergebnisse für Betrag ( $\Omega m, \log_{10}$ , links) und Phase ( $mrad$ , rechts) im Vergleich zum Modell. Oben: Modell, Mitte: Benutzung des kombinierten Ansatzes, unten: Occam-Glättung.

## 4.2 Topografie

Im Zusammenhang mit Gleichung 3.32 wurden die verschiedenen Typen von Randbedingungen erläutert. Neben den Neumannschen Randbedingungen an der Erdoberfläche, die numerisch unproblematisch sind, wurden im Untergrund meist die gemischten Randbedingungen eingesetzt, die das asymptotische Verhalten der Potentiale berücksichtigen. Dirichletsche Randbedingungen wurden nicht benutzt, um das Inversionsgebiet nicht zu groß machen zu müssen. Das asymptotische Verhalten wurde bisher aus dem eines homogenen Halbraums mit entsprechender Leitfähigkeit abgeleitet, was sich als hinreichend genau erwiesen hat. Die analytischen Potentiale eines homogenen Halbraums wurden auch beim singularity removal benötigt. Beides wird im Zusammenhang mit Topografie problematisch, da hier nicht auf analytische Lösungen zurückgegriffen werden kann. Bei Gräben oder Bergen verzerren sich die Äquipotentiallinien.

Der für diese Arbeit neu implementierte Lösungsansatz, um gemischte Randbedingungen auch für Gebiete mit Topografie verwenden zu können (und damit entscheidende Rechenzeit zu sparen), besteht darin, auf einem sehr großen Gitter mit Dirichletschen Randbedingungen eine Vorwärtsrechnung durchzuführen, die Potentiale für die einzelnen (Strom-)Elektrodenpositionen (und jede Wellenzahl) im Bereich der Ränder des kleineren Inversionsgebietes und für das kleinere Gebiet das asymptotische Verhalten zu bestimmen. Berechnet wird  $\beta_{FE}$  (s. z.B. Gleichung 3.32) zu

$$\beta_{FE} = -\sigma \frac{\partial_n \tilde{U}}{\tilde{U}} . \quad (4.1)$$

Die Berechnung der Potentiale und Ableitungen geschieht folgendermaßen: Das kleinere Inversionsgebiet ist in seinen Knoten Teilmenge des größeren und der Rand des kleineren besteht vollständig aus Kanten. Die Gebiete sind trianguliert. Es finden sich also zu jeder Randkante zwei Dreiecke, die diese Kante beinhalten. Zu jedem Dreieck wird eine Ebene bestimmt, darüber die Steigung in äußere Normalenrichtung. Aufgrund der recht starken räumlichen Abhängigkeit des Gradienten wird der (über den Abstand zur Kante gewichtete) Mittelwert des Gradienten aus beiden Dreiecken bestimmt. Auch das Potential selbst wird als Mittelwert berechnet.

Um die Effekte zu veranschaulichen, soll zunächst ein homogener Halbraum betrachtet werden, für den die Potentiale auch analytisch gegeben sind. In Abbildung 4.17 ist das Dipolpotential (für 1A) dargestellt, nach analytischer Berechnung. An der Oberfläche stehen die Äquipotentiallinien senkrecht auf dem Rand; im Untergrund schneiden die Linien ihn auch schräg. Im Vergleich dazu stellt 4.18 das Potential mit Dirichletschen Randbedingungen (Potential Null auf dem Rand des Untergrundes) dar. Offensichtlich ist die Dirichlet-Bedingung nicht hinreichend erfüllt und die Randbedingungen führen zu einer starken Deformation des Bildes.

Wie extrem die Situation ist, stellt Abbildung 4.19 dar. Selbst an der Oberfläche wachsen die Fehler in einen inakzeptablen Bereich. Im Vergleich dazu liefert ein Ansatz mit gemischten Randbedingungen (Abbildung 4.20) fast fehlerfreie Ergebnisse (geänderte Skala!). Die leichten Abweichungen sind auf die Diskretisierung der endlich großen Zellen zurückzuführen. In jedem Fall ist also eine Art gemischter Randbedingungen bei Ver-

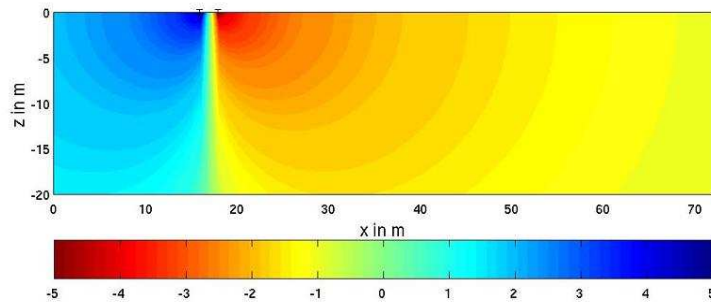


Abbildung 4.17: Potentialverteilung für eine Dipoleinspeisung, analytische Berechnung. Logarithmische Darstellung. Messwerte in mV. Vorzeichen entspricht dem des Potentials ( $-2 \Rightarrow -(10^2) mV \Rightarrow -100mV$ )

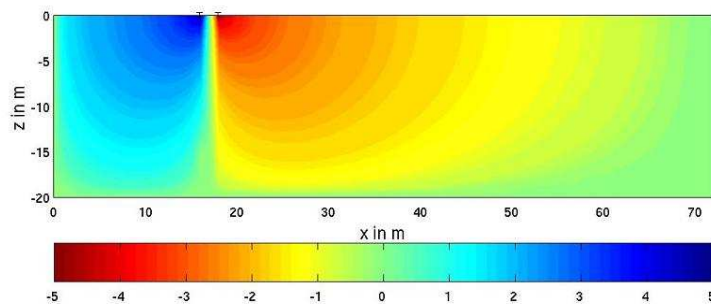


Abbildung 4.18: Potentialverteilung für eine Dipoleinspeisung, synthetische Berechnung mit Dirichletschen Randbedingungen. Logarithmische Darstellung. Messwerte in mV. Vorzeichen entspricht dem des Potentials ( $-2 \Rightarrow -(10^2) mV \Rightarrow -200mV$ )

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

wendung kleinerer Gitter zu empfehlen. Im Fall von unebener Topografie bleibt zunächst nur die Berechnung mit Dirichlet-Bedingungen, da das asymptotische Verhalten der Potentiale nicht analytisch gegeben ist. Hier ist ein größeres Gitter notwendig. In Abbildung 4.21 ist der Fehler dargestellt bei Verlängerung des Gitters um je 50 m in  $x$ - und 60 m in  $z$ -Richtung. Die Verbesserung gegenüber dem kleineren Gebiet ist bereits sehr deutlich, obwohl nur etwa das Doppelte an Zellen (Zellen wachsen mit zunehmendem Abstand von den Elektroden) benötigt wird.

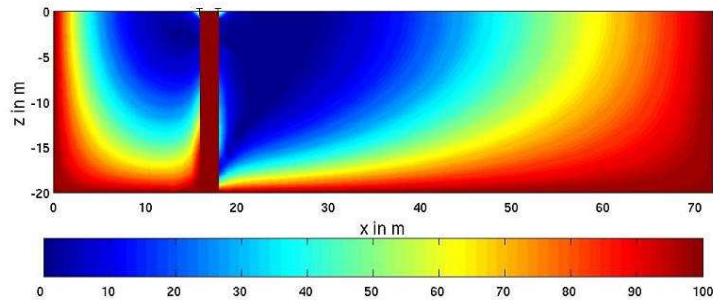


Abbildung 4.19: Prozentuale Abweichung des Dipolpotentials bei Berechnung mit Dirichletschen Randbedingungen von der analytischen Lösung. Der Bereich mit Potentialen um 0 ist ausgeblendet.

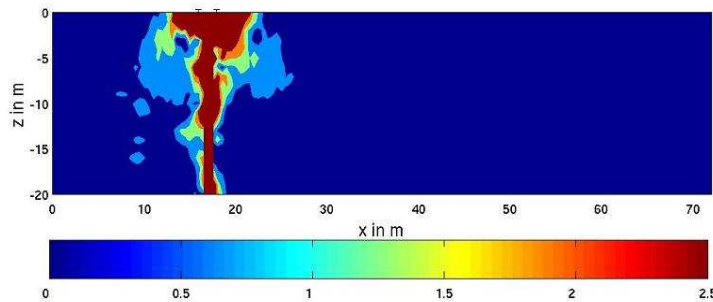


Abbildung 4.20: Prozentuale Abweichung des Dipolpotentials bei Berechnung mit gemischten Randbedingungen von der analytischen Lösung. Der Bereich mit Potentialen um 0 ist ausgeblendet.

Aus den Potentialen des größeren Gebietes sollen nun synthetisch Werte für  $\beta_{FE}$  (s. 4.1) wie beschrieben bestimmt werden. Dazu werden die Potentiale und deren Gradienten auf dem Rand des inneren Gebietes aus den diskreten Werten der Vorwärtsrechnung mit Dirichletschen Bedingungen und großem Gebiet bestimmt. Anhand eines Potentials für eine Elektrode werden analytische und synthetische Lösung verglichen. Abbildung 4.22 zeigt das Ergebnis. In der Nähe der Elektrode stimmt  $\beta_{FE}$  bereits gut überein; schlechter werden die Werte bei größerer Entfernung. Der Effekt liegt im (bewusst) noch immer zu kleinen Gitter begründet und soll im Folgenden näher erläutert werden.

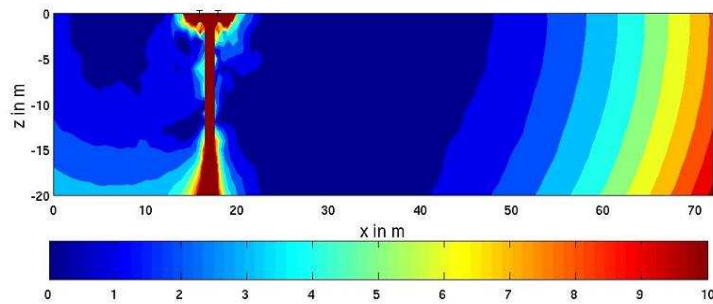


Abbildung 4.21: Prozentuale Abweichung des Dipolpotentials bei Berechnung mit Dirichletschen Randbedingungen und vergrößertem Gitter von der analytischen Lösung. Der Bereich mit Potentialen um 0 ist ausgeblendet.

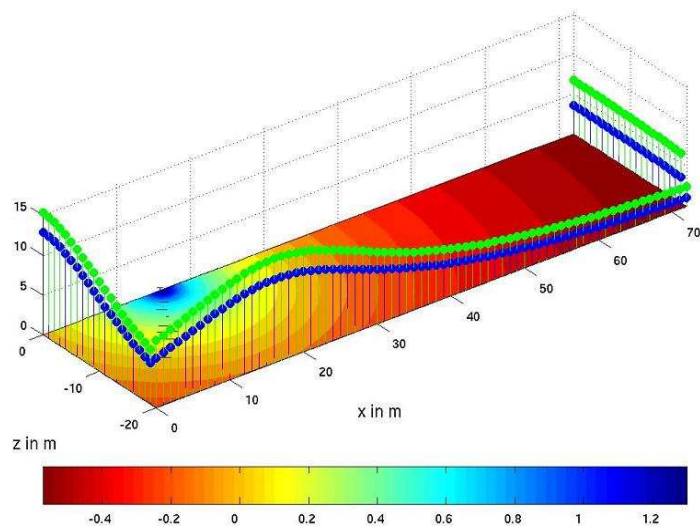


Abbildung 4.22: Analytisches Potential durch eine Elektrode (bei  $x=16\text{m}$ ,  $z=0\text{m}$ ) in V. Zusätzlich dargestellt  $\beta_{FE}$  aus der analytischen Lösung (blau) und den synthetischen Werten (Dirichlet-Bedingungen und vergrößertes Gitter) (grün).

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

Bei der Rücktransformation aus dem Wellenzahlbereich setzen sich die Potentiale der näheren Knoten mehr aus kurzwelligeren Anteilen zusammen als entferntere Punkte, an denen die kleineren Wellenzahlen wichtiger sind. Ein Beispiel ist in Abbildung 4.23 dargestellt. Man sieht deutlich die Tendenz zu kleineren Anteilen der kleineren Wellenzahlen bei geringerem Abstand zur Elektrode. Der Sprung in der roten Kurve kommt durch einen Wechsel in der Gewichtung zustande. Die Werte zu Wellenzahlen über und unter 9 bzw. größer und kleiner einer charakteristischen Wellenzahl  $k_0 = 1/(2r_{min})$  werden aufgrund des verschiedenen asymptotischen Verhaltens für  $k \rightarrow 0$  bzw.  $k \rightarrow \infty$  unterschiedlich bestimmt. Mehr hierzu in [Kemna, 2000].

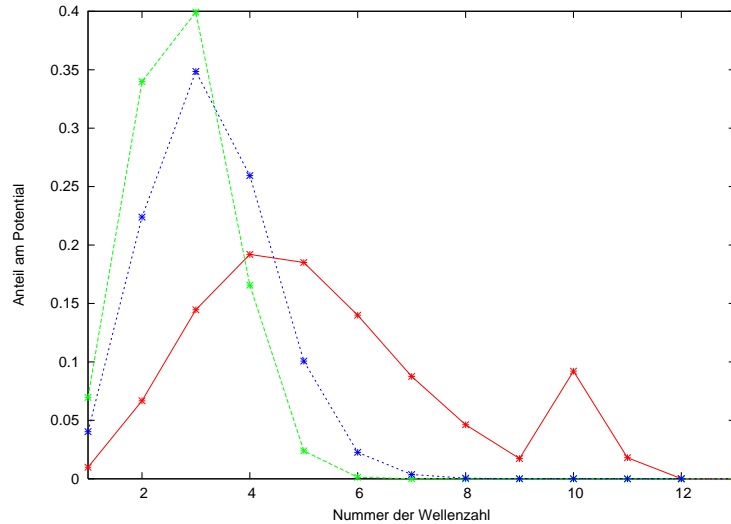


Abbildung 4.23: Zusammensetzung des Gesamtpotentials in Abhängigkeit von den Wellenzahlen (aufsteigend mit größerer Nummer). Entfernung zur Elektrode: rot: 6m, blau:  $\sim 31$ m, grün:  $\sim 59$ m.

Es ist offensichtlich, dass die langwelligen Anteile stärker durch die Dirichlet-Bedingung gestört werden als die kurzwelligen Anteile. Schaut man sich die Werte für  $\beta_{FE}$  in Abhängigkeit der einzelnen Wellenzahlen an, sieht man in Abbildung 4.24, dass sich der Wert mit zunehmender Wellenzahl zunächst mehr dem analytischen (kontinuierlich, unabhängig vom Gitter berechnet) annähert, aufgrund des geringeren Einflusses der Ränder. Werden die Wellenzahlen noch größer, kommen Störeffekte aufgrund der Gitterdiskretisierung hinzu. Dies kann dadurch bestätigt werden, dass hier die Werte aus den analytischen gemischten Bedingungen auf dem diskreten Gitter (blau) ebenfalls gestört werden.

Als nächstes soll ein Beispiel mit Topografie benutzt werden. Die Potentiale für Dirichletsche Bedingungen wurden auf einem deutlich größeren Gitter als zuvor gerechnet, sodass keine signifikanten Randeffekte mehr im betrachteten Gebiet erwartet werden. Eine Bestätigung liefert die Benutzung analytischer gemischter Randbedingungen auf dem großen Gitter, was zu fast identischen Werten führt.

Die Vorwärtsrechnung mit synthetischen gemischten Randbedingungen auf dem kleineren Gitter liefert praktisch identische Potentiale (Fehler  $\ll 1\%$ ); bei Benutzung analytischer



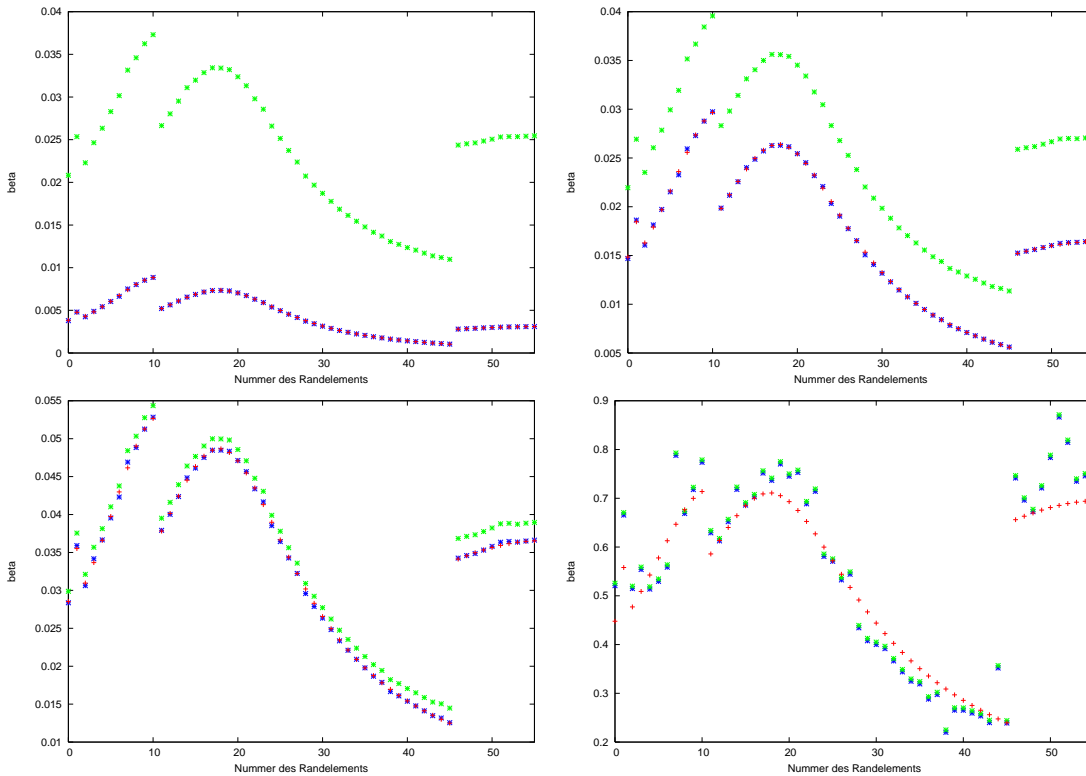


Abbildung 4.24:  $\beta$  der Randelemente. Grün: Dirichlet, großes Gitter, blau: gemischt, großes Gitter, rot: synthetisch. Nummer der Wellenzahl: oben links: 1, oben rechts: 3, unten links: 4, unten rechts: 11. Verlauf der Randelemente: linke Seite von unten, Unterseite nach rechts, rechte Seite von unten. (vgl. auch Abbildung 4.22)

gemischter Randbedingungen (unter der Annahme ebener Topografie) treten hingegen deutliche Fehler auf. Ein extremes Beispiel ist der Betrag des Dipolpotentials für Elektroden direkt am Ende der unebenen Topografie. Abbildung 4.25 zeigt, dass die Abweichungen im relevanten Auslagenbereich 30% überschreiten (Farbskala begrenzt. Werte sonst bis etwa 40%).

Bei Verlassen der unmittelbaren Umgebung der Geländekante sinken die Fehler schnell, sind allerdings noch immer signifikant. Abbildung 4.26 zeigt die Situation bei um zwei Meter versetzten Elektroden. Bis in weite Bereiche an der Oberfläche werden Potentiale nun mit Fehlern unter 10% gemessen.

Um einen Gesamtüberblick der Effekte zu erhalten, wurde noch eine Inversion mit Daten aus der gleichen Topografie durchgeführt, wobei der Untergrund homogen war. Die Elektroden wurden in  $x$ -Richtung alle zwei Meter aufgestellt und für einfache Dipolweite Messdaten für  $n = 1$  bis  $n = 14$  berechnet. Die Inversion mit synthetischen Randbedingungen gibt wie erwartet den Untergrund fast perfekt wieder (Fehler unter 0,2%). Im Fall der analytischen Bedingungen erwartet man Fehler deutlich kleiner als in 4.25, da

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

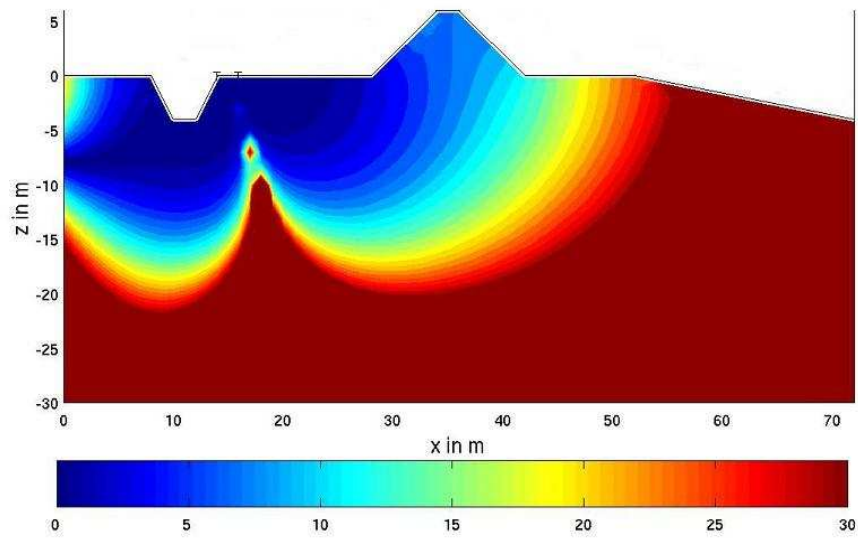


Abbildung 4.25: Prozentuale Abweichung bei Benutzung analytischer gemischter Randbedingungen für flache Topografie von Daten aus einer Vorwärtsrechnung auf hinreichend großem Gebiet und mit Dirichletschen Randbedingungen. Elektrodenpositionen („T“) des Sendedipols eingezeichnet.

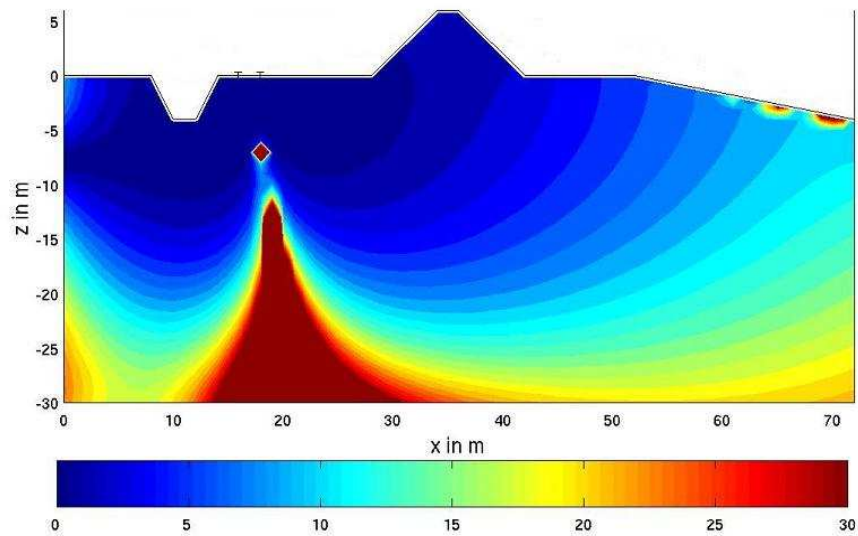


Abbildung 4.26: Prozentuale Abweichung bei Benutzung analytischer gemischter Randbedingungen für flache Topografie von Daten aus einer Vorwärtsrechnung auf hinreichend großem Gebiet und mit Dirichletschen Randbedingungen. Elektrodenpositionen („T“) des Sendedipols eingezeichnet.

die Verhältnisse im Durchschnitt der Sendedipole nicht so extrem wie in diesem Einzelfall sind. Trotzdem erweisen sich die Fehler nicht als vernachlässigbar. Abbildung 4.27 zeigt die Verteilung der Fehler - sie liegen im Bereich um  $\pm 6\%$  und damit deutlich über der synthetischen Berechnung. Bei starker Topografie ist eine Verwendung synthetischer Randbedingungen damit in jedem Fall anzuraten, da auch der numerische Mehraufwand (eine Vorwärtsrechnung mit Dirichletschen Bedingungen auf großem Gitter) überschaubar ist.

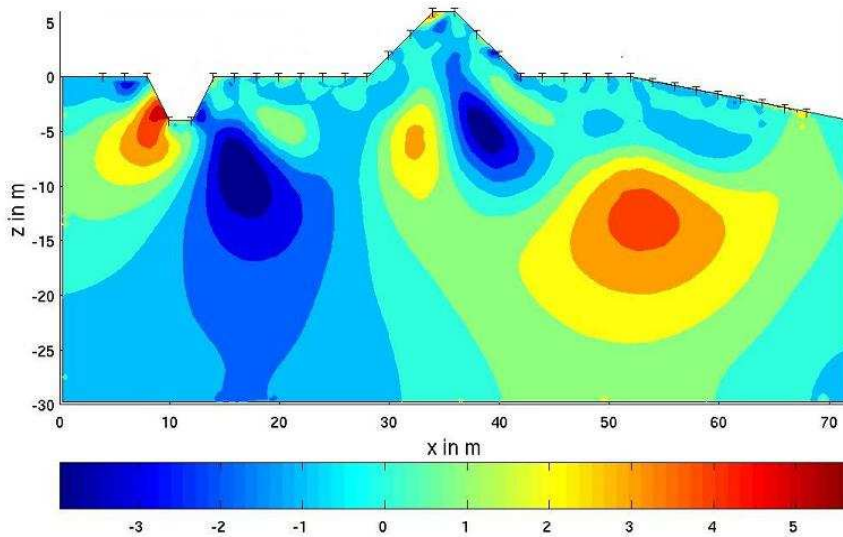


Abbildung 4.27: Prozentuale Abweichung nach Inversion bei Benutzung analytischer gemischter Randbedingungen für flache Topografie von Daten hinreichend genauer Vorwärtsrechnung auf großem Gebiet und Dirichletschen Randbedingungen. Elektrodenpositionen sind eingezeichnet.

Abschließend soll bei gleicher Topografie ein Zweischichtmodell invertiert werden. Die obere Schicht besitzt einen spezifischen Widerstand  $100\Omega m$ ,  $-5mrad$ , die untere Schicht  $10\Omega m$ ,  $-15mrad$ . Invertiert wurde mit einer Glättungsbedingung. Das Ergebnis ist in 4.28 dargestellt. Man erkennt gut, dass (abgesehen vom schlecht aufgelösten Randbereich) weder der Graben noch der Hügel oder der Hangbereich Auswirkung auf die Form der invertierten Schichtgrenze haben. Es treten auch keine lokalen Artefakte in den Bereichen der unebenen Topografie auf. Da die simulierte Topografie verglichen mit in der täglichen Feldpraxis auftretenden Verhältnissen recht extrem ist, ist es damit möglich, Messdaten aus Konfigurationen mit Topografie zu invertieren.

Auch für den Topografie-Fall wurde die neue Regularisierung implementiert und eine Inversion für das beschriebene Modell durchgeführt. Der Kontrast ist wie erwartet stärker, die Grenze aufgrund der recht groben Triangulierung etwas unregelmäßig. Wie bei der Glättungsbedingung wirken sich weder Graben, Hügel noch Hang auf die Grenzfläche aus. Das Ergebnis für den Betrag ist in 4.29 dargestellt.

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

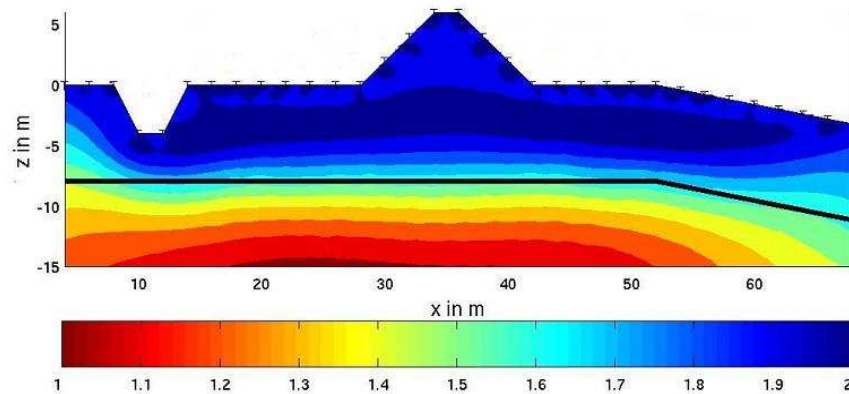


Abbildung 4.28: Inversionsergebnis bei Benutzung synthetischer gemischter Randbedingungen und Occam-Regularisierung. Betrag in  $\Omega m$ , logarithmisch. Elektrodenpositionen sind eingezeichnet.

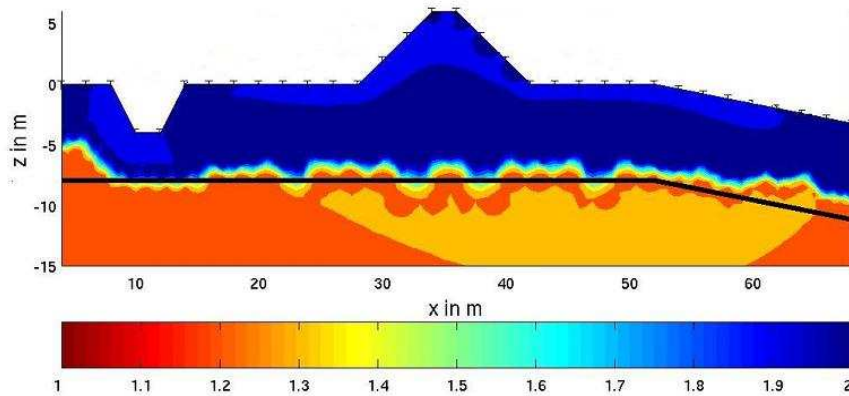


Abbildung 4.29: Inversionsergebnis bei Benutzung synthetischer gemischter Randbedingungen und kombinierter Regularisierung. Betrag in  $\Omega m$ , logarithmisch. Elektrodenpositionen sind eingezeichnet.

Eine weitere Anwendungsmöglichkeit der Inversion mit flexibler Geometrie findet sich im Labor. Die Messzylinder haben einen kreisförmigen Querschnitt, auf dessen Rand die Elektroden positioniert sind. Die gemischten Randbedingungen kommen hier nicht zur Anwendung, weil an allen Rändern homogene Neumannsche Randbedingungen gefordert werden; eine Triangulierung des Inversionsgebietes ist aber wesentlich günstiger als eine Rechteck-Aufteilung.

Daten für Messungen mit 24 Elektroden wurden von der RWTH Aachen (Klitzsch, pers. Komm.) zur Verfügung gestellt. Dort wird die Apparatur für Durchströmungsversuche an einer Messzelle zur labormäßigen Bestimmung der hydraulischen Leitfähigkeit eingesetzt. Bei einem Berechnungsversuch wurden zu verschiedenen Feuchtigkeitszuständen jeweils alle (231) Dipol-Dipol Konfigurationen mit einfachem Elektrodenabstand benutzt. Abbildung 4.30 zeigt die Veränderung vom trockenen zum berechneten Zustand. Im Trockenzustand ist die Leitfähigkeit (immer bis auf den nahen Randbereich) recht homogen verteilt und weitgehend unstrukturiert. Nach der Berechnung sinkt der Widerstand merklich, und insbesondere im Inneren ergeben sich niedrigere Werte. Möglicherweise geschieht der Abfluss überwiegend im Zentrum. Die Phasen zeigen diese Charakteristik nicht. Man erkennt eine (betragliche) Zunahme der Phasen. Die Anpassung erfolgt bis auf einen Fehler von einem Prozent in den Beträgen und 0,5 mrad in den Phasen. Eine Darstellung als Pseudosektion bietet sich in dieser Geometrie nicht an.

Eine weitere Anwendungsmöglichkeit für Zylindergeometrien stellen auch Bäume dar. Es konnte gezeigt werden (z.B. [Just, 2001]), dass die Leitfähigkeit hier Rückschlüsse auf eventuell vorhandene Fäule zulässt, was sowohl aus Sicherheitsaspekten (Gefahr des Umstürzens) als auch aus wirtschaftlicher Sicht (Verkaufswert sinkt rapide) von Bedeutung ist. Ein nichtinvasives Verfahren ist hierbei von großem Vorteil.

## 4.3 Messbeispiele

Auch wenn das Programm die Inversion von Daten aus Labormessungen an zylinderförmigen Proben zulässt, so soll der Schwerpunkt bei den Messbeispielen doch darauf gelegt werden, Daten von Feldmessungen zu interpretieren.

Die meisten Daten wurden dabei auf dem Testfeld Krauthausen aufgezeichnet; die Untergrundverhältnisse sind in Unterkapitel 7.1 vorgestellt. Gleiches gilt für das Testgebiet bei Cuxhaven. Detaillierte Analysen der vollständigen Datensätze zu den Testgebieten finden sich in [Zisser, 2005], wobei die jeweils aktuellste Version des Programmes benutzt wurde. In dieser Arbeit sollen nicht die Testgebiete behandelt werden, sondern die Felddaten lediglich zum Testen des Inversionsprogrammes dienen. Entsprechend werden nur einzelne Datensätze behandelt und die Details zum Messgebiet ans Ende der Betrachtungen gestellt (siehe Kapitel 7).

Zunächst sollen die Messwerte zu Profil B32 (siehe Abbildung 7.4) für eine Frequenz von 312,5mHz invertiert werden. Wie schon erwähnt, bieten sich Frequenzen in diesem Bereich an, da sie einerseits niedrig genug sind, um vernachlässigbar von EM-Kopplung gestört zu sein, andererseits ist die Periode noch hinreichend klein, sodass ausreichend oft gestapelt werden kann.

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

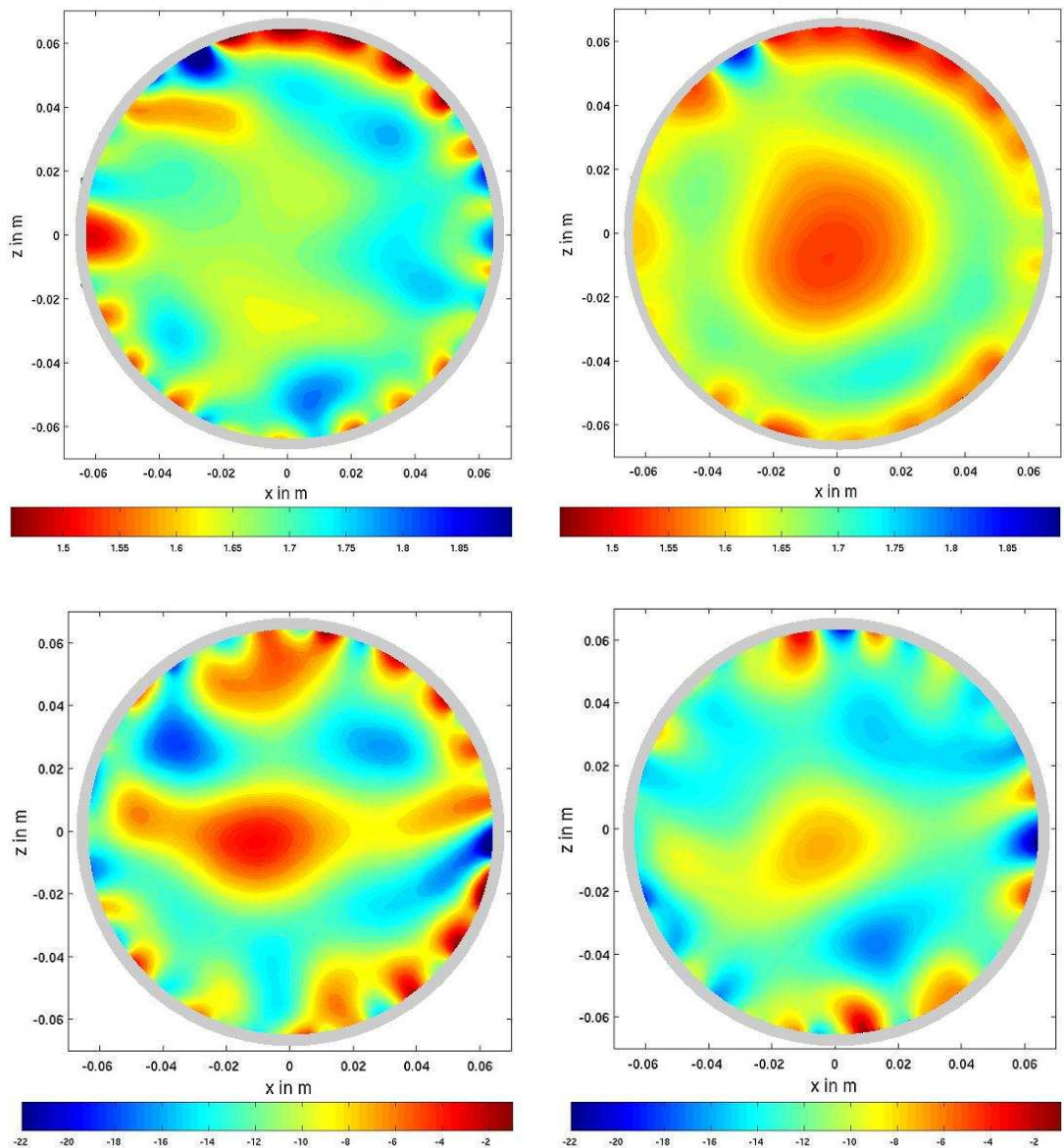


Abbildung 4.30: Inversion von Daten aus einem Berechnungsversuch zu verschiedenen Feuchtigkeitszuständen. Dargestellt sind Beträge (oben, in  $\Omega m$ , logarithmisch) und Phasen (unten, in mrad) im trockenen (links) und be-regneten (rechts) Zustand. Messfrequenz ist 2,5 Hz.

Abbildung 4.31 zeigt eine Studie möglicher Inversionsergebnisse. Das Vorgehen entspricht dem bereits vorgeschlagenen: Man betrachtet zunächst die Ergebnisse einer Inversion mit Glättungsbedingung (alternativ kombinierte Regularisierung mit großem  $\beta$ ) und im Vergleich die Ergebnisse für die neue Bedingung und sinkendem  $\beta$ , bis das Bild unrealistisch scharf erscheint (sehr große, völlig homogene Strukturen).



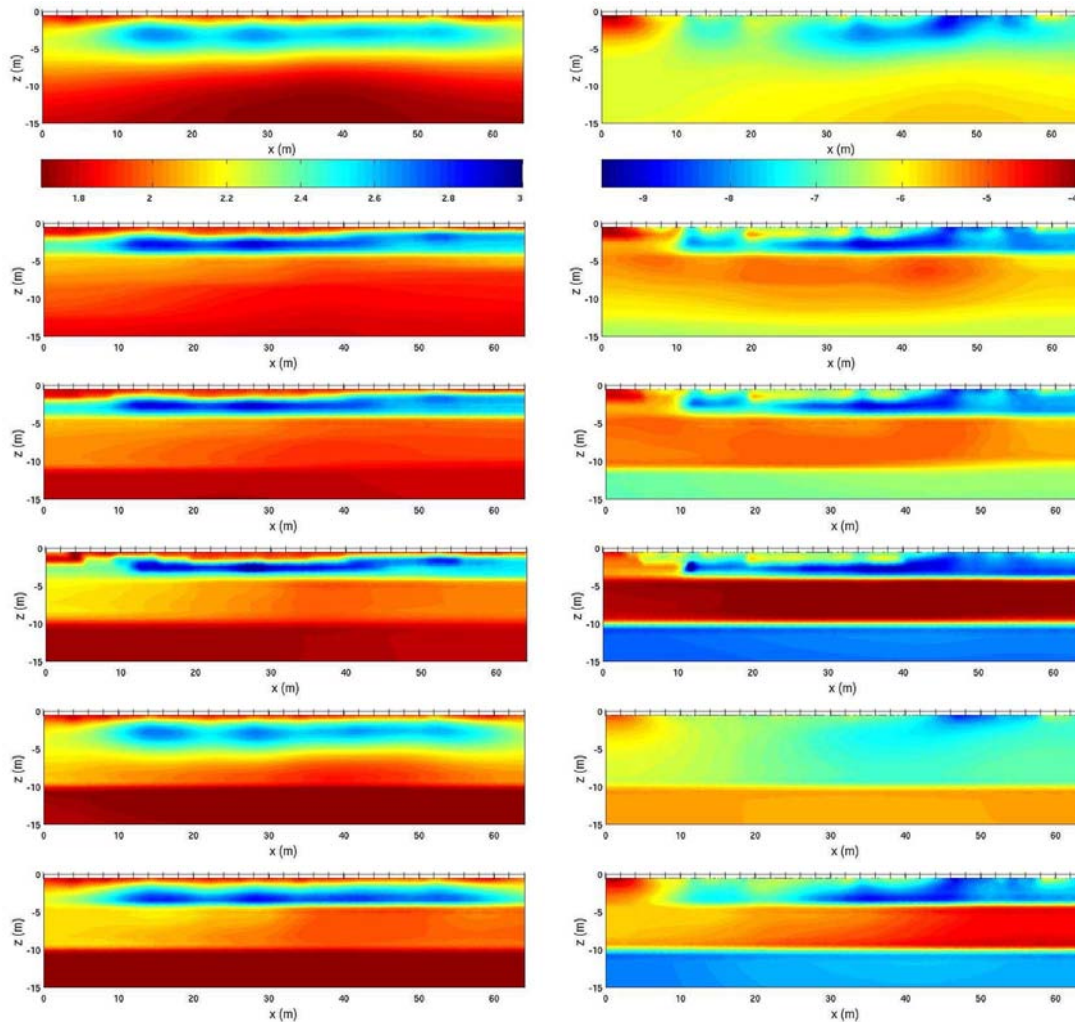


Abbildung 4.31: Inversionsergebnisse zum Profil B32 bei 312,5mHz. Dargestellt sind Beiträge (links, in  $\Omega m$ , logarithmisch) und Phasen (rechts, in mrad). Zeilenweise von oben wurde benutzt: 1: Occam-Glättung; 2: kombinierte Regularisierung mit  $\beta = 3\beta_0$ ; 3:  $\beta = 2\beta_0$ ; 4:  $\beta = \beta_0$ ; 5: Occam-Glättung für angenommene Schicht bei  $z = -10m$ ; 6: angenommene Schicht bei  $z = -10m$  und  $z = -4m$ .

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

Bei Betrachtung der Beträge wirkt der Übergang von Occambedingung zur kombinierten Regularisierung mit größerem  $\beta$  recht glatt. Die schlechter leitende obere Schicht wird etwas kontrastreicher und entsprechend schmaler. Eine dritte Schicht ist noch nicht zu erkennen.

Weiteres Verkleinern von  $\beta$  bildet bei steigendem Kontrast eine zweite Schichtgrenze in etwa 10m Tiefe aus (3. und 4. Zeile). Bei weiter sinkendem  $\beta$  werden die Kontraste sehr stark und große, homogene Gebiete machen das Modell unglaubwürdig (nicht dargestellt). Die 10m-Schichtgrenze ist jedoch auch aus dem Normalprofil noch zu erwarten.

Zum Vergleich soll nun erneut eine Inversion mit Glättungsbedingung durchgeführt werden, bei der allerdings in 10m Tiefe nicht vertikal geglättet wird. Das Ergebnis (5. Zeile) entspricht im Betrag fast der kombinierten Regularisierung mit  $\beta_0$  (4. Zeile). Eine Annahme der Schichtgrenze in 9 oder 11m Tiefe führt zu geringeren Kontrasten an der Grenze, was analog zu den synthetischen Rechnungen (siehe 4.3) als schlechtere Übereinstimmung mit der Realität angesehen werden kann, da sich ein großer Kontrast nicht ohne Modellbezug aufbaut.

Fügt man nun noch eine mögliche Schichtgrenze in 4m Tiefe hinzu, die auch durch das Normalprofil gedeckt ist, entsprechen die Ergebnisse (6. Zeile) im Betrag praktisch denen der kombinierten Regularisierung mit optimalem Wert für  $\beta$ .

Das Betrachten der Phasen liefert zunächst eine ähnliche Aussage. Ausgehend von der Glättungsbedingung (1. Zeile) mit sinkendem  $\beta$  bis zum Optimalwert  $\beta_0$  (4. Zeile) ist der Übergang kontinuierlich. Es bildet sich aus dem glatten Modell mit zwei angedeuteten Schichten ein kontrastreiches Modell mit drei Schichten aus. Interessant ist allerdings das Occam-Modell bei Hinzunahme der Schichtgrenze in 10m Tiefe (5. Zeile). Das Modell hat einen erkennbaren Bezug zur Glättung ohne Schichtgrenze (1. Zeile), besitzt aber eine qualitativ andere Schichtung (unten betraglich kleinere Phase) als das Bild aus der kombinierten Regularisierung (unten wieder betraglich größere Phase, z.B. Zeile 3).

Bei Setzen der 4m Schichtgrenze kippt das Verhältnis und entspricht qualitativ (und weitgehend auch quantitativ) dem der kombinierten Regularisierung im Optimalfall (4. Zeile).

Insgesamt wird deutlich, welche Auswirkung das stark unterbestimmte Gleichungssystem hat. Alle Inversionen passen die Messdaten gleich gut an, unterscheiden sich insbesondere in der Phase aber auch qualitativ. Als Beispiel sind in Abbildung 4.32 verschiedene Pseudosektionen dargestellt. Die realen Messdaten (jeweils Betrag links, Phase rechts) werden in der ersten Zeile gezeigt und unterscheiden sich nur unwesentlich von den Daten aus der Vorwärtsrechnung mit den Modellen aus einer Occam-Inversion (zweite Zeile) oder einer mit kombinierter Regularisierung (dritte Zeile). Der kombinierte Ansatz liefert eine etwas bessere Übereinstimmung in den Phasen.

Betrachtet man nur die Abweichungen von den realen Messdaten, wie in Abbildung 4.33 dargestellt, so erkennt man weitere Unterschiede. Offenbar liefert die Occam-Glättung Daten, die insbesondere nahe der Oberfläche stärkere Abweichungen in den Beträgen hervorrufen. Auch die Phasen zeigen ein strukturierteres Verhalten in den Abweichungen, wie es schon in Abbildung 4.14 zu sehen war. Abweichungen, die wenig mit dem Modell korrelieren, sprechen für eine glaubwürdige Anpassung. Deshalb spricht diese Detailbe-



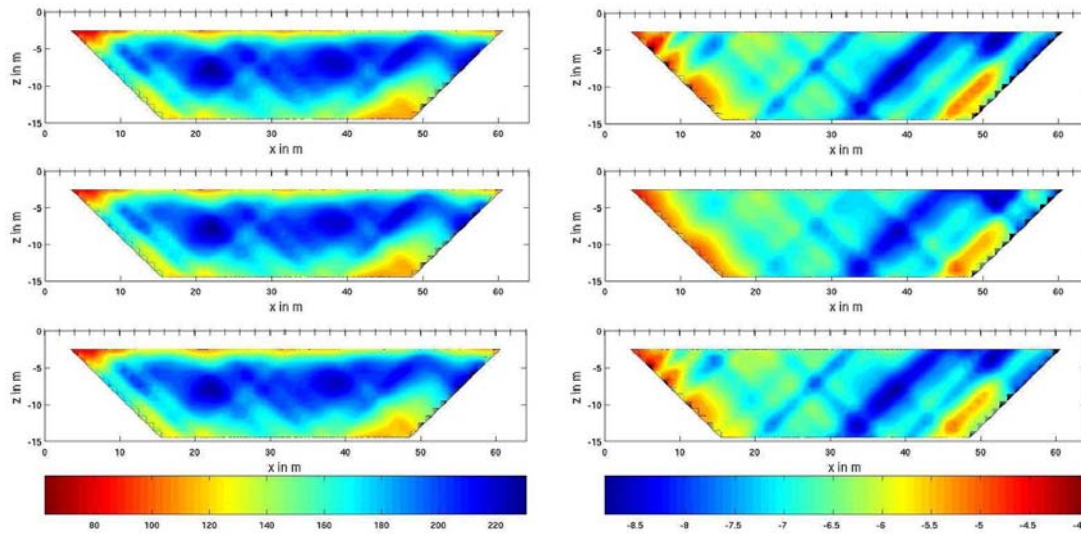


Abbildung 4.32: Pseudosektionen zu den Messdaten des Profils B32 bei 312,5mHz. Dargestellt sind die Messdaten und die Daten der Vorwärtsrechnung auf Basis des Modells nach Inversion mit Occam- (Mitte) bzw. kombinierter Regularisierung (unten,  $\beta = \beta_0$ ). Gezeigt sind Betrag (links, in  $\Omega m$ ) und Phase (rechts, in mrad).

trachtung unabhängig von den gleichen RMS-Werten für das Modell aus der Inversion mit kombinierter Regularisierung (und  $\beta = \beta_0$ ).

Im vorliegenden Fall ist der Untergrund bekannt und an der 10m Grenze erwartet man einen Wechsel von Kiesen im oberen, zu Sanden im unteren Bereich und damit eine Änderung von (betraglich) niedrigeren zu höheren Phasen (siehe z.B. Abschnitte 2.3 oder 2.4.3). Damit ist das Modell in Zeile 5 unrealistischer.

Abbildung 4.34 stellt das Ergebnis aus der kombinierten Regularisierung mit optimalem  $\beta$  dem lithologischen Normalprofil gegenüber. Man erkennt deutlich die Übereinstimmung der Schichtgrenzen bei beiden Darstellungen. Das Bild stimmt nicht nur in der Lage der Grenzen überein, sondern besitzt neben dem Aspekt der scharfen Kontraste auch leichte Variationen innerhalb der Schichten, was das Gesamtbild noch natürlicher werden lässt.

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

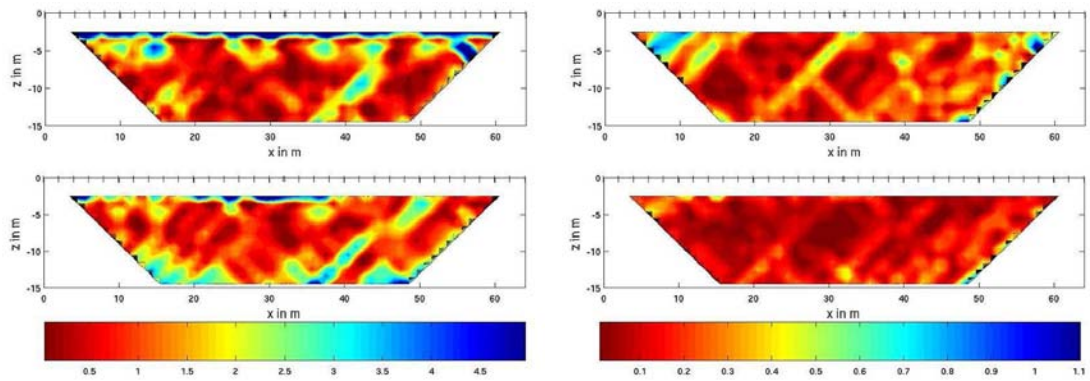


Abbildung 4.33: Pseudosektionen zu den Messdaten des Profils B32 bei 312,5mHz. Dargestellt sind die Abweichungen der Daten aus der Vorwärtsrechnung auf Basis des Modells nach Inversion mit Occam- (oben) bzw. kombinierter Regularisierung (unten,  $\beta = \beta_0$ ) von den realen Messdaten. Gezeigt sind Abweichungen in Betrag (links, in %) und Phase (rechts, in mrad).

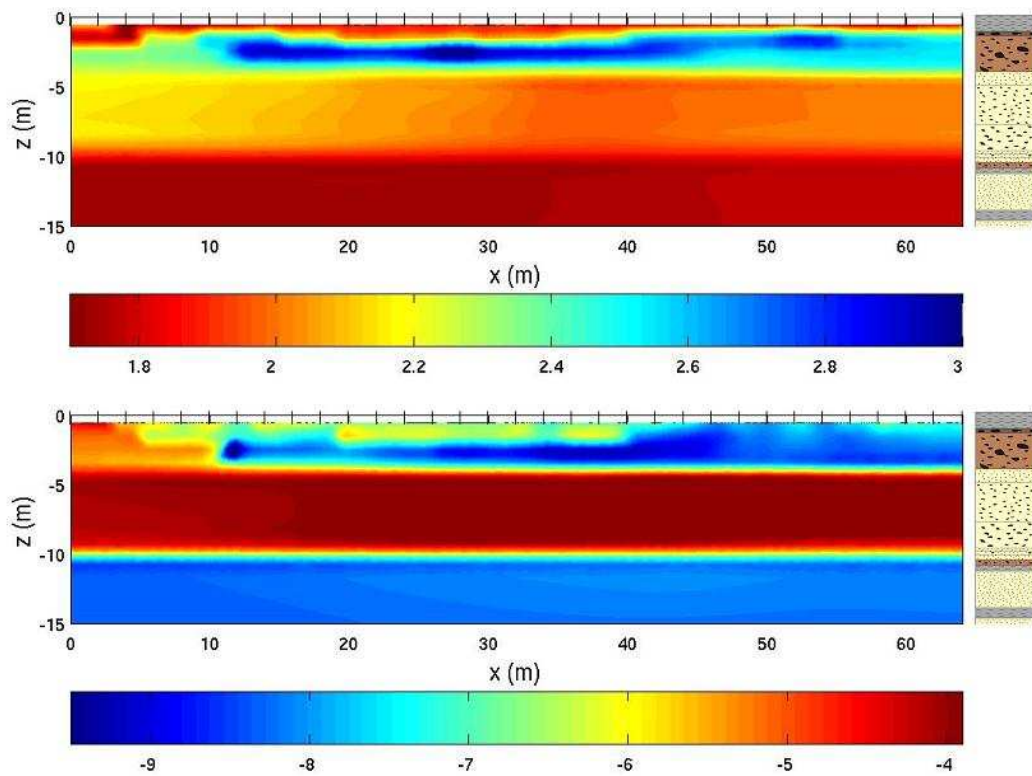


Abbildung 4.34: Inversionsergebnisse zum Profil B32 bei 312,5mHz im Vergleich zum Normalprofil. Dargestellt sind Beträge (oben, in  $\Omega m$ , logarithmisch) und Phasen (unten, in mrad). Benutzt wurde die kombinierte Regularisierung mit  $\beta = \beta_0$ .

Bei Inversion von Daten aus dem parallelen Profil B22 erwartet man bei Inversion mit gleicher Parametereinstellung vergleichbare Ergebnisse. Abbildung 4.35 stellt die Ergebnisse für die kombinierte Regularisierung bei  $\beta = \beta_0$  zusammen. Wie erwartet, unterscheiden sie sich nur im Detail von den Daten aus Profil B32 (vergleiche z.B. Abbildung 4.31, Zeile 4), was die Stabilität der Inversionsergebnisse unterstreicht. Das Modell ist nicht willkürlich, sondern offenbar sind die Schichten signifikant. Sie gehen aus dem Modell einer Occam-Glättung kontinuierlich durch Verkleinerung von  $\beta$  hervor, ohne Verwenden von Informationen über die bekannten Schichtgrenzen.

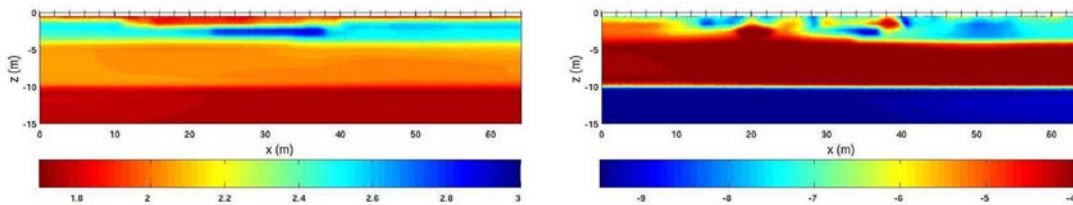


Abbildung 4.35: Inversionsergebnisse zum Profil B22 bei 312,5 MHz. Dargestellt sind Beträge (oben, in  $\Omega m$ , logarithmisch) und Phasen (unten, in mrad). Benutzt wurde die kombinierte Regularisierung mit  $\beta = \beta_0$ . Vergleiche B32: 4.31, Zeile 4.

Als zweites Messbeispiel soll ein Profil aus dem Messgebiet bei Cuxhaven betrachtet werden. Die Lithologie (siehe Abbildung 7.5) unterscheidet sich deutlich von der aus Krauthausen, insbesondere, weil keine klaren Schichtgrenzen mit größeren Kontrasten auftreten. Bis auf die oberste Schicht bestehen die oberen 10 m aus Feinsanden, darunter folgt eine Tonschicht.

Es gibt allerdings einen zweiten Aspekt in dieser Region, der starke Auswirkungen auf die gemessene Leitfähigkeit hat - die des Porenfluides.

In Abbildung 4.36 ist eine Messkurve der Fluidleitfähigkeit gemessen an einem naheliegenden Bohrloch gezeigt. Im Bereich von etwa 5 - 6,5 Metern Tiefe nimmt dieser Wert um mehr als eine Zehnerpotenz zu. Damit ist in diesem Bereich eine starke Abnahme des Betrags des spezifischen Widerstandes zu erwarten. Für die Phasen muss der imaginäre Anteil der Leitfähigkeit besonders betrachtet werden. Eine Aussage, die *Börner et al.* [1996] als Voraussetzung für die Berechnung des  $k_f$ -Wertes benutzen (siehe 2.27), ist die Unabhängigkeit des Verhältnisses von Imaginär- zu Realteil der Grenzflächenleitfähigkeit von der Zusammensetzung und Verteilung des Porenfluids. Bleibt dieses Verhältnis konstant und nimmt die rein reelle elektrolytische Leitfähigkeit zu, erwartet man insgesamt fallende Phasen im Bereich des besser leitenden Fluides.

Das Fluid hat allerdings noch eine weitere Auswirkung auf die Interpretation der Messdaten: Der gute Leiter kanalisiert die Ströme und macht eine Aussage für größere Tiefen, also auch bezüglich der Tonschicht in über 10 m Tiefe, deutlich schwieriger. Vor diesem Hintergrund sollen nun die Inversionsergebnisse zum Messprofil, dargestellt in Abbildung 4.37, betrachtet werden.

In der ersten Zeile ist das Ergebnis einer Occam-Bedingung dargestellt. Wie erwartet, erkennt man in etwa 6 m Tiefe einen Übergang von etwas schlechterem zu besserem Leiter.

#### 4 Aspekte der Inversion in zwei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

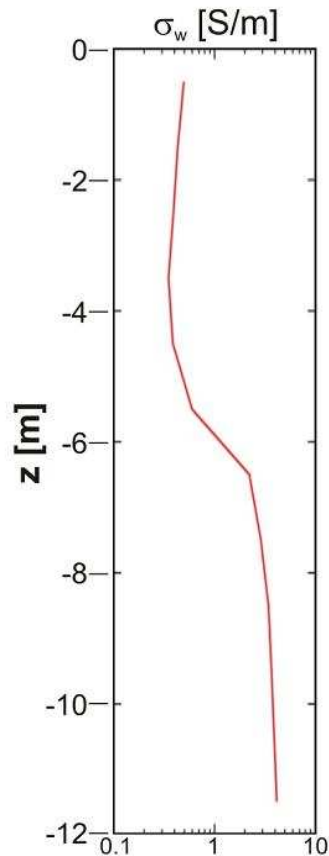


Abbildung 4.36: Gemessene Fluidleitfähigkeit in einem Bohrloch im Testgebiet Cuxhaven. Abbildung nach [Zisser, 2005].

In der Phase deutet sich noch eine weitere Schichtgrenze an, die allerdings in den sehr wenig sensitiven Teil unter 10m Tiefe fällt. Noch dazu ist der Wechsel am Randbereich des Profils am deutlichsten. Weitere Inversionen sollen hier Klarheit bringen.

Wieder beginnen wir mit einem großen Wert für  $\beta$  und führen die Inversion mit der kombinierten Regularisierung durch. Das Ergebnis in Zeile 2 bestätigt im Betrag das Bild der Occam-Glättung; in der Phase ist die untere Schichtgrenze nicht zu erkennen, die obere liegt, wie im Betrag, bei etwa 6m Tiefe.

Weitere Verkleinerungen in  $\beta$  bringen weder in Betrag noch Phase weitere Schichten hervor; ein Ergebnis mit mehr als um einen Faktor 3 verkleinertem  $\beta$  liefert die in Zeile 3 dargestellten Ergebnisse. Man sieht praktisch keine Veränderung im Betrag und auch die Phasen erweisen sich als stabil, wobei die Grenze noch etwas schärfer ausgebildet wird. In diesem Fall liefert die kombinierte Regularisierung weniger Schichten und auch bei weitem nicht so scharfe Grenzen in der Phase, wie noch im Beispiel von Krauthausen, aber dennoch sehr glaubwürdige Ergebnisse. Auch quantitativ passen die Ergebnisse der Beträge zu den Werten der Hubschrauberbefliegung, die im weiteren Umfeld Werte zwi-

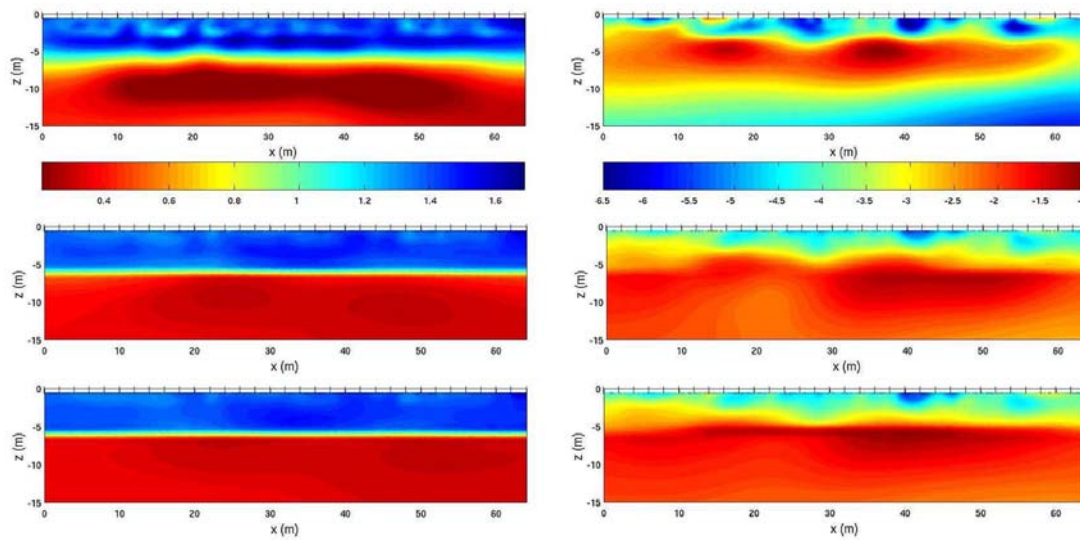


Abbildung 4.37: Inversionsergebnisse zum Profil buc in Messgebiet Cuxhaven bei 1,25Hz. Dargestellt sind Beträge (links, in  $\Omega m$ , logarithmisch) und Phasen (rechts, in mrad). Zeilenweise von oben wurde benutzt: 1: Occam-Glättung; 2: kombinierte Regularisierung mit  $\beta = 3,3\beta_0$ ; 3:  $\beta = \beta_0$ .

schen etwa 3 und  $50\Omega m$  liefert. Der Inversionsalgorithmus erweist sich damit als flexibel einsetzbar, auch für sehr verschiedene Untergründe.



## 5 Multifrequenz–Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

Die spektrale IP versucht neben den im vorherigen Kapitel besprochenen Informationen auch Aussagen aus den Frequenzabhängigkeiten zu gewinnen. Prinzipiell kann eine Multifrequenz-Inversion aufgeteilt werden in eine Inversion einzelner Frequenzen, womit man zu jeder Frequenz ein Untergrundmodell in Betrag und Phase erhält. Bei einer größeren Zahl von Frequenzen wird diese Menge an Informationen jedoch unpraktisch und es ist zweckmäßig, die Betrag/Phase-Paare für die einzelnen Frequenzen (und Zellen) nicht unabhängig zu betrachten, sondern in einem Relaxationsmodell (s. 2.3.3) zu interpretieren. Das Frequenzverhalten kann hier mit wenigen Parametern (4 bei Cole-Cole bzw. 2 bei CPA) wiedergegeben werden. Ein weiterer Vorteil ist, dass einzelne Ausreißer (bei einer Frequenz) sich nicht so deutlich in den Parametern wiederfinden wie bei einzelner Inversion nach Betrag und Phase. Nicht zuletzt können einzelne Parameter mit Materialeigenschaften in Verbindung gesetzt werden. Im Falle des Cole-Cole Modells entspricht  $\rho_0$  dem Gleichstromwiderstand,  $m$  der Aufladbarkeit,  $\tau$  liefert über Relaxationszeit und entsprechender Relaxationslänge Information über die Korngrößen und  $c$  gibt Auskunft über die Breite der Verteilung dieser Korngrößen (siehe auch Abschnitt 2.3.3).

Im einfachsten Fall, wie er im Labor nahezu realisiert werden kann, wird ein Spektrum an einer homogenen Probe bei einer Vielzahl von Frequenzen und über einen weiten Frequenzbereich aufgezeichnet. Eine Apparatur, die das leisten kann, steht beispielsweise im Forschungszentrum Jülich. Hier wurden Messungen im Bereich von 1mHz bis 42kHz (bei über 25 Frequenzen) durchgeführt (z.B. [Münch et al., 2004] oder [Münch et al., 2005]). Die Frequenzabhängigkeit ist damit gut bekannt und ein Relaxationsmodell kann (durch Lösen eines in diesem Fall überbestimmten Gleichungssystems) angepasst werden.

In der Feldmessung treten allerdings mehrere Einschränkungen auf, die eine direkte Interpretation aus den gemessenen Spektren erschweren:

Induktive Kopplung kann im Bereich höherer Frequenzen (z.T. ab 10Hz) nicht hinreichend unterdrückt werden, sodass dieser Effekt rechnerisch kompensiert werden muss. Dazu werden komplexere Relaxationsmodelle angepasst (z.B. multiple Cole-Cole Modelle), die den Kopplungsanteil beschreiben und damit ermöglichen, ihn zu entfernen. Nachteil ist, dass mehr freie Parameter auftreten. Dieser Nachteil wird dadurch verstärkt, dass im Feld technisch bedingt keine Frequenzen über 1000Hz aufgezeichnet werden und sich im unteren Bereich bei etwa 50mHz eine Grenze aufgrund der Messdauer ergibt. Damit stehen etwa 15 Frequenzen einer Anzahl von z.B. 10 freien Parametern (3faches Cole-Cole Modell,  $\rho_0$  nur einmal) gegenüber - ein deutlich schlechteres Verhältnis als im Labor. Weiteres entscheidendes Problem ist, dass der Untergrund im Feld nicht homogen ist. Ein einfacher Schichtfall aus zwei Schichten mit Materialien, die eine Cole-Cole

Abhängigkeit besitzen, können bei Messung an der Oberfläche ein Spektrum liefern, was nicht mit einem Cole-Cole Modell angepasst werden kann. Entsprechend wird es schwerer, die Anteile der induktiven Kopplung zu identifizieren. Eine Induktionskorrektur an den scheinbaren Spektren kann nicht mehr sinnvoll durchgeführt werden, wenn sich die Antwort mehrerer intrinsischer Cole-Cole Spektren so überlagert, dass das Ergebnis nicht mehr Cole-Cole artig ist.

Diese Arbeit legt den Schwerpunkt auf Feldmessungen. Das Vorgehen, das sich bisher hier anbietet, ist eine Inversion der Messdaten aller nicht durch Kopplung gestörter Messwerte gleichzeitig in einem einfachen Relaxationsmodell, oder in Frequenzen getrennt mit anschließender Anpassung für jede Zelle. Das Ergebnis variiert hierbei in der Regel wenig. Vorteil der ersten Variante ist das Glätten einzelner gestörter Werte, weil Betrag und Phase aller Frequenzen zu wenigen Parametern zusammengefasst werden; Vorteil der zweiten Variante ist, dass nicht a priori ein Relaxationsmodell festgelegt werden muss.

Im Folgenden werden Ansätze für die rechnerische Kompensation der EM-Kopplungseffekte beschrieben, deren Anwendung allerdings bisher dem Labor vorbehalten ist. Danach werden Anpassungen an die zwei bedeutenden Modelle Cole-Cole und Constant Phase Angle vorgestellt.

## 5.1 Behandlung der EM-Kopplung

*Madden and Cantwell* [1967] geben eine Faustformel für die Grenzen von Frequenz und Elektrodenabstand, um EM-Kopplung vernachlässigen zu können. Für Dipol-Dipol Konfigurationen sollte demnach gelten:

$$nx(f/\rho)^{\frac{1}{2}} < 200 \quad (5.1)$$

Hierbei werden  $f$  in Hz,  $\rho$  in  $\Omega m$  und  $nx$  in m angegeben.  $x$  steht für die Dipollänge,  $nx$  für den Abstand zwischen Strom- und Spannungsdipol.

Die Formel steht in engem Zusammenhang mit der Induktionszahl  $B_{IN}$ , die sich aus dem Verhältnis von Sender-Empfänger Abstand  $r_{SR}$  und der Skintiefe  $\delta_{SD}$  ergibt:

$$B_{IN} = \frac{r_{SR}}{\delta_{SD}} = \frac{r_{SR}}{\sqrt{\frac{2}{\sigma\mu_0\omega}}} = \sqrt{\frac{\sigma\mu_0\omega}{2}}r \quad (5.2)$$

Für  $nx \approx r_{SR}$  ergibt sich eingesetzt in 5.1 die Forderung  $B_{IN} < 0,4$ .

Für einen Untergrund von  $10\Omega m$  und eine Frequenz von 40Hz liegt das maximale  $nx$  damit bereits bei 100m. Im Messgebiet bei Cuxhaven wurden sogar Werte um  $1\Omega m$  gemessen. Bei 50Hz wird  $nx$  hier bereits auf unter 30m begrenzt. Es ist also notwendig, bei Interpretation des vollen Spektrums, die Kopplung zu berücksichtigen.

Ein möglicher Ansatz ist der eines multiplen Cole-Cole Modells. Bereits in 2.3.3 wurde beschrieben, dass sich für die EM-Kopplung weitere Cole-Cole Terme additiv an das Standardmodell anfügen lassen (2.17). Hierbei erwartet man kleine Werte für  $\tau$  und große für  $c$  (wie bei einer einzelnen Kapazität) im Term, der die Kopplung repräsentiert.



Es gibt allerdings auch den Ansatz, das Grundmodell durch multiplikative Terme zu erweitern. Das Modell erhält dabei die Form

$$\rho(\omega) = \rho_0 \left( 1 - m_1 \left( 1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau_1)^{c_1}} \right) \right) \cdot \left( 1 - m_2 \left( 1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau_2)^{c_2}} \right) \right) . \quad (5.3)$$

Beispiele finden sich in [Major and Silic, 1981] und [Pelton et al., 1978b]. Letztere benutzen auch den kürzeren Ansatz mit

$$\rho(\omega) = \rho_0 \left( 1 - m_1 \left( 1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau_1)^{c_1}} \right) \right) \cdot \left( \frac{1}{1 + (i\omega\tau_2)^{c_2}} \right) . \quad (5.4)$$

Abbildung 5.1 zeigt die Zerlegung von Messdaten in einen Anteil, der der induktiven Kopplung zugeschrieben wird und einen Anteil SIP-Signal. Ohne Kopplungsanteil ergibt sich entsprechend ein einfaches Cole-Cole Modell.

Additive Cole-Cole Terme liefern in erster Ordnung (Ausmultiplizieren des multiplikativen Ansatzes,  $m$  klein) allerdings die gleichen Ergebnisse und sind in der Anpassung numerisch einfacher zu bestimmen, da die Ableitungen nach den Parametern in der Summe von anderen Termen unabhängig bleiben. Diese Variante wird also hier verwendet. Die Anpassung erfolgt in der Form

$$\rho(\omega) = \rho_0 (1 - cc_{IP} - cc_{EM+} - cc_{EM-}), \text{ mit } cc_{IP} = m_{IP} \left( 1 - \frac{1}{1 + (i\omega\tau_{IP})^{c_{IP}}} \right) . \quad (5.5)$$

EM+ und EM- sind analog aufgebaut, nur haben diese Terme sehr niedrige Werte für  $\tau$  und hohe für  $c$ . Um die Anzahl der Parameter zu reduzieren, kann meist  $c = 1$  gesetzt werden. Positive und negative EM-Kopplung unterscheiden sich durch das Vorzeichen von  $m$ . Bei EM+ ist dies positiv, die Phase bleibt folglich negativ und wächst im Betrag, mit EM- können Vorzeichenwechsel auftreten; beides wird beobachtet.

Ein Beispiel aus einer Feldmessung ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Geht man davon aus, dass das Material eine Cole-Cole Frequenzabhängigkeit besitzt, kann der induktive Teil rechnerisch entfernt werden und die nutzbaren Frequenzen erweitern sich erheblich von etwa 40Hz auf 500Hz. Die Zerlegung nach einer Cole-Cole Anpassung mit zwei Termen ist in Abbildung 5.3 dargestellt. In diesem Beispiel wurde ein kleiner Dipolabstand ( $a=2\text{m}$ ,  $n=3$ ) gewählt, damit das für das Signal relevante Material möglichst als homogen angesehen werden kann. Bei größeren Auslagen sind mehrere Schichten am Signal beteiligt, was zur Folge hat, dass bei stark unterschiedlichen Parametern für die Schichten der Kurvenverlauf des IP-Anteils in der Phase stark verbreitert wird. Abbildung 5.4 zeigt den Phasenverlauf der gleichen Messung für  $n = 7$ . Eine Cole-Cole Anpassung ist nicht sinnvoll anzuwenden. Die Effekte mehrerer Schichten auf das Messspektrum werden detaillierter in Unterkapitel 5.2 betrachtet.

Es bleibt festzuhalten, dass selbst bei guter Anpassung eines multiplen Cole-Cole Modells an die Messdaten, die Verwendung hoher Frequenzen kritisch betrachtet werden muss. Es kann durchaus mehrere, ähnlich gute Zerlegungen geben, bei denen sich aber IP- und EM-Anteile merklich unterscheiden. Zumindest aber gibt die Zerlegung einen Eindruck davon, ab welcher Frequenz die EM-Terme signifikant werden und der Gesamtverlauf

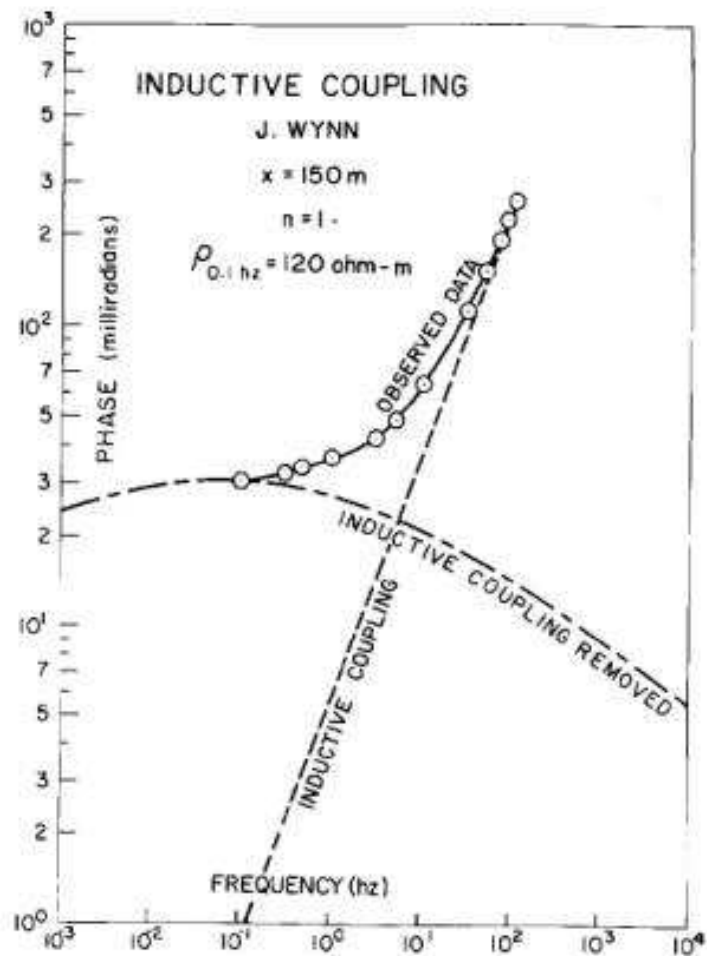


Abbildung 5.1: Gemessenes Phasenspektrum (Kreise) mit Zerlegung in Anteile induktiver Kopplung und Rest. Die Frequenzexponenten wurden mit  $c_1 = 0,25$  bzw.  $c_2 = 1$  angenommen. Abbildung aus [Pelton et al., 1978b].

nicht mehr ausschließlich durch den IP-Anteil beschrieben werden kann. Ein recht sicheres Vorgehen ist damit, die Zerlegung nicht zur direkten Korrektur zu benutzen, sondern nur, um festzustellen, bis zu welcher Frequenz eine Korrektur nicht nötig ist, und weiterhin mit den reinen Messdaten zu arbeiten. Dabei kürzt man natürlich das zur Verfügung stehende Spektrum.

Ein grundlegend verschiedener Ansatz zur Unterscheidung von IP- und EM-Anteil wird in [Xiang et al., 2002] präsentiert und soll deshalb vorgestellt werden. Teile des Ansatzes wurden bereits in [Luo and Zhang, 1998] diskutiert.

## 5.1 Behandlung der EM-Kopplung

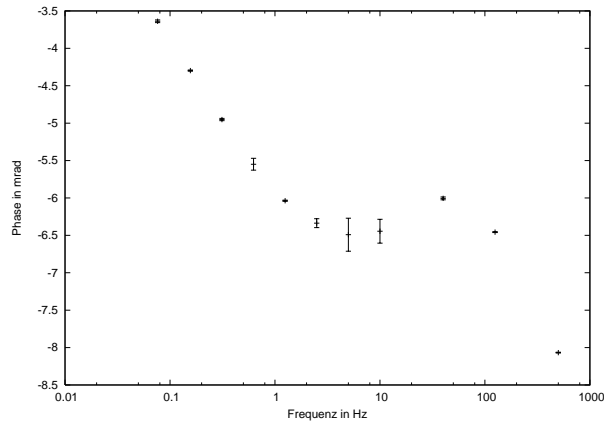


Abbildung 5.2: Messdaten eines Phasenspektrums mit Fehlerbalken. Beträge siehe 5.3. (Fehler dort zu klein für Darstellung.)

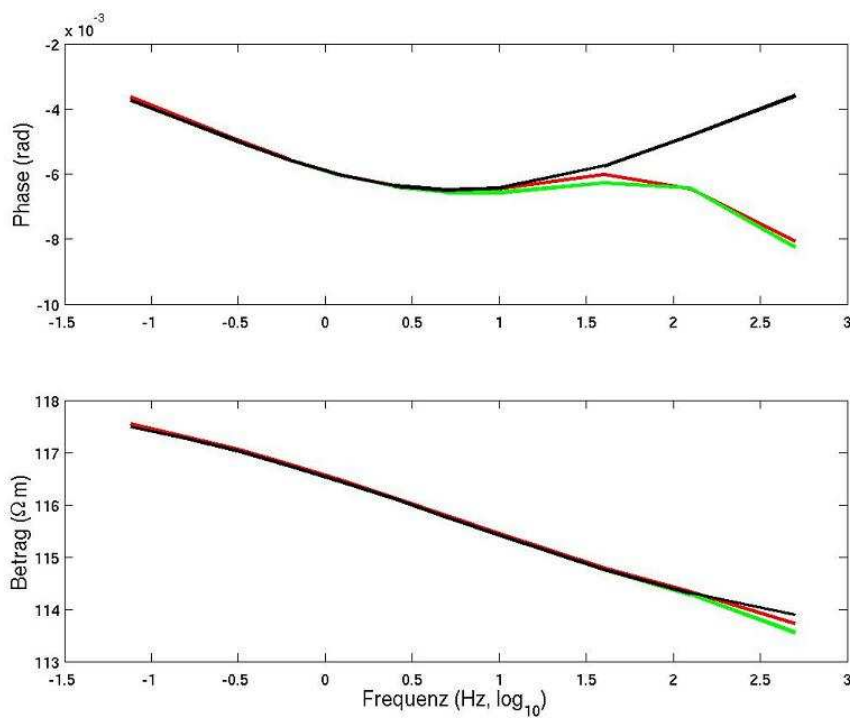


Abbildung 5.3: Spektren aus Abbildung 5.2. Dargestellt sind Phasen (oben) und Beträge (unten). Die Linien gehören zu: rot: Messdaten, grün: Anpassung mit doppeltem Cole-Cole Modell ( $\rho_0 = 118,4\Omega m$ ,  $m_1 = 0,045$ ,  $\tau_1 = 0,03s$ ,  $c_1 = 0,35$ ,  $m_2 = 0,01$ ,  $\tau_2 = 0,0002s$ ,  $c_2 = 0,99$ ), schwarz: IP-Anteil bei Subtraktion des Anteils 2.

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

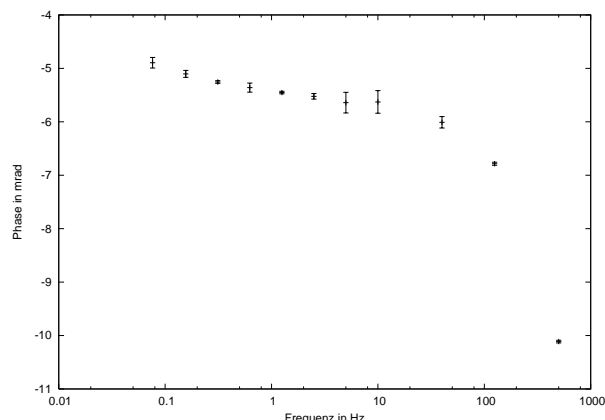


Abbildung 5.4: Messdaten eines Phasenspektrums mit Fehlerbalken.

Die Cole-Cole Formel (2.15) kann aufgrund des nicht ganzzahligen Exponenten  $c$  (wodurch das Modell unendlich dimensional wird) zwar nicht als endlicher Polynombruch dargestellt, aber beliebig gut als solcher genähert werden:

$$Z(\omega) = \frac{b_{n+1}(i\omega)^n + b_n(i\omega)^{n-1} + \dots + b_1}{(i\omega)^n + a_n(i\omega)^{n-1} + \dots + a_1}. \quad (5.6)$$

Eine Auflösung nach den Parametern ( $a_i$  bzw.  $b_i$ ) erweist sich hierbei als nicht trivial, da der Wertebereich nicht sinnvoll eingeschränkt werden kann und sehr ähnliche Lösungen im Parameterraum nicht zwangsläufig nahe beieinander liegen. Ein Standardalgorithmus (z.B. *fminsearch* aus matlab o.ä.) fällt hierbei leicht in lokale Minima und erzielt keine gute Anpassung. Ein Beispiel für eine gute Anpassung (mit  $n = 2$ ) ist in Abbildung 5.5 dargestellt. Die Abweichungen sind einerseits deutlich, andererseits ist das Modell zweiter Ordnung ein sehr einfacher Ansatz.

IP-Antwort auf eine Stufenfunktion im Zeitbereich kann beschrieben werden als

$$E(t) \cong E_0 \left( 1 - \sum_n A_n \exp(-\alpha_n \cdot t) \right). \quad (5.7)$$

Bei der Impedanzbildung kann eine Laplace-Transformation angewendet werden, indem  $L(\exp(-\alpha \cdot t)) = 1/(s + \alpha)$  für  $E$  aus 5.7 und  $L(1, t > 0) = 1/s$  für die Stufenfunktion zu  $I$  benutzt wird (z.B. [Bronstein and Semendjajew, 1991];  $s = i\omega$ ):

$$Z(s) = \frac{E(s)}{I(s)} = Z(0) \left( 1 - \sum_n \frac{A_n \cdot s}{s + \alpha_n} \right) \quad (5.8)$$

Anhand von elektronischen Schaltkreisen wird bestätigt, dass der IP-Teil eines Signals (einem RC-Glied entsprechend) als

$$IP(s) = E_0 \left( 1 - \sum_{k=1}^n \frac{A_k \cdot s}{s + a_k} \right), \quad A_k > 0 \quad (5.9)$$

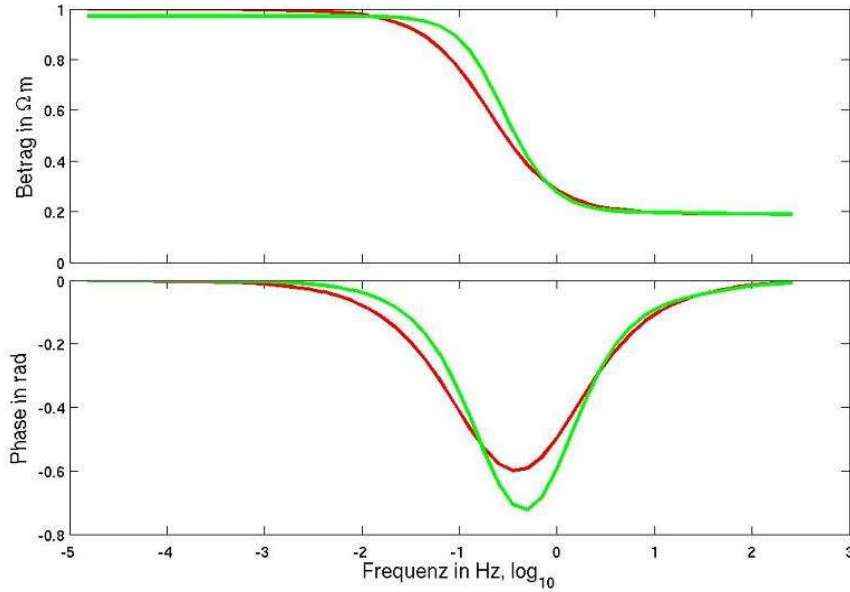


Abbildung 5.5: Spektren für ein Cole-Cole Modell ( $\rho_0 = 1\Omega m$ ,  $m = 0,81$ ,  $\tau = 6,9s$ ,  $c = 0,85$ , rot) und eine Anpassung in zweiter Ordnung (grün). Beispiel nach [Xiang et al., 2002].

dargestellt werden kann, der Teil der elektromagnetischen Kopplung (RL-Glied) als

$$EM(s) = E_0 \sum_{k=1}^m \frac{B_k \cdot s}{s + b_k}, \quad B_k > 0. \quad (5.10)$$

Die Gesamtantwort ergibt sich aus der Summe beider Anteile, wobei die negativen Terme zum IP-Anteil gehören, die positiven beschreiben den EM-Anteil.

Die Entfernung der EM-Kopplung geschieht also in drei Schritten:

Zunächst wird der (auf  $Z(0)$  normierte) Impedanz ein endlich dimensionales Modell der Form

$$Z(s) = \frac{c_0 + c_1 s + \dots + c_n s^n}{d_0 + d_1 s + \dots + 1 \cdot s^n} \quad (5.11)$$

angepasst. Dieses wird dann zerlegt in die Form von 5.8 (normiert ohne  $Z(0)$ ). Mit induktiver Kopplung können hier negative Werte für  $A_n$  auftreten. Nach diesen Vorzeichen wird die Summe zerlegt in die IP- und EM-Anteile, wie in 5.9 und 5.10 (ohne  $E(0)$ ). Das reine IP-Signal ergibt sich schließlich aus den Termen für RC-Glieder und wird allein mit 5.9 beschrieben. In der Regel genügen wenige Glieder (etwa  $n = 2$ ) für eine erste Anpassung, die für weitere Terme nur unter numerischen Schwierigkeiten deutlich verbessert werden kann.

Insgesamt ist dieser Ansatz grundsätzlich eine Alternative. In der Praxis erweist sich die Bestimmung der Koeffizienten des endlich dimensionalen Modells allerdings aus genannten Gründen als instabil: Der Wertebereich der Koeffizienten ist nicht beschränkt,

ähnlich gute Lösungen können sehr unterschiedliche Koeffizienten beinhalten und die Konditionszahl des Gleichungssystems ist aufgrund der Potenzen von  $\omega$  sehr groß. Weiterhin ist der Zusammenhang zwischen der vorzeichenweisen Unterteilung in IP- und EM-Anteil lediglich auf Messdaten an elektrischen Schaltkreisen und deren Charakteristik und weniger durch physikalische Überlegungen begründet. Der mathematische Aufwand ist zudem höher als eine multiple Cole-Cole Anpassung. Vorteil ist allerdings, dass eine sehr allgemeine Methode zugrunde liegt, die keine Modelle außer den elementaren RC- und RL-Gliedern benutzt. Damit ist der potenzielle Anwendungsbereich sehr weitläufig. Im Folgenden wird diese Methode jedoch nicht benutzt.

### 5.2 Cole-Cole Anpassung

Zunächst soll angenommen werden, dass in den Daten keine induktive Kopplung auftritt, diese also korrigiert wurde oder z.B. hinreichend kleine Frequenzen gewählt wurden. Die Inversion soll jeder Zelle im Untergrund ein intrinsisches Cole-Cole Modell zuweisen. Dies kann zum einen dadurch geschehen, dass die Inversion die Daten aller Frequenzen gleichzeitig bearbeitet und intern ein Cole-Cole Untergrundmodell speichert oder es wird frequenzweise modellunabhängig invertiert und anschließend zellenweise eine Anpassung durchgeführt (für Zeitbereichsanwendung siehe [Yuval and Oldenburg, 1997]). Hierbei ist der Vorteil einer modellunabhängigen Inversion nicht zu unterschätzen, da einem an der Oberfläche über inhomogenem Untergrund gemessenem Spektrum keineswegs immer anzusehen ist, ob der Untergrund eher aus Schichten, die ähnlich einem Cole-Cole oder CPA Modell sind, besteht. Ein einfaches Zweischichtmodell soll dies verdeutlichen.

In Abbildung 5.6 ist das potenzielle Messspektrum für ein Modell dargestellt, das aus zwei Schichten mit verschiedenen Cole-Cole Eigenschaften besteht. Die Schichtgrenze befindet sich in 7m Tiefe, der Dipolabstand beträgt 26m, die Dipollänge 2m. Die Cole-Cole Parameter sind  $\rho_0 = 100\Omega m$ ,  $m = 0,2$  und  $c = 0,25$  für beide Schichten. Lediglich  $\tau$  ist unterschiedlich und in der oberen Schicht größer. Die Variation ist von 4 Dekaden (rot,  $1s : 10^{-4}s$ ) über 5 (grün,  $10s : 10^{-4}s$ ) zu 6 (blau,  $100s : 10^{-4}s$ ). Die Betragsspektren liegen übereinander und sind in der Grafik nicht zu unterscheiden.

Während im ersten Fall (rot) noch ein gemeinsames (einfaches) Cole-Cole Modell angepasst werden kann, scheint die zweite Kurve (grün) besser einem CPA-Modell zu folgen, wenn man den Frequenzbereich einer Feldmessung (etwa  $10^{-1}$  bis  $10^2$ Hz) zugrunde legt. Im letzten Fall (blau) trennen sich die Phasenextrema deutlich und man könnte kein einfaches Modell (ggf. ein doppeltes Cole-Cole Modell) anpassen.

Berücksichtigt man die Modellvorstellungen des Cole-Cole Modells (siehe 2.3.3) und geht davon aus, dass bei wachsender Eindringtiefe sich immer weitere Relaxationsverteilungen im Messsignal niederschlagen, erwartet man im Extremfall, dass die unterschiedlichen Prozesse die Kurve zu einem CPA-Spektrum verbreitern. Diese Aussage wird dadurch bestätigt, dass ein Anpassen bei Felddaten von einem einfachen Cole-Cole Modell für Spektren geringerer Pseudotiefen in der Regel (getestet wurde für die Profile B22 und B32 in Krauthausen, sowie eines bei Cuxhaven, siehe Unterkapitel 7.1) besser möglich

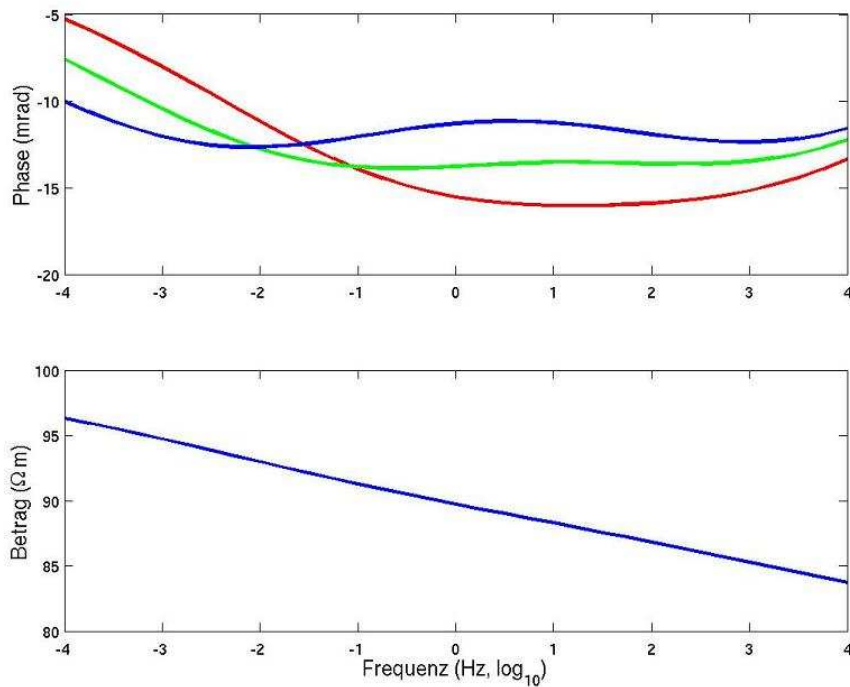


Abbildung 5.6: Synthetische Messdaten, aufgezeichnet über einem Zweischicht-Modell.  $\tau$  variiert. Der Kontrast zwischen den Schichten wächst von rot ( $1 : 10^4$ ) über grün ( $1 : 10^5$ ) zu blau ( $1 : 10^6$ ). Beträge liegen übereinander. Modellwerte siehe Text.

ist als für tiefere Bereiche, bei denen eine Cole-Cole Anpassung trotz doppelter Zahl freier Parameter nur etwa gleich gut gelingt. Mehr hierzu nach der Beschreibung der CPA-Anpassung in 5.3.

Neben Schichten mit unterschiedlichen Werten für  $\tau$  können selbstverständlich auch Variationen in anderen Parametern und in anderen Fällen als horizontaler Schichtung die Spektren für Betrag und Phase so verzerrt werden, dass eine Anpassung mit einem einfachen Cole-Cole Modell nicht möglich ist.

Für die Anpassung eines Cole-Cole Modells an ein Spektrum ist es wichtig zu wissen, wie sich eine Änderung der Parameter auf die Daten auswirkt. Bevor die Sensitivitäten berechnet werden, soll ein Beispiel die Effekte grafisch verdeutlichen. In Abbildung 5.7 werden von den Ausgangswerten  $\rho_0 = 100\Omega m$ ,  $m = 0,4$ ,  $\tau = 1s$  und  $c = 0,25$  (schwarze Kurve) die Parameter einzeln variiert.

Eine Änderung von  $\rho_0$  (hier auf  $150\Omega m$ , rote Kurve) bewirkt eine Verschiebung des Betragsspektrums, die Phase bleibt unverändert.

Bei einer Änderung von  $m$  (hier auf  $0,7$ , grüne Kurve) bleibt im Niederfrequenzbereich der Betrag nahezu konstant und ändert sich stärker mit wachsender Frequenz. Dieser Effekt begründet sich dadurch, dass  $m$  direkt den Hochfrequenz-Grenzwert bestimmt, den DC-Wert nicht ändert. Im Phasenspektrum gibt es hier ( $m$  steigt) größere Beträge und einen leichten zeitlichen Versatz.

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

Eine Änderung von  $\tau$  (hier um vier Dekaden auf 0,0001s, blaue Kurve) versetzt die Spektren entsprechend, hier zu höheren Frequenzen.

Eine Änderung in  $c$  (hier auf 0,5, magentafarbene Kurve) bewirkt eine Variation in der Breite der Relaxationsverteilung. Ein größerer Wert führt hier zu einem steileren Wechsel in der Betragskurve und einem schmaleren Extremum in der Phase.

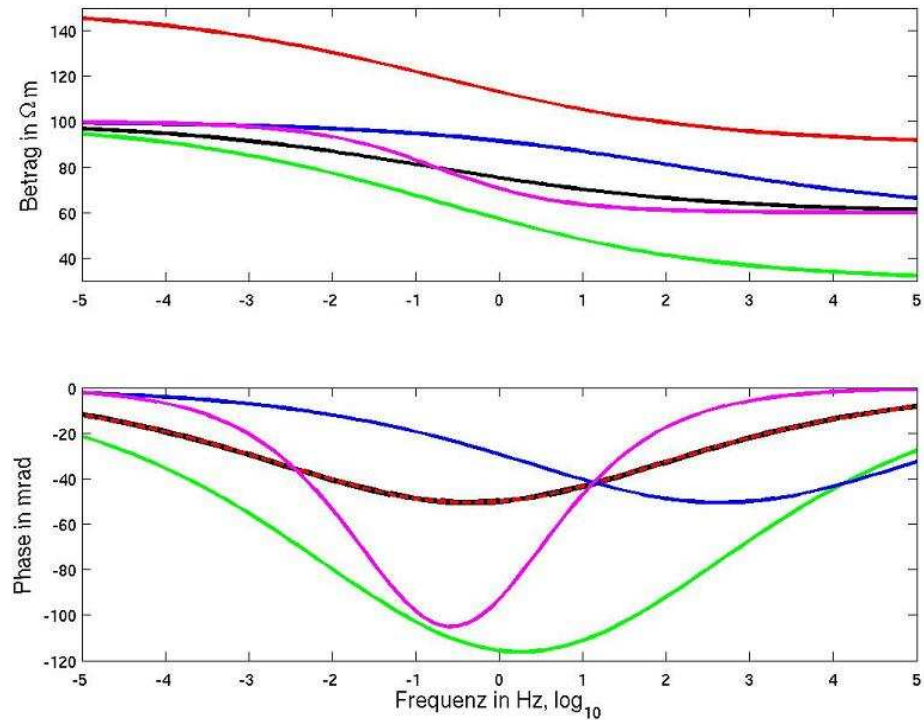


Abbildung 5.7: Betrags- (oben) und Phasenspektren (unten) bei Variation einzelner Cole-Cole Parameter. Ausgangskurve: schwarz, Variation in  $\rho_0$ : rot,  $m$ : grün,  $\tau$ : blau,  $c$ : magenta. Werte siehe Text.

Nach dieser Betrachtung sollen nun die für den Anpassungsvorgang wichtigen Ableitungen der Widerstandsbeträge und Phasen nach den einzelnen Cole-Cole Parametern angegeben werden. Da der elektrische Widerstand hier komplexwertig ist, werden für jeden (der reellen) Cole-Cole Parameter Ableitungen zunächst nach Real- und Imaginärteil gebildet. Aufgrund des weiten Wertebereiches soll allerdings der Logarithmus des Widerstandes gewählt werden. Demnach erfolgen die Ableitungen nach  $\ln|\rho|$  und  $\phi$ , also Logarithmus des Betrags und der Phase (z.B. [Kemna, 2000]). Im ersten Schritt wird die komplexwertige Ableitung von  $\rho$  gebildet, daraus die reellwertige von  $\ln|\rho|$  berechnet, die dann bei der (ebenfalls reellwertigen) Ableitung nach  $\phi$  benötigt wird:



$$\frac{\partial \rho}{\partial \ln \rho_0} = \rho \quad (5.12)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial m} = \rho_0 \left( \frac{1}{1 + (i\omega\tau)^c} - 1 \right) \quad (5.13)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \ln \tau} = -\rho_0 m c \frac{(i\omega\tau)^c}{(1 + (i\omega\tau))^2} \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial c} = -\rho_0 m \frac{\ln(i\omega\tau) \cdot (i\omega\tau)^c}{(1 + (i\omega\tau))^2} \quad (5.15)$$

Mit  $x = \ln \rho_0, m, \ln \tau, c$  ergeben sich dann die reellwertigen Anteile der komplexen Ableitungen über

$$\frac{\partial \ln |\rho|}{\partial x} = \frac{1}{2\rho\bar{\rho}} \left( \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x} \rho + \bar{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = i \left( \frac{\partial \ln |\rho|}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) . \quad (5.17)$$

Die Ableitung des Komplex-Konjugierten entspricht hierbei dem Komplex-Konjugierten der Ableitung, womit alle Größen bestimmt werden können. Die Ableitung im Komplexen kann nun nach 3.55 zusammengesetzt werden als  $\Re + i \cdot \Im$ . Dabei ist für eine Anpassung eines Messspektrums  $\rho = \rho_a$ . Für die Inversion nach intrinsischen Spektren, ist  $\rho$  der komplexwertige Widerstand einer Zelle. Für den Bezug zur gemessenen (komplexen) Spannung  $V_a$  wird noch die Sensitivität  $\partial V_a / \partial \rho$  benötigt, um sie dann mit der Ableitung  $\partial \rho / \partial x$  zu multiplizieren.  $x$  ist hierbei wieder der entsprechende (ggf. logarithmierte) Cole-Cole Parameter. Im Weiteren sollen Real- und Imaginärteil jeweils getrennt betrachtet werden, da sie sehr unterschiedlich variieren.

Für das zuvor beschriebene Modell zeigt Abbildung 5.8 (neben Betrag und Phase in der ersten Zeile) die Ableitungen nach den Parametern. Wie schon in 5.7 zu sehen (Farben jeweils gleich), verschiebt eine Änderung das Betragsspektrum konstant und lässt die Phasenwerte unbeeinflusst. Eine positive Änderung in  $m$  senkt den Betrag, verstärkt zu hohen Frequenzen und ändert die Phasen verstärkt im Bereich des Extremums. Eine Verschiebung zu höheren  $\tau$  verkleinert alle Betragswerte, maximal im Bereich der Wendestelle. Die Phasen werden betraglich bei Frequenzen kleiner der des Phasenextremums kleiner, auf der anderen Seite größer. Auch hier liegen die Extrema im Bereich der Wendestellen. Ein größeres  $c$  bewirkt zu extremalen Frequenzen keinen Unterschied, ebenso wie an Wendestellen der Spektren, wo jeweils ein Vorzeichenwechsel stattfindet. Im Betragsspektrum ist dies einer, bei den Phasen sind es zwei.

Aus dieser Betrachtung wird bereits deutlich, dass die Messdaten nicht nur unterschiedlich stark von den verschiedenen Cole-Cole Parametern abhängen, sondern auch eine zusätzliche Frequenzabhängigkeit besteht. Variiert man beispielsweise  $m$  leicht, so verändern sich zwar die Beträge zu hohen Frequenzen stark, bleiben für niedrige Frequenzen aber praktisch konstant. Die Sensitivitäten zu den Cole-Cole Parametern hängen also von der Frequenz, dem Parameter selbst und auch anderen Cole-Cole Parametern ab.

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

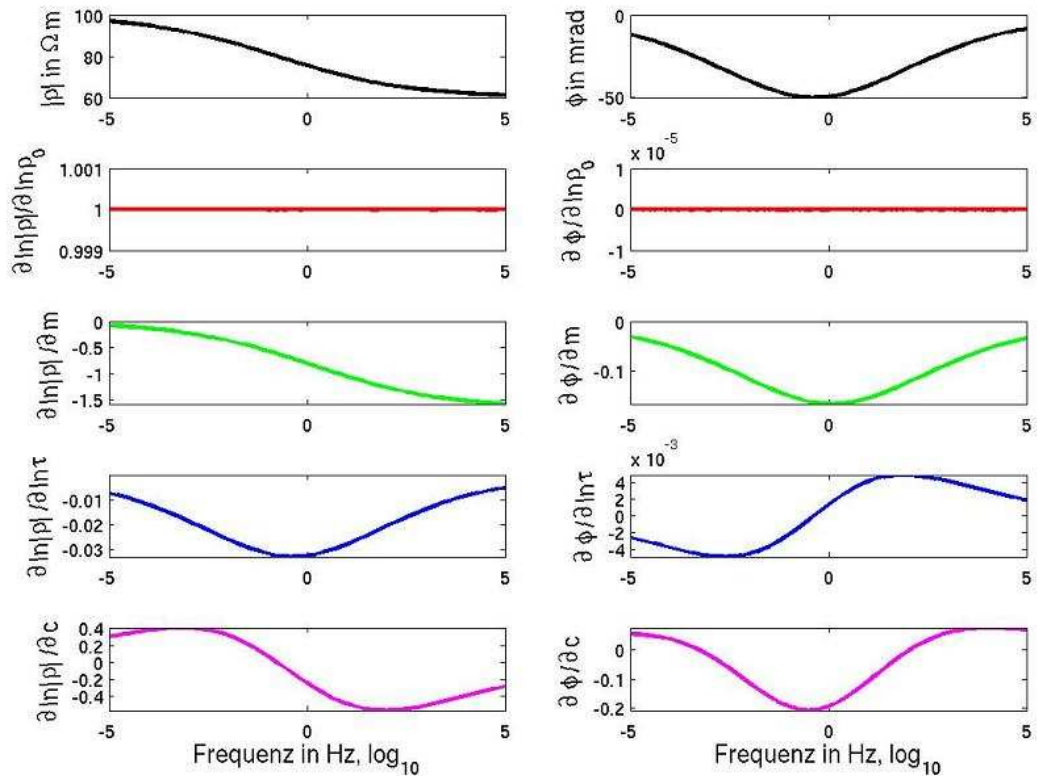


Abbildung 5.8: Erste Zeile: Betrags- (links) und Phasenspektrum (rechts). 2.-5. Zeile: Ableitungen von  $\ln|\rho|$  (links) bzw.  $\phi$  (rechts) nach  $\ln\rho_0$ ,  $m$ ,  $\tau$  und  $c$  (von oben nach unten). Modellwerte siehe Text.

Inwieweit sie trotzdem als lokal konstant angesehen werden können, soll die folgende Überlegung zeigen:

Wir nehmen an, dass zu einem Messdatum ein Modell gefunden werden soll, welches das Datum optimal anpasst. Ein Näherungsmodell liegt vor und auch die lokalen Ableitungen nach den Cole-Cole Parametern. Das Datum der Vorwärtsrechnung auf Basis der Näherung hat eine bestimmte Abweichung von der Messung. Die Frage ist, wie genau das wahre Modell getroffen wird, wenn man unter der Annahme, dass die bekannte, lokale Ableitung konstant bleibt, die nötige Änderung der jeweiligen Cole-Cole Parameter bestimmt.

Angenommen sei eine nötige Betragsänderung von 10%. Abbildung 5.9 stellt die Ergebnisse zusammen. Dabei stellen die durchgezogenen Linien die aus der lokalen Ableitung als notwendig erwarteten Parameteränderungen dar, die Kreise die tatsächlich notwendigen. Blau steht für eine negative Betragsänderung, rot für eine positive.

Im Fall von  $\ln\rho_0$  ist die Ableitung konstant, und mit der erwarteten Parameteränderung produziert man das gewünschte Ergebnis.

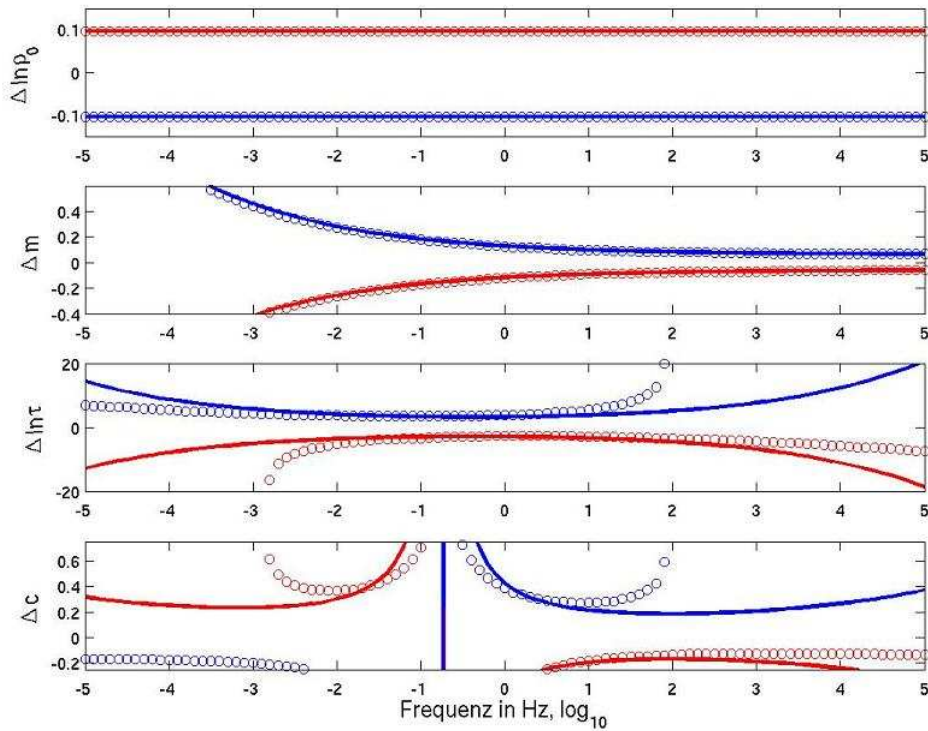


Abbildung 5.9: Nötige Variation im Parameter, um eine Betragsänderung von 10% (rot: positiv, blau: negativ) zu erreichen. Durchgezogen: Aus der lokalen Ableitung erwartet; Kreise: Wirklich benötigt.

$m$  erweist sich ebenfalls als stabil und man trifft das Ziel in guter Näherung.

Für  $\ln \tau$  ist die Übereinstimmung im Bereich der maximalen Sensitivität am besten. Beispielsweise am Rand der niedrigen Frequenzen wird die nötige Parameteränderung zur Betragsverkleinerung aufgrund der mit der Frequenz wachsenden Ableitung überschätzt. Wegen der zu sinkenden Frequenzen (und steigenden Beträgen) abnehmenden Ableitung, wird die nötige Änderung zur Betragsvergrößerung unterschätzt und in der Realität kann z.T. sogar kein passendes  $\ln \tau$  mehr gefunden werden.

Bei  $c$  sind die Verhältnisse noch komplexer und es finden sich große Bereiche schlechter Übereinstimmung.

Bereits hier zeigt sich, wie wichtig es ist, insbesondere für eine gute Anpassung von  $\tau$  und  $c$ , mit einem guten Startmodell zu beginnen. Auch die nötigen Änderungen für eine Phasenverschiebung sollen noch betrachtet werden und sind in Abbildung 5.10 dargestellt.

Eine Änderung von  $\rho_0$  braucht nicht betrachtet zu werden, da sie keine Phasenänderung bewirkt.

Die Übereinstimmung bezüglich  $m$  ist sehr gut.

$\ln \tau$  zeigt zu den äußeren Frequenzbereichen ein stabiles Verhalten, wobei sich die möglichen Parameteränderungen für die gewünschte Phasenverschiebung aufspalten, da zu

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

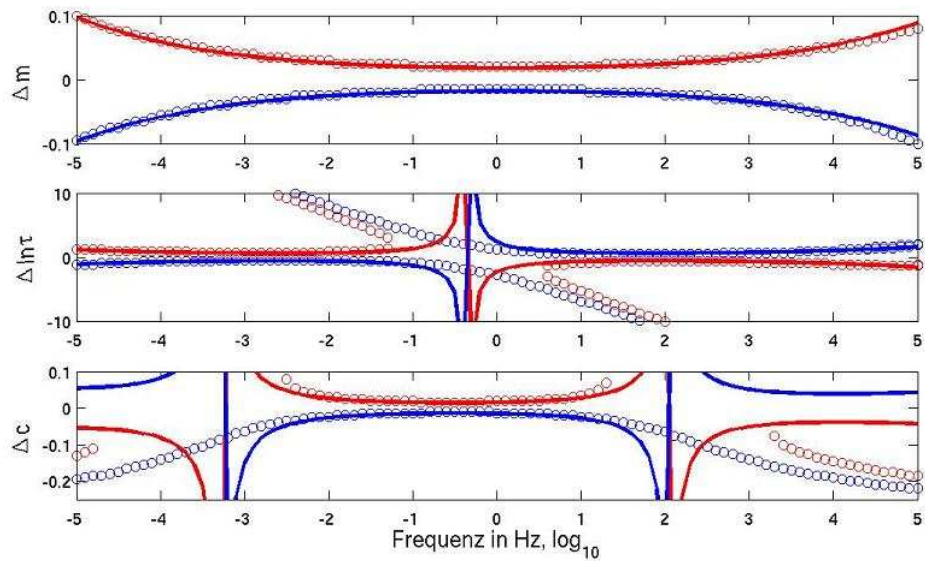


Abbildung 5.10: Nötige Variation im Parameter, um eine Phasenänderung von 3mrad (rot: betraglich positiv, blau: betraglich negativ) zu erreichen. Durchgezogen: Aus der lokalen Ableitung erwartet; Kreise: Wirklich benötigt.

einem Phasenwert jeweils zwei Frequenzen existieren. Im Bereich des Phasenextremums gibt es starke Abweichungen der Kurven.

$c$  hat zwei Nullstellen der Sensitivität im Frequenzbereich (siehe auch Abbildung 5.8), womit um diese Bereiche die notwendige Änderung überschätzt wird. Im mittleren Frequenzbereich ergibt sich eine gute Übereinstimmung.

Insgesamt bleibt also festzuhalten, dass bei Weitem nicht immer ein Messdatum durch Veränderung nur eines bestimmten Cole-Cole Parameters im Modell erreicht werden kann und es insbesondere für die Parameter  $\tau$  und  $c$  wichtig ist, ein gutes Startmodell zu finden. Die Sensitivitäten zu den einzelnen Cole-Cole Parametern variieren im Allgemeinen mit der Frequenz und sind vom Parameter selbst und auch von den restlichen abhängig. Weiterhin sind die Sensitivitäten von Betrag und Phase bezüglich gleicher Parameter oft sehr unterschiedlich, wie z.B. der Betrag stark mit  $\rho_0$  variiert, wobei die Phase konstant bleibt. Es sei noch betont, dass die Kurven in den Abbildungen 5.9 und 5.10 offensichtlich auch vom Modell selbst (zu Anfang erwähnt:  $\rho_0 = 100\Omega m$ ,  $m = 0,4$ ,  $\tau = 1s$  und  $c = 0,25$ ) abhängen.

Im Folgenden sollen zwei synthetische Beispiele gezeigt werden, um die Auswirkungen der unterschiedlichen Inversionsansätze (Frequenzen gemeinsam oder einzeln) auf das Endergebnis vergleichen zu können. Als erstes Modell dient ein Zweischichtfall mit horizontaler Schichtgrenze in einer Tiefe von 7m. Die obere Schicht besitze die Parameter  $\rho_0 = 100\Omega m$ ,  $m = 0,2$ ,  $\tau = 1s$  und  $c = 0,2$ , die untere  $\rho_0 = 10\Omega m$ ,  $m = 0,6$ ,  $\tau = 0,01s$

und  $c = 0,6$ . Es werden verrauschte (1% Betrag, 0,3mrad Phase) Daten von 13 Frequenzen (logarithmisch äquidistant von 1mHz bis 1kHz) invertiert.

In der ersten Variante werden die Daten jeder Frequenz unabhängig in ein Leitfähigkeitsmodell invertiert und anschließend an die Werte jeder Zelle ein Cole-Cole Modell angepasst. Das Ergebnis ist in Abbildung 5.11 dargestellt. Man erkennt deutlich die Schichtung und auch quantitativ stimmen die Ergebnisse gut überein. Lediglich an einzelnen Stellen liefert die Modellanpassung stark vom Modell abweichende Werte. Hier wäre nun eine Glättung über Nachbarzellen möglich.

Die zweite Variante ist die gleichzeitige Inversion aller Frequenzen in ein Cole-Cole Modell. Aufgrund der Abhängigkeiten der Nachbarzellen durch die Regularisierung treten hier keine Ausreißer auf. Das Ergebnis findet sich in Abbildung 5.12.

Als Regularisierung in der ersten Variante bietet sich mehr eine Occam-Glättung an (hier auch verwendet), da leicht schwankende Tiefen der Schichtgrenze bei starken Kontrasten im Bereich der Grenze später eine Cole-Cole Anpassung dort erschweren. Aus Gründen der Vergleichbarkeit wurde auch im zweiten Fall eine Occam-Regularisierung gewählt. Hier ist aber auch eine mehr fokussierende Version unproblematisch, da der mögliche Kontrast direkt in den Cole-Cole Parametern auftritt.

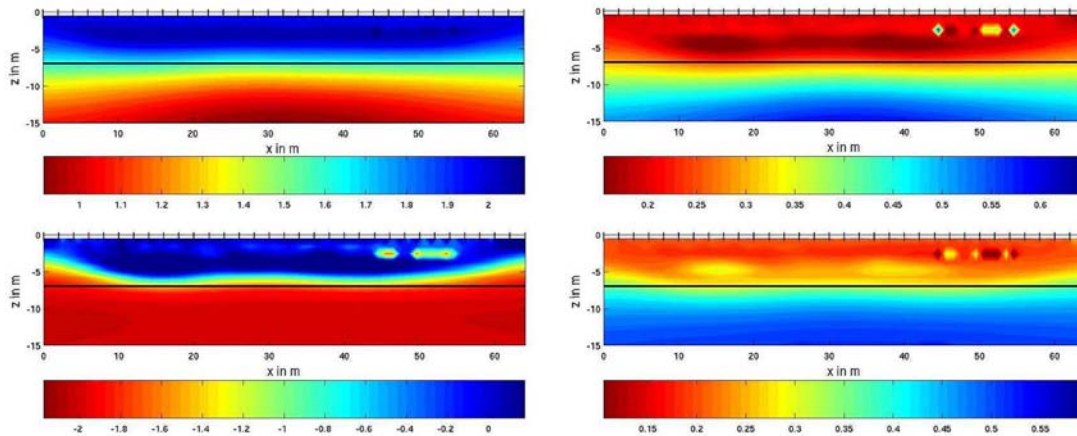


Abbildung 5.11: Verteilung der Cole-Cole Parameter bei Inversion, getrennt für jede Frequenz und anschließender Cole-Cole Anpassung für jede Zelle. Zeilenweise:  $\rho_0$  in  $\Omega m$ ,  $\log_{10} m$ ,  $\tau$  in  $s$ ,  $\log_{10}$  und  $c$ . Modell siehe Text, Schichtgrenze eingezeichnet. Occam-Regularisierung.

Ein zweites synthetisches Beispiel soll eine komplexere Struktur beinhalten. Das Modell besteht aus einem Zweischichtfall (oben:  $\rho_0 = 50\Omega m$ ,  $m = 0,15$ ,  $\tau = 0,01s$  und  $c = 0,2$ ; unten  $\rho_0 = 200\Omega m$ ,  $m = 0,25$ ,  $\tau = 0,1s$  und  $c = 0,4$ ) mit einem eingelagerten gut leitfähigen und polarisierbaren Körper in der oberen Schicht ( $\rho_0 = 20\Omega m$ ,  $m = 0,5$ ,  $\tau = 10s$  und  $c = 0,55$ ). Die Schichtgrenze verläuft nicht horizontal. Die Modellgrenzen sind in den nachstehenden Abbildungen eingezeichnet.

In den Abbildungen 5.13 und 5.14 sind die Inversionsergebnisse für frequenzweise Inversion mit anschließender zellenweiser Cole-Cole Anpassung bzw. gleichzeitiger Inversion

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

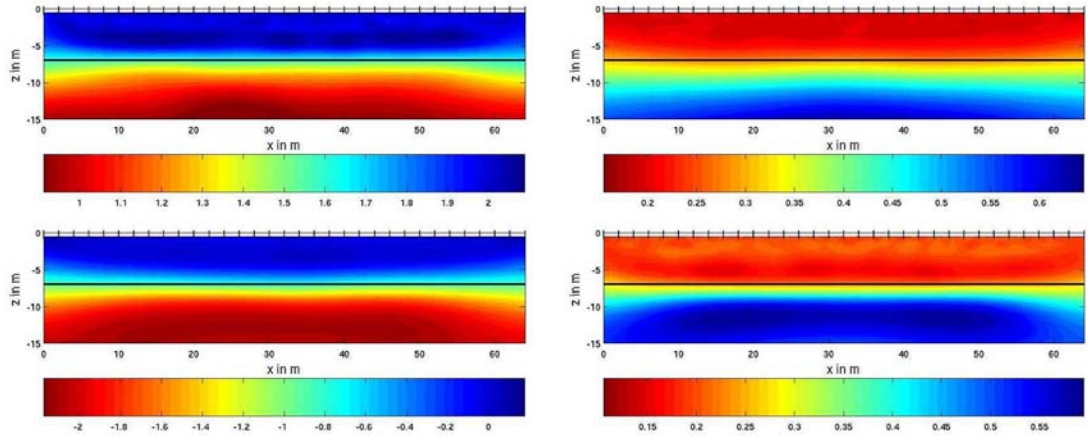


Abbildung 5.12: Verteilung der Parameter bei gleichzeitiger Inversion für alle Frequenzen in Cole-Cole Modelle. Zeilenweise:  $\rho_0$  in  $\Omega m$ ,  $\log_{10} m$ ,  $\tau$  in  $s$ ,  $\log_{10}$  und  $c$ . Modell siehe Text, Schichtgrenze eingezeichnet. Occam-Regularisierung.

aller Frequenzen (wie im ersten Modell) dargestellt. Die Ergebnisse sind vergleichbar, jedoch gibt es einige Vorzüge der Gesamtinversion.

$\rho_0$  wird in beiden Fällen gut reproduziert, auch quantitativ ( $\log_{10}(2) \approx 0,3$ ), die Gesamtinversion zeigt die Grenze deutlicher. Bei  $m$  gilt dasselbe. Hier treten allerdings vermehrt gestörte Zellen in der Einzelfrequenzinversion auf. Bei  $\tau$  trifft die Gesamtinversion den Wert der unteren Schicht besser. In beiden Fällen ist die Schichtgrenze nicht gut zu erkennen. Bei  $c$  finden sich die markantesten Unterschiede. Während bei der Gesamtinversion dieser Parameter gut wiedergegeben wird, ist die Verteilung im Bereich des Körpers stark gestört. Hier tritt das zentrale Problem der Inversion einzelner Frequenzen auf: Die Kontraste sind für verschiedene Frequenzen unterschiedlich ausgeprägt, und bei der Anpassung an ein Cole-Cole Modell pro Zelle treten damit Probleme auf.

Es bleibt also festzuhalten, dass die Gesamtinversion der Inversion einzelner Frequenzen vorzuziehen ist, wenn ein Untergrundmodell, das aus Strukturen mit jeweils intrinsischem Cole-Cole Verhalten besteht, angenommen werden kann. Dies gilt insbesondere, wenn einzelne Parameter schlecht aufgelöst sind und damit bei (zellenweise) unabhängiger Anpassung Nachbarzellen aufgrund kleiner Unterschiede in Betrag und Phase ggf. deutlich verschiedene Cole-Cole Parameter erhalten. Dieser Fall tritt besonders im Zusammenhang mit kleinen Aufladbarkeiten auf, wenn  $\tau$  und  $c$  stark variiert werden können, ohne die Spektren deutlich zu verändern.

Abschließend soll ein Feldbeispiel gezeigt werden. Es handelt sich dabei um das Profil B32 des Testfeldes Krauthausen (s. 7.1.1). Verwendet werden Frequenzen von 10Hz bis etwa 76mHz. Aufgrund der größeren Phasenfehler bei zunehmender Frequenz variieren die angenommen Fehler zur Gewichtung von 0,3 bis 2,0mrad in der Phase bei konstanten 1% im Betrag.

Abbildung 5.15 zeigt das Inversionsergebnis für gleichzeitige Inversion aller Frequenzen (bei Occam-Regularisierung).  $\rho_0$  kann hierbei mit dem Inversionsergebnis für den Be-

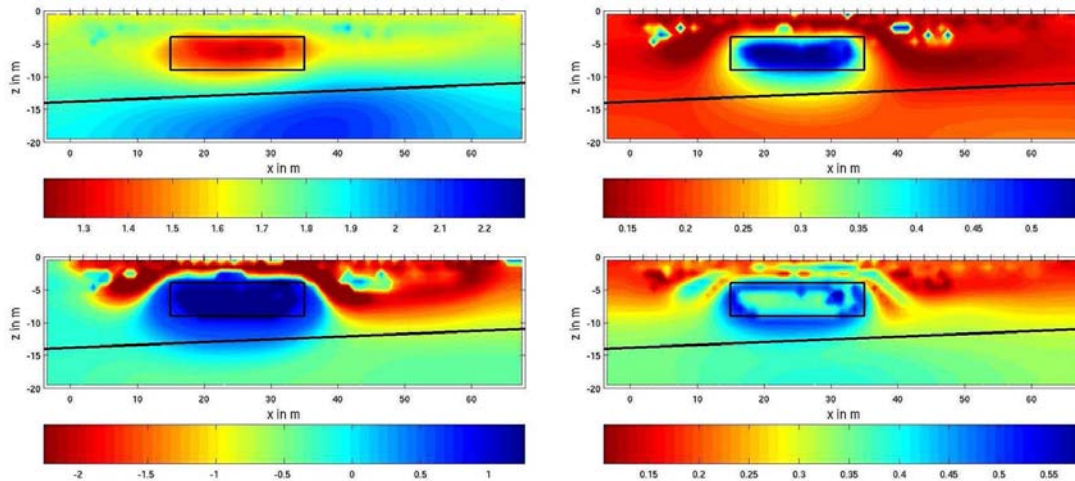


Abbildung 5.13: Verteilung der Parameter bei Inversion, getrennt für jede Frequenz und anschließender Cole-Cole Anpassung für jede Zelle. Zeilenweise:  $\rho_0$  in  $\Omega\text{m}$ ,  $\log_{10} m$ ,  $\tau$  in  $s$ ,  $\log_{10}$  und  $c$ . Modell siehe Text, Gebietsgrenzen eingezeichnet. Occam-Regularisierung.

trag aus Abbildung 4.31 (oben links) verglichen werden. Die Strukturen stimmen sowohl qualitativ als auch quantitativ gut überein.  $m$  ist in Oberflächennähe mit Werten um 4 bis 8% wie erwartet gering, auch in größerer Tiefe besitzt das Material keine große Aufladbarkeit. Der Parameter erreicht hier Werte um 15%. Bemerkenswert ist, dass die Strukturen für  $m$ ,  $\tau$  und  $c$  etwa gleich liegen, sich aber von  $\rho_0$  unterscheiden. In den drei Parametern ist der Untergrund, abgesehen von einer dünnen Deckschicht, fast homogen. Für  $\tau$  ergeben sich Werte von etwa 0,15s bis 1s in der Tiefe, für  $m$  liegen diese bei 0,1 bis 0,2. An der Oberfläche finden sich Relaxationszeiten von 0,1s bis 0,02s, Frequenzexponenten von 0,2 bis 0,4. Aufgrund der recht geringen Werte für  $m$  ist neben diesem  $\rho_0$  der aussagekräftigste Parameter.

Um einen Eindruck zu gewinnen, wie gut die Anpassung durch das Untergrundmodell an die Messdaten gelingt, werden in Abbildung 5.16 beispielhaft für 1,25Hz die gemessenen und aus dem Cole-Cole Modell berechneten Pseudosektionen dargestellt. Die gemessenen Daten der ersten Zeile stimmen dabei auf den ersten Blick mit den errechneten der zweiten Zeile gut überein; quantifiziert wird die Anpassung in Zeile 3. Die Fehler im Betrag liegen meist deutlich unter einem Prozent, an den Randbereichen werden Werte um 2% beobachtet. Ähnliches gilt für die Phase. Hier liegen die Abweichungen meist unter 0,4mrad, selten bis 1mrad.



## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

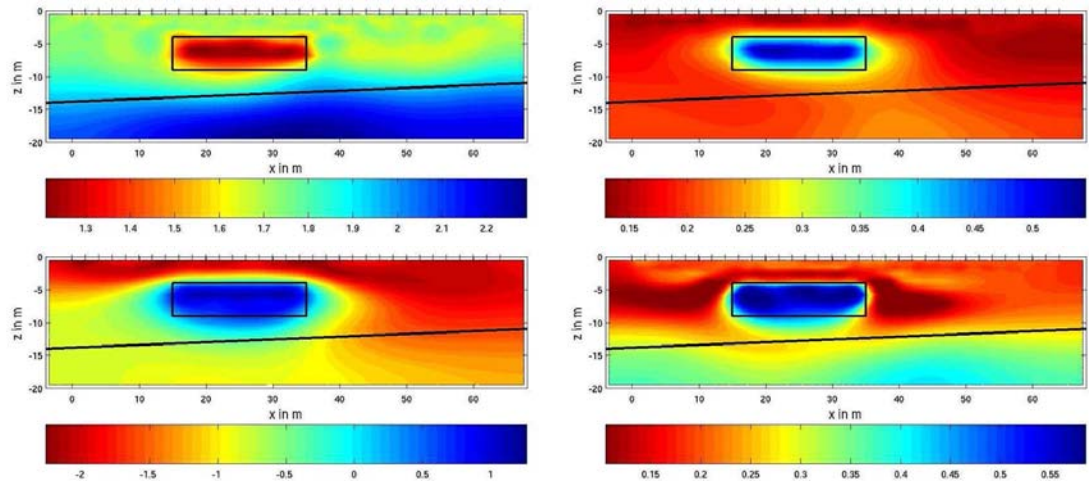


Abbildung 5.14: Verteilung der Parameter bei gleichzeitiger Inversion für alle Frequenzen in Cole-Cole Modelle. Zeilenweise:  $\rho_0$  in  $\Omega m$ ,  $\log_{10} m$ ,  $\tau$  in  $s$ ,  $\log_{10}$  und  $c$ . Modell siehe Text, Gebietsgrenzen eingezeichnet. Occam-Regularisierung.

Zur weiteren Verdeutlichung soll ein Spektrum herausgegriffen werden. Es handelt sich um die Daten zur Elektrodenkonfiguration mit Sender: 13-14, Empfänger: 21-22, also dem Pseudopunkt  $x = 33m$ ,  $z = -8m$  in Abbildung 5.17. Gezeigt ist der Verlauf der Messdaten (rot) sowie der Spektren aus der Vorwärtsrechnung nach Einzelfrequenzinversion (blau) bzw. Gesamtinversion (grün).

Man sieht, dass beide Verfahren das Spektrum über den gesamten Frequenzbereich unter einem Prozent Fehler anpassen. Dabei liefert die Gesamtinversion ein wesentlich glatteres Verhalten, das auch mehr dem spektralen Verlauf der Messdaten ähnelt; die Einzelinversion dagegen passt die Einzeldaten noch besser an, zeigt aber in den Daten, wie erwartet, ein unruhiges Spektralverhalten. Um mit wenigen Parametern das Spektrum zu beschreiben, bietet sich somit die Gesamtinversion an.

Selbst Felddaten lassen sich somit über eine Cole-Cole Inversion gut anpassen, allerdings ist das hydrogeologische Testfeld Krauthausen in diesem Fall aufgrund der geringen Aufladbarkeiten kein optimales Testgebiet. Eine Müllhalde mit Metallteilen o.ä. wäre ein günstigeres Ziel gewesen, aufgrund der höheren Parametervariationen.

Abschließend sei erneut darauf hingewiesen, dass bei der Gesamtinversion aller Frequenzen eine Auffassung der Messwerte als zwei reelle Größen mit einzelnen Fehlern der einer komplexwertigen Variablen mit einem gemeinsamen Fehler deutlich vorzuziehen ist (s.a. Diskussion in 3.2.2 um Gleichung 3.36). Insbesondere bei kleinen Aufladbarkeiten besteht ansonsten die Gefahr, dass durch eine schnelle Anpassung von  $\rho_0$  die Beträge der Messdaten gut wiedergegeben werden und dann auch der Gesamtfehler als hinreichend reduziert angesehen wird, ohne dass die weiteren drei Parameter genügend reproduziert werden. Bei getrennter Anpassung wird gewährleistet, dass sowohl Beträge als auch Pha-



sen gut reproduziert werden. Dabei ist eine gute Phasenanpassung entscheidend, um das richtige Modell für  $m$ ,  $\tau$  und  $c$  zu finden.

Unabhängig von diesem Ansatz, gibt es im Bereich der Glättungsbedingung noch eine Einflussmöglichkeit, um Variationen der Parameter verschieden zu fördern. Schon aufgrund der verschiedenen Dimensionen der Parameter müssen Gewichtungen eingeführt werden. Durch stärkere Glättung von  $\rho_0$  im Vergleich z.B. zu  $c$ , erhält  $c$  über ein größere Anzahl von Iterationsschritten (das zur Konvergenz notwendige  $\rho_0$  wird langsamer erreicht) die Möglichkeit, Kontraste auszubilden.

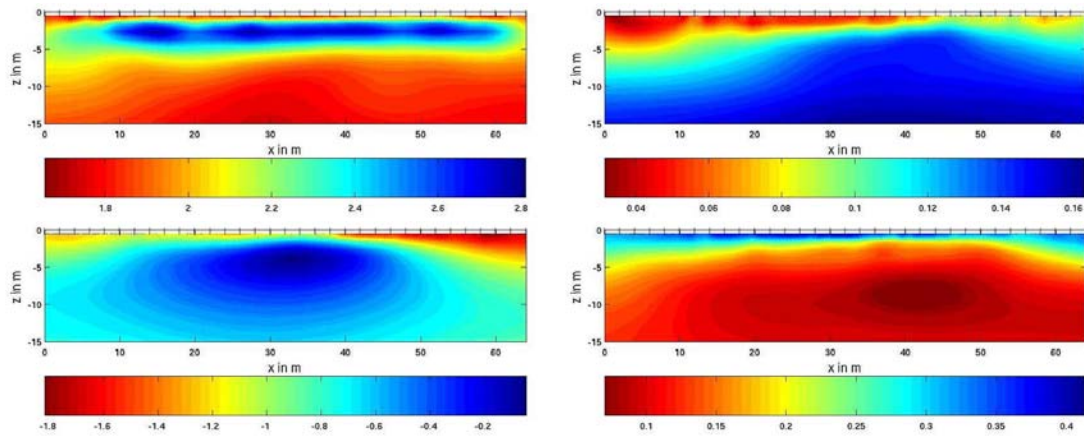


Abbildung 5.15: Verteilung der Parameter bei gleichzeitiger Inversion für alle Frequenzen in Cole-Cole Modelle. Zeilenweise:  $\rho_0$  in  $\Omega m$ ,  $\log_{10}(m)$ ,  $m$ ,  $\tau$  in s,  $\log_{10}(m)$  und  $c$ . Grundlage sind Messdaten zum Profil B32 des Testfeldes Krauthausen.

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

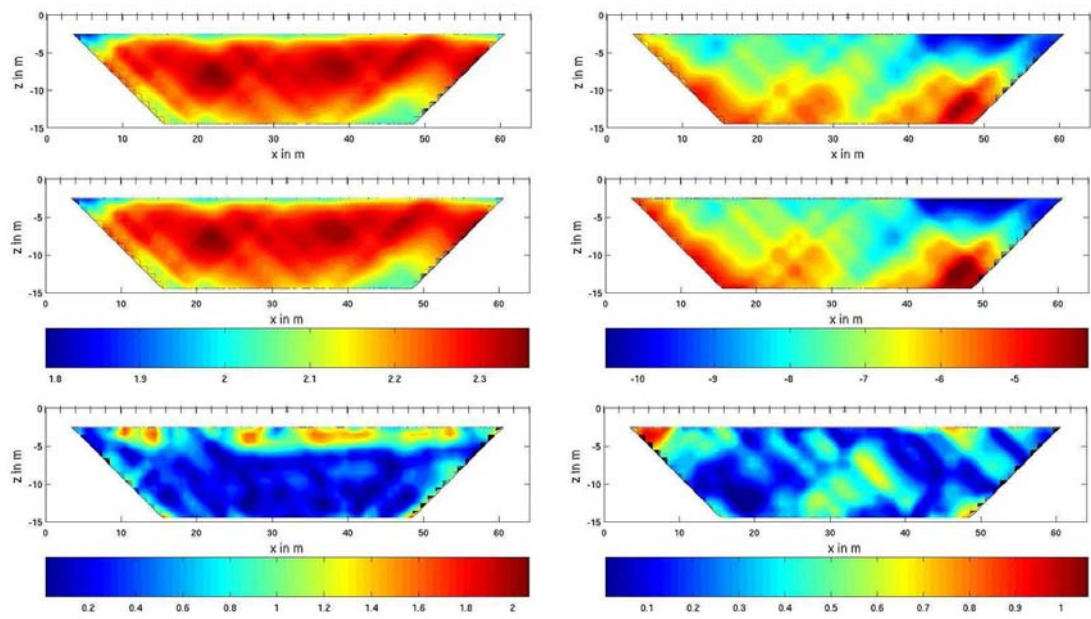


Abbildung 5.16: Vergleich der Pseudosektionen zu 1,25Hz. Dargestellt sind Messdaten (1. Zeile), synthetische Daten aus dem Cole-Cole Modell nach Inversion aller Frequenzen gleichzeitig (2. Zeile) und Abweichungen dazwischen (3. Zeile). Beträge in  $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ , Phasen in mrad, Fehler in % bzw. mrad.

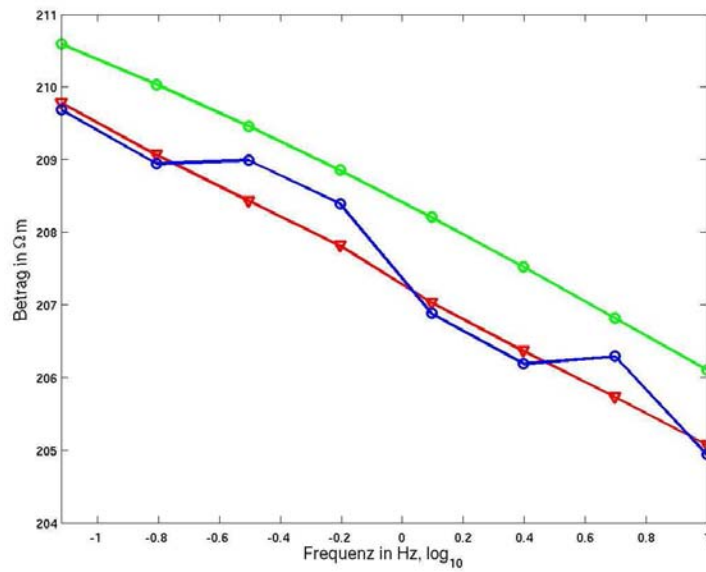


Abbildung 5.17: Vergleich eines Spektrums im B32-Profil. Dargestellt sind die scheinbaren Widerstände (in  $\Omega m$ ) aus der Messung (rot) sowie aus der Vorwärtsrechnung nach Einzelfrequenzinversion (blau) bzw. gleichzeitiger Cole-Cole Inversion aller Frequenzen (grün). Pseudopunkt  $x = 33m$ ,  $z = -8m$  (siehe Abbildung 5.16).

### 5.3 Constant Phase Angle Anpassung

Das CPA Modell wurde bereits in 2.3.3 beschrieben. Betrag und Phase gehorchen den Beziehungen aus Gleichung 2.20. Im Komplexen schreibt sich die Frequenzabhängigkeit des spezifischen Widerstandes als

$$\rho(\omega) = \rho_n \left( \frac{\omega_0}{i\omega} \right)^b . \quad (5.18)$$

Hierbei ist  $\rho_n$  der Betrag, der für  $\omega = \omega_0$  angenommen wird.  $\omega_0$  ist hierbei eine wählbare Referenzfrequenz. Je kleiner man  $\omega_0$  wählt, umso mehr kann  $\rho_n$  als Gleichstromwert angesehen werden. Im Folgenden wird daher  $\omega_0 = 2\pi \cdot 1mHz$  gesetzt. In der Literatur findet man häufiger Werte um 1Hz. Für die Anpassung ist die Wahl ohne Bedeutung, da die Spektren, die durch eine Verschiebung von  $\omega_0$  um einen Faktor  $a$  entstehen, durch entsprechende Korrektur von  $\rho_n$  exakt ineinander überführt werden können:

$$\rho(\omega) = \rho_n \left( \frac{\omega_0}{i\omega} \right)^b = \rho_n \left( \frac{a\omega_0}{i\omega} \right)^b a^{-b} = \rho'_n \left( \frac{\omega'_0}{i\omega} \right)^b . \quad (5.19)$$

Die Möglichkeiten der Anpassung eines CPA-Modells sind aufgrund der lediglich zwei freien Parameter beschränkt, im Gegenzug ist die numerische Umsetzung einfacher. Insbesondere aufgrund der glatten Ableitungen konvergiert eine Inversion sehr schnell im Vergleich zu einer Cole-Cole Anpassung. Auch für das CPA-Modell soll die Auswirkung einer Parameteränderung auf Betrags- und Phasenspektrum demonstriert werden. In Abbildung 5.18 sind jeweils drei Kurven in Betrag und Phase dargestellt. Die Ausgangskurve für ein Modell mit  $\rho_n = 100\Omega m$ ,  $b = 0,01273$  ( $\rightarrow \phi \approx -20mrad$ ) ist in schwarz aufgetragen ( $\omega_0 = 2\pi \cdot 1mHz$ ).

Eine Änderung auf  $\rho_n = 150\Omega m$  verschiebt das Betragsspektrum parallel, sodass nun bei  $\omega = \omega_0$  ein Betrag von  $150\Omega m$  erreicht wird. Die Phasen bleiben unverändert.

Vergrößert man  $b$  um 50% auf 0,01910, so verschiebt sich das Phasenspektrum parallel, die Betragskurve wird in diesem Fall nur leicht beeinflusst. Die Gerade (im Logarithmischen) verläuft bei  $\omega = \omega_0$  durch denselben Punkt, nun aber steiler.

Die Ableitungen ergeben sich unmittelbar aus den Gleichungen 2.20. Dabei gilt:

$$\frac{\partial \ln |\rho|}{\partial \ln \rho_n} = 1 \quad (5.20)$$

$$\frac{\partial \ln |\rho|}{\partial b} = \ln \left( \frac{\omega_0}{\omega} \right) \quad (5.21)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \ln \rho_n} = 0 \quad (5.22)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial b} = -\frac{\pi}{2} . \quad (5.23)$$

Die Phase hängt somit direkt proportional mit  $b$  zusammen, der Betrag mit  $\rho_n$ . Eine Phasenabhängigkeit von  $\rho_n$  ist nicht gegeben; die Betragsabhängigkeit von  $b$  ist im Vergleich zu der von  $\rho_n$  gering, um  $\omega = \omega_0$  ist praktisch keine Abhängigkeit mehr gegeben.

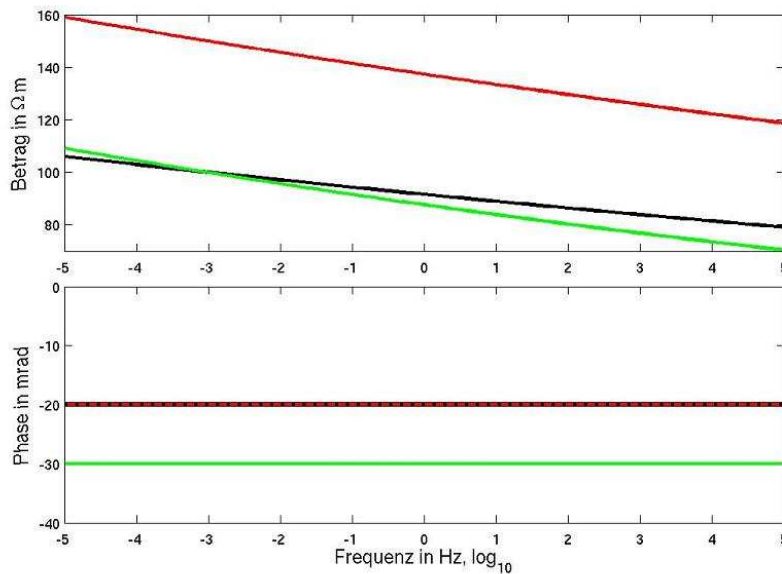


Abbildung 5.18: Betrags- (oben) und Phasenspektren (unten) bei Variation einzelner CPA Parameter. Ausgangskurve: schwarz, Variation in  $\rho_n$ : rot,  $b$ : grün. Werte siehe Text.

Als Folge müssen beide Parameter gut angepasst werden, um ein Spektrum in Betrag und Phase zu reproduzieren (bei CPA-Verhalten des wahren Modells). Es gibt auch aufgrund der glatten Ableitungen keine stark verschiedenen Sätze von Parametern, die ein ähnliches Spektrum liefern. Man kann also erwarten, dass hier die Unterschiede einer zellenweisen Anpassung von Modellen an die Ergebnisse von Einzelfrequenzinversionen weniger Sprünge aufweisen und mehr den Ergebnissen der Gesamtinversion gleichen, als dies bei der Cole-Cole Anpassung der Fall war.

Im Folgenden sollen analog zu der Cole-Cole Anpassung zunächst zwei synthetische Modelle gezeigt werden. Erstes Modell ist erneut ein Zweischichtfall mit einer Grenze in 7m Tiefe. Die obere Schicht besteht aus Material mit  $\rho_n = 100\Omega m$  und  $\phi = 15mrad$  (zur besseren Anschauung im Weiteren anstelle von  $b$  angegeben), die Parameter der unteren Schicht sind  $\rho_n = 10\Omega m$ ,  $\phi = 40mrad$ . Abbildung 5.19 zeigt die Inversionsergebnisse im Vergleich für Inversion einzelner Frequenzen nach Betrag und Phase mit anschließender Anpassung und für direkte Inversion nach CPA-Modellen aller Frequenzen gleichzeitig. In den Beträgen wird die Schichtgrenze gut wiedergegeben und auch quantitativ wird der Kontrast gut reproduziert. In der Phase ist das Modell aus der Gesamtinversion etwas kontrastreicher und erreicht quantitativ eher die Modellwerte, allerdings ist die obere Schicht etwas gestört. Insgesamt liefern beide Varianten gute Ergebnisse und stimmen insbesondere im Betrag fast vollständig überein. Wie schon für das Cole-Cole Modell wurden 13 logarithmisch äquidistante Frequenzen zwischen 1mHz und 1kHz mit je 329 Messwerten bei 33 benutzten Elektroden mit 2m Abständen (entspricht Felddauslage) simuliert. Die Daten wurden zusätzlich mit Gausschem Rauschen belegt (1%, 0,3mrad).

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

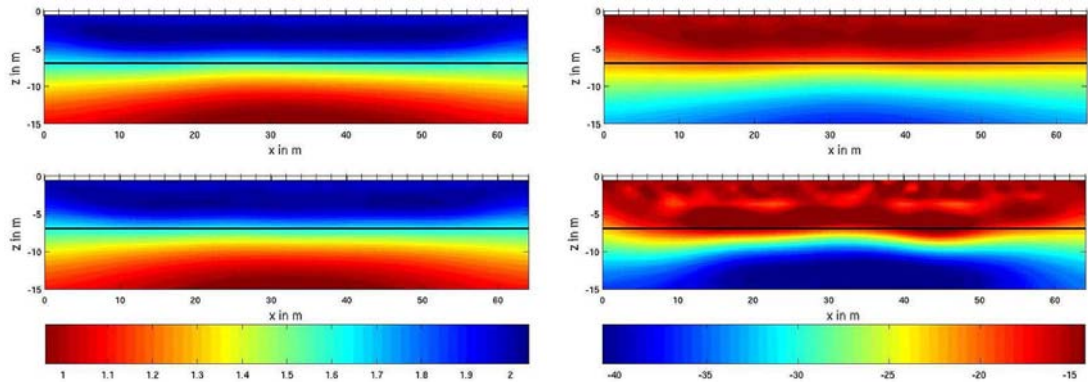


Abbildung 5.19: Verteilung der Parameter bei Inversion der einzelnen Frequenzen mit anschließender Anpassung (oben) oder gleichzeitiger Inversion aller Frequenzen (unten). Dargestellt sind  $\rho_n$  ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ ) (links) und  $\phi$  (mrad) (rechts).

Als zweites Modell dient eine komplexere Struktur, die in der Form des zweiten Beispiels der Cole-Cole Anpassung entspricht. Die obere Schicht des Zweischichtfalls besitzt die Parameter  $\rho_n = 50\Omega m$  und  $\phi = -10\text{mrad}$ , die untere Schicht  $\rho_n = 200\Omega m$  und  $\phi = -20\text{mrad}$ . Der gut leitfähige Störkörper besteht aus Material mit  $\rho_n = 20\Omega m$  und  $\phi = -40\text{mrad}$ . Unter den gleichen Bedingungen wie im ersten Beispiel wird die Inversion (mit Occam-Regularisierung) durchgeführt. Das Ergebnis ist in 5.20 dargestellt.

Die unterschiedlichen Varianten der Anpassung ähneln sich wiederum im Ergebnis. Im Betrag ist diesmal die unabhängigere Zellenanpassung etwas kontrastreicher, in der Phase die Gesamtinversion. Ausreißer in den Zellen -wie noch in der Cole-Cole Anpassung- finden sich aus den bereits genannten Gründen nicht mehr. Für beide Varianten wird sowohl in  $\rho_n$  als auch in der Phase der Störkörper in der Lage und im Parameterwert gut reproduziert, ebenso wie die obere Schicht. Die untere Schicht wird aufgrund nachlassender Sensitivität schlechter aufgelöst; der Grenzverlauf ist in  $\rho_n$  noch gut zu erkennen.

In Abbildung 5.21 werden die Pseudosektionen für 1Hz verglichen. Dabei entsprechen die simulierten Messdaten (1. Zeile) praktisch denen aus der Gesamtanpassung (2. Zeile). Die Phasen sind noch besser angepasst als die Beträge, was aus den invertierten Untergrundmodellen (Abbildung 5.20, 2. Zeile) nicht unmittelbar zu sehen ist. Es wird sowohl in Betrag als auch in der Phase als RMS-Wert das Rauschniveau (1% bzw. 0,3mrad) erreicht, womit die Anpassung grundsätzlich als gleich gut zu bewerten ist; die Phasenabweichungen verteilen sich allerdings homogener über das Gebiet der Pseudosektion. Die stärkere Abweichung im Betrag deckt sich mit dem Bereich des Störkörpers.

### 5.3 Constant Phase Angle Anpassung

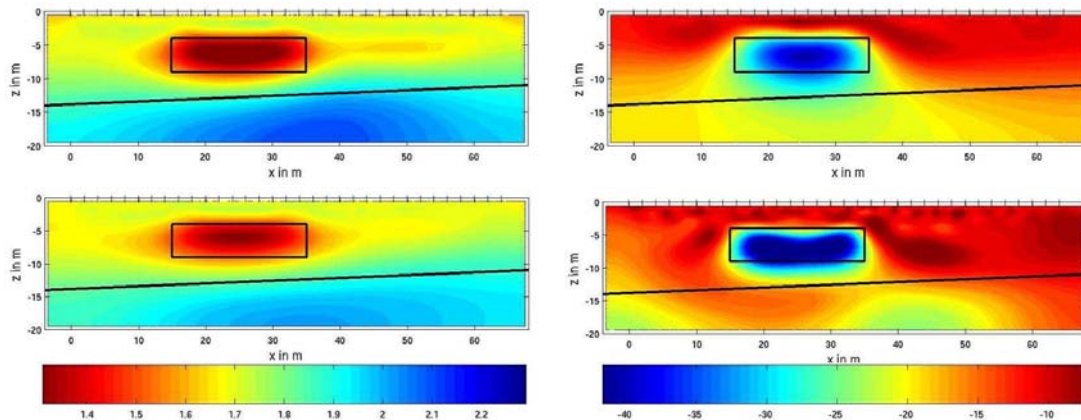


Abbildung 5.20: Verteilung der Parameter bei Inversion der einzelnen Frequenzen mit anschließender Anpassung (oben) oder gleichzeitiger Inversion aller Frequenzen (unten). Dargestellt sind  $\rho_n$  ( $\Omega m, \log_{10}$ ) (links) und  $\phi$  (mrad) (rechts).

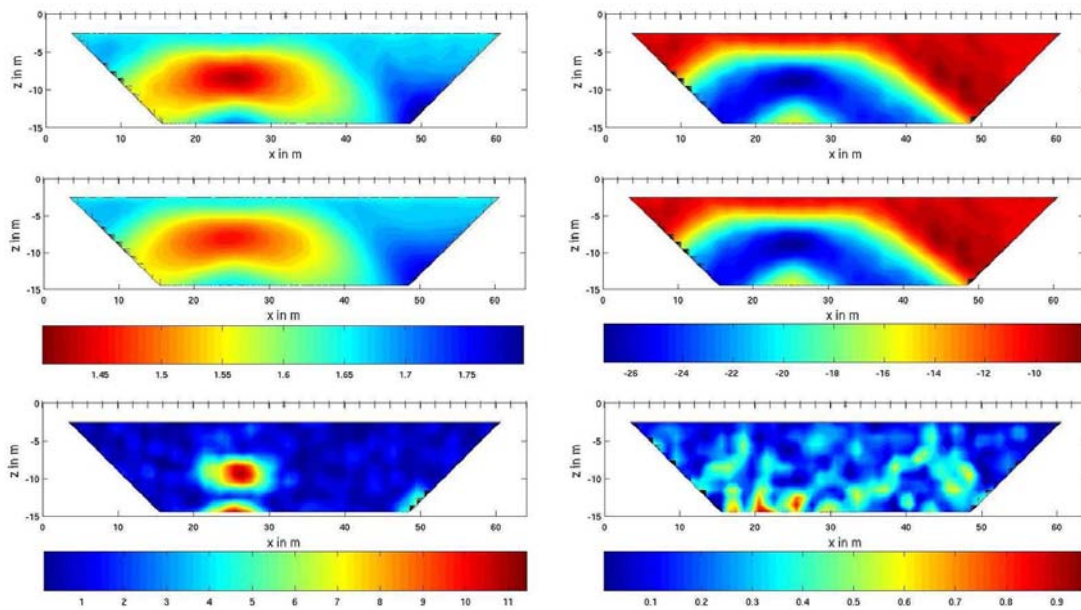


Abbildung 5.21: Vergleich der Pseudosektionen zu 1Hz. Dargestellt sind synthetischen Messdaten (1. Zeile), synthetische Daten aus dem CPA Modell (2. Zeile) und Abweichungen dazwischen (3. Zeile). Beträge in  $\Omega m, \log_{10}$ , Phasen in mrad, Fehler in % bzw. mrad.

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

Als Nächstes sollen Felddaten betrachtet werden. Es sind dieselben Daten, wie schon bei der Cole-Cole Anpassung - die des Profils B32 aus dem Testfeld Krauthausen. Die Inversion wurde erneut für die Einzelfrequenzinversion mit anschließender Anpassung sowie für eine Gesamtinversion durchgeführt.

Das Ergebnis für die Parameterverteilung im Untergrund ist in Abbildung 5.22 dargestellt. In  $\rho_n$  stimmen beide Varianten überein, und es gibt eine große Ähnlichkeit zu den entsprechenden Betragswerten aus Abbildung 4.31.

In der Phase (umgerechnetes  $b$  des CPA-Modells) gibt es zwar deutliche Unterschiede in den Varianten, insbesondere die oberflächennahen Strukturen sind jedoch gut vergleichbar. Insgesamt produziert die Variante der Gesamtinversion mehr Kontrast und zieht den angedeuteten Halbraum kleinerer Phasen im Fall der Einzelinversion zu einer Schicht zusammen, die deutlich kontrastreicher ist (auch andere Skala). Die Anpassung an die Messwerte entspricht bei beiden Varianten im Mittel den angenommenen Fehlern zwischen 0,3mrad für die niedrigste bis 2mrad für die höchste Frequenz, die sich aus dem jeweiligen Inversionsverlauf der Einzelfrequenzrechnungen ergeben, die ab diesen Grenzen keine deutlichen Verbesserungen mehr zulassen. Es ist also nicht unmittelbar zu erkennen, welche Variante mehr der Realität entspricht. Für die kontrastreichere Gesamtinversion spricht, dass das Normalprofil eine Schichtgrenze in etwa 10m Tiefe erwarten lässt und auch eine Gesamtinversion bei Betrachten aller Daten gleichzeitig, eher in der Lage ist, einzelne Daten, die in der Einzelfrequenzinversion noch als Ausreißer geglättet würden, auf reale Strukturen zurückzuführen. Allerdings sind die Phasen zum Teil sehr klein, sodass quantitativ eher dem Ergebnis der Einzelinversion Glauben geschenkt werden sollte.

Um weitere Aussagen treffen zu können, werden in Abbildung 5.23 die Inversionsergebnisse für die Phasen aller einzelnen Frequenzen gezeigt. Hierbei erkennt man deutliche Strukturänderungen. Bei der Anpassung der Einzelfrequenzen haben offenbar die niedrigeren Frequenzen größeren Einfluss; bei der Gesamtinversion fließt auch ein, dass in den höheren Frequenzen die Phasen (betraglich) zum Teil auch wieder zunehmen.

Insgesamt stellt sich offenbar weniger die Frage, ob das Ergebnis der Einzel- oder der Gesamtinversion zu bevorzugen ist, sondern vielmehr, ob in diesem konkreten Fall die Durchführung einer CPA-Anpassung überhaupt aussagekräftige Ergebnisse, insbesondere bezüglich der Phase, liefern kann.

Dass eine Anpassung grundsätzlich möglich ist, soll in Abbildung 5.24 gezeigt werden. Auf den ersten Blick werden die Beträge sehr gut reproduziert und man findet in weiten Bereichen Abweichungen unter 0,5%. Lediglich direkt an der Oberfläche sind diese Werte höher, sodass sich insgesamt eine Anpassung von 1% ergibt (war als Konvergenzkriterium im Betrag gesetzt).

Die Phasen werden in den Strukturen ebenfalls gut wiedergegeben, die Abweichungen verteilen sich hier etwas homogener, wobei insbesondere der Bereich mittlerer Pseudotiefen gut angepasst ist. Die mittlere Abweichung liegt mit etwa 0,5mrad ebenfalls im Bereich der geforderten Anpassung. Insgesamt ist die Anpassung der Pseudosektionen sehr zufriedenstellend.



### 5.3 Constant Phase Angle Anpassung

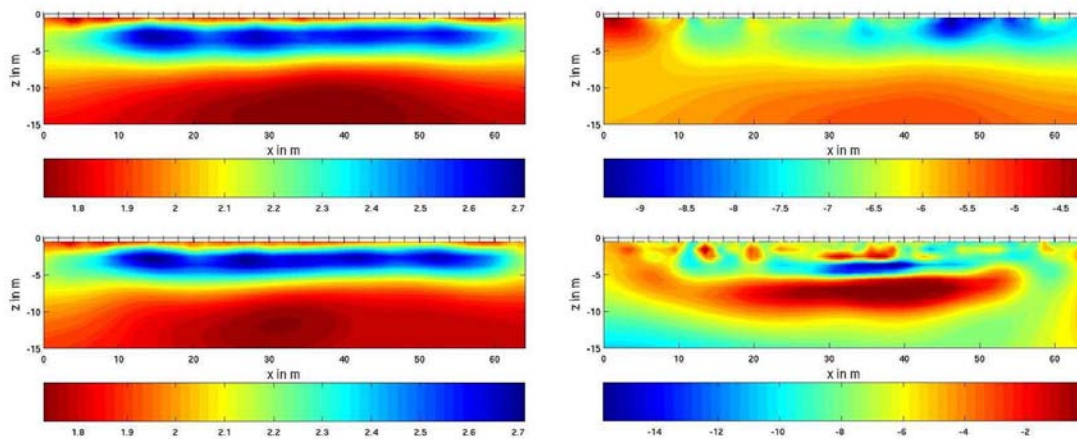


Abbildung 5.22: Verteilung der Parameter bei Inversion der einzelnen Frequenzen mit anschließender Anpassung (oben) oder gleichzeitiger Inversion aller Frequenzen (unten). Dargestellt sind  $\rho_n$  ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ ) (links) und  $\phi$  (mrad) (rechts).

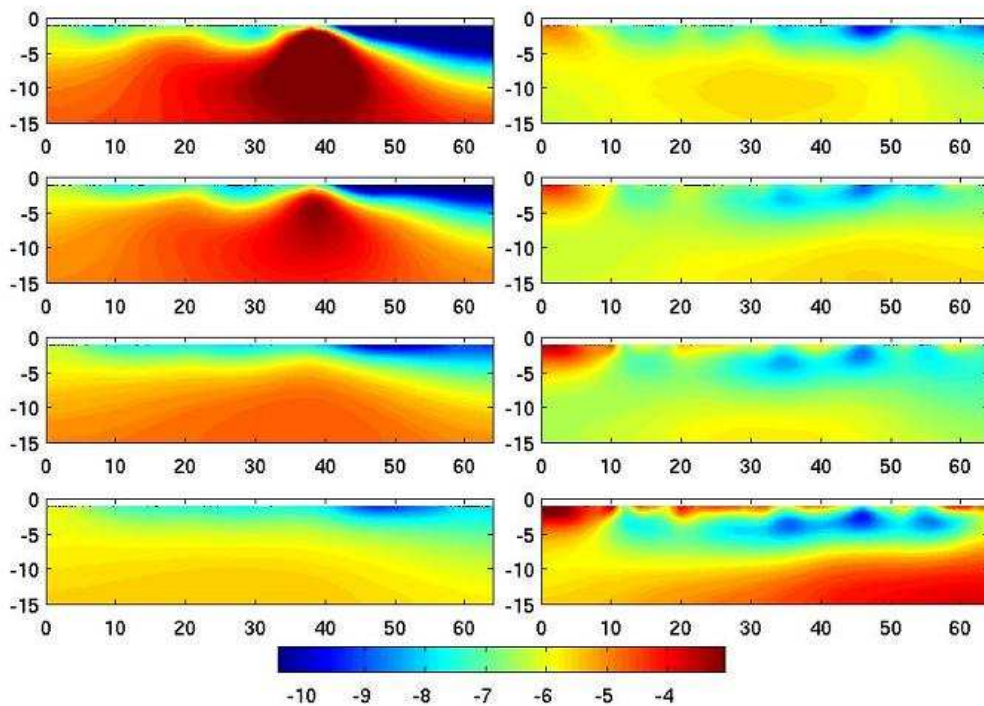


Abbildung 5.23: Inversionsergebnis für die Phasen (in mrad) bei Einzelfrequenzinversion. Die Frequenzen fallen in der ersten Spalte von oben nach unten und weiter in der zweiten Spalte. Die Werte sind: 10, 5, 2,5, 1,25, 0,625, 0,3125, 0,15625 und 0,07622Hz.

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

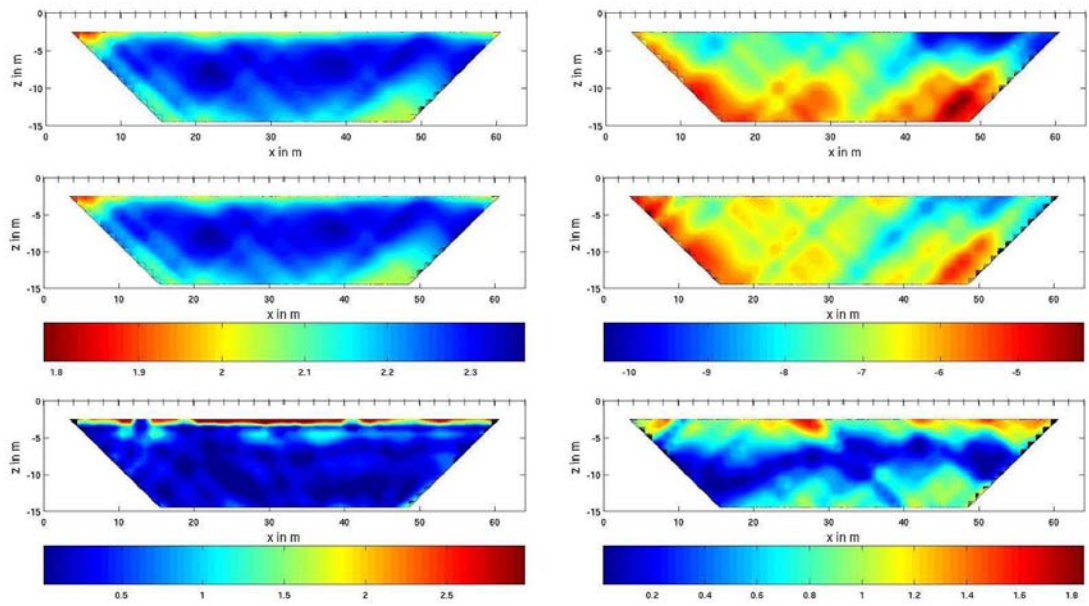


Abbildung 5.24: Vergleich der Pseudosektionen zu 1,25Hz. Dargestellt sind Messdaten (1. Zeile), synthetische Daten aus dem CPA Modell (2. Zeile) und Abweichungen dazwischen (3. Zeile). Beträge in  $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ , Phasen in mrad, Fehler in % bzw. mrad.

Wie schon im Cole-Cole Fall, soll wieder ein einzelnes Spektrum, erneut zum Pseudopunkt  $x = 33m$ ,  $z = -8m$ , beispielhaft betrachtet werden. Abbildung 5.25 zeigt wie in Abbildung 5.17 die Messdaten (rot), die Daten aus der Einzelfrequenzinversion (blau) sowie die Daten aus der Gesamtinversion, nun in ein CPA-Modell (magenta). Die Aussage ist die gleiche: Die Einzelfrequenzinversion passt die Daten besser an, allerdings bietet die Gesamtinversion eine deutlichere Aussage über das Spektralverhalten. Auch die Gesamtinversion liefert mit deutlich unter einem Prozent Abweichung zu den Messdaten hierbei über alle Frequenzen eine gute Anpassung.

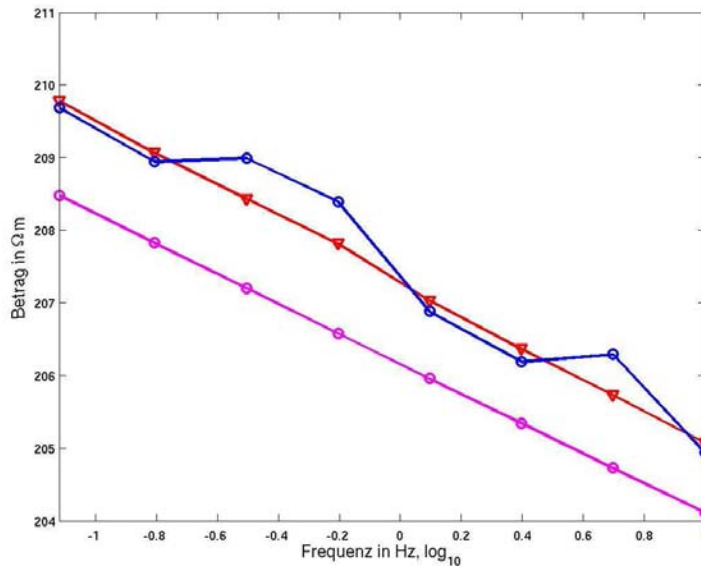


Abbildung 5.25: Vergleich eines Spektrums im B32-Profil. Dargestellt sind scheinbare Widerstände (in  $\Omega m$ ) aus der Messung (rot) sowie aus der Vorwärtsrechnung nach Einzelfrequenzinversion (blau) bzw. gleichzeitiger CPA-Inversion aller Frequenzen (magenta). Pseudopunkt  $x = 33m$ ,  $z = -8m$  (siehe auch Abbildung 5.24 und 5.17).

Als letztes soll anhand der Anpassungsfehler untersucht werden, ob eher ein Cole-Cole oder CPA Modell für den Untergrund gewählt werden sollte. Zu diesem Zweck werden zuerst die Messspektren angepasst und ein RMS-Wert analog zu Gleichung 3.36 bestimmt, mit einzelnen (frequenzabhängigen) Fehlern in Betrag und Phase. Die Ergebnisse können in einer Pseudosektion aufgetragen werden.

Abbildung 5.26 zeigt die Ergebnisse. Die Cole-Cole Anpassung liefert praktisch im gesamten Gebiet eine bessere Anpassung, da es bei den benutzten 8 Frequenzen 4 Cole-Cole Parametern besser möglich ist, das Spektrum anzupassen als bei 2 Parametern aus dem CPA-Modell.

Der im Zusammenhang mit Abbildung 5.6 beschriebene Effekt, dass bei Spektren, die über mehreren Schichten aufgezeichnet werden, eher ein CPA-Verhalten zu erwarten

ist, selbst wenn die einzelnen Schichten Cole-Cole Charakteristik aufweisen, tritt hier nicht auf. Die Parameter variieren offenbar nicht stark genug. Man erkennt in der CPA-Anpassung allerdings eine Verbesserung mit der Tiefe, obwohl hier die Fehler deutlich zunehmen, aber für die Anpassung zur besseren Vergleichbarkeit konstant gehalten wurden. Zu großen Tiefen nimmt entsprechend die Qualität der Anpassung wiederum ab. Ebenso ist die schlechtere Anpassung zu hohen  $x$ -Werten zu erklären, da das Stromkabel zur Dipol-Dipol Konfiguration jeweils von  $x = 0$  zugeführt wurde und zur rechten Bildseite entsprechend die Kopplungseffekte anwachsen. (Die hier benutzte Frequenz  $10Hz$  wurde nur benutzt, um das Verhältnis zwischen Frequenzen und freien Parametern nicht zu klein werden zu lassen und wird sonst bzgl. der EM-Kopplung schon oft als kritisch eingestuft.)

Einen weiteren Aspekt zum Qualitätsvergleich zwischen Cole-Cole- und CPA-Anpassung bietet die Betrachtung der Anpassungsfehler der Zellen nach der Einzelfrequenzinversion. Es werden also nicht die Messspektren angepasst, sondern für jede Zelle ein einzelnes intrinsisches Modell auf Grundlage der komplexen Widerstände aus den Einzelfrequenzinversionen an dieser Stelle. In Abbildung 5.27 sind die RMS-Werte der zellenweisen Anpassung an die Betrags- und Phasenwerte aus den Einzelspektreninversionen dargestellt. Man erkennt eine große Übereinstimmung in beiden Verfahren. Da die gleiche Datenbasis zugrunde liegt und die Messdaten mit dem Untergrundmodell hinreichend reproduziert werden konnten, bleibt als Erkenntnis, dass offenbar jeweils zwei freie Parameter des CPA-Modells die Zellspektren gleich gut anpassen können wie vier Parameter im Cole-Cole Fall. Damit liegt auch der Schluss nahe, den Untergrund eher als CPA-artig zu bezeichnen, um keine unnötig komplexen Modelle zu benutzen.

Einen letzten Eindruck soll auch hier ein Vergleich der Spektren geben: Abbildung 5.28 zeigt für Betrag (links) und Phase (rechts) das spektrale Verhalten einer Zelle (erneut bei  $x = 33m$  und  $z = -8m$ , wenn auch nicht direkt mit den Pseudosektionen zu vergleichen). Dabei wird durch die unruhige Kurve der Werte aus der Einzelinversion (blau) im Fall des Betrags durch das Cole-Cole Modell (grün) in etwa dasselbe Modell angepasst wie für den CPA-Fall (magenta). In der Phase sind die Abweichungen stärker und -aufgrund des Sprunges bei  $0,625Hz$ - beide Varianten nur in der Lage, einen groben Mittelwert anzupassen. Das CPA-Modell ist hierbei noch eingeschränkter als das Cole-Cole Modell, das entsprechend eine etwas bessere Anpassung leistet. Offenbar erscheint das Phasenverhalten nach der Einzelinversion so komplex, dass weder Cole-Cole noch CPA eine sehr gute Anpassung liefern können.

Bei größeren Kontrasten in den Parametern, insbesondere der Aufladbarkeit, kann man jedoch vermuten, dass eine Cole-Cole Inversion aussagekräftiger sein wird. Zudem haben die Cole-Cole Parameter über Aufladbarkeit, Relaxationszeit, deren Verteilungsbreite und Gleichstromwiderstand direkteren Bezug zum Untergrundmaterial als der Widerstandsbetrag  $\rho_n$  bei  $\omega_o$  und der Exponent  $b$ .

Da im Fall des Testfeldes Krauthausen die Aufladbarkeiten gering waren (s. 5.15), konnten hier kaum weitere Erkenntnisse aus der Frequenzabhängigkeit gewonnen werden. Die Multifrequenzinversion sollte bei Messungen über deutlich heterogenerem Untergrund mit stärkerer Frequenzabhängigkeit eingesetzt werden.

### 5.3 Constant Phase Angle Anpassung

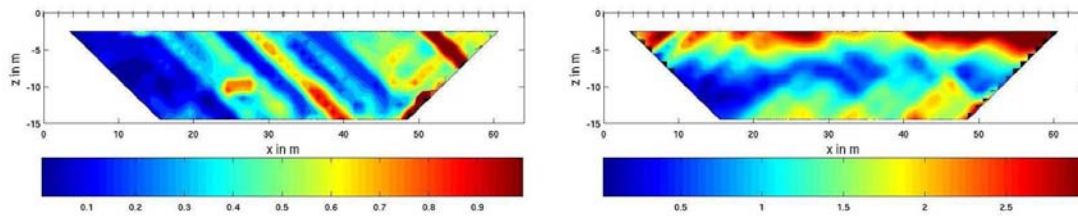


Abbildung 5.26: Vergleich der Messspektrenanpassung, dargestellt als Pseudosektion. Dargestellt sind RMS-Werte der Cole-Cole- (links) und CPA-Anpassung (rechts).

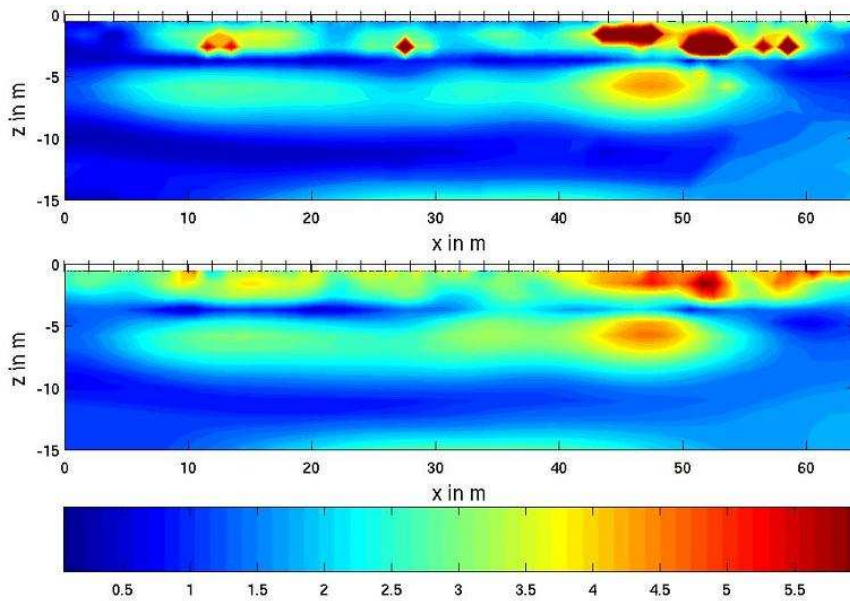


Abbildung 5.27: Vergleich der zellenweisen Anpassung an die Ergebnisse der Einzelspektreninversion. Dargestellt sind RMS-Werte der Cole-Cole- (oben) und CPA- (unten) Anpassung.

## 5 Multifrequenz-Inversion in zwei räumlichen Dimensionen

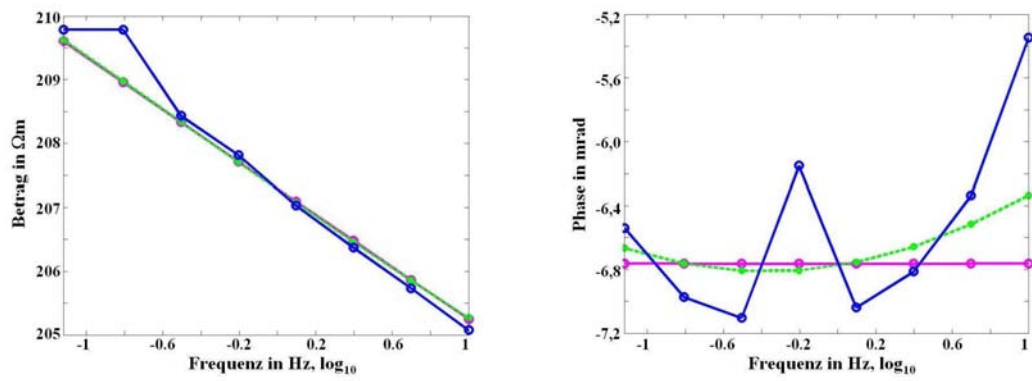


Abbildung 5.28: Vergleich der intrinsischen Spektrenanpassung. Dargestellt sind die Betrags- (links, in  $\Omega m$ ) und Phasenspektren (rechts, in mrad) aus der Einzelfrequenzinversion (blau), der Cole-Cole- (grün) und der CPA-Anpassung (magenta) für einen Punkt bei  $x = 33m$ ,  $z = -8m$ .

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

Mit drei räumlichen Dimensionen erreicht man die flexibelste Untergrundparametrisierung. Dies ist im SIP-Bereich insbesondere deshalb interessant, da Gebilde mit hohen Frequenzeffekten (Erzkörper, Mülldeponien, etc.) oft in alle Richtungen räumlich begrenzt sind und nur schwer in weniger Dimensionen angenähert werden können. Eine dreidimensionale Inversion bringt somit zwar den Vorteil eines konsistenten Parameterverlaufs in alle Richtungen, allerdings wird auch der Rechenaufwand deutlich erhöht. Die Zellenanzahl wächst stark an, die Sensitivitätsmatrix ebenso. Im Gegensatz dazu besteht grundsätzlich die Möglichkeit, parallele Profile jeweils in zwei Dimensionen zu invertieren und die Sektionen aneinander zu setzen. Da die einzelnen 2D-Ergebnisse allerdings von jeweils konstanten Parametern in die dritte Dimensionen ausgehen, erklärt ein aus 2D-Schnitten zusammengesetztes 3D-Modell in der Regel nicht alle Messdaten.

Da die Idee war, ein Programm zu erstellen, das auf einem aktuellen Standard-PC laufen sollte, werden in der dreidimensionalen Inversion schnell die Grenzen des Machbaren erreicht. Mehr dazu im Abschnitt 6.2. Dies ist auch der Grund, weshalb auf eine Mehrfrequenzinversion in drei räumlichen Dimensionen verzichtet wurde. Die Implementation selbst ist unkritisch und entspricht der aus dem 2D-Ansatz. Die Umsetzung einer Einzelfrequenzinversion in drei Dimensionen ist sogar numerisch einfacher als in zwei Dimensionen. Hiermit beschäftigt sich das folgende Unterkapitel 6.1.

### 6.1 Umsetzung

Bei Behandlung des Problems in drei räumlichen Dimensionen vereinfacht sich die Helmholtz-Gleichung 3.21 aus zwei Dimensionen zur Poisson-Gleichung 3.19. Die Fourier-Kosinustransformation fällt damit weg (und entsprechend die Rücktransformation). Die analytischen Lösungen der Potentiale für das singularity removal können nun direkt analytisch nach 3.15 berechnet werden, ebenso wie die Ableitung in Normalenrichtung im Falle der Verwendung von gemischten Randbedingungen. Wiederum wird die Lösung über die FE-Methode bestimmt, und es kommt folgender Satz zur Anwendung ([*Richter*, 1995]), der sich nur in den räumlichen Dimensionen von dem Analogon aus Unterkapitel 3.1 unterscheidet und dadurch, dass aufgrund der fehlenden Fouriertransformation ( $f = 0$ ) keine Massenelementmatrix  $\bar{M}$  benötigt wird:

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

**Satz 2** Gegeben sei für  $(x, y, z)^t \in G \subset \mathbb{R}^3$  die partielle Differentialgleichung

$$\partial_x(a_1 \cdot u_x) + \partial_x(a_2 \cdot u_y) + \partial_z(a_1 \cdot u_z) + g = 0 \quad (6.1)$$

mit den Veränderlichen  $x, y, z$  und Koeffizienten  $a_1, a_2, a_3$  und  $g$ .

Es sei  $D_j \subset G$  ein Tetraeder, Prisma oder Parallelepipede. Bei der Anwendung der FE-Methode ergeben sich für  $D_j$  die Bestimmungsgleichungen

$$\begin{aligned} 0 = & \gamma_j \vec{b} - 2(\sigma_{j,12} \bar{S}_{12} + \sigma_{j,13} \bar{S}_{13} + \sigma_{j,23} \bar{S}_{23}) \cdot u^{(j)} \\ & - (\sigma_{j,11} \bar{S}_{11} + \sigma_{j,22} \bar{S}_{22} + \sigma_{j,33} \bar{S}_{33}) \cdot \vec{u}^{(j)}. \end{aligned} \quad (6.2)$$

Hierbei sind  $\bar{S}_{ij}$  konstante Elementmatrizen,  $\sigma_{ij}$  von der Elementgeometrie und  $a_1, a_2$  und  $a_3$  abhängige Größen. In  $\gamma$  fließt zur Geometrie noch  $g$  ein.

Die Elementmatrizen sowie die geometrischen Zusammenhänge zur Bildung von  $\sigma_{ij}$  und  $\gamma$  finden sich in Anhang A.

In Gleichung 6.1 kann für  $a_1, a_2$  und  $a_3$   $\sigma$  gesetzt werden,  $u$  entspricht  $U$  und  $g$  dem Quellterm. Aus den einzelnen Elementen wird eine Gesamtmatrix erstellt und das System gelöst. Die Inversionsstrategie bleibt unverändert.

Für die Zerlegung des Untergrundes werden zwei Zelltypen bereit gestellt. Im einfachsten Fall sind dies die Parallelepipede, meist mit rechtwinkligen Kanten als Quader oder sogar zusätzlich mit Kanten gleicher Länge als Würfel.

Eine flexiblere Variante stellen die Tetraeder dar. Dabei findet sich eine Möglichkeit, die Zerlegung in Würfel fortzuführen und einen Würfel in 5 Tetraeder zu zerlegen. Die Zerlegung erfolgt so, dass sich zwei spiegelsymmetrische Zerlegungen von einem Würfel zum Nachbarn jeweils abwechseln, damit auf den Grenzflächen die Kanten jeweils aufeinander liegen. Die Zerlegung ist in Abbildung 6.1 dargestellt. Das letzte Element besitzt jeweils das doppelte Volumen. Dies hat den Vorteil, dass nicht 6 Tetraeder pro Würfel benutzt werden, wie es sonst häufig auftritt.

Da ein Tetraeder lediglich aus 4 Knoten besteht (die  $S$ -Matrizen enthalten damit  $4^2 = 16$  Einträge) bedeutet die wesentlich feinere Zerlegung eines Würfels ( $8^2 = 64$  Einträge) keinen entscheidenden numerischen Mehraufwand (gesamt:  $5 \cdot 16 = 80 = 1,25 \cdot 64$ ). Insbesondere in Hinsicht auf eventuelle Implementation von Topografie im Dreidimensionalen, werden Tetraeder analog zu Dreiecken im Zweidimensionalen von Vorteil sein.

Im Folgenden sollen Vorwärtsoperator und Inversionsteil an verschiedenen Modellen getestet werden. Bei synthetischen Modellen werden dabei gemischte Randbedingungen gewählt bei einem Untergrundgebiet von  $21m \times 72m \times 19m$ . Die Zellen sind Würfel der Kantenlänge  $1m$  (Tetraeder liefern praktisch gleiche Ergebnisse). Simuliert werden (wenn nicht anders beschrieben) 5 parallele Profile mit je 17 Elektroden bei  $4m$  Abstand zwischen Profilen sowie Elektroden. Zur besseren Anschauung wird oftmals der Bereich der Pseudopunkte eingetragen, bei einem Winkel von  $45^\circ$  gegen die Horizontale zur Tiefenbestimmung. Abbildung 6.2 zeigt anhand von zwei Beispielen, wie sich die Lage der Pseudopunkte ergibt.



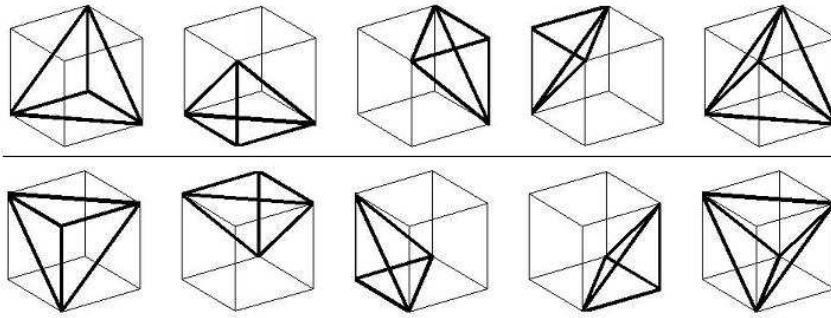


Abbildung 6.1: Zerlegung eines Würfels in 5 Tetraeder. Die Varianten (1. bzw. 2. Zeile) wechseln sich in alle Raumrichtungen ab, beispielsweise 3. Element oben, 4. Element unten.

Als Nächstes wird eine Vorwärtsrechnung über einem homogenen Halbraum durchgeführt, um die synthetischen Werte mit analytischen vergleichen zu können. Es zeigt sich über allen 5 Profilen, die sich jeweils im Abstand zum Rand (in  $x$ -Richtung) unterscheiden, eine gleiche Qualität des Ergebnisses. Bei kleinen Dipolabständen (entsprechend Pseudotiefen) sind die Fehler im Betrag ungenauer und liegen immer unter 3%, in weiten Gebieten unter 0,5%. Stellvertretend auch für die anderen Profile ist in Abbildung 6.3 der Betragsfehler als Pseudosektion aufgetragen. Das negative Vorzeichen bedeutet, dass die Vorwärtsrechnung einen zu geringen Betrag des scheinbaren Widerstandes liefert. Verglichen werden kann das Bild mit 4.5 für den 2D-Fall (hier Betrag der Abweichung). Insgesamt ist damit die Datenqualität durchaus vergleichbar mit der 2D-Rechnung. Die Phasen werden numerisch exakt (bis auf aufgezeichnete 6. Nachkommastelle) geliefert. Im Folgenden soll der Inversionsteil getestet werden. Dabei wird zunächst die etablierte Occam-Bedingung als Regularisierung gewählt. Da das Verhältnis von Gleichungen zu Unbekannten im Dreidimensionalen noch schlechter wird, das Gleichungssystem also noch stärker unterbestimmt ist, kommt der Regularisierung erneut eine wichtige Bedeutung zu. Es wird hier mit einer Occam-Regularisierung gearbeitet, da diese in der Regel zu einer etwas schnelleren Konvergenz führt. Dies war aufgrund der langen Rechenzeit das entscheidende Kriterium für die Wahl.

Erster Testfall ist ein Zweischichtfall mit einer horizontalen Grenzfläche in 8m Tiefe. Oberhalb besitzt das Material die Eigenschaften  $100\Omega m$ ,  $-10\text{mrad}$ , unterhalb  $10\Omega m$ ,  $-25\text{mrad}$ . Die Daten werden mit 1% bzw.  $0,3\text{mrad}$  Gaußschem Rauschen für Betrag bzw. Phase belegt.

Die Inversion konvergiert auf das angegebene Rauschniveau, und sowohl im Betrag als auch in der Phase ist der Zweischichtfall gut zu erkennen. Abbildung 6.4 zeigt das Inversionsergebnis in 3D-Schnitten. Man erkennt klar die zwei Schichten; lediglich in den wenig sensitiven Randbereichen des Inversionsgebietes nimmt der Kontrast stark ab. Im Zentrum werden Betrag und Phase auch quantitativ reproduziert.

Abbildung 6.5 zeigt die Inversionsergebnisse für einen Schnitt entlang des mittleren Profils. In dieser Darstellung wird noch deutlicher, wie unbeeinflusst die Randgebiete von

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

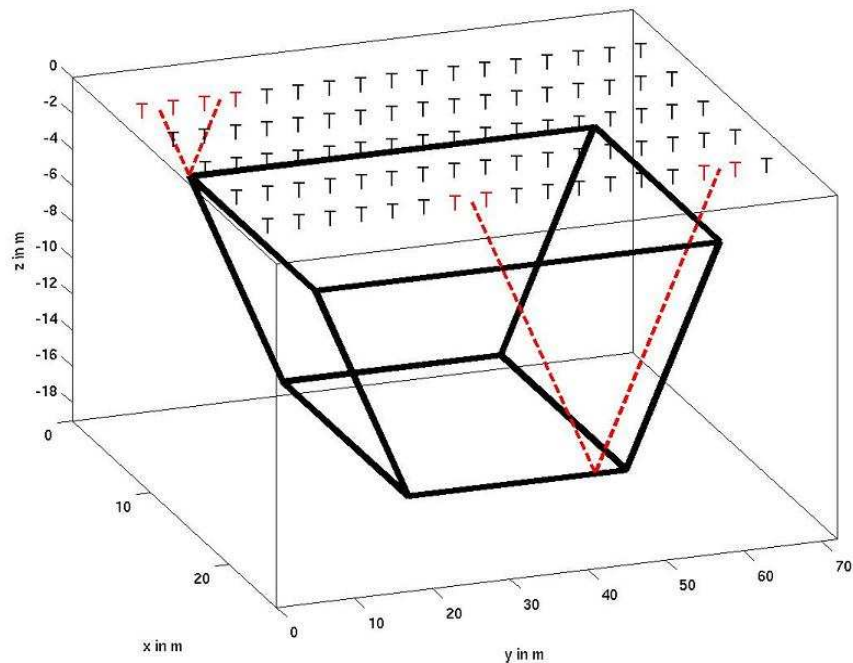


Abbildung 6.2: Die Messkonfiguration (mit Inversionsgebiet) in drei Dimensionen. Eingezeichnet sind die 5 Profile von Elektroden sowie das Gebiet der Pseudosektionen mit zwei beispielhaften Dipol-Dipol Anordnungen. (Bestimmung der zugehörigen Pseudopunkte gestrichelt skizziert)

der Inversion bleiben. Zu den Seiten, außerhalb des eingezeichneten Bereichs der Pseudopunkte, ändern sich Betrag und Phase nur wenig von den Werten des homogenen Starthalbraums.

Zusätzlich erkennt man, dass unmittelbar an der Oberfläche die Werte etwas gestört sind. Hier wird zum einen versucht, den verrauschten Teil der Messdaten anzupassen, zum anderen leidet hier die Auflösung an der vergrößerten Dipolweite (im 2D-Fall wurden stets 2m gewählt) und der damit verbundenen größeren Pseudotiefe für  $n = 1$ . Aus Rechenzeitgründen (s.a. 6.2) konnten kleinere Dipole jedoch nicht zusätzlich gerechnet werden.

Das nächste und auch letzte synthetische Modell, das vorgestellt werden soll, ist eines mit 3D Leitfähigkeitsstrukturen (Strukturen jeweils in den zugehörigen Abbildungen eingezeichnet). Hintergrund ist ein Zweischichtfall, bei dem eine obere Schicht ( $100\Omega m$ ,  $-10\text{mrad}$ ) in 15m Tiefe von einer unteren Schicht ( $10\Omega m$ ,  $-20\text{mrad}$ ) abgegrenzt wird. Zusätzlich liegt ein gut leitender, quaderförmiger Störkörper ( $25\Omega m$ ,  $-20\text{mrad}$ ) im Bereich von  $x = 18 - 26m$ ,  $y = 8 - 14m$  und  $z = -7$  bis  $-12m$ . Weiterhin befindet sich eine schlecht leitende Kugel ( $400\Omega m$ ,  $-5\text{mrad}$ ) mit 6m Radius und Mittelpunkt  $x = 38m$ ,  $y = 14m$ ,  $z = -8m$  in der oberen Schicht. Die Messwerte werden mit gleichem Rauschlevel wie zuvor belegt; die Konfigurationen werden benutzt, wie in Abbildung 6.2 dargestellt.

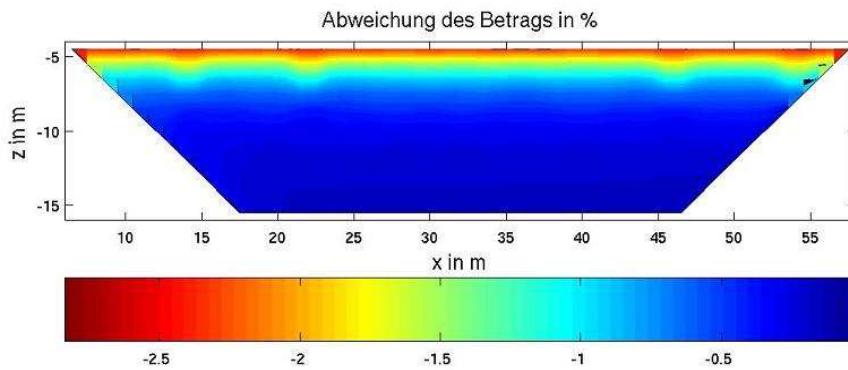


Abbildung 6.3: Die prozentuale Abweichung des Betrages der synthetischen gegenüber den analytischen Werten für das äußere Profil  $x = 5m$ .

Die Inversion erreicht in der Anpassung das Rauschniveau; die Ergebnisse als 3D-Schnitte sind in Abbildung 6.6 dargestellt. Im Betrag erscheint die schlecht leitende Kugel klar im Umriss und auch der Wert ( $\log_{10}(400) \approx 2,6$ ) wird gut reproduziert. Anders sieht das bei dem gut leitenden Quader (mit deutlich geringerem Volumen) aus. Es zeichnet sich ein niedrigerer Widerstand ab, aber der Hintergrundwert wird lediglich auf etwa  $60\Omega m$  abgesenkt. Ähnliches gilt für die untere Schicht, die größtenteils in sehr wenig sensitivem Gebiet liegt. Der Kontrast wird zwar nicht erreicht, trotzdem ist ein Schichtübergang zu erkennen.

Die Aussagen gelten analog für die Phasen. Die Kugel wird in Lage und Wert recht gut reproduziert, der Quader ist zu klein und die Schichtgrenze zu tief, um den wahren Kontrast zu erreichen. Die Lage deutet sich korrekt an.

Auch für dieses Modell soll ein Schnitt gezeigt werden (Abbildung 6.7). Es muss dabei berücksichtigt werden, dass der gezeigt Schnitt bei  $y = 13m$  nicht durch die Mitte der Störkörper läuft (Kugel:  $y = 14m$ , Quader:  $y = 12m$ ). Die Umrisse der Kugel sind erneut klar zu erkennen, ebenso wie der Schichtübergang. Der Quader bewirkt zwar eine Anomalie an seiner Position, die besonders im Betrag jedoch verstärkt in die Tiefe fortgesetzt wird. Wie schon im Zweischichtfall, ist die Oberfläche leicht gestört. Die Aussagekraft nimmt deutlich zu den Rändern hin ab.

Für dieses Modell sollen die Anpassungen der Messdaten betrachtet werden. Zu diesem Zweck sind in Abbildung 6.8 die Pseudosektionen der Abweichungen in Betrag und Phase dargestellt. Sowohl Betrags- als auch Phasenabweichungen sind - wie das Rauschen - räumlich unstrukturiert verteilt. Ein Zusammenhang zu den Störkörpern oder der Schichtgrenze ist nicht zu erkennen. Es treten auch keine starken Ausreißer auf. Die Abweichungen liegen meist im Bereich des Rauschniveaus.

Nun sollen Messdaten untersucht werden. Hierbei bietet sich ein Datensatz an, der auf dem Testfeld Krauthausen gewonnen wurde (Abbildung 7.4). Bei jeweils 1Hz wurden (am gleichen Tag) 10 parallele Profile mit je 33 Elektroden und 2m Elektrodenabstand vermessen. Die Elektrodenanzahl ist jedoch zu hoch für eine Rechnung auf einem Standard-PC. Aufgrund der (durch den Hauptspeicher) begrenzten Zellenanzahl, muss mit gemisch-

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

ten Randbedingungen gerechnet werden, womit wiederum für jede Stromelektrode eine erneute Vorwärtsrechnung durchgeführt werden muss. Als Lösung werden zur Datenreduktion aus den Messwerten 4m-Dipole zusammengesetzt und alle geradzahligen Profile übergangen. Dies geschieht unter Verwendung von Gleichung 3.16, indem die 4 beteiligten Spannungen addiert werden. Es sei  $r_{ij}$  der Abstand von Elektrode  $i$  zu Elektrode  $j$ . Gemessene Spannungen waren  $\Delta V_{12,56}$ ,  $\Delta V_{23,56}$ ,  $\Delta V_{12,67}$  und  $\Delta V_{23,57}$ . Benötigt wird  $\Delta V_{13,57}$ . Die ersten beiden Zahlen stehen für die Stromelektroden, die letzten für die Spannungselektroden. Alle 4 Spannungen der 2m Dipole ergeben die des 4m Dipols. Ausformuliert kann dies bestätigt werden mit:

$$\begin{aligned}
 \Delta V_{13,57} &= (1/r_{15} - 1/r_{17} - 1/r_{35} + 1/r_{37}) \cdot \frac{\rho I}{2\pi} \\
 &= (1/r_{15} - 1/r_{16} - 1/r_{25} + 1/r_{26} \\
 &\quad + 1/r_{16} - 1/r_{17} - 1/r_{26} + 1/r_{27} \\
 &\quad + 1/r_{25} - 1/r_{26} - 1/r_{35} + 1/r_{36} \\
 &\quad + 1/r_{26} - 1/r_{27} - 1/r_{36} + 1/r_{37}) \cdot \frac{\rho I}{2\pi} \\
 &= \Delta V_{12,56} + \Delta V_{12,67} + \Delta V_{23,56} + \Delta V_{23,67}
 \end{aligned} \tag{6.3}$$

Die Berechnung wird komplexwertig ausgeführt. Insgesamt wird die Datenmenge deutlich reduziert und auf dem bekannten 3D-Gitter (wie in 6.2) kann die Inversion ausgeführt werden. Das Ergebnis ist in Abbildung 6.9 dreidimensional dargestellt. Im Betrag erkennt man (trotz Occam-Bedingung) recht deutlich einen Zweischichtfall mit Grenze in etwa 10m Tiefe, wie auch aus dem Normalprofil erwartet. Im oberen Teil liegen die Werte im Bereich von 200 bis 400 $\Omega m$ , darunter etwa zwischen 40 und 80 $\Omega m$ . Auch in dieser Inversion wurde keine anisotrope Glättung verwendet, was außerhalb des hoch sensitiven Bereiches (in etwa Lage der Pseudopunkte) zu einer deutlichen Kontrastabnahme führt. Die Phasen deuten ebenfalls eine Zweischichtung an, mit einer Grenze in ähnlicher Tiefe und betragslich höheren Phasen in der Tiefe. Im unteren Bereich variieren die Werte dabei zwischen -7 und -10mrad, im oberen Bereich von etwa -3 bis -6mrad, mit kleineren Regionen, wo sie die Werte der unteren Schicht annehmen. Auch in den Phasen nimmt der Kontrast zum Rand des Inversionsgebietes hin stark ab.

Vergleichen kann man nun die 3D-Inversion aller 5 Profile gleichzeitig mit den Ergebnissen aus den 2D-Inversionen der einzelnen Profile. Die Darstellung für die Beträge findet sich in Abbildung 6.10. Man erkennt, dass sich die Profile untereinander nur schwach unterscheiden und innerhalb des sensitiveren Bereiches sich auch 2D- und 3D-Inversionsergebnisse sehr ähneln. Dass die Ergebnisse der 2D-Inversion mehr Schichtung nach außen aufweisen, ist darauf zurückzuführen, dass hier ein Faktor 10 in der horizontalen Glättung eingesetzt wurde, was insbesondere zur Stabilisierung der Phaseninversion nötig war. Gerechtfertigt ist dies, wie in 7.1.1 beschrieben, aufgrund der bekannten Korrelationslängen. Im 3D-Fall lief die Inversion auch ohne diese Zusatzbedingung auf das (im sensitiven Bereich) sehr ähnliche Ergebnismodell.

Betrachtet man analog die Ergebnisse für die Phasen, dargestellt in Abbildung 6.11, so erkennt man hier erneut recht vergleichbare Profile, allerdings deutliche Unterschiede

zwischen 2D- und 3D-Inversion. Im 2D-Fall treten zu hohen  $x$ -Werten größtenteils Phasen um  $-5,5$  bis  $-7$  mrad auf, wobei in der ersten Hälfte des Profils Werte  $-4$  bis  $-5,5$  mrad überwiegen. Eine vertikale Variation deutet sich nur leicht an, obwohl sie aufgrund des Normalprofils und auch der Betragsergebnisse zu erwarten wäre.

Ganz anders sieht das Bild der 3D-Inversion aus. Hier erkennt man für alle Profile einen Bereich (betraglich) erhöhter Phasen ab einer Tiefe von etwas mehr als 10m. Die horizontalen Variationen treten ebenfalls auf, sind aber bei weitem nicht so großflächig wie in der 2D-Inversion, der Kontrast ist dafür stärker. Hier ist der Vorteil einer 3D-Inversion offensichtlich. Beim Wechsel vom ersten über den zweiten zum dritten Schnitt ändert sich die Phase in den ersten 10m Tiefe um  $x = 50m$  bei der 3D-Inversion stark, im 2D-Fall nicht. Die betraglich hohen Phasen in den Messwerten des Profils zu Schnitt 2 können mit einer leichten Phasenerhöhung (immer betraglich), die sich weit in  $y$ -Richtung erstreckt (also 2D-Fall), erklärt werden. Die richtigere Lösung einer stärkeren, in  $y$ -Richtung eng begrenzten Erhöhung, berücksichtigt die kleineren Messwerte für die Phasen in den benachbarten Parallelprofilen. Dies kann nur durch eine 3D-Inversion geschehen.

Da starke Variationen im 2D-Modell (unendliche Tiefe in  $y$ -Richtung) Messwerte deutlich mehr beeinflussen als gleiche Änderungen im 3D-Modell (z.B. 1m Tiefe in  $y$ -Richtung), bleiben die 2D-Ergebnisse kontrastärmer. Insgesamt erwartet man also auch glattere Bilder in  $y$ -Richtung bei Inversion paralleler Profile in 2D, weil hierbei in  $y$ -Richtung eine Art Mittelung auftritt. Zu einem 3D-Modell angelegte 2D-Modelle mit Tiefe bis zum Nachbarprofil müssen keineswegs die Daten aller Messprofile erklären, weil die Modelle der Profile gerade bis ins Unendliche reichen und nicht nur bis zum Nachbarprofil. Insbesondere bei stärkeren Variationen (des wahren Untergrundes) lassen sich 2D-Profile nicht sinnvoll zusammenfügen. Die Daten aus der Vorwärtsrechnung des entstandenen 3D-Modells würden die Messdaten nicht reproduzieren. Wie dies im Feldbeispiel aussieht, ist in Abbildung 6.12 für den Betrag und 6.13 für die Phase in Horizontalschnitten zu sehen.

Die Phase variiert horizontal recht schwach, womit die 2D-Ergebnisse gut aneinanderpassen. Im 3D-Fall treten, wie aus den obigen Erläuterungen erwartet, größere Kontraste auf.

Im Betrag sind die Variationen in der 3D-Inversion schwach, die 2D-Modelle sind etwas sprunghaft. Dies liegt nun in einem weiteren Vorteil der 3D-Inversion begründet. Neben der Möglichkeit der höheren Kontraste und lokalen Variationen, liefert die Inversion aufgrund der Glättungsbedingung, wo die Anpassung es erlaubt, glattere und damit konsistentere Ergebnisse. Es ist also durchaus möglich, dass zwei Zweischichtmodelle mit leichten Unterschieden in Grenztiefe und Parameterkontrast fast die gleichen Messdaten erzeugen. Eine leichte Änderung der Messdaten im Parallelprofil kann dann einen Sprung vom einen zum anderen Modell ausmachen. Dies ist gerade in Abbildung 6.13 für die 2D-Inversion zu sehen. Das 3D-Bild ist (nicht nur aufgrund der höheren Auflösung) deutlich glatter.

Abschließend sollen noch die Anpassungen im 2D- bzw. 3D-Fall verglichen werden. Aufgrund der im Vergleich zur Profillanzahl höheren Zellenanzahl im 3D-Fall, ist das Gleichungssystem hier stärker unterbestimmt. Es ergeben sich entsprechend mehr mögliche Modelle, und eine tendenziell bessere Anpassung kann erwartet werden. Da das System

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

im 2D-Fall bereits stark unterbestimmt ist, bleibt die Frage zu klären, wie groß der Effekt sein kann.

Abbildung 6.14 zeigt die Qualität der Anpassung für den Betrag am Beispiel des mittleren Profils. Es fällt auf, dass im 2D-Fall (oben) eine Anpassung von durchschnittlich rund 1% erreicht wird. Bei etwa gleicher Lage der stärksten Abweichungen liefert die 3D-Inversion Anpassungen von unter 0,5%, was als deutliche Verbesserung bezeichnet werden kann.

Die Phasenanpassung zum gleichen Profil wird in Abbildung 6.15 dargestellt. Hier sind die Abweichungen räumlich für 2D- und 3D-Ansatz unterschiedlich strukturiert. Im 2D-Fall liegen die Werte meist im Bereich von  $\pm 0,3\text{mrad}$ , gleiches gilt auch für den 3D-Fall, bei dem die Abweichungen im Durchschnitt noch etwas geringer sind. Für die Phasen gibt es also keine deutliche Verbesserung.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass eine 3D-Inversion aufgrund der größeren Flexibilität im Parameterraum konsistentere Modelle liefert als eine 2D-Inversion und auch eine Gesamtinversion paralleler Profile einer Stückelung aus 2D-Modellen vorzuziehen ist. Beschränkt werden die Möglichkeiten zur Zeit allerdings noch durch den rechnerischen Mehraufwand. Es zeigt sich, dass eine 3D-Inversion mehrerer Profile durchaus einen Faktor 100 langsamer sein kann als die Summe der Zeiten für die 2D-Inversionen. Mehr dazu im folgenden Abschnitt 6.2.

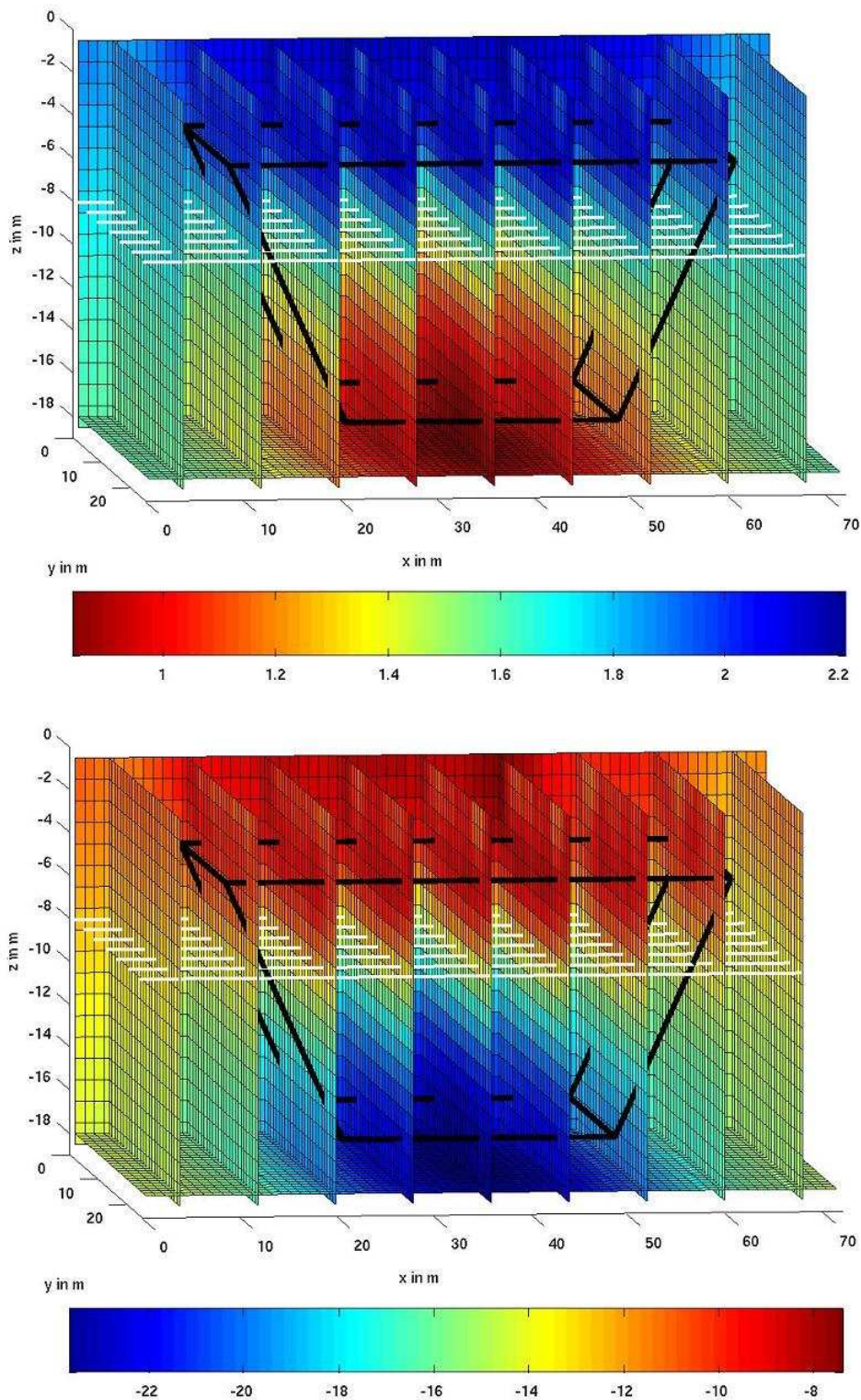


Abbildung 6.4: Inversionsergebnisse für Betrag ( $\Omega m, \log_{10}$ , oben) und Phase ( $mrad$ , unten). Eingezeichnet sind das Gebiet der Pseudopunkte sowie die Lage der Schichtgrenze. Modell ist ein Zweischichtfall (siehe Text).



## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

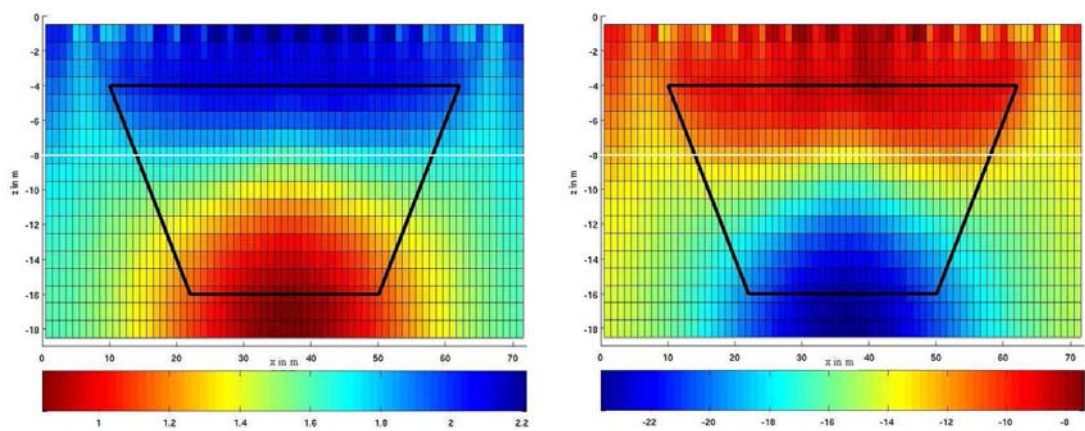


Abbildung 6.5: Schnitt durch die Mitte ( $y = 13m$ ) des Inversionsgebietes. Ergebnisse für Betrag ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ , links) und Phase ( $mrad$ , rechts). Eingezeichnet sind das Gebiet der Pseudosektion sowie die Lage der Schichtgrenze. Modell ist ein Zweiseichtfall (siehe Text).



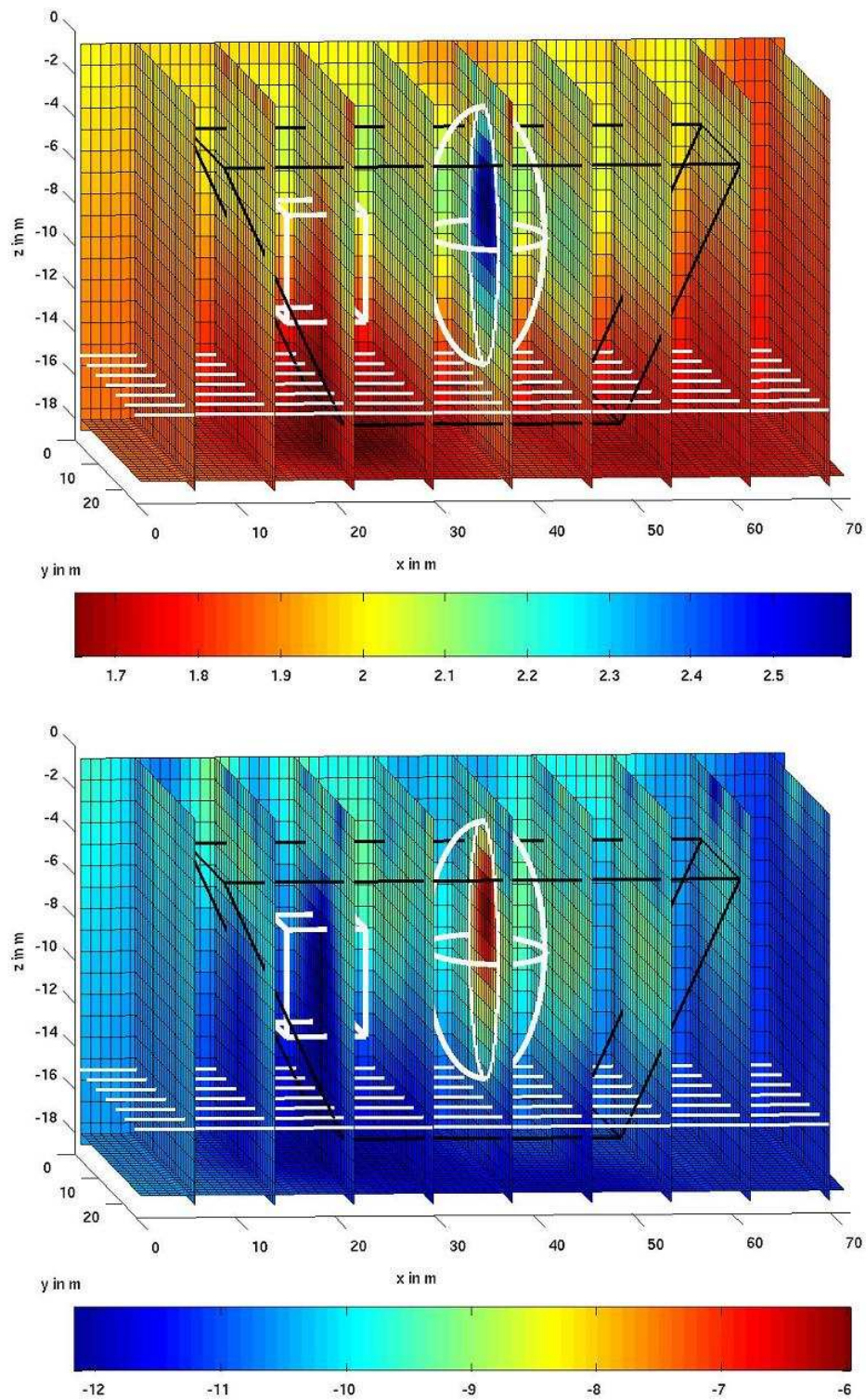


Abbildung 6.6: Inversionsergebnisse für Betrag ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ , oben) und Phase ( $mrad$ , unten). Eingezeichnet sind das Gebiet der Pseudopunkte (schwarze Umrandung) sowie die Lage der Schichtgrenze und der Störkörper (weiss). Modell siehe Text.

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

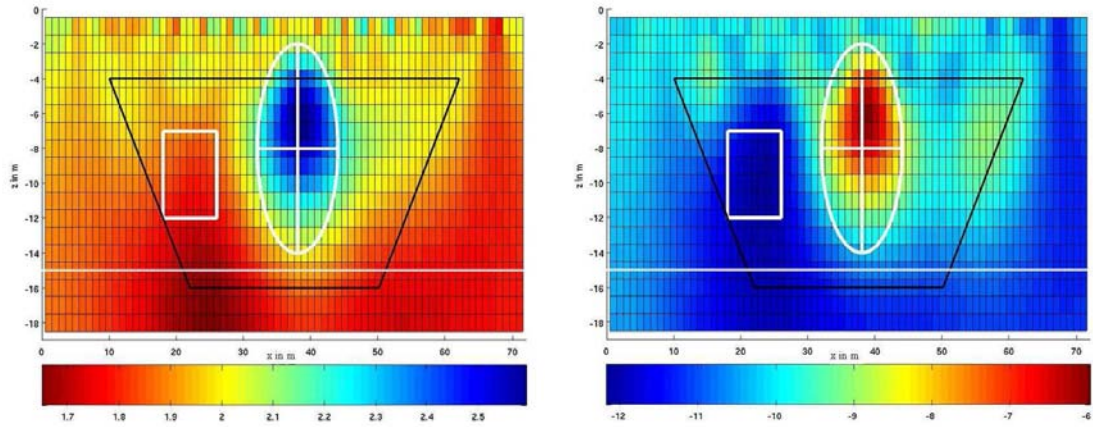


Abbildung 6.7: Schnitt durch die Mitte ( $y = 13m$ ) des Inversionsgebietes. Ergebnisse für Betrag ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ , links) und Phase ( $mrad$ , rechts). Eingezeichnet sind das Gebiet der Pseudosektion (schwarz) sowie die Lage der Schichtgrenze und der Störkörper (weiss).

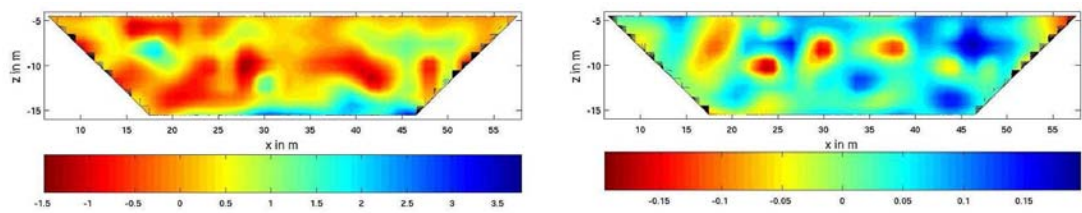


Abbildung 6.8: Anpassung der Pseudosektion des mittleren Profils ( $y = 13m$ ). Dargestellt sind Abweichungen für Betrag (in %, links) und Phase (in  $mrad$ , rechts).



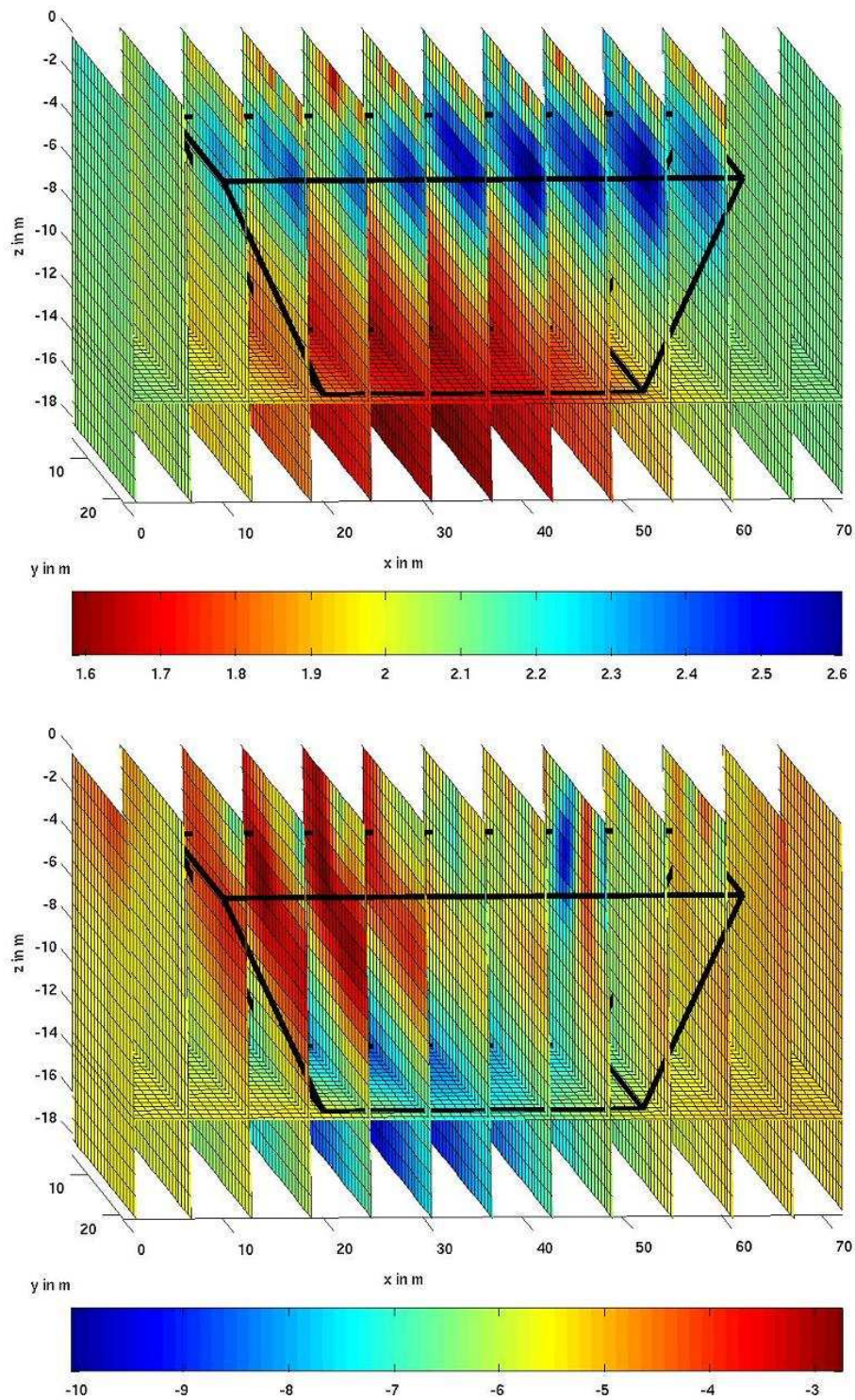


Abbildung 6.9: Inversionsergebnisse für Betrag ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ , oben) und Phase ( $mrad$ , unten). Eingezeichnet ist das Gebiet der Pseudopunkte. Invertiert wurden die reduzierten Profile 1, 3, 5, 7 und 9 vom Messgebiet Krauthausen.

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

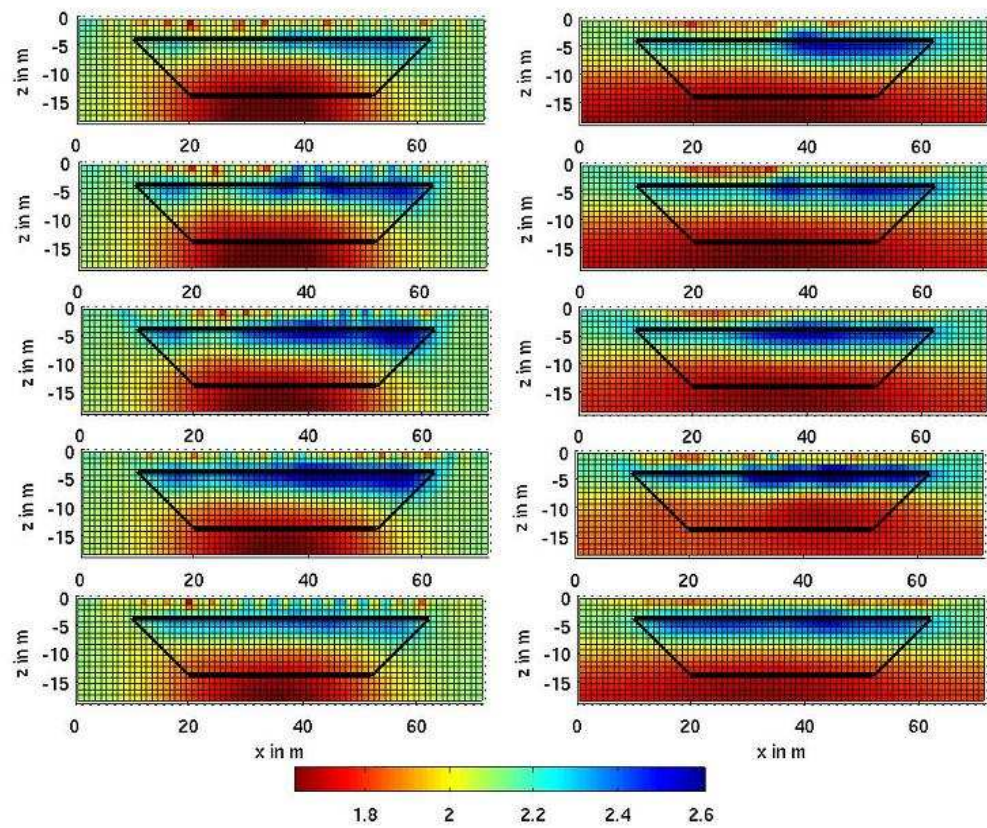


Abbildung 6.10: Inversionsergebnisse für den Betrag ( $\Omega m, \log_{10}$ ) als Schnitte entlang der Messprofile bei 3D-Inversion (links) und 2D-Inversion (rechts). Eingezeichnet ist jeweils das Gebiet der Pseudosektion. Von oben nach unten: Profil 1, 3, 5, 7, 9 ( $y=5\text{m}, 9\text{m}, 13\text{m}, 17\text{m}, 21\text{m}$ ).



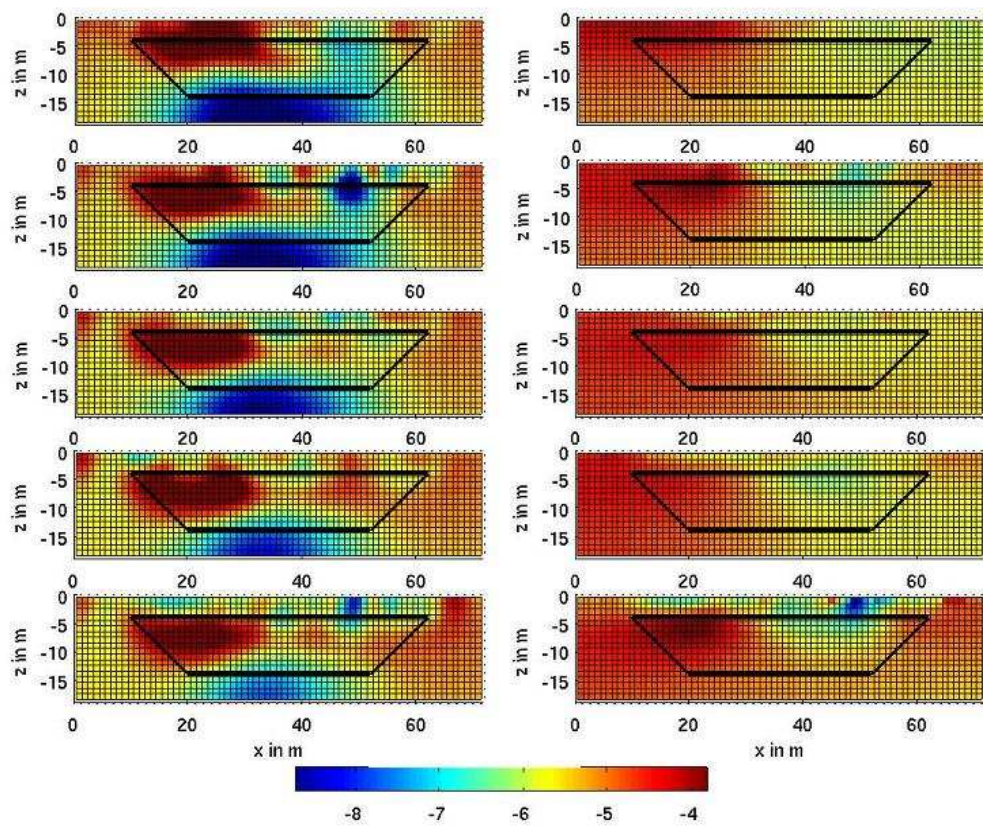


Abbildung 6.11: Inversionsergebnisse für die Phase ( $mrad$ ) als Schnitte entlang der Messprofile bei 3D-Inversion (links) und 2D-Inversion (rechts). Eingezeichnet ist jeweils das Gebiet der Pseudosektion. Von oben nach unten: Profil 1, 3, 5, 7, 9 ( $y=5m, 9m, 13m, 17m, 21m$ ).

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

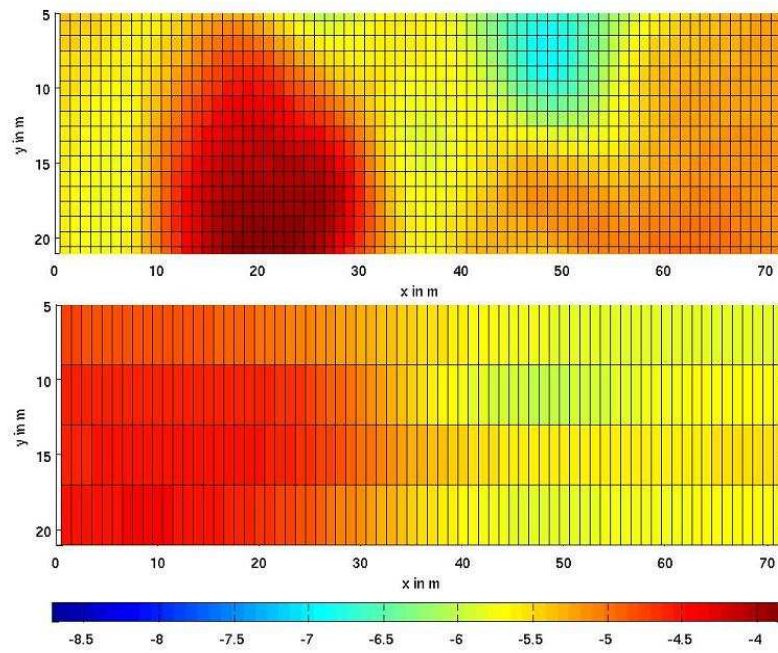


Abbildung 6.12: Inversionsergebnisse für die Phase (*mrad*) als Schnitt in  $z=-9\text{m}$  Tiefe bei 3D-Inversion (oben) und 2D-Inversion (unten).

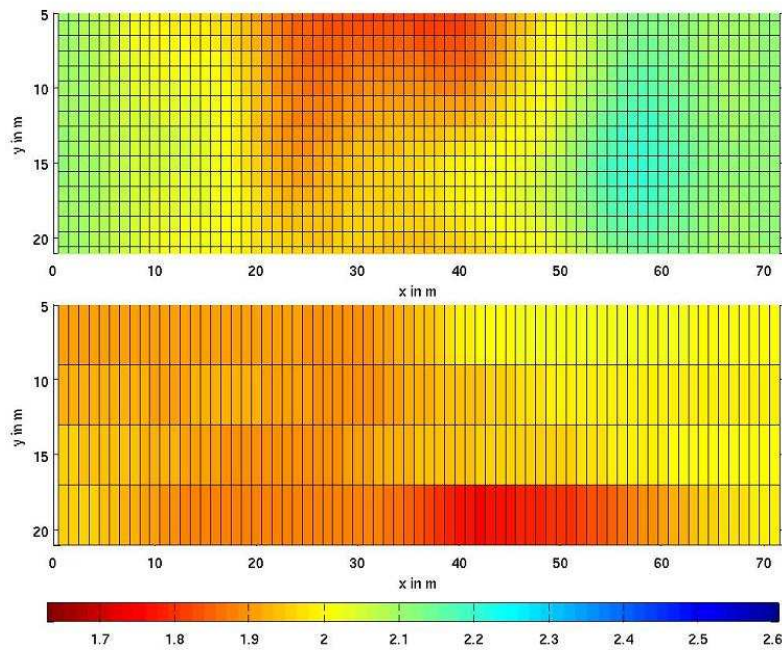


Abbildung 6.13: Inversionsergebnisse für den Betrag ( $\Omega m$ ,  $\log_{10}$ ) als Schnitt in  $z=-9\text{m}$  Tiefe bei 3D-Inversion (oben) und 2D-Inversion (unten).

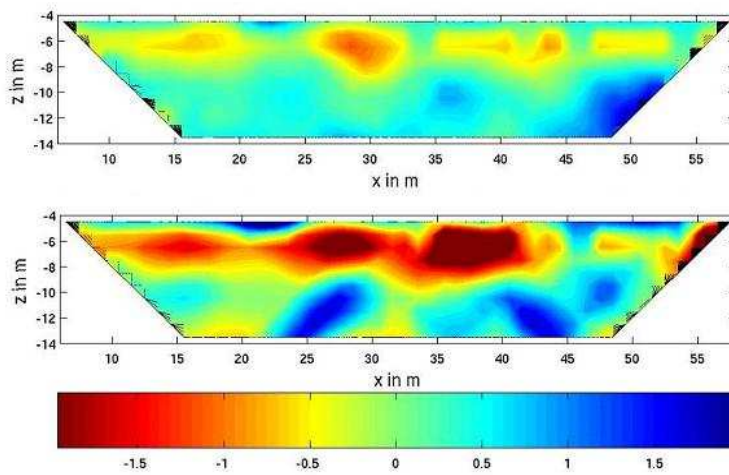


Abbildung 6.14: Anpassung an die Messdaten für den Betrag in % am Beispiel des mittleren Profils, oben: 3D-Ergebnis, unten: 2D-Ergebnis.

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

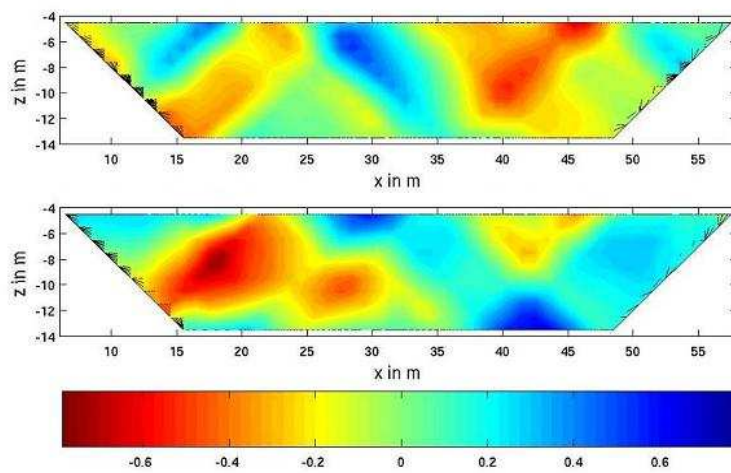


Abbildung 6.15: Anpassung an die Messdaten für die Phase in  $mrad$  am Beispiel des mittleren Profils, oben: 3D-Ergebnis, unten: 2D-Ergebnis.



## 6.2 Beschränkungen

In diesem Abschnitt soll kurz auf die computertechnischen Probleme eingegangen werden, die sich während der Inversionsläufe, allerdings auch bereits im Fall der Vorwärtsrechnung, gestellt haben. Es gibt hierbei zwei Begrenzungen, auf der einen Seite durch den Speicherplatz, auf der anderen Seite durch die Rechenzeit. Die Programmiersprache (benutzt wurde Fortran95) setzt auch Grenzen, die aber aufgrund der anderen Limitierungen unbedeutend sind.

Für die Berechnungen wurde ein Standard PC benutzt, mit einem Linux-System, einem AMD Athlon64 3000+ Prozessor und 1,0 GB Hauptspeicher. Zeitaufwändiges Parallelisieren für eine Großrechenanlage wurde bewußt vermieden, da zum einen die Vergangenheit gezeigt hat, dass ähnliche Leistung bereits kurze Zeit später auch per Einzelprozessor erreicht werden können, zum anderen erschließt man aktuell mit der Lauffähigkeit auf einem Standard-PC ein größeres Einsatzpotential (z.B. Inversion im Feld bei längerer Messkampagne, etc.).

Zwei Felder spielen im Speicher eine bedeutende Rolle. Dies ist zum einen die Matrix der Potentiale, zum anderen die der Sensitivität. Die Potentiale müssen zu jedem Knoten für jede Elektrode berechnet werden. Die Sensitivität wird zu jeder Zelle für jeden Messwert bestimmt.

Betrachtet man die Standardauslagenlänge mit gemischten Randbedingungen, genügt eine Zellenaufteilung von  $72 \times 19$  im Zweidimensionalen. (Dabei werden jeweils vier Zellen zwischen die insgesamt 17 Elektroden gesetzt und 15 in  $z$ -Richtung, aufgrund der größten Pseudotiefe, verlängert um 4 Zellen nach unten und zu den Seiten -für eine bessere Qualität bei den Randbedingungen.) Für 4m -Dipole werden 77 Messwerte benutzt, was eine Sensitivitätsmatrix von  $\approx 1,1 \cdot 10^5$  Einträgen bedeutet. Die zu berechnenden Potentiale in diesem Fall sind mit  $73 \times 20 \times 11 \times 17 \approx 2,7 \cdot 10^5$  in der gleichen Größenordnung. Die 11 fließt dadurch ein, dass für die Fourier-Kosinustransformation für alle Wellenzahlen Potentiale berechnet werden; die 17 begründet sich dadurch, dass für jede Stromelektrode eine Vorwärtsrechnung benötigt wird.

Das Verhältnis zwischen den Matrizen ändert sich mit steigender Elektrodenzahl. Während Zellen- und Knotenanzahl immer in der gleichen Größenordnung liegen (und auch die Anzahl der Wellenzahlen nur leicht variiert), hängt die Messwertanzahl, die in die Sensitivitätsmatrix fließt, in etwa quadratisch mit der Elektrodenanzahl aus der Potentialmatrix zusammen. Für die Standardauslage mit 2m Elektrodenabständen hat die Potentialmatrix etwa  $5,3 \cdot 10^5$  Einträge; bei der Sensitivitätsmatrix sind es mit bereits  $4,5 \cdot 10^5$  nun fast gleich viele.

Im Dreidimensionalen fällt die Anzahl der Wellenzahlen weg, sodass das Verhältnis der Matrixeinträge praktisch nur durch das von Elektroden zu Messwerten bestimmt wird. Da meist Profile aufgezeichnet werden und damit keine Messwerte für Elektrodenkombinationen verschiedener Profile, nimmt die Messwertanzahl nicht mehr ganz so stark in Abhängigkeit von der Elektrodenanzahl zu, wie noch im Zweidimensionalen. Das Beispiel der 5 Profile mit 4m Elektrodenabstand liefert  $\approx 3,3 \cdot 10^6$  Einträge bei den Potentialen und  $\approx 1,4 \cdot 10^7$  bei den Sensitivitäten. Damit sind bei verwendeten komplexen Variablen mit DOUBLE PRECISION - Vereinbarung (also 16 Byte-Darstellung) die Ressourcen

## 6 Inversion in drei räumlichen Dimensionen für eine Frequenz

des Hauptspeichers erschöpft. Eine Inversion dauert dabei etwa 1-2 Wochen, weil es häufig der Fall ist, dass phasenweise Daten auf die Festplatte ausgelagert werden müssen, die dann wesentlich langsamer zur Verfügung stehen.

Eine Möglichkeit der Zeitreduktion ist prinzipiell die Verwendung homogener Dirichlet-scher Randbedingungen. Dafür muss das Gitter soweit vergrößert werden, dass auf dem Rand (im Untergrund) die Potentiale genügend nahe am Wert Null für unendliche Quellentfernung liegen. Oft kann dies (bei nach außen anwachsender Zellengröße) bereits mit einem Faktor 10 in der Zellen- oder Knotenanzahl erreicht werden. Damit muss nicht mehr für jede Elektrodenposition eine Vorwärtsrechnung durchgeführt werden, sondern diese Operation geschieht nun in Konstantzeit, unabhängig von der Elektrodenzahl (siehe auch Kapitel 3). Besonders im Dreidimensionalen wäre dies interessant, da hier leicht Hunderte von Elektroden auftreten können. Leider kann ein hinreichend großes Gitter nicht im Speicher verwaltet werden, sodass ein Auslagern auf die Festplatte den Zeitgewinn nicht nur zunichte macht, sondern potentielle Rechenzeiten in Größenordnungen von Jahren verschiebt. Für aufwändigere 2D-Modelle war die Berechnung auf größeren Gittern ohne gemischte Randbedingungen in jedem Fall ein zeitlicher Vorteil.

Mit den benutzten gemischten Randbedingungen im 3D-Fall wurden die Möglichkeiten des Rechners fast vollständig ausgeschöpft. Die Hauptspeicherbelegungen waren typischerweise dauerhaft über 85%, womit kein Spiel für entscheidend größere Gitter gegeben war. Die Rechenzeit in der Größenordnung von 1-2 Wochen war noch akzeptabel. Insbesondere die Schleife über die Elektroden bei der Vorwärtsrechnung im Fall gemischter Randbedingungen hätte sich für eine Parallelisierung angeboten, wurde aber aus den bereits genannten Gründen nicht durchgeführt. Die Lauffähigkeit der Programme konnte in jedem Fall nachgewiesen werden.

## 7 Feldpraxis und Messgebiet

Ein Inversionsalgorithmus muss sich nicht nur an synthetischen, sondern immer auch an realen Messdaten bewähren. Die vorangehenden Kapitel stellen die Inversion in den Vordergrund. Es geht dort im Zusammenhang mit Messdaten nicht um Feldstudien und das Messgebiet im Besonderen, sondern darum, mit diesen Daten das Inversionsprogramm zu testen. Messdaten wurden hierfür aufgezeichnet auf dem Testfeld Krauthausen bei Jülich, bei Cuxhaven und im Labor (der RWTH Aachen). Der Schwerpunkt liegt hierbei deutlich auf Krauthausen, insbesondere aufgrund der vorhandenen Datenmenge, weil hier bereits eine Vielzahl von geophysikalischen Messungen durchgeführt wurde und der Untergrund recht gut bekannt ist.

Unterkapitel 7.1 beschäftigt sich mit den beiden Messgebieten und ihrer Lithologie, wobei das Testfeld Krauthausen auch hier den größten Teil einnimmt. 7.2 zeigt dann allgemeiner die Eckdaten einer Feldmessung und die Unterschiede zwischen synthetischen und realen Daten auf.

### 7.1 Messgebiet

#### 7.1.1 Das Testfeld Krauthausen

Das Testfeld Krauthausen liegt etwa 7km südöstlich von Jülich und ist eine weitgehend ebene Fläche mit einer Ausdehnung von etwa 60 mal 200 Metern. Die ehemalige landwirtschaftliche Nutzfläche wurde 1993 im Rahmen eines EU-Projektes (zum Transport von Pestiziden in Aquiferen) vom Forschungszentrum Jülich eingerichtet. Es wurden rund 80 Bohrungen bis in Tiefen von 10-20 Metern unter Geländeoberkante (GOK) niedergebracht. Die GOK liegt zwischen 98,0 und 98,5m ü. NN. Der Grundwasserstand schwankt saisonal zwischen 1,3 und 2,6m Tiefe unter GOK (z.B. [Schulze, 1996]).

Die Fläche liegt in der südlichen Niederrheinischen Bucht. Diese wurde durch tektonische Bewegungen, die im Tertiär (rund 65 bis 2 Mio. Jahre vor heute) begannen, abgesenkt. Als Folge ist der Gebirgssockel mit bis zu 1000m mächtigen Sedimentschichten überdeckt. Diese bestehen aus einer Wechselfolge von Tonen, Sanden, Kiesen und Braunkohlen, wobei die Kiese und Sande Aquifere darstellen, die Tone und Kohlen Grundwasserstauer. Die südliche Niederrheinische Bucht wird durch die Hauptstörungen in Rur-, Erft- und Kölner Scholle unterteilt, wobei das Testgebiet auf einer Zwischenscholle zwischen Rur- und Erftscholle liegt. Die Abbildungen 7.1 und 7.2 zeigen die Verhältnisse in der Karte bzw. als Schnitt.

Für unsere Untersuchungen ist nur das oberste Grundwasserstockwerk von Bedeutung, das im Bereich der Zwischenscholle eine Mächtigkeit zwischen 5 und 35 Metern besitzt. Die Stratigrafie ist aufgrund der Vielzahl von Bohrungen bekannt und es wurde ein geo-

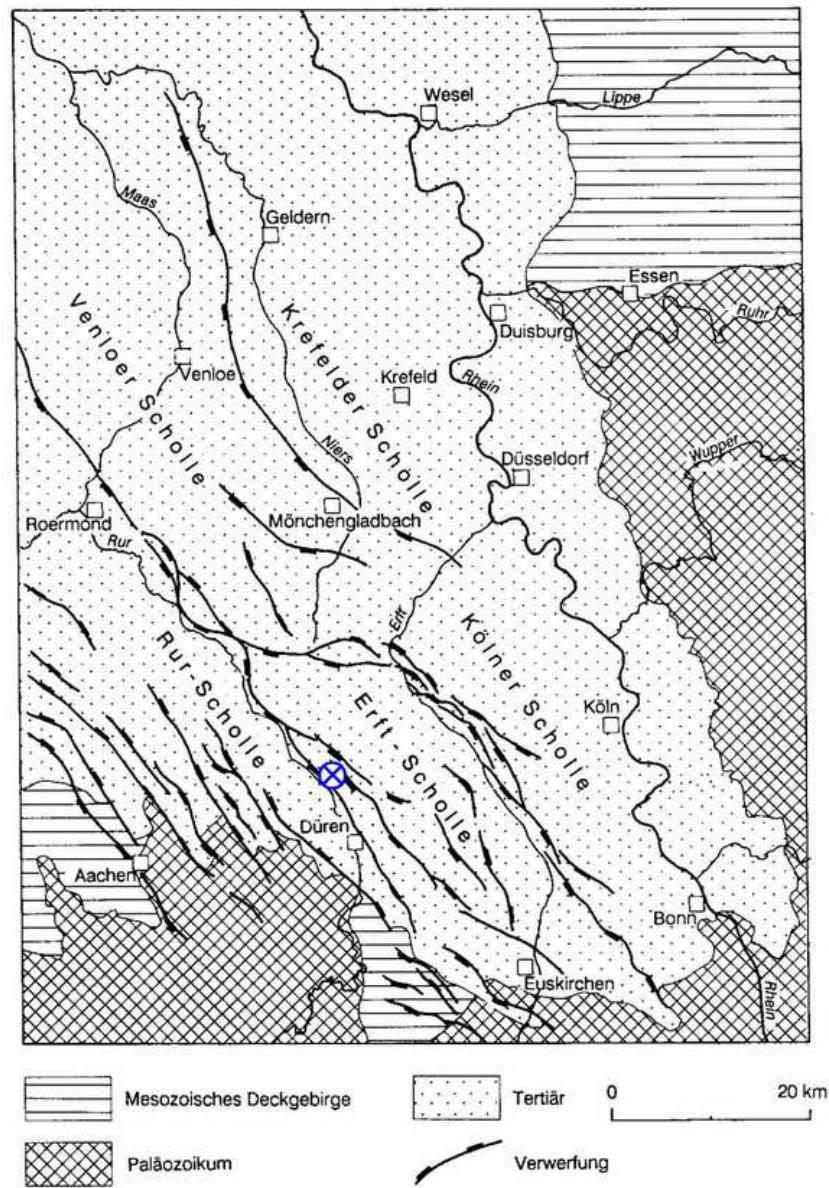


Abbildung 7.1: Tektonische Übersichtskarte der Niederrheinischen Bucht (ohne Quartärbedeckung). Das Testfeld bei Jülich liegt im Bereich zwischen Erft- und Rurscholle (blaue Markierung). Abbildung nach [Walter, 1992].

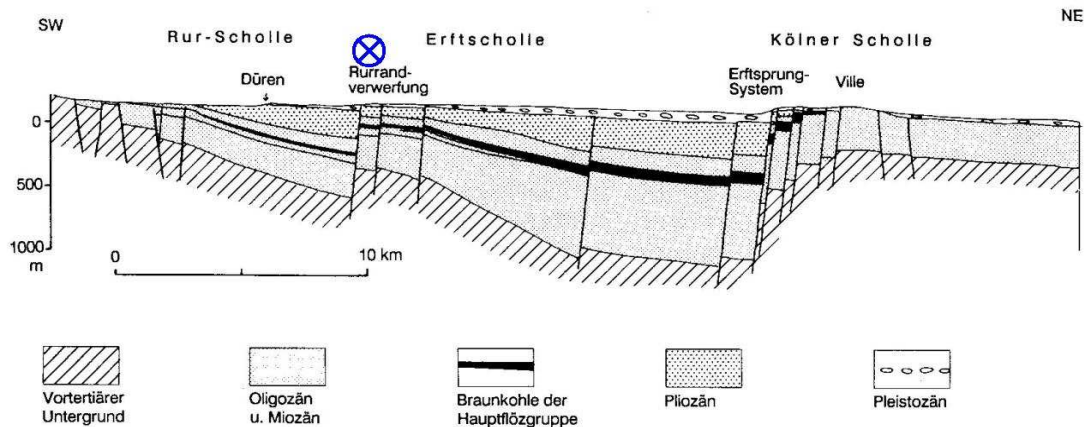


Abbildung 7.2: Geologisches Profil durch die Niederrheinische Bucht von SW nach NO über Düren. Projektion der Lage des Feldes ist markiert. Abbildung nach [Walter, 1992].

logisches Normalprofil, siehe Abbildung 7.3 erstellt. Demnach ist eine erste Aquiferbasis bei etwa 11-13m unter GOK zu erwarten. Auch wenn man von einem geschlossenen Grundwasserstauer ausgeht ([Höpner, 2001]), so wurden die Tonlagen doch nicht in allen Bohrungen (z.T. vermutlich mangels entsprechender Bohrtiefe) nachgewiesen und auch Tracerversuche ([Englert et al., 2000]) deuten räumliche Heterogenität der hydraulischen Durchlässigkeiten an. Das Normalprofil kann also nur eine grobe Richtlinie sein und meint nicht, dass das Testfeld praktisch einen 1D-Fall darstellt. Eine deutliche Horizontalschichtung kann allerdings angenommen werden. In [Vereecken et al., 2000] wird nicht nur ein recht kleiner hydraulischer Gradient (Gefälle des fließenden Wassers) von etwa 0,2% beobachtet, sondern insbesondere ein Faktor 10 zwischen horizontaler zu vertikaler Korrelationslänge (statistisches Maß für die Wiederholung von Strukturen). Dies lässt auch eine Abschätzung für eine sinnvolle anisotrope Glättung zu.

Im Rahmen dieses Projektes wurden bereits zwei Diplomarbeiten verfasst ([Suckut, 2001] und [Zisser, 2005]), die IP-Daten von Krauthausen analysieren. Der ersten Arbeit liegen nur drei Profile zugrunde (LP, Q80, Q100), da zu diesem Zeitpunkt noch mit einer Einkanal-Apparatur (SIP-Fuchs) gemessen wurde. Die zweite Arbeit behandelt bereits 12 Profile (B22, B32, P1-P10, gemessen mit SIP-256C, 32 Kanäle), legt aber den Schwerpunkt deutlich auf die Interpretation nach hydrologischen Parametern. Abbildung 7.4 zeigt das Testfeld mit den Profilen, über die gemessen wurde, und mit Borhlochlochpositionen. Die Daten werden als Testdaten für das Inversionsprogramm benutzt. Ergebnisse finden sich in den entsprechenden Kapiteln.

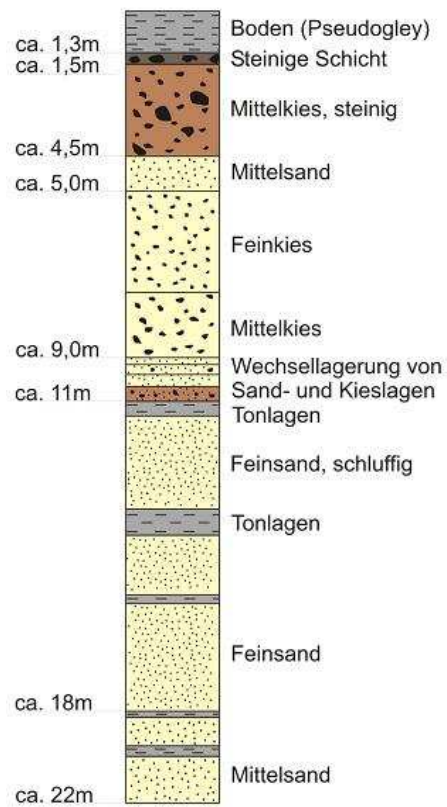


Abbildung 7.3: Lithologisches Normalprofil zum Testfeld Krauthausen. Abbildung nach [Höpner, 2001].

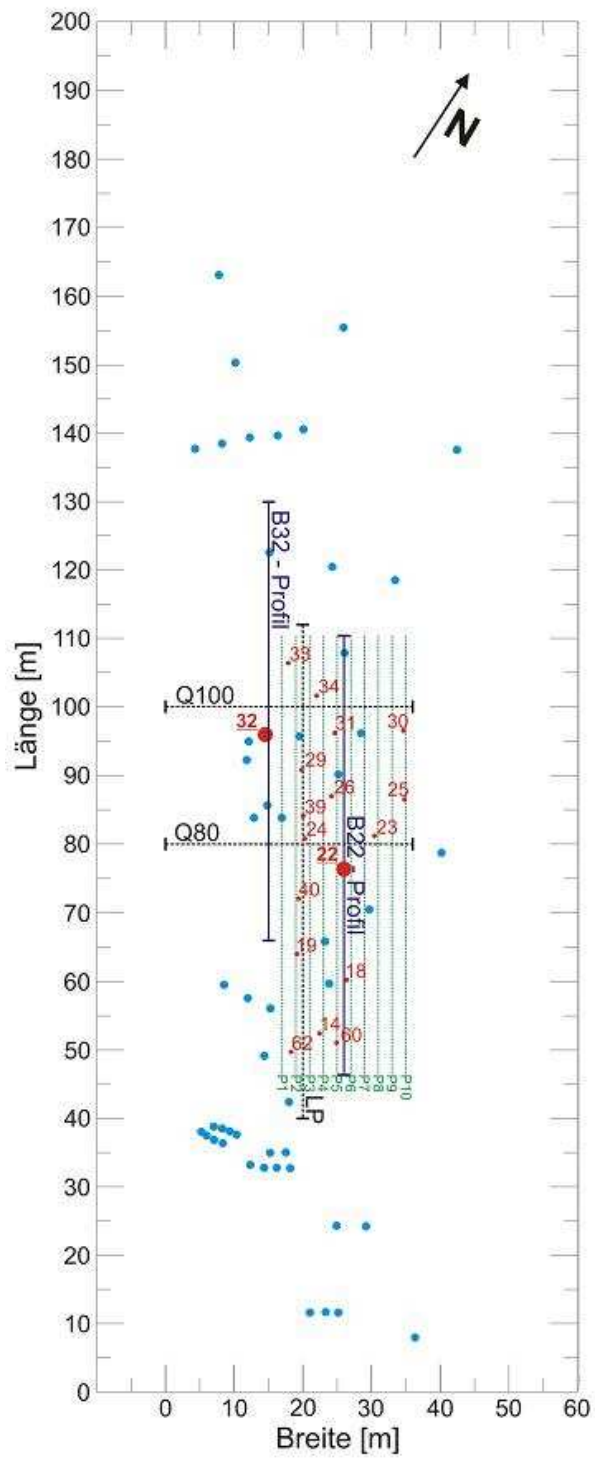


Abbildung 7.4: Lage von Messprofilen und Bohrungen auf dem Testfeld Krauthausen.  
Abbildung nach [Zisser, 2005].

### 7.1.2 Das Messgebiet Cuxhaven

Das Gebiet Cuxhaven beinhaltet vier verschiedene kleinere Messfelder, die bis zu 6km auseinander liegen. Die Küstennähe bewirkt hier eine sehr hohe Leitfähigkeit des Grundwassers. Flächenhaft ist die Leitfähigkeitsstruktur aus Hubschrauberbefliegungen mit EM-Messungen bekannt, durchgeführt vom Bundesamt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR, [Siemon and Eberle, 2001]), lokal wurden vom Institut für Geowissenschaftliche Gemeinschaftsaufgaben (GGA) Bohrungen und weitere geophysikalische Messungen durchgeführt. Somit ist auch hier der Untergrund bekannt und eignet sich als Testfeld. Die Lithologie unterscheidet sich deutlich von der in Krauthausen. Abbildung 7.5 zeigt ein Bohrprofil, das überwiegend aus Feinsand besteht, mit einer Tonschicht in etwa 10m Tiefe. Der Grundwasserspiegel bei der Bohrung lag mit 1,8m unter GOK in der Größenordnung der Werte für Krauthausen.

## 7.2 Feldpraxis

Die zur Verfügung stehende Messapparatur SIP-256C beinhaltet eine Base-Unit und 32 Remote-Units (RUs). Die Stromversorgung geschieht über eine 600W Quelle, die von einem Generator versorgt wird oder über die interne Quelle der Base-Unit von 50W, die über eine 12V-Autobatterie ihre Leistung bezieht. Der Abstand zwischen den einzelnen RUs ist durch die Anschlusskabel auf 10m begrenzt; in der Praxis wurden bisher meist Abstände von 2m verwendet, wofür bereits bei den weiteren Auslagen die Signale sehr schwach werden. Damit ergibt sich eine Auslagenlänge von 64m (an der letzten RU können zwei Elektroden angeschlossen werden).

Die Steuerung der Messung erfolgt über ein Messprogramm, das auf einem angeschlossenen Feld-Notebook läuft. Das Messprogramm ruft eine Initialisierungsdatei auf, in der die Daten für den Messablauf festgelegt werden. In dieser werden die Koordinaten zu den Elektrodennummern angegeben, weiterhin die Konfigurationen von einspeisenden und Spannung messenden Dipolen (zusammen als „reading“ bezeichnet). Bei der Abfolge der Messkonfiguration ist es sinnvoll zu berücksichtigen, dass Elektroden, die zuvor als Stromelektroden benutzt wurden, später nicht mehr als Spannungselektroden verwendet werden, da ggf. entstandene Eigenpotentiale das Ergebnis der Spannungsmessung verfälschen könnten. Da auch größere Dipolweiten durch Einspeisen an zwei nicht direkt benachbarten Elektroden eingesetzt werden, um ein größeres Dipolmoment zu erreichen, ist besonders auf die Abfolge der Stromdipole zu achten. Eine mögliche und verwendete Lösung ist in Tabelle 7.1 dargestellt.

Neben den Auslagen werden auch die Messfrequenzen mit der zugehörigen Anzahl von Wiederholungen festgelegt. Im Handbuch sind die möglichen Frequenzen mit 1,4mHz bis 800Hz angegeben. In der Praxis liegen die niedrigsten Frequenzen bei etwa 70mHz, da sonst bei rund 50 nötigen readings für 32 RUs ein Messtag und auch die Batterien der RUs nicht ausreichen.

Im oberen Frequenzbereich dominieren zunehmend Fehler aus Kabelkopplungseffekten, weshalb trotz hoher Stapelungsanzahl Daten zu Frequenzen über 10Hz ohne weitere Behandlung kaum interpretiert werden können (siehe hierzu auch Unterkapitel 5.1). Im



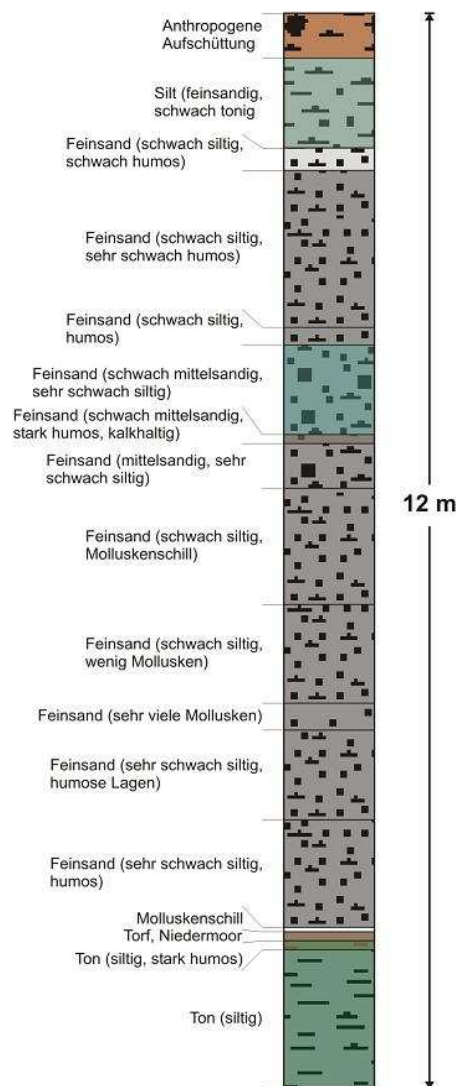


Abbildung 7.5: Lithologisches Profil zu einer Lokation im Testgebiet Cuxhaven. Abbildung nach [Zisser, 2005].

unteren Frequenzbereich leidet die Datenqualität aufgrund zu geringer Anzahl von Wiederholungen. Als guter Frequenzbereich hat sich der um 0,3 - 1,25Hz herausgestellt, in dem Wiederholungen nicht zu viel Zeit kosten und kaum Kopplungseffekte auftreten. Auf diesen Bereich haben sich entsprechend die meisten (Einzelfrequenz-) Inversionen bezogen.

SIP-256C ist eine echte Multikanalapparatur, die für jedes Reading an allen RUs (die nicht an der Stromspeisung beteiligt sind) Spannungen gleichzeitig aufzeichnet. Die Spannungsdipole werden also nicht durchgeschaltet. Ein kleiner Nachteil ist, dass jeweils eine recht große Datenmenge zusammenkommt und bei evtl. Filtern (50Hz, Drift, etc.)

reading	Elektroden-Positionen														
1	C	C	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	...
2		C	C	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	...
3	C	-	C		P	-	P	-	P	-	P	-	P	-	...
4			C	C	P	P	P	P	P	P	P	P	P	P	...
5				C	C	P	P	P	P	P	P	P	P	P	...
6			C	-	C		P	-	P	-	P	-	P	-	...
7	C	-	-	-	C				P	-	-	-	P	-	...
8					C	C	P	P	P	P	P	P	P	P	...

Tabelle 7.1: Abfolge von Strom- und Spannungsdipolen bei Verwendung von Dipolen mit ein-, zwei- und vierfachem Elektrodenabstand. *C*: Stromelektrode, *P*: Spannungselektroden, *-*: Verbindung bei nicht benachbarten Elektroden.

die Übertragung recht lange dauert. Da nicht die Daten von einzelnen Dipolen angefordert werden können, wird insbesondere bei fortschreitender Messung der weitaus größte Teil der Daten (zu den linken Elektroden in 7.1), die gesendet werden, nicht mehr benutzt. Auch bei Dipollängen mit mehrfachen Elektrodenabständen werden Spannungen von den überbrückten Elektroden gesendet. Ebenso werden Daten zu sehr großen Pseudotiefen produziert, die weit außerhalb der Auflösungsmöglichkeiten liegen. Insgesamt können je nach Stapelungen ein bis zwei vollständige Profile (mit allen RUs und etwa 15 Frequenzen) an einem Messtag aufgezeichnet werden.

Um einen Überblick über typisches Fehlerverhalten zu erlangen, werden im Folgenden Fehlerniveaus in Abhängigkeit von verschiedenen Parametern dargestellt. Die verwendeten Fehler stehen hierbei jeweils zusammen mit den Messdaten in der Ausgabedatei.

Zu Beginn stellt Abbildung 7.6 den Zusammenhang zwischen Fehlerniveau und Pseudotiefe dar. Sowohl in Betrag als auch in der Phase sieht man einen in etwa exponentiellen Anstieg des Fehlers mit der Pseudotiefe. Bei konstantem Rauschen wird ein Ansteigen des Fehlers durch die stark abnehmenden Potentiale bewirkt, allerdings erwartet man kein exponentielles Verhalten. Dieses Verhalten ist ungeklärt. Insgesamt sinkt die Aussagekraft also stark mit der Tiefe, wie es auch schon in den Sensitivitäten (s. Abbildung 3.3) beobachtet wurde. Für die Grafik 7.6 wurde über alle Frequenzen und Dipolweiten gemittelt. Zu beachten ist noch, dass das Fehlerniveau des Betrags mit Fehler unter 1% bis in etwa 25m Tiefe deutlich unproblematischer ist als das der Phase. 1mrad wird bereits in etwa 15m Tiefe überschritten; bei Messwerten um 10mrad ist dies schon am Rand eines akzeptablen Fehlerniveaus.

Ein Bild über die räumliche Abhängigkeit des Fehlerniveaus gibt auch 7.7. Die weitere Erkenntnis liegt darin, dass man durch größere Dipolweiten (jeweils Verdopplung von oben nach unten) zwar eine geringere Datenpunktdichte erhält, aber dafür ein deutlich verbessertes Fehlerniveau. Betrachtet man Gleichung 3.16 und setzt  $a$  als Dipollänge und  $L$  als Abstand der Dipolmitten, so schreibt sich die Formel für eine Dipol-Dipol Auslage als

$$V = \frac{\rho I}{\pi} \cdot \frac{a^2}{L(L^2 - a^2)}. \quad (7.1)$$

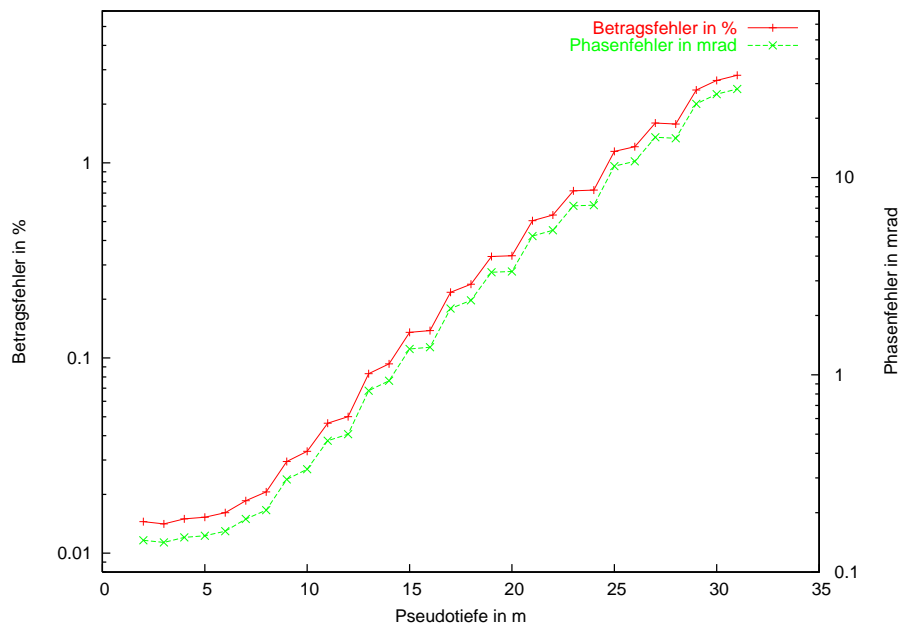


Abbildung 7.6: Abhängigkeit des Fehlerniveaus von der Pseudotiefe. Gemittelt wurde jeweils über alle Daten gleicher Pseudotiefe des *B22*-Profils bei Krauthausen.

Damit ist für große Tiefen ( $L \gg a$ ) die Spannung proportional zum Quadrat der Dipollänge, entsprechend verbessert sich das Signal/Rausch Verhältnis.

Ein weiterer Aspekt, der in Abbildung 7.7 zu erkennen ist, ist die laterale Variation der Fehler. Die Datenqualität wird offenbar zur rechten Bildseite hin schlechter. Dies hängt damit zusammen, dass die Base-Unit auf der linken Seite steht und von dort aus die Kabel an die RUs geführt werden. Je weiter rechts der stromeinspeisende Dipol liegt, desto länger ist das stromführende Kabel, und die störenden Kopplungseffekte der Kabel mit dem Boden nehmen zu. Durch die Benutzung von optischen Datenkabeln wird die kapazitive Kopplung zwischen Stromkabeln und denen zur Spannungsmessung vermieden. Da weiterhin der Strom direkt an beiden Stromelektroden gemessen wird, kann auch die Kopplung der Stromkabel untereinander beseitigt werden. Damit ist es möglich, den kapazitiven Leckstrom zu quantifizieren. Allein die Kopplung der Stromkabel mit dem Boden sorgt also für störende Kopplungseffekte. Hierbei ist zu berücksichtigen, dass der Fehler von  $\rho$  insbesondere proportional zu Frequenz und der Kabelkapazität gegen den Erdboden ist. Letztere ist wiederum proportional zur Länge des Stromkabels. Weitere Einflüsse kommen von den Übergangswiderständen, die möglichst klein und zudem gleich groß sein sollten. Mehr hierzu in [Radic, 2004].

Als Nächstes soll noch die Frequenzabhängigkeit der Datenqualität betrachtet werden. Hierzu wird (wie auch in 7.6) über alle Pseudotiefen und Dipolweiten gemittelt. Weiterhin wird der Fehler auf eine gemessene Periode zurückgerechnet, um die verschiedenen Frequenzen, für die unterschiedlich oft gestapelt wurde, direkt vergleichen zu können.

## 7 Feldpraxis und Messgebiet

Dabei wird das statistische Verhalten benutzt, dass  $n$ -faches Stapeln das Fehlerniveau um einen Faktor  $\sqrt{n}$  senkt. Das Ergebnis ist in Abbildung 7.8 dargestellt.

Man erkennt deutlich einen mit der Frequenz ansteigenden Fehler, wobei der große Fehler bei 40Hz vermutlich durch eine lokale Störung (es wurden nur Daten des B22-Krauthausenprofils benutzt) zu erklären ist und der Anstieg hier zu stark ausfällt. Betrachtet man weiterhin die Größenordnung der Fehler, so liegen diese für den Betrag oberhalb von etwa 5Hz in einem kritischen, für die Phase praktisch durchgehend in einem nicht akzeptablen Bereich. Grund ist das Rückrechnen auf eine gemessene Periode. In Wirklichkeit ist die Datenqualität für hohe Frequenzen aufgrund der höheren Stapelrate besser.

Aufgrund der geringen zusätzlich nötigen Messdauer (und der höheren Fehler) werden die oberen Frequenzen in der Regel häufiger gestapelt als die unteren. Dies bewirkt zum einen, dass die Fehler sinken, zum anderen, dass die Fehlerniveaus niedriger und höherer Frequenzen sich annähern. Da Wiederholungen in den untersten Frequenzen sehr viel Zeit kosten, kommt es insgesamt sogar zu dem Effekt, dass die Daten bei den niedrigsten Frequenzen nicht mehr den kleinsten Fehler aufweisen, den man aufgrund der deutlich geringeren EM-Kopplung erwarten könnte. Abbildung 7.9 zeigt die Frequenzabhängigkeit für typische Stapelraten.

Als Konsequenz werden bei Inversion von Daten einzelner Frequenzen meist Spektren von etwa 0,3 bis 1,5Hz bevorzugt.

Abschließend soll noch auf die Tatsache hingewiesen werden, dass die gezeigten Fehler sich immer nur aus statistischer Behandlung von Wiederholungsmessungen ergeben. Systematische Fehler bleiben hierbei unberücksichtigt. Bei der Inversion zeigt sich jedoch oft, dass eine Datenanpassung auf dem angegebenen Fehlerniveau der Messdaten unmöglich ist. Dies liegt daran, dass insbesondere im Betrag die systematischen Fehler oft deutlich größer als die statistischen sind. Bei einem Elektrodenabstand  $a$  von 2m überschreitet man nach Gleichung 7.1 bei um einen Zentimeter falsch gesetzten Elektroden bereits eine Spannungsungenauigkeit von einem Prozent ( $V$  in etwa  $\propto a^2$ ). Damit bleiben angegebene Fehlerniveaus unter 0,1% ohne praktische Bedeutung. Es zeigt sich sogar, dass oftmals für alle Pseudotiefen ein einziges Fehlerniveau für die Inversion angenommen werden kann. Die Phasen sind allerdings nicht so leicht durch ungenau positionierte Elektroden zu beeinflussen.

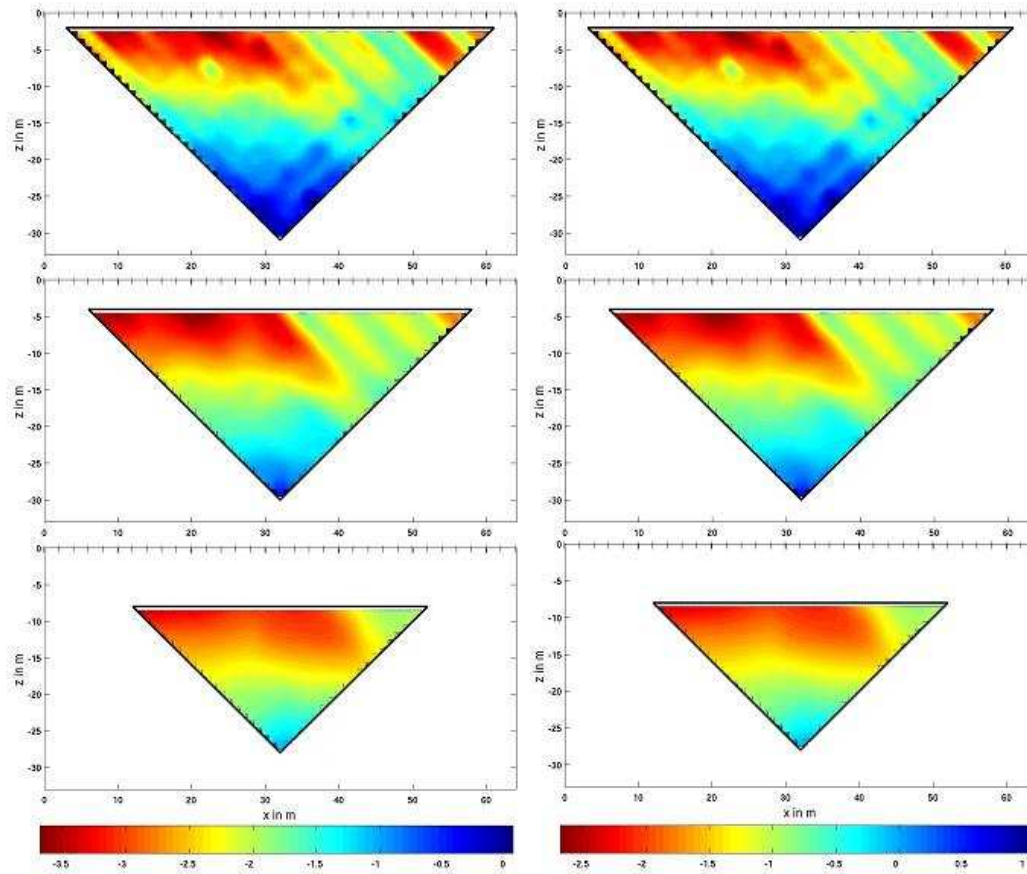


Abbildung 7.7: Abhängigkeit des Fehlerniveaus von der Dipolweite. Einfacher (oben), doppelter (Mitte) und vierfacher (unten) Dipolabstand. Dargestellt sind die mittleren Fehler von Betrag in % (links) und Phase in mrad (rechts), jeweils 10er-logarithmisch. Es wurde über alle Frequenzen gemittelt und die Daten des  $B22$ -Profils von Krauthausen benutzt.

## 7 Feldpraxis und Messgebiet

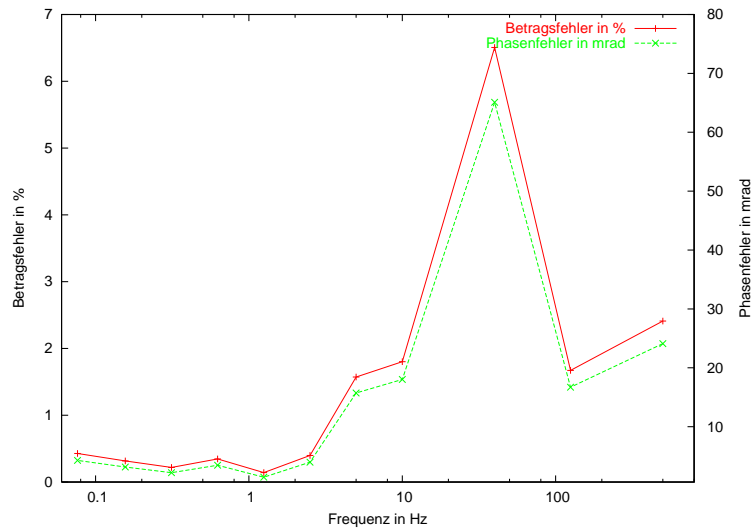


Abbildung 7.8: Abhängigkeit des Fehlerniveaus von der Frequenz. Dargestellt sind die mittleren Fehler von Betrag in % und Phase in mrad, jeweils auf Messung einer Periode zurückgerechnet. Datengrundlage ist das *B22*-Profil von Krauthausen.

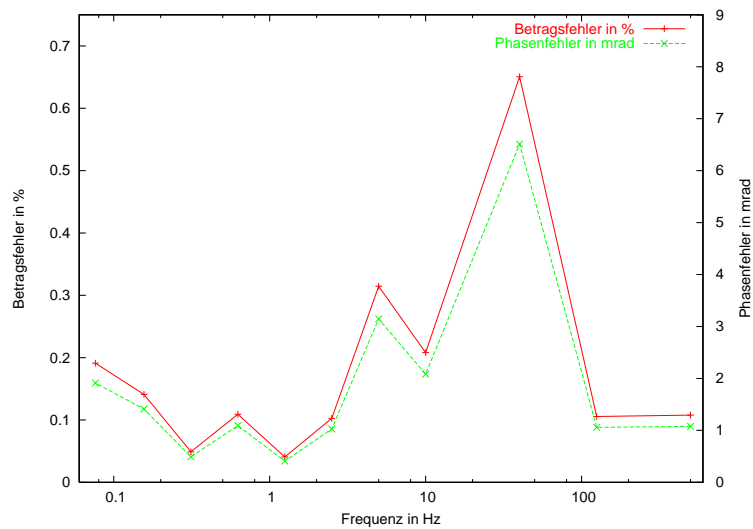


Abbildung 7.9: Abhängigkeit des Fehlerniveaus von der Frequenz. Dargestellt sind die mittleren Fehler von Betrag in % und Phase in mrad. Die Werte sind von den verschiedenen Stapelraten beeinflusst. Datengrundlage ist das *B22*-Profil von Krauthausen.

# 8 Zusammenfassung und Ausblick

## 8.1 Zusammenfassung

Der Basisalgorithmus für die 2D-Inversion in einer Frequenz nach *Kemna* [2000] ist in einer Vielzahl von Punkten erweitert worden, wobei vollständig eigenständige Programme entstanden sind: für die 2D-Inversion einer Frequenz (mit oder ohne Berücksichtigung der Topografie), die 2D-Inversion mehrerer Frequenzen gleichzeitig (in ein Cole-Cole- oder CPA-Modell) und die 3D-Inversion einer Frequenz.

Bei der 2D-Inversion in einer Frequenz ist der wichtigste Aspekt die Einführung der neuen Regularisierung, die sich als sehr vielfältig anwendbar erwiesen hat (siehe Unterkapitel 4.1). Durch Variation des Parameters  $\beta$  kann dabei nach wie vor auch eine Glättungsbedingung simuliert werden. Ansonsten ermöglicht die Regularisierung insbesondere die Auflösung scharfer Parametervariationen. In der Anwendung auf Felddaten über einem Gebiet mit bekannter Lithologie haben sich glaubwürdigere Modelle als bei einer üblichen Occambedingung (siehe Unterkapitel 4.3) ergeben. Es ist hier gezeigt worden, dass aufgrund der Vielzahl von Modellen, die einen Messdatensatz erklären können, die Regularisierung entscheidend zum Verständnis des Untergrundes beiträgt und die hier erstellte Variante für vielfältigste Anwendungen geeignet ist, insbesondere, wenn kein glattes Untergrundmodell erwartet wird.

Für den 2D-Fall ist außerdem die Inversion für flexible Topografie entwickelt worden (siehe Unterkapitel 4.2), sodass das Potential der Finite Elemente Methode weiter ausgeschöpft werden kann. Neben der Anwendungsmöglichkeit bei Feldmessungen mit unebener Topografie hat sich die Inversion auch (für Zylindergeometrien) für Labordaten als nützlich erwiesen. Gerade letztere Anwendung ist von Bedeutung, da zur Bestimmung hydraulischer Parameter zur Zeit eine Vielzahl von Messungen im Labor stattfindet (z.B. im Forschungszentrum Jülich oder an der RWTH Aachen).

Als Nächstes ist die Inversion erweitert worden, um den spektralen Informationsgehalt zu nutzen und der Bezeichnung SIP-Inversion gerecht zu werden. Es sind mehrere Ansätze zur Kompensation der EM-Kopplung vorgestellt worden (siehe Unterkapitel 5.1), die sich allerdings nur teilweise als praktikabel erwiesen haben. Im Folgenden sind Inversionen in Untergrundmodelle der weit verbreiteten Typen Cole-Cole (Unterkapitel 5.2) und CPA (Unterkapitel 5.3) bereit gestellt worden. Dabei wird sowohl eine direkte Inversion in Untergrundmodelle ermöglicht als auch Standardinversionen in komplexe Leitfähigkeiten mit anschließender Modellanpassung. Die interne Umstellung von komplexer auf reellwertige Arithmetik, insbesondere bei der Datenanpassung in Betrag und Phase, ist hier ein deutlicher Fortschritt.

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

Es bleibt festzuhalten, dass für Felddaten eine Kompensation der Hochfrequenz-Kopplung aufgrund der geringen Frequenzanzahl (im Vergleich zu der Anzahl freier Parameter des anzupassenden Modells) äußerst schwierig und zur Zeit Labordaten vorbehalten ist, die auch einen weiteren Frequenzbereich abdecken und eine bessere Datenqualität haben. Trotzdem konnte anhand von synthetischen Daten die Machbarkeit der Anpassung eines Relaxationsmodells nachgewiesen werden. Aufgrund des engen Zusammenhangs zwischen Cole-Cole Parametern und Materialeigenschaften und wegen des besseren Überblicks über das Spektralverhalten im Vergleich zu der Angabe eines komplexen Widerstandes zu jeder Frequenz, bleibt die Multifrequenz-Inversion attraktiv.

Als Abschluss ist eine Inversion für drei räumliche Dimensionen geschrieben worden, die naturgemäß die größten Änderungen für den Basisalgorithmus bedeutet hat. An die Stelle der Fourier-Kosinustransformation sind eine Fülle anderer Unterprogramme getreten, und auch die Elementmatrizen sind vollständig ersetzt worden. Wie bei den direkten Multifrequenzinversionen, haben sich auch hier vollständig eigenständige Programme ergeben.

Die Lauffähigkeit ist nachgewiesen worden (siehe Unterkapitel 6.1), wenn auch mit begrenzter Gittergröße. Für das Feldbeispiel ist die Datenmenge reduziert worden, trotz allem sind die Ergebnisse gut und die Datenanpassung besser als im Fall einzelner 2D-Inversionen.

Abschließend sind die kritischen Punkte bezüglich Laufzeit und Speicherkapazität dargestellt worden (siehe Unterkapitel 6.2), um abschätzen zu können, welche Rechnerressourcen für welche Probleme benötigt werden.

Die Interpretation in ein konsistentes Untergrundmodell in drei Dimensionen (im Gegensatz zu evtl. Problemen beim Aneinandersetzen von 2D-Schnitten) ist besonders für die Zukunft von Bedeutung, wenn dann auch übliche Feld-PCs in der Lage sein werden, Daten (vermehrt flächenhaft durch Multikanalapparaturen aufgezeichnet) in akzeptabler Zeit zu invertieren. Die Anwendungen sind auch hier zahlreich, wobei besonders der Bereich Hydrogeophysik mit Grundwasserkartierungen hervorzuheben ist. Zum einen ist hierbei eine flächenhafte Datenaufnahme praktisch unverzichtbar, zum anderen ist dies die für das DFG-Projekt, in dessen Rahmen diese Arbeit erstellt worden ist, relevante Anwendung. Dreidimensional begrenzte Untersuchungsobjekte finden sich allerdings auch häufig in Anwendungen der Umweltgeophysik (z.B. heterogene Strukturen einer Mülldeponie), Erzexploration, etc..

Das Ziel dieser Arbeit wurde also erreicht, für verschiedenste Typen von SIP-Datensätzen Programme zur Verfügung zu stellen, die dem Untergrund ein (komplexwertiges) Widerstandsmodell zuordnen. Aufgrund der begrenzten Anzahl an Messdatensätzen (sowohl SIP als auch Hydrogeologie) konnte allerdings nicht abschließend geklärt werden, in welchen Fällen die empirischen Beziehungen zwischen elektrischer und hydraulischer Leitfähigkeit anwendbar sind. Da aber diese Beziehungen von verschiedenen Arbeitsgruppen (dabei auch am Forschungszentrum Jülich und an der RWTH Aachen) weiter untersucht werden und die Grundwasserprospektion in der Zukunft aller Voraussicht nach von großer Bedeutung sein wird, werden vermutlich auch bald Felddatensätze vorhanden sein, die



zur Programmoptimierung führen können. Die aktuelle Datenqualität, Aussagetiefe und Geschwindigkeit der Datenaufzeichnung machen die SIP hierbei unter allen elektrischen und elektromagnetischen Verfahren zur Bestimmung der Untergrundleitfähigkeit zur geeignetsten Methode.

Selbst wenn vermutlich keine Aussage über die hydraulische Leitfähigkeit des Bodens allein aufgrund von SIP-Daten ohne kalibrierende Bohrungen getroffen werden kann, so lässt sich jedoch vermuten, dass zumindest ein Großteil des Aufwandes verzichtbar wird, gegenüber der herkömmlichen Bestimmung hydraulischer Parameter durch z.B. Pump- oder Tracertests.

## 8.2 Ausblick

Wie bei sicherlich den meisten wissenschaftlichen Arbeiten ist am Ende nicht jedes Problem gelöst. Die offenen Punkte gliedern sich hier in drei Bereiche: die der prinzipiellen Einschränkung, des Mangels an Messdaten-Tests und des Anwendungskomforts.

Prinzipielle Einschränkungen ergeben sich dadurch, dass Topografie weder für den Fall der Multifrequenzinversionen noch für die 3D-Inversion implementiert wurde. Dies liegt nicht in Problemen der Machbarkeit begründet. Mit dem Vorbild aus der 2D-Inversion für eine Frequenz wäre dies unproblematisch möglich gewesen und auch nicht zeitlich zu aufwändig in der Programmierung. Programme sollten bis zur Präsentation allerdings eingehend getestet sein, was für die Multifrequenz- und 3D-Inversion (mit Berücksichtigung der Topografie) jedoch zur Zeit sehr viel Rechenzeit benötigt hätte. Aus diesen Gründen wurde hierauf verzichtet. Gleiches gilt für eine multifrequente Inversion in drei räumlichen Dimensionen.

Für die Zukunft wäre es wünschenswert, diese Lücke zu schließen, was zeitnah dadurch erfolgen könnte, einen parallelisierten Code zu erstellen und auf Großrechnern eingehend zu testen, bevor er auf einem Standard-Rechner bei der Messdateninterpretation zum Einsatz käme.

Zu der Rechenproblematik kommt auch ein noch allgemeineres Problem: Da das Messgerät neu angeschafft wurde, ist bisher keine große Datenbasis vorhanden. Messkampagnen sind aufwändig in Personal, Zeit und auch Kosten. Es ist also nicht ein multifrequenter Datensatz paralleler Profile zur 3D-Auswertung aufgezeichnet worden. Insbesondere ist es immer wieder aufgrund des teilweise im Zustand des Austestens befindlichen Messgerätes zu unbrauchbaren Datensätzen gekommen. In diesem Bereich kann noch viel aufgeholt werden. Für die 3D-Inversion wären Messungen über einem Gebiet mit bekanntem Störkörper interessant; für die Multifrequenzinversion müsste ein Testfeld mit deutlich höheren Aufladbarkeiten gefunden werden. So beschränkten sich die meisten Tests auf synthetische Daten, die dann in der Regel verrauscht und mit veränderten Gittern invertiert worden sind.

Für die Zukunft wäre es also wichtig, Messungen über stark heterogenen Strukturen mit deutlichen Parameterkontrasten und möglichst starker Frequenzabhängigkeit durchzuführen, um die Vorteile der dreidimensionalen Inversion, der neuen Regularisierung und

## 8 Zusammenfassung und Ausblick

der Multifrequenz-Interpretation besser aufzeigen zu können.

Auf der rein praktischen Seite könnten eine ganze Reihe von eigenständigen Programmen zusammengefasst werden.

Zur Zeit wird als Input eine Messdatendatei benötigt, die einen anderen Standard hat als die, die das Messgerät selbst produziert. Weiterhin werden neben den Elektrodenpositionen noch die Zellen des Inversionsgitters benötigt. Es wäre möglich, den Input auf die Messdatei des Gerätes zu beschränken (Elektrodenpositionen sind beinhaltet) und das Gitter automatisch zu erstellen.

Eine grafische Oberfläche ist nicht erstellt worden, um die Protokollfunktion der Konfigurationsdateien der Inversion nicht zu verlieren. Es ist allerdings sicherlich möglich, dass sie auch bei GUI-Verwendung produziert werden. Da hier allerdings eine akademische Arbeit und kein kommerzielles Produkt erstellt worden ist, sind bisher aus Zeitgründen andere Prioritäten gesetzt worden.

Innerhalb einzelner Routinen besteht noch die Möglichkeit der Zeitoptimierung, was aber einen größeren Programmieraufwand bedeutet hätte. Zum einen hätten dann andere geophysikalische Teile gelitten, zum anderen wird der potentielle Zeitgewinn vermutlich schon bald durch die technische Entwicklung überholt.

Für die Zukunft könnte also ein einziges Programm aus den vorhandenen erstellt werden, welches dann mit einer grafischen Bedienungsfläche zu steuern sein würde, um das Programm für weitere Anwender übersichtlicher zu gestalten. Die Messdaten als einzige Eingabedatei zu benutzen, wäre denkbar, ebenso wie eine direkte Grafikausgabe, zusätzlich zu den Datenlisten.

Zusammenfassend sind also die wichtigsten Ziele erreicht worden. Die Programme, die sich an synthetischen Daten als lauffähig erwiesen haben, sollten nun verstärkt an (noch zu messenden) Felddaten getestet werden. Es wäre wünschenswert, die Programme in der Form noch zu optimieren, was durch Verbinden von Konvertierungsprogrammen, automatischer Gittergenerierung, GUI, etc. geschehen kann. (Mehr zur Benutzung der erstellten Programme findet sich in Anhang B.)

Für die Zukunft stehen damit nach dem Erstellen der Programme und den Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit für die SIP viele potentielle Anwendungsfelder bereit.

# Literaturverzeichnis

- Angoran, Y., und R. Madden**, Induced polarization: a preliminary study of its chemical basis, *Geophysics*, 42, 788–803, 1977.
- Archie, G. E.**, The electric resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics, *Trans. AIME*, 146, 54–62, 1942.
- Auken, E., und A. V. Christiansen**, Layered and laterally constrained 2D inversion of resistivity data, *Geophysics*, 69, 752–761, 2004.
- Bleil, D. F.**, Induced polarization: a method of geophysical prospecting, *Geophysics*, 18, 636–661, 1953.
- Börner, F. D.**, *Untersuchungen zur komplexen elektrischen Leitfähigkeit von Gesteinen im Frequenzbereich von 1 mHz bis 1 kHz*, Dissertation, Bergakademie Freiberg, 1991.
- Börner, F. D., M. Gruhne, und J. H. Schön**, Contamination indications derived from electrical properties in the low frequency range, *Geophysical Prospecting*, 44, 83–98, 1993.
- Börner, F. D., J. R. Schopper, und A. Weller**, Evaluation of transport and storage properties in the soil and groundwater zone from induced polarization measurements, *Geophysical Prospecting*, 44, 583–601, 1996.
- Bronstein, I. N., und K. A. Semendjajew**, *Taschenbuch der Mathematik*, Teubner, Stuttgart, 1991.
- Carman, P. C.**, *Flow of gases through porous media*, Butterworth Scientific Publ., 1956.
- Cole, K. S., und R. H. Cole**, Dispersion and absorption in dielectrics, *Journal of Chemical Physics*, 9, 341–351, 1941.
- Constable, S. C., R. L. Parker, und C. G. Constable**, Occam's inversion: A practical algorithm for generating smooth models from electromagnetic sounding data, *Geophysics*, 52, 289–300, 1987.
- Dakhnov, V. N.**, *Electrical well-logging, interpretation of electrical logs*, Moskau, 1941.
- de Groot-Hedlin, C., und S. Constable**, Occam's inversion to generate smooth, two-dimensional models from magnetotelluric data, *Geophysics*, 55, 1613–1624, 1990.

- de Groot-Hedlin, C., und S. Constable**, Inversion of magnetotelluric data for 2D structure with sharp resistivity contrasts, *Geophysics*, *69*, 78–86, 2004.
- Dey, A., und H. F. Morrison**, Resistivity modeling for arbitrarily shaped three-dimensional structures, *Geophysics*, *44*, 753–780, 1979.
- Dias, C. A.**, Developments in a model to describe low-frequency electrical polarization of rocks, *Geophysics*, *65*, 437–451, 2000.
- Englert, A., U. Hashagen, U. Jaekel, O. Nitzsche, H. Schwarze, und H. Verecken**, Transport von gelösten Stoffen im Grundwasser - Untersuchungen am Testfeld Krauthausen, *Grundwasser*, *3/2000*, 115–124, 2000.
- Grahame, D. C.**, The electrical double layer and the theory of electrocapillarity, *Chemical Reviews*, *41*, 441–501, 1947.
- Habberjam, G. M.**, On the application of the reciprocity theorem in resistivity prospecting, *Geophysics*, *32*, 918–919, 1967.
- Hestenes, M. R., und E. Stiefel**, Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *J. Res. Nat. Bur. Standards*, *49*, 409–436, 1952.
- Hohmann, G. W.**, Electromagnetic methods in applied geophysics, vol I - Theory, in *Numerical modeling for electromagnetic methods of geophysics*, herausgegeben von M. N. Nabighian, 409–416, Soc. Expl. Geophys., 1988.
- Hölting, B.**, *Hydrogeologie*, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart, 1996.
- Hönig, M.**, *Entwicklung und Anwendung von Auswertalgorithmen für die Induzierte Polarisation im Zeitbereich in bis zu drei Dimensionen*, Dissertation, Univ. zu Köln, Inst. für Geophys. und Meteo., 2002.
- Höpner, F.**, Numerische Modellierung von Stofftransport im Grundwasser unter Verwendung geoelektrischer und hydraulischer Daten, Master's thesis, RWTH Aachen, 2001.
- Just, A.**, *Bestimmung der räumlichen Verteilung des spezifischen elektrischen Widerstandes an zylinderförmigen Körpern mit Hilfe der Elektrischen Widerstandstomographie*, Dissertation, Univ. Leipzig, 2001.
- Kemna, A.**, *Tomographic Inversion of Complex Resistivity*, Dissertation, Univ. Bochum, Inst. für Geophys., 2000.
- Kemna, A., A. Binley, A. Ramirez, und W. Daily**, Complex resistivity tomography for environmental applications, *The Chemical Engineering Journal*, *77*, 11–18, 2000.
- Kemna, A., A. Binley, und L. Slater**, Crosshole IP imaging for engineering and environmental applications, *Geophysics*, *69*, 97–107, 2004.

- Klitzsch, N.**, *Ableitung von Gesteinseigenschaften aus Messungen der spektralen induzierten Polarisation an Sedimentgesteinen*, Dissertation, Univ. Leipzig, Inst. f. Geophys., 2004.
- Knödel, K., H. Krummel, und G. Lange**, *Geophysik, Band 3: Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten*, Springer, 1997.
- Kozeny, J.**, Über die kapillare Leitung des Wassers im Boden (Aufstieg Versickerung und Anwendung auf die Bewässerung), *Sitz. Ber. Akad. Wiss., Wien, Math. Nat. (Abt. IIa)*, 136a, 271–306, 1927.
- Kulenkampff, J. M.**, *Die komplexe elektrische Leitfähigkeit poröser Gesteine im Frequenzbereich von 10 Hz bis 1 MHz - Einflüsse von Porenstruktur und Porenfüllung*, Dissertation, Techn. Univ. Clausthal, 1994.
- LaBrecque, D. J., M. Miletto, W. Daily, A. Ramirez, und E. Owen**, The effect of noise on occam's inversion of resistivity tomography data, *Geophysics*, 61, 538–548, 1996.
- Last, B. J., und K. Kubik**, Compact gravity inversion, *Geophysics*, 48, 713–721, 1983.
- Lesur, V., M. Cuer, und A. Straub**, 2-D and 3-D interpretation of electrical tomography measurements, Part 1: The forward problem, *Geophysics*, 64, 386–395, 1999.
- Li, Y., und D. W. Oldenburg**, 3-D Inversion of induced polarization data, *Geophysics*, 65, 1931–1945, 2000.
- Liu, S. H.**, Fractal model for the AC response of a rough interphase, *Physical Review Letters*, 55, 529–532, 1985.
- Lowrie, W.**, *Fundamentals of Geophysics*, Cambridge University Press, 1997.
- Lowry, T., M. B. Allen, und P. N. Shive**, Singularity removal: A refinement of resistivity modeling techniques, *Geophysics*, 54, 766–774, 1989.
- Luo, Y., und G. Zhang**, *Theory and Application of Spectral Induced Polarization*, Geophysical Monograph Series No. 8. Society of Exploration Geophysicists, Tulsa, OK, 1998.
- Madden, T. R., und T. Cantwell**, Induced polarization: A review, *Mining Geophysics*, 2, 373–400, 1967.
- Major, J., und J. Silic**, Restrictions on the use of Cole-Cole dispersion models in complex resistivity interpretation, *Geophysics*, 46, 916–931, 1981.
- Marshall, D. J., und T. R. Madden**, Induced polarization, a study of its causes, *Geophysics*, 24, 790–816, 1959.

- Mehanee, S., und M. Zhdanov**, Two-dimensional magnetotelluric inversion of blocky geoelectrical structures, *Journal of Geophysical Research*, 107, doi:10.1029/2001JB000191, 2002.
- Militzer, H., und F. Weber**, *Angewandte Geophysik*, Springer, Wien, 1985.
- Münch, H.-M., A. Kemna, E. Zimmermann, H. Vereecken, und A. Hördt**, SIP-Messungen an Sanden in Abhängigkeit von Salinität und Sättigung, in *64. Jahrestagung der DGG*, 321, 2004.
- Münch, H.-M., A. Kemna, E. Zimmermann, und H. Vereecken**, Abhängigkeit der SIP-Charakteristik von Salinität, Korngröße und Sättigung, in *65. Jahrestagung der DGG*, 108, 2005.
- Newman, G. A., und D. L. Alumbaugh**, Three-dimensional massively parallel electromagnetic inversion- I. Theory, *Geophysical Journal International*, 128, 345–354, 1997.
- Ogilvy, A. A., und E. N. Kuzmina**, Hydrogeologic and engineering-geologic possibilities for employing the method of induced potentials, *Geophysics*, 37, 839–861, 1972.
- Oldenburg, D. W., und Y. Li**, Inversion of induced polarization data, *Geophysics*, 59, 1327–1341, 1994.
- Olhoeft, G. R.**, Low-frequency electrical properties, *Geophysics*, 50, 2492–2503, 1985.
- Pape, H., L. Riepe, und J. R. Schopper**, Theory of self-similar network structures in sedimentary and igneous rocks and their investigation with microscopical methods, *Journal of Microscopy*, 148, 121–147, 1987.
- Pape, H., C. Clauser, und J. Iffland**, Permeability prediction based on fractal pore space geometry, *Geophysics*, 64, 1447–1460, 1999.
- Pelton, W. H., L. Rijo, und J. C. M. Swift**, Inversion of two-dimensional resistivity and induced-polarization data, *Geophysics*, 43, 788–803, 1978a.
- Pelton, W. H., S. H. Ward, P. G. Hallof, W. R. Sill, und P. H. Nelson**, Mineral discrimination and removal of inductive coupling with multifrequency IP, *Geophysics*, 43, 588–609, 1978b.
- Portniaguine, O., und M. S. Zhdanov**, Focusing geophysical inversion images, *Geophysics*, 64, 874–887, 1999.
- Press, W. H., S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, und B. P. Flannery**, *Numerical recipes in C*, Teubner, Stuttgart, 1992.
- Radic, T.**, Vorstellung von Konzept und Einsatzmöglichkeiten der neuartigen Aacheener SIP-Appartur SIP256C, sowie Diskussion von Messstrategie zur Erzielung einer hohen Datenqualität, 2004.

- Richter, W.**, *Partielle Differentialgleichungen*, Spektrum, Akad. Verl., Heidelberg, 1995.
- Routh, P. S., und D. W. Oldenburg**, Regularized Inversion of Spectral IP parameters from Complex Resistivity Data, in *1998 SEG Expanded Abstracts*, Soc. Expl. Geophys., 1998.
- Sasaki, Y.**, 3-D resistivity inversion using the finite-element method, *Geophysics*, 59, 1839–1848, 1994.
- Schlumberger, C.**, *Etudes sur la prospection électrique du soul-sol*, Gauthier-Villars, Paris, 1922.
- Schön, J.**, *Petrophysik - Physikalische Eigenschaften von Gesteinen und Mineralen*, Enke, Stuttgart, 1983.
- Schulze, K. C.**, Einsatz elektrischer Meßverfahren zur Erkundung eines hydrologischen Testfeldes bei Jülich, Master's thesis, Univ. zu Bonn, Geol. Inst., 1996.
- Schwarz, H. R.**, *Methode der finiten Elemente*, Teubner, Stuttgart, 1984.
- Schwarz, H. R.**, *FORTRAN-Programme zur Methode der finiten Elemente*, Teubner, Stuttgart, 1991.
- Schwarz, H. R.**, *Numerische Mathematik*, Teubner, Stuttgart, 1997.
- Schwarzbach, C., und A. Kemna**, Geoelektrik- und SIP-Modellierung: Sensitivitätsberechnung bei gemischten Randbedingungen, in *65. Jahrestagung der DGG*, 106, 2005.
- Seigel, H. O.**, Mathematical formulation and type curves for induced polarization, *Geophysics*, 24, 547–665, 1959.
- Seigel, H. O., H. Vanhala, und S. N. Sheard**, Some case histories of source discrimination using time-domain spectral IP, *Geophysics*, 62, 1394–1408, 1997.
- Shuey, R. T., und M. Johnson**, On the phenomenology of electrical relaxation in rocks, *Geophysics*, 38, 37–48, 1973.
- Siemon, B., und D. G. Eberle**, Identification of saltwater intrusions and coastal aquifers using BGR helicopter-borne geophysical system, in *Proc. Symp. Application of Geophysics to Engineering and Environmental Problems, Denver*, Environ. and Eng. Geophys. Soc. (EEGS), 2001.
- Slater, L. D., und D. R. Glaser**, Controls on induced polarization in sandy unconsolidated sediments and application to aquifer characterization, *Geophysics*, 68, 1547–1558, 2003.
- Slater, L., und D. P. Lesmes**, Electrical-hydraulic relationships observed for unconsolidated sediments, *Water Resources Research*, 38, doi:10.1029/2001WR001075, 2002.

- Smith, T., M. Hoversten, E. Gasperikova, und F. Morrison**, Sharp boundary inversion of 2-D magnetotelluric data, *Geophysical Prospecting*, 47, 469–486, 1999.
- Spies, B. R., und D. E. Eggers**, The use and misuse of apparent resistivity in electromagnetic methods, *Geophysics*, 51, 1462–1471, 1986.
- Spitzer, K.**, A 3-D finite difference algorithm for DC resistivity modelling using conjugate gradient methods, *Geophys. J. Int.*, 123, 903–914, 1995.
- Stiefel, E.**, *Einführung in die numerische Mathematik*, Teubner, Stuttgart, 1976.
- Sturrock, J. T., D. P. Lesmes, und F. D. Morgan**, Permeability estimation using spectral induced polarization measurements, in *Symposium on the Application of Geophysics to Engineering and Environmental Problems, Oakland*, 409–416, Environ. and Eng. Geophys. Soc. (EEGS), 1999.
- Suckut, J. C.**, Messung der spektralen induzierten Polarisation auf einem hydrogeologischen Testfeld und Auswertung mit dem Ziele der Bestimmung der hydraulischen Leitfähigkeit, Master's thesis, Univ. zu Bonn, Geol. Inst., 2001.
- Telford, W. M., L. P. Geldart, und R. E. Sheriff**, *Applied Geophysics*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- Tripp, A. C., G. W. Hohmann, und J. C. M. Swift**, Two-dimensional resistivity inversion, *Geophysics*, 49, 1708–1717, 1984.
- Vanhala, H.**, Mapping oil-contaminated sand and till with the spectral induced polarization SIP method, *Geophysical Prospecting*, 45, 303–326, 1997.
- Vanhala, H., H. Soininen, und I. Kukkonen**, Detecting organic chemical contaminants by spectral-induced polarization method in glacial till environment, *Geophysics*, 57, 1014–1017, 1992.
- Vereecken, H., U. Döring, H. Hardelauf, U. Jaekel, U. Hashagen, O. Neuen-dorf, H. Schwarze, und R. Seidemann**, Analysis of solute transport in a heterogenous aquifer: the Krauthausen field experiment, *Journal of Contaminant Hydrology*, 45, 329–358, 2000.
- Vinegar, H. J., und M. H. Waxman**, Induced polarization of shaly sands, *Geophysics*, 49, 1267–1287, 1984.
- Vogel, H.**, *Gerthsen Physik*, Springer, Berlin, 1997.
- Voorhis, G. D. V., P. H. Nelson, und T. L. Drake**, Complex resistivity spectra of porphyry copper mineralization, *Geophysics*, 38, 49–60, 1973.
- Wait, J. R.**, *Overvoltage research and geophysical applications*, Pergamon Press Inc., 1959.



- Walter, R.**, *Geologie von Mitteleuropa*, E. Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 1992.
- Waxman, M. H., und L. J. M. Smits**, Electrical conductivities in oil-bearing shaly sands, *Soc. Petr. Eng. J.*, 8, 107–122, 1968.
- Weller, A., und F. D. Börner**, Measurements of spectral induced polarization for environmental purposes, *Environmental Geology*, 27, 329–334, 1996.
- Weller, A., W. Frangos, und M. Seichter**, Three-dimensional inversion of induced polarization data from simulated waste, *Journal of Applied Geophysics*, 41, 31–47, 1999.
- Xiang, J., N. B. Jones, D. Cheng, und F. S. Schlindwein**, A new method to discriminate between a valid IP response and EM coupling effects, *Geophysical Prospecting*, 50, 566–576, 2002.
- Yi, M.-J., J.-H. Kim, und S.-H. Chung**, Enhancing the resolving power of least-squares inversion with active constraint balancing, *Geophysics*, 68, 931–941, 2003.
- Yuval, und D. W. Oldenburg**, Computation of Cole-Cole parameters from IP data, *Geophysics*, 62, 436–448, 1997.
- Zhdanov, M. S.**, *Tutorial: Regularization in Inversion Theory*, Colo. Sch. of Mines, Golden, 1993.
- Zisser, N.**, Bestimmung der hydraulischen Leitfähigkeit  $k_f$  mit der Spektralen Induzierten Polarisation (SIP) - Testgebiet Krauthausen und Cuxhaven, Master's thesis, Univ. zu Bonn, Geol. Inst., 2005.
- Zonge, K. L., und J. C. Wynn**, Recent advances and applications in complex resistivity measurements, *Geophysics*, 40, 851–864, 1975.



# A Elementmatrizen für dreidimensionale Volumenelemente

In Unterkapitel 6.1 wurden die Bestimmungsgleichungen der FE-Methode für dreidimensionale Elemente benutzt (Gleichung 6.2). Hierzu sollen die Elementmatrizen  $\bar{S}_{ij}$  und der Vektor  $\vec{b}$  für Tetraeder und Parallelepipede angegeben werden. Es wird auch auf die Variablen in Gleichung 6.1 Bezug genommen.

- Tetraeder:

$$\bar{S}_{11} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \bar{S}_{22} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\bar{S}_{33} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \bar{S}_{12} = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\bar{S}_{13} = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \bar{S}_{23} = \frac{1}{12} \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\vec{b} = \frac{1}{24} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

- Parallelepiped

$$\bar{S}_{11} = \frac{1}{36} \begin{pmatrix} 4 & -4 & -2 & 2 & 2 & -2 & -1 & 1 \\ -4 & 4 & 2 & -2 & -2 & 2 & 1 & -1 \\ -2 & 2 & 4 & -4 & -1 & 1 & 2 & -2 \\ 2 & -2 & -4 & 4 & 1 & -1 & -2 & 2 \\ 2 & -2 & -1 & 1 & 4 & -4 & -2 & 2 \\ -2 & 2 & 1 & -1 & -4 & 4 & 2 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & -2 & -2 & 2 & 4 & -4 \\ 1 & -1 & -2 & 2 & 2 & -2 & -4 & 4 \end{pmatrix},$$

A Elementmatrizen für dreidimensionale Volumenelemente

$$\bar{S}_{22} = \frac{1}{36} \begin{pmatrix} 4 & 2 & -2 & -4 & 2 & 1 & -1 & -2 \\ 2 & 4 & -4 & -2 & 1 & 2 & -2 & -1 \\ -2 & -4 & 4 & 2 & -1 & -2 & 2 & 1 \\ -4 & -2 & 2 & 4 & -2 & -1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & -1 & -2 & 4 & 2 & -2 & -4 \\ 1 & 2 & -2 & -1 & 2 & 4 & -4 & -2 \\ -1 & -2 & 2 & 1 & -2 & -4 & 4 & 2 \\ -2 & -1 & 1 & 2 & -4 & -2 & 2 & 4 \end{pmatrix},$$

$$\bar{S}_{33} = \frac{1}{36} \begin{pmatrix} 4 & 2 & 1 & 2 & -4 & -2 & -1 & -2 \\ 2 & 4 & 2 & 1 & -2 & -4 & -2 & -1 \\ 1 & 2 & 4 & 2 & -1 & -2 & -4 & -2 \\ 2 & 1 & 2 & 4 & -2 & -1 & -2 & -4 \\ -4 & -2 & -1 & -2 & 4 & 2 & 1 & 2 \\ -2 & -4 & -2 & -1 & 2 & 4 & 2 & 1 \\ -1 & -2 & -4 & -2 & 1 & 2 & 4 & 2 \\ -2 & -1 & -2 & -4 & 2 & 1 & 2 & 4 \end{pmatrix},$$

$$\bar{S}_{12} = \frac{1}{24} \begin{pmatrix} 2 & 0 & -2 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 1 \\ -2 & 0 & 2 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -2 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & -2 & 0 & 2 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 2 & 0 & -2 \end{pmatrix},$$

$$\bar{S}_{13} = \frac{1}{24} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 1 & 0 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & -2 & -1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & -2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & 2 & 0 & -1 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & -2 & 0 & 0 & -1 \\ -2 & 0 & 0 & -1 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -2 & 0 & 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & -1 & 0 & 0 & -2 \end{pmatrix},$$

$$\bar{S}_{23} = \frac{1}{24} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & -2 \\ 1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & -2 & -1 \\ 0 & 0 & -2 & -1 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & -2 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & -2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 1 & -1 & -2 & 0 & 0 \\ -1 & -2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 \\ -2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix},$$

$$\vec{b} = \frac{1}{8} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Mit  $V_j$  als Volumen des zum j. Element gehörigen Parallelepipeds (oder der Determinante der Transformationsmatrix) bestimmen sich  $\gamma_j$  als

$$\gamma_j = \bar{g}_j \cdot V_j . \quad (\text{A.1})$$

„ $\bar{\phantom{g}}$ “ meint dabei den über die Zelle gemittelten Wert. Zur Berechnung von  $\sigma_{j,kl}$  werden folgende Beziehungen benötigt:

$$\begin{aligned} \xi_x &= ((y_3 - y_1)(z_g - z_1) - (z_3 - z_1)(y_g - y_1)) / V_j \\ \eta_x &= ((y_g - y_1)(z_2 - z_1) - (z_g - z_1)(y_2 - y_1)) / V_j \\ \zeta_x &= ((y_2 - y_1)(z_3 - z_1) - (z_2 - z_1)(y_3 - y_1)) / V_j \\ \xi_x &= ((z_3 - z_1)(x_g - x_1) - (x_3 - x_1)(z_g - z_1)) / V_j \\ \eta_x &= ((z_g - z_1)(x_2 - x_1) - (x_g - x_1)(z_2 - z_1)) / V_j \\ \zeta_x &= ((z_2 - z_1)(x_3 - x_1) - (x_2 - x_1)(z_3 - z_1)) / V_j \\ \xi_x &= ((x_3 - x_1)(y_g - y_1) - (y_3 - y_1)(x_g - x_1)) / V_j \\ \eta_x &= ((x_g - x_1)(y_2 - y_1) - (y_g - y_1)(x_2 - x_1)) / V_j \\ \zeta_x &= ((x_2 - x_1)(y_3 - y_1) - (y_2 - y_1)(x_3 - x_1)) / V_j \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Hierbei entspricht  $y_3$  der  $y$ -Koordinate von Punkt  $P_{j(3)}$  des Elements aus Abbildung A.1 und analog für die weiteren Koordinaten. Aus Gründen der Übersicht wurde nicht die Notation  $y_{j(3)}$  gewählt. Für das Tetraeder ist  $g = 4$  zu setzen, für das Parallelepiped  $g = 5$ .

Damit lassen sich nun die letzten benötigten Gleichungen aufstellen (korrekter auch hier  $\sigma_{j,11}$  anstatt  $\sigma_{11}$ , etc.):

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= (\bar{a}_1 \xi_x^2 + \bar{a}_2 \xi_y^2 + \bar{a}_3 \xi_z^2) \cdot V_j \\ \sigma_{22} &= (\bar{a}_1 \eta_x^2 + \bar{a}_2 \eta_y^2 + \bar{a}_3 \eta_z^2) \cdot V_j \\ \sigma_{33} &= (\bar{a}_1 \zeta_x^2 + \bar{a}_2 \zeta_y^2 + \bar{a}_3 \zeta_z^2) \cdot V_j \\ \sigma_{12} &= (\bar{a}_1 \xi_x \eta_x + \bar{a}_2 \xi_y \eta_y + \bar{a}_3 \xi_z \eta_z) \cdot V_j \\ \sigma_{13} &= (\bar{a}_1 \xi_x \zeta_x + \bar{a}_2 \xi_y \zeta_y + \bar{a}_3 \xi_z \zeta_z) \cdot V_j \\ \sigma_{12} &= (\bar{a}_1 \eta_x \zeta_x + \bar{a}_2 \eta_y \zeta_y + \bar{a}_3 \eta_z \zeta_z) \cdot V_j \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

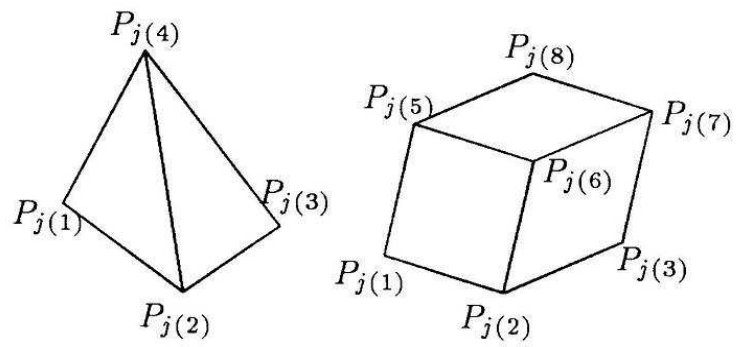


Abbildung A.1: Die dreidimensionalen Volumenelemente Tetraeder (links) und Parallelepiped (rechts) mit Numerierung der Eckpunkte. Aus [Richter, 1995].

## B Zur Benutzung der erstellten Programme

In diesem Teil sollen die wichtigsten Programme beschrieben werden, welche Eingabedateien und -formate benötigt werden und welche Ausgabedateien sie produzieren. Zusätzlich sollen einige nützliche kleinere Programme vorgestellt werden, die langwierige Prozeduren deutlich verkürzen können.

Zur Berechnung mit einer Frequenz in zwei räumlichen Dimensionen stehen die beiden Programme **FEM** (Vorwärtsrechnung) und **INV** (Inversion) (Namen erhalten nach [Kemna, 2000]) zur Verfügung. Das Vorwärtsprogramm wird über die Konfigurationsdatei **crmod.cfg** gesteuert. Die Datei hat dabei folgende Struktur:

- FEM - 2D-Vorwärtsrechnung einer Frequenz

```
****dummy-Zeile
gitter/elem.dat
elektroden/elec.dat
modelle/mod.dat
konfigurationen/conf.dat
T - potentials
werte/pot.dat
T - measurements
ergebnis/tolleDaten/mes.dat
T - sensitivities
out/sen.dat
F - another dataset
```

Als Eingabedateien werden eine Datei für das Gitter, eine für die Elektrodenpositionen, eine für das Leitfähigkeitsmodell und eine für die zu simulierenden Messkonfigurationen in **crmod.cfg** (s.o.) angegeben. Im Detail heißt das:

- Die Gitterdatei besteht auch mehreren Blöcken, die die Lage der Flächen- und Randelemente und deren Typ klärt. Anhand eines Beispiels von  $72 \times 20$  Zellen soll die Struktur erläutert werden. Das Format besteht bereits nach [Kemna, 2000] und wurde erst für die weiteren Programme etwas abgeändert. Einzelne Werte sind redundant, allerdings auch unproblematisch zu bestimmen. Weiterhin kann (und sollte) diese Datei auch automatisch erstellt werden (s. a. weiter unten).

## B Zur Benutzung der erstellten Programme

In der ersten Zeile steht die Anzahl der Knoten ( $73 \times 21$ ), gefolgt von der Anzahl der Elementtypen (besonderes Flächenelement mit vier Knoten, Randelement Oberfläche, Randelement Untergrund). Es folgt die Bandbreite des Gesamtsystems (wird über den Cuthill-McKee Algorithmus festgelegt oder nach oben abgeschätzt).

In den nachfolgenden Zeilen werden die verschiedenen Elementtypen aufgelistet mit Anzahl und Knotenanzahl pro Element. 8 ist ein bestimmtes Flächenelement mit 4 Knoten, 12 ein Randelement für die Oberfläche (Neumann-Bedingung) und 11 ein Oberflächenelement mit gemischten Randbedingungen. 3 wird bei Dreieckselementen benutzt, 13 bei Rändern mit homogenen Dirichlet-Bedingungen.

Es folgen Knotennummern mit  $x$ - und  $z$ -Koordinaten. Die Nummern werden durch den Cuthill-McKee Algorithmus verändert.

Als Nächstes werden die Knoten der Elemente aufgeführt, wie ab Zeile 2 angegeben. Dabei werden die Knoten im Gegenuhrzeigersinn angegeben, hier beginnend unten links. 241 meint (Zellen zeilenweise von links nach rechts, oben beginnend) also den Knoten bei  $x = -4m$ ,  $z = 0m$ . Dies ergibt sich über den Umweg, dass in der 241. Zeile die 1 steht und damit der Knoten in der ersten (Knoten)zeile gemeint ist. Für andere Programme wurde diese Umnummerierung abgeändert.

Es folgen die kodierten Knotennummern für die Randelemente (im Uhrzeigersinn). Am Schluss werden die zu den Randelementen gehörigen Flächenelemente identifiziert. Damit ist die Gitterdatei vollständig.

```
1533 3 34
8 1440 4
12 72 2
11 112 2
877 -4.0 0.0
950 -3.0 0.0
804 -2.0 0.0
...
1 17.0 -3.0 (241. Knotenzeile)
...
146 67.0 -20.0
73 68.0 -20.0
210 211 242 241
211 212 243 242
212 213 244 243
...
1471 1492 1493 1472
1492 1513 1514 1493
241 242
242 243
```



```

243 244
...
181 210
210 241
1
2
3
...
145
73
1

```

- Die Elektrodendatei hat eine wesentlich einfachere Struktur. In der ersten Zeile steht die Anzahl der Elektroden, gefolgt von den zu den Positionen gehörigen kodierten Knotennummern der Gitterdatei. Die 249. Knotenzeile beginnt mit einer 5. Dies bedeutet, dass die erste Elektrode an der Stelle des 5. Knotens (bei  $x = 0m$ ,  $z = 0m$ ) steht, usw.

```

33
245
247
249
...

```

- Die Modelldatei besteht aus der Kopfzeile, die die Anzahl der Flächenelemente beinhaltet, gefolgt von einem Block, der -gemäß der Reihenfolge aus der Gitterdatei- den Flächenelementen spezifische Widerstände zuordnet. In der ersten Spalte steht der Betrag in  $\Omega m$ , in der zweiten Spalte die Phase in mrad.

```

1440
100.0 -5.0
100.0 -5.0
100.0 -5.0
...

```

- Die Konfigurationsdatei beginnt mit der Anzahl der zu berechnenden Messwerte. Es folgen die Konfigurationen. In der ersten Spalte werden die Stromelektroden angegeben, zusammengefasst zu einer Zahl, wobei die Nummer der ersten Elektrode um den Faktor 10000 vergrößert wird (Schreibweise später auch geändert). Die zweite Spalte enthält die Stromstärke in mA, die dritte die kodierten Spannungselektroden. Im ersten Fall wird also über Elektroden 1 und 2 mit einem Strom von 500mA eingespeist und das Signal über Elektroden 3 und 4 gemessen.

```

329
10002 500.0000 30004
10002 500.0000 40005

```

## B Zur Benutzung der erstellten Programme

```
10002  500.0000          50006
...
```

Im Weiteren wird die Ausgabe geregelt. Dabei steht jeweils eine Logical-Variable (T/F), gefolgt von einer potentiellen Ausgabedatei.

- Zunächst können Potentiale ausgegeben werden. In diesem Fall wird zu jeder Konfiguration eine Datei (Namen hier pot001.dat bis pot329.dat) erstellt. Sie beinhalten die Potentiale an jedem Knoten, dargestellt in vier Spalten:  $x$ ,  $z$ , Realteil und Imaginärteil der Potentiale in mV. Ein Beispiel:

```
-4.000000    -12.00000    35.55312    -0.1777671
-4.000000    -13.00000    28.94427    -0.1447226
-4.000000    -11.00000    44.22218    -0.2211127
```

- Die wichtigste Datei ist in der Regel die der synthetischen Messwerte. In der ersten Zeile wird die Anzahl der Werte aufgeführt, danach folgen diese Werte in der Form Stromdipol, Spannungsdipol (jeweils kodiert), Spannung in Volt (hier immer für 1A !), Phase in mrad und Konfigurationsfaktor in m.

```
329
10002  40003  0.24325657E+01 -0.50000000E+01    -37.6991
10002  50004  0.64168058E+00 -0.50000000E+01    -150.7964
10002  60005  0.26070288E+00 -0.50000000E+01    -376.9911
```

- Die Sensitivitäten werden -wie die Potentiale- für alle Konfigurationen erstellt. Sie beinhalten in der Kopfzeile die Summe der komplexen Sensitivitäten über alle Zellen als Betrag und Phase (mrad), gefolgt von den Sensitivitäten der Form  $x$ - und  $z$ -Koordinate der Zellenmitte, Real- und Imaginärteil der Sensitivität.

```
122839.8      3135.593
-3.500000    -0.5000000    209.6364     -1.257833
-2.500000    -0.5000000    515.7582     -3.094587
-1.500000    -0.5000000    1596.694     -9.580277
...
```

- INV - 2D-Inversiosrechnung einer Frequenz Die Inversion wird über **crtomomo.cfg** gesteuert:

```
*****dummy-Zeile
gitter/elem2.dat
elektroden/elec.dat
ergebnis/tolleDaten/mes.dat
inversionsergebnisse/test
*****dummy-Zeile
72 Zellen in x-Richtung
20 Zellen in z-Richtung
```

```

10. smoothing x
1. smoothing z
50 max. # Inv-It
1. nrmsdm >1d-12 min data rms
F DC Inversion
T singularity removal
T robust inversion
T automatic polarity adjustment
T final phase improvement
F individual error
1. total error level (etwa) Prozent
.3 phase error level mrad
F homogeneous background resistivity
120. background magnitude ohmm
-15.70 background phase mrad
F another dataset

```

- In der Eingabeliste tritt nur eine neue Datei auf: Die Gitterdatei wurde leicht abgeändert:

Die ersten Zeilen bleiben unverändert. Die Angabe der Flächenelemente erfolgt nun in einem anderen Format. Die erste Spalte numeriert die Flächenelemente; es folgen die Knoten wie bekannt. Die nächsten Spalten bestehen aus Logical-Variablen und legen fest, ob eine Glättung über die entsprechenden Kanten erfolgen soll. Der erste Wert steht dabei für die Kante vom ersten zum zweiten Knoten, dann vom 2. zum 3. Knoten, etc. Es können hiermit bekannte Diskontinuitäten unterstützt werden.

Danach folgen die Werte für Betrag in  $\Omega m$  und Phase in mrad, gefolgt von Variablen die aussagen, ob dieser Wert für die Zellen geändert werden darf. Standardmäßig sind diese Routinen abgeschaltet. Am Ende folgen die Nummern der angrenzenden Flächenelemente über die erste Kante (1. zu 2. Knoten), zweite Kante, etc. . 0 steht für Randlage.

Im Block der Randlelemente erfolgt eine Numerierung, dann folgen wie vorher die Knotennummern und direkt die Nummer des anliegenden Flächenelements.

```

1533 3 34
...
146 67.0 -20.0
73 68.0 -20.0
1 210 211 242 241 T T T T 10.0 T -15.0 T 73 2 0 0
2 211 212 243 242 T T T T 10.0 T -15.0 T 74 3 0 1
...
1440 1492 1513 1514 1493 T T T T 10.0 T -15.0 T 0 0 1368 1439
1 241 242 1
2 242 243 2

```

## B Zur Benutzung der erstellten Programme

```
...
111 181 210 73
112 210 241 1
```

Elektroden- und Messwertdatei sind bereits bei der Vorwärtsrechnung festgelegt. Weiterhin wird ein Ordner für die Ausgabe angegeben. Die wichtigsten Ausgabe-dateien sind:

- Eine Ausgabe nach jedem (äußeren Gauss-Newton) Inversionsschritt  $i$  in **rhoi.mag**. Nach der Angabe der Zellen folgen Spalten der Form  $x$ ,  $z$  und  $\log_{10} |\rho|$ :

```
          1368
-3.500000    -0.500000    1.993299
-2.500000    -0.500000    1.995258
-1.500000    -0.500000    2.000412
...
```

Die Ausgabe für die Phasen erfolgt analog, mit Werten in mrad. Dateinamen sind **rhoi.pha**.

- Weiterhin werden jeweils die zum aktuellen Modell berechneten Messwerte ausgegeben. Die Werte erfolgen in V bzw. mrad:

```
          329
10002         40003    2.430170    -5.133768
10002         50004    0.611529    -5.189055
...
```

Es werden noch weitere Dateien u.a. zur Kontrolle der Inversion ausgegeben, auf die aber nicht weiter eingegangen werden kann. Die weiteren Parameter in **crtomo.cfg** sind selbsterklärend oder bereits im entsprechenden Kapitel näher erläutert. Es sollen aber noch einige nützliche Programme erwähnt werden, die oftmals viel Zeit ersparen.

- **elemmakerregneu** erstellt Gitterdateien für die Inversion in einem regelmäßigen Rechtecksgitter.
- **femkonvert** erzeugt aus einer Inversionsgitter-Datei eine Datei mit Gitter für die Vorwärtsrechnung.
- **cutmckneu** führt den Cuthill-McKee Algorithmus zur Bandbreitenreduktion aus, verändert die Gitter- und Elektroden-datei.
- **konvfemdx** erzeugt dxf-Dateien aus Elektrodenkoordinaten. Diese Files können unter **femlab** eingelesen werden und beschleunigen die Erstellung triangulierter Gitter. Gitter konstant großer Zellen sind für homogene Dirichletsche Randbedingungen nicht praktikabel. Für die weitere Verarbeitung müssen die Anteile `p(oints)`, `e(dges)` und `t(riangles)` von `mesh` in getrennte

Dateien gespeichert werden. `Points` hat Spalten der Form: 1:  $x$ -Koordinate, 2:  $y$ -Koordinate. `Edges` besteht aus den Kanten. Die ersten beiden Spalten beinhalten die Knotennummern, Spalte 5 die Nummer der Kantendomain, Spalten 6 und 7 die Gebietsnummer der Bereiche links bzw. rechts der Kante (vom ersten zum zweiten Knoten gesehen). Der Anteil `t` führt die Dreieckselemente mit Knotennummern und Gebietsnummer auf. Verschiedene Programme (insbesondere `elemmakertri` mit Startdatei `makerstarter`) helfen bei der Erstellung der Gitterdatei für **FEM** bzw. **INV**.

- Multifrequenzrechnung

- Die Vorwärtsrechnung erfolgt erneut durch ein Programm namens **FEM**, gesteuert von einer Datei `crmod.cfg`. Die Ähnlichkeiten zur Einzelfrequenzrechnung sind groß.

An die Stelle der herkömmlichen Modelldatei tritt für die Cole-Cole Rechnung eine mit den Parametern  $\rho_0$  (in  $\Omega m$ ),  $m$ ,  $\tau$  (in s) und  $c$ , wo sich vorher Betrag und Phase befanden. Im CPA-Fall werden die Werte für  $\rho_n$  (in  $\Omega m$ ) und  $b$  eingesetzt. Zusätzlich wird eine Frequenzdatei eingelesen, die die Anzahl der Frequenzen sowie deren Werte in aufsteigender Reihenfolge beinhaltet.

Die Ausgabe erfolgt in eine Messdatei pro Frequenz, die jeweils am Namensende den Index der Frequenz trägt. Die Phasen werden in rad (nicht mehr mrad) ausgegeben.

- Die Inversion erfolgt mit einem weiteren Programm **INV**, dass über eine Datei `crtomocfg` gesteuert wird. Neben den üblichen Gitter- und Elektroden Dateien wird eine Frequenzdatei benötigt, die die verschiedenen Messdateien der Frequenzen auflistet. Es wird die Anzahl der Frequenzen angegeben, gefolgt von den Frequenzen und den Fehlerniveaus in Betrag und Phase dazu. Am Ende stehen die Pfade zu den Messdateien. Die Fehler der Messwerte können auch individuell vereinbart werden.

```

8 ! Anzahl der Frequenzen
! Frequenz(Hz) Abweichung (abs(ln)), mrad
10.0      1.  2.
5.0       1.  2.
...
0.15625   1.  .3
0.076220  1.  .3
! Messdateien
../modinvcpareal/out/b32/f4cur.dat
../modinvcpareal/out/b32/f5cur.dat
...

```

Die Ausgabe erfolgt in Dateien `volti.dat`, `rhoi.mag`, `rhoi.pha` und `rhoi.ccm` bzw. `rhoi.cpam`. Die synthetischen Messwerte werden ausgegeben in der Form: Strom- und Spannungsdipol (kodierte), Spannungsbetrag (Volt)

## B Zur Benutzung der erstellten Programme

und Phase (mrad) der ersten Frequenz, dann der zweiten, etc.. Auch die Beträge werden nebeneinander (nach den Koordinaten) für die verschiedenen Frequenzen ( $\log_{10}$ ) ausgegeben. Das gleiche gilt für die Phasen. rhoi.ccm listet analog zur Modelldatei die Cole-Cole- oder CPA-Parameter auf.

- Berechnung in drei Dimensionen

Die 3D-Rechnung erfolgt über die Programme **FEM3D** bzw. **INV3D**.

- Die Vorwärtsrechnung wird über **fem3d.cfg** gesteuert. Hier werden das Gitter, die Elektrodenposition, das Leitfähigkeitsmodell und die Messkonfigurationen als Eingabe vereinbart. Die Gitterdatei wurde leicht verändert. In der ersten Zeile steht die Knotenzahl, gefolgt von der Anzahl der Oberflächenelemente mit Knotenzahl, der gemischten Randelemente, der homogenen Dirichletschen Randelemente und der Volumenelemente.

Als nächstes folgen die (aufsteigend) numerierten Knoten mit den Koordinaten zusammen mit einer unbedeutenden Permutationszahl. Anschließend werden die Randelemente numeriert mit Knoten (9088 entspricht nun dem 9088. Knoten) und angrenzendem Volumenelement vereinbart. Es folgen die Volumenelemente numeriert, mit Angabe der Knoten und Nachbarvolumenelemente. Am Schluss folgt die Bandbreite der Matrix.

```

39420
 1872          4
 5596          4
   0           4
35568          8
  1 0.0000000E+00 17.00000    -8.000000    17010
  2 0.0000000E+00 18.00000    -9.000000    19054
...
39418 72.00000    0.0000000E+00 -2.000000    4015
39419 72.00000    0.0000000E+00 -1.000000    2044
39420 72.00000    0.0000000E+00 0.0000000E+00 73
  1   9088      9089      8218      8217      1
  2   9089      9090      8221      8218      2
  3   9090      9091      8223      8221      3
...
5595 38887 38883 38884 38888 35496
5596 38883 38881 38882 38884 35568
  1 9045 9047 8220 8219 9088 9089 8218 8217 ...
...   0   2   0   73   0 1873
  2 9047 9049 8222 8220 9089 9090 8221 8218 ...
...   1   3   0   74   0 1874
  3 9049 9051 8224 8222 9090 9091 8223 8221 ...
...   2   4   0   75   0 1875

```

```

...
35567 37803 38343 38341 37801 37804 38344 38342 37802 ...
... 35566 35568 35495 0 33695 0
35568 38343 38883 38881 38341 38344 38884 38882 38342 ...
... 35567 0 35496 0 33696 0
901

```

In der Elektrodendatei wird die Anzahl der Elektroden -gefolgt von einer Nummerierung der Knoten- gelistet. Analog entsteht die Modelldatei. Bei der Konfigurationsdatei wurde die Kodierung aufgelöst. Nach der Anzahl der Konfigurationen folgen Nummer der Konfiguration, erste und zweite Stromelektrode, Stromstärke, erste und zweite Spannungselektrode.

```

436
1 1 2 1. 3 4
2 1 2 1. 4 5
3 1 2 1. 5 6
...

```

Die Ausgabe der Messwerte erfolgt analog, mit Betrag in Volt und Phase in mrad:

```

385
1 1 2 4 3 0.131139486759E+01 -0.994473926614E+01
2 1 2 5 4 0.329526561041E+00 -0.999054361822E+01
3 1 2 6 5 0.120404342764E+00 -0.103208344235E+02

```

- Die Inversion wird über **inv3d.cfg** gesteuert. Gitter- und Elektrodendatei entsprechen der Vorwärtsrechnung; weiterhin wird eine Messdatei des bekannten Formats verarbeitet. Es können die individuellen Fehler in weiteren Spalten für Betrag und Phase angefügt werden. Die Ausgabe erfolgt analog zum 2D-Fall für eine Frequenz. Es treten nun lediglich drei Koordinaten auf. In der Messwertdatei werden die Werte in Volt und mrad angegeben, in der Betragsdatei in  $\Omega m$  (anstelle von  $\log_{10}$ ), die Phasen weiterhin in mrad.





# Danksagung

Abschließend lässt sich feststellen, dass der Erfolg einer Arbeit wohl selten allein an einer Person festzumachen ist. Aus diesem Grunde möchte ich, aus der Vielzahl von Personen, die auf die eine oder andere Art und Weise zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, einigen auch namentlich danken:

- Herrn Prof. A. Hördt für die Anregung zu diesem interessanten und vielfältigen Promotionsthema und die Betreuung.
- Herrn Prof. S. A. Miller für die Übernahme des Koreferats.
- Herrn Dr. A. Kemna (Forschungszentrum Jülich) für die Erlaubnis, seinen Quellcode zu verwenden und für eine Vielzahl fachlicher Tipps, besonders während der Einarbeitung.
- Der DFG für die Mittel zu diesem Projekt (Nr. Ho1506/11-1 und 11/2).
- Herrn Dr. N. Klitzsch (RWTH Aachen) für die Labordaten aus der Zylindermessung.
- Herrn F. Binot und Herrn M. Grinat (GGA Institut, Hannover) für die Zusammenarbeit bei der Messung im Testgebiet Cuxhaven
- Herrn Prof. H. Vereecken (Forschungszentrum Jülich) für die Erlaubnis zur Messung auf dem Testfeld Krauthausen.
- Herrn N. Zisser für die Arbeiten als Messhelfer, Ratgeber in Fragen der Geologie und insbesondere als langjährigem Bürokollegen.
- Herrn M. Thiemer, insbesondere für die  $\text{\LaTeX}$ -Tipps.
- Herrn Dr. A. Dreist für die prompte Hilfe bei Computerproblemen.
- Herrn T. Radic für die Hilfe bei Problemen mit der Messapparatur.
- Meinen Eltern, die besonderen Anteil haben, als die Grundlagen gelegt wurden.
- Den vielen, die mehr indirekt zum Gelingen beigetragen haben. Auch sie sind nicht vergessen.