Deutsche Geophysikalische Gesellschaft e.V.

Inhalt

Tronicke, J. *(Institut für Erd- und Umweltwissenschaften, Universität Potsdam)*:
Integrierte Erkundungsstrategien zur quantitativen Charakterisierung des oberflächennahen Untergrundes

Wuttke, F. *(Bauhaus-Universität Weimar)*:
Wave based parameter identification and process monitoring in Geotechnics

Müller-Petke, M., Hübner, W., Wonik, T. und Yaramanci, U. *(Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik, Hannover)*:
Nuklear-Magnetische Resonanz (NMR) – ein Tool der Gesteinsphysik

Kontny, A. und Schilling, F. *(Institut für Angewandte Geowissenschaften, KIT Karlsruher Institut für Technologie)*:
Petrophysikalische Ansätze zum Verständnis der Krustendynamik

MITTEILUNGEN

DGG-Kolloquium

Angewandte Gesteinsphysik

Hamburg, den 07. März 2012

Sonderband II/2012
ISSN-Nr. 0947-1944

Herausgeber:
Deutsche Geophysikalische Gesellschaft e.V.

IMPRESSUM

Herausgeber: Deutsche Geophysikalische Gesellschaft e.V.
Telegrafenberg, 14473 Potsdam

Redaktion: Arbeitskreis „Angewandte Geophysik“

Dr. T. Fechner, Neuwied
Dr. T. Litwinska-Kemperink, Oldenzaal
Prof. Dr. M. Joswig, Stuttgart
Dr. D. Orlowsky, Essen
Dr. A. Schuck, Leipzig (Sprecher)
Prof. Dr. U. Yaramanci, Hannover

Kontakt:

Dr. A. Schuck
GGL Geophysik und Geotechnik Leipzig GmbH
Bautzner Str. 67, 04347 Leipzig
Tel. 0341/2421-310, andreas.schuck@ggl-gmbh.de

DGG-Kolloquien
1988 - 2012

1988	Köln	Feldtechniken in der Landseismik
1989	Stuttgart	Unterstützung der seismischen Interpretation durch Bohrlochmessungen
1990	Leoben	Umweltgeophysik
1991	Bochum	Integrierte Interpretation in der Angewandten Geophysik
1992	Leipzig	Ingenieurgeophysik
1993	Kiel	Ausgewählte Themen aus der Marinen Geophysik
1994	Münster	Nichtseismische Verfahren in der Angewandten Geophysik
1995	Hamburg	Geophysikalische Bohrlochmessverfahren
1996	Freiberg	Fernerkundung - Remote Sensing
1997	Potsdam	Kolloquium ersetzt durch den "Internationalen Tag"
1998	Göttingen	Angewandte Geothermie
1999	Braunschweig	Satellitengeophysik
2000	München	Magnetik
2001	Frankfurt	Interpretation reflexionsseismischer Messungen
2002	Hannover	Neue Aspekte der Explorations- und Produktionsgeophysik
2003	Jena	Interdisziplinärer Einsatz geophysikalischer Methoden
2004	Berlin	Aerogeophysik
2005	Graz	Geophysik zur Vorerkundung von Tunneln
2006	Bremen	Georadar
2007	Aachen	NMR
2008	Freiberg	Geophysikalisches Monitoring
2009	Kiel	Polare Geophysik
2010	Bochum	Entwicklung geophysikalischer Messgeräte
2011	Köln	Induzierte Seismizität
2012	Hamburg	Angewandte Gesteinsphysik

Die seit 2002 zum Kolloquium erschienenen Sonderbände der DGG-Mitteilungen können Sie noch beim Sprecher des Arbeitskreises „Angewandte Geophysik“ oder in der Geschäftsstelle der DGG nachbestellen.

Kontakt:

Dr. Andreas Schuck
GGL Geophysik und Geotechnik Leipzig GmbH
Bautzner Str. 67, 04347 Leipzig
Tel. 0341/2421-310, andreas.schuck@ggl-gmbh.de

DGG-Kolloquium

Angewandte Gesteinsphysik

72. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft

Hamburg, 07. März 2012

Inhalt

Tronicke, J. *(Institut für Erd- und Umweltwissenschaften, Universität Potsdam)*:

Integrierte Erkundungsstrategien zur quantitativen Charakterisierung des oberflächennahen Untergrundes ……... 3

Wuttke, F. *(Bauhaus-Universität Weimar)*:

Wave based parameter identification and process monitoring in Geotechnics ……... 13

Müller-Petke, M., Hübner, W., Wonik, T. und Yaramanci, U.
(Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik, Hannover):

Nuklear-Magnetische Resonanz (NMR) – ein Tool der Gesteinsphysik ...……... 29

Kontny, A. und Schilling, F. *(Institut für Angewandte Geowissenschaften, KIT - Karlsruher Institut für Technologie)*:

Petrophysikalische Ansätze zum Verständnis der Krustendynamik …….. 41

Anzeige

Ihr Partner für geophysikalische Messgeräte

Verkauf - Vermietung - Beratung - Schulung - Reparatur

Geophysik in allen Elementen: Luft - Boden - Wasser

Georadar GPR - Elektromagnetik (FD / TD)
Magnetik - Geoelektrik - Seismik
Gravimetrie - Gammaspektrometrie

Allied Associates Geophysical Ltd. Büro Deutschland
Butenwall 56 / D-46325 Borken
Tel.: +49-(0)2861-8085648 / Fax: +49-(0)2861-9026955
susanne@allied-germany.de
www.allied-associates.co.uk / www.allied-germany.de

Integrierte Erkundungsstrategien zur quantitativen Charakterisierung des oberflächennahen Untergrundes

Jens Tronicke

Universität Potsdam
Institut für Erd- und Umweltwissenschaften
Karl-Liebknecht-Str. 24
14476 Potsdam

E-mail: jens@geo.uni-potsdam.de

Zusammenfassung

Das Methodenspektrum der Geophysik wird seit Jahrzehnten erfolgreich zur Erkundung und Charakterisierung des oberflächennahen Untergrundes bei einer Vielzahl von geologischen, hydrologischen und ingenieurtechnischen Fragestellungen eingesetzt. Neben der strukturellen Erkundung wird dabei immer häufiger die Anforderung formuliert, die geophysikalischen Modelle in die für die jeweilige Fragestellung relevanten Zielparameter (wie z.B. Fluidgehalt, Porosität, hydraulische Leitfähigkeit) zu übersetzen. Unglücklicherweise ist die geforderte Parameterumsetzung mit einer Reihe von Problemen verknüpft, da die zu Grunde liegenden petrophysikalischen Beziehungen und Modelle häufig komplexe Zusammenhänge zeigen, die bei begrenzter Datenlage an einem bestimmten Standort eine verlässliche direkte Übersetzung erschweren. In diesem Beitrag sollen nach einer einleitenden, grundlegenden Einführung in die Problematik der Parameterumsetzung ausgewählte Erkundungsstrategien und Auswerteansätze vorgestellt werden, deren Grundidee es ist, durch eine gezielte Kombination von unterschiedlichen Methoden und Datensätzen verbesserte Möglichkeiten bezüglich einer angestrebten Parameterumsetzung zu liefern. Neben statistischen und geostatistischen Ansätzen zur Daten- und Modellintegration werden auch neuere Entwicklungen hinsichtlich der Inversion geophysikalischer Datensätze diskutiert, da ein verlässliches geophysikalisches Struktur- und Parametermodell als ein wesentlicher Faktor bei der quantitativen Charakterisierung des oberflächennahen Untergrundes darstellt.

Einleitung

Der oberflächennahe Untergrund (vor allem die obersten 50 m) beherbergt den Großteil der menschlichen Infrastruktur, wichtige Ressourcen wie Wasser und mineralische Rohstoffe und dient gleichzeitig als Depot für Haus- und Industriemüll. Erkenntnisse über diesen Untergrundbereich sind somit wichtig bei unterschiedlichsten ingenieurtechnischen Fragestellungen und Projekten (z.B. des Bauwesens), bei der Beurteilung und der Ausbeutung natürlicher Rohstofflagerstätten (z.B. Grundwasser) oder bei der Vorhersage und Bewertung der Konsequenzen von anthropogenen Verschmutzungen. Die sich daraus ergebenden vielfältigen praxis- und forschungsrelevanten Erkundungsaufgaben fordern in der Regel effiziente Methoden, die es erlauben den Untergrund räumlich, möglichst hochauflösend und zerstörungsarm zu charakterisieren (National Research Council, 2000). Hieraus erklärt sich auch das stetig steigende Interesse an den unterschiedlichen Methoden der oberflächennahen Geophysik, da diese zumindest prinzipiell das Potential haben, den formulierten Anforderungen in großen Teilen zu entsprechen (Butler, 2005).

In der oberflächennahen Erkundung und Standortcharakterisierung haben eine Reihe von geophysikalischen Methoden wie zum Beispiel das Georadar-Verfahren, geoelektrische

Verfahren oder auch verschiedene seismische Methoden gezeigt, dass sie bei typischen Fragestellungen wertvolle Informationen vor allem über den strukturellen Aufbau des Untergrundes liefern können (Butler, 2005). Räumliche Informationen über die Tiefe zum Festgestein, zum Grundwasser oder über die Geometrie pedologischer und geologischer Schichten und Einheiten können als typische Beispiele in diesem Zusammenhang genannt werden. Solche Informationen sind essentiell, da eine strukturelle Modellbildung einen wichtigen ersten Schritt bei nahezu allen Erkundungsaufgaben darstellt. Für eine weitergehende quantitative Charakterisierung des beprobten Untergrundbereichs kommt aus der Anwendung jedoch immer häufiger die Anforderung, die geophysikalischen Modelle in die für die Fragestellung relevanten Zielparameter zu übersetzen. Als typische Boden- und Gesteinseigenschaften, die hier von Interesse sind, können der Fluidgehalt, die Porosität, die hydraulische Leitfähigkeit, die Zusammensetzung des Matrixmaterials sowie verschiedene geotechnische und geochemische Parameter genannt werden.

Da geophysikalische Parameter (z.B. elektrischer Widerstand, seismische oder auch Georadar-Geschwindigkeiten) grundsätzlich von verschiedenen Eigenschaften des beprobten Materials abhängen (mineralische Zusammensetzung, Art der Porenraumfüllung, Druck, Temperatur etc.), kann in der Regel keine generell gültige scharfe Korrelation zu bestimmten einzelnen Zielparametern erwartet werden (z.B. Schön, 1998). Die entsprechenden Parameterbeziehungen werden vielmehr häufig als schwach-korreliert, unsicher, komplex, standortspezifisch, nicht-eindeutig und/oder räumlich variabel beschrieben. Für die Anwendung bedeutet dies, dass die Anwendbarkeit und Gültigkeit genereller petrophysikalischer Beziehungen wie zum Beispiel des Archie-Gesetzes (Archie, 1942) oder der Topp-Gleichung (Topp et al., 1980), die sich als direkte Möglichkeit der Parameterübersetzung anbieten (z.B. Slater et al., 2002; Greaves et al. 1996), zumindest hinterfragt werden muss. Die Entwicklung eines petrophysikalischen Modellverständnisses für einen bestimmten Standort sollte somit unter Zuhilfenahme von punktuellen Informationen, wie sie durch Messungen am Bohrkernmaterial, Bohrlochmessungen oder auch Cone-Penetration Tests (CPT) bzw. Direct-Push (DP) Sondierungen gewonnen werden können, geschehen, da diese oft die Möglichkeit bieten, die interessierenden Zielparameter zumindest punktuell direkt zu messen (Lunne et al., 1997; Hearst et al., 2000; Dietrich & Leven, 2006). Dementsprechend finden sich in der Literatur zahlreiche Studien die punktuelle (z.B. bohrlochbasierte) Daten mit 2D oder auch 3D geophysikalischen Parmameterfeldern verknüpfen, um die Gültigkeit bestimmter petrophysikalischer Zusammenhänge zu überprüfen oder standortspezifische Parameterbeziehungen empirisch abzuleiten (z.B. Alumbaugh et al., 2002). Erschwert wird eine solche Verknüpfung allerdings dadurch, dass die räumliche Skala der bohrloch- bzw. DP-basierten Experimente typischerweise um mindestens eine Größenordnung kleiner ist als die Skala der geophysikalischen Datensätze bzw. Modelle. Weiterhin ist zu beachten, dass die Auflösung und die Charakteristika geophysikalischer Parametermodelle von der Geometrie des Feldexperiments, der Inversionsstrategie und den abzubildenden Strukturen und Parameterkontrasten abhängen und kritischen Einfluss auf die abgeleiteten petrophysikalischen Parameterbeziehungen haben können (Day-Lewis et al., 2005; Moysey et al., 2005). In diesem Zusammenhang muss auch darauf hingewiesen werden, dass häufig eine angemessene Berücksichtigung von Unsicherheiten in der geophysikalischen Parameterbestimmung bzw. Modellbildung fehlt, die mit der Nicht-Eindeutigkeit der Inversionsaufgabe zusammenhängt und bei nahezu allen Inversionsproblemen in der Geophysik berücksichtigt werden muss (z.B. Aster et al., 2005). Ein weiterer für die Praxis kritischer Aspekt stellen Mehrdeutigkeiten in den Parameterbeziehungen dar, die eine direkte Übersetzung ohne zusätzliche Informationen erschweren bzw. unmöglich machen. Beispielhaft seien hier die von Marion et al. (1992) und Knoll (1996) vorgestellten Studien genannt, die solche Mehrdeutigkeiten anhand der Beziehung zwischen seismischer bzw. elektromagnetischer Wellengeschwindigkeit und der Porosität für Sand-Ton-Gemische näher beleuchten.

Um die oben diskutierten Probleme bei der Parameterumsetzung anzugehen und den Untergrund der Fragestellung entsprechend detailliert zu charakterisieren, erscheint neben einem detailliertem petrophysikalischen Verständnis eine gezielte Kombination unterschiedlicher geophysikalischer und nicht-geophysikalischer Methoden unumgänglich. In der Literatur findet sich eine Reihe von Fallbeispielen, die das Potential einer solchen gezielten Methodenkombination verdeutlichen, wobei auch der Bedarf an flexiblen und effektiven Methoden zur quantitativen Analyse deutlich wird (z.B. Hubbard et al., 2001; Garambois et al., 2002; Tronicke et al., 2004; Paasche et al., 2008). Im folgenden werden verschiedene ausgewählte Ansätze diskutiert, die sich zur integrierten, struktur- und parameterbezogenen Erkundung des oberflächennahen Untergrundes anbieten. Zum einen werden statistische und geostatistische Ansätze zur Daten- bzw. Modellintegration vorgestellt, die es erlauben unterschiedliche Datensätze und Modelle quantitativ zu integrieren und darauf abzielen, die dominanten Parametervariationen herauszuarbeiten. Danach wird auf gemeinsame Inversionsansätze eingegangen, die die Möglichkeit eröffnen, Mehrdeutigkeiten und Unsicherheiten bei der Inversion zu minimieren und ein geophysikalisches Multi-Parametermodell des Untergrundes zu erstellen. Am Ende werden noch Ansätze der globalen Inversion diskutiert, mit denen auch Unsicherheiten in den geophysikalischen Parameterfeldern quantifiziert werden können, was als weitere wichtige Vorrausetzung für eine anschließende Parameterumsetzung angesehen werden kann.

Statistische Ansätze zur Daten- und Modellintegration

Zur besseren Charakterisierung des Untergrundes werden heutzutage häufig mehrere geophysikalische Datensätze an einem Standort aufgezeichnet. Die Standard-Auswertestrategie basiert dabei auf einer separaten Inversion jedes einzelnen Datensatzes gefolgt von einer gemeinsamen Interpretation der resultierenden Modelle. Die gemeinsame Interpretation geschieht meist manuell, was bedeutet, dass das Resultat als subjektiv und auch qualitativ einzustufen ist. Eine Alternative stellen Ansätze aus dem Bereich der multivariaten Statistik (z.B. Methoden der Clusteranalyse) dar, die sich als geeignetes und robustes Mittel bewährt haben, um die dominanten physikalischen Parametervariationen herauszuarbeiten (Dietrich et al., 1998; Tronicke et al., 2004; Paasche et al., 2006; Dietrich & Tronicke, 2009).

Abb. 1 zeigt ein Beispiel, in dem Modelle der Georadar-Geschwindigkeit und des Dämpfungsparameters mittels Clusteranalyse integriert wurden. Der zu Grunde liegende Crosshole-Datensatz (Tronicke et al., 2004) wurde an einem hydrogeophysikalischen Teststandort in Boise (Idaho, USA) aufgezeichnet, an dem die Möglichkeiten geophysikalischer Techniken zur detaillierten Aquifercharakterisierung in sandig bis kiesigen Sedimenten studiert werden. Im gezeigten Beispiel wurden Modelle der Georadar-Geschwindigkeit und Dämpfung aus Erstankunftszeiten bzw. Amplituden mit einem konventionellen, strahlbasierten Inversionsalgorithmus rekonstruiert. Zur Integration der Modelle wurde hier ein fuzzy c-means Clusteralgorithmus verwendet, der als „weiche“ partitionierende Clustertechnik auch Informationen über die Zugehörigkeit eines Datenpunktes zu einem bestimmten Cluster liefert. Neben einer „harten“ Strukturierung (Abb. 1c) können somit die Resultate der Modellintegration auch dazu genutzt werden, die geophysikalischen Parameterfeldern mit punktuellen Datensätzen (z.B. Bohrlochmessungen) über Mischungsgesetze zu verknüpfen und Modelle der geforderten Zielparameter zu erstellen (Näheres zu dieser Methodik findet sich in Paasche et al., 2006). Abb. 1d zeigt das daraus in diesem Beispiel resultierende 2D Porositätsmodell inklusive der zur Parameterumsetzung verwendeten Porositätsdatensätze, die mit einem Neutron-Verfahren in den Bohrungen gemessen wurden.

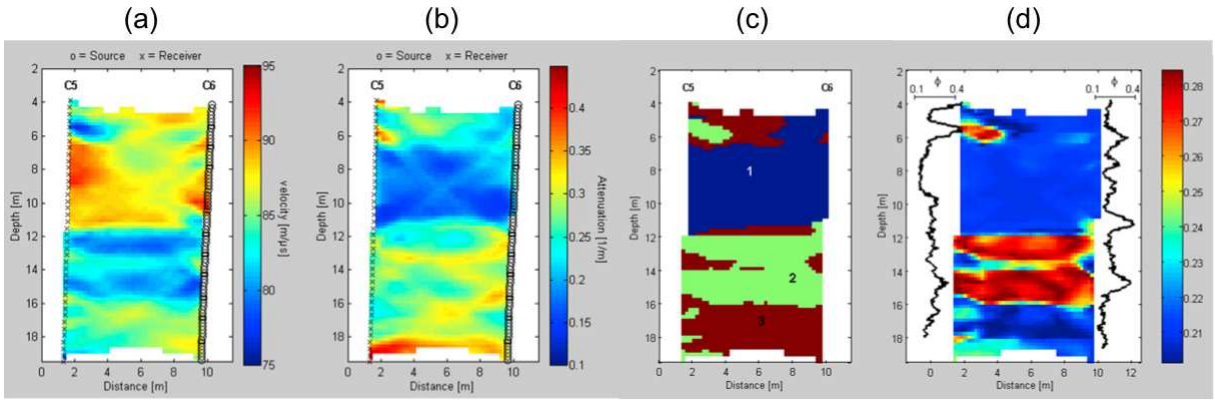

Abbildung 1: Integration zweier tomographischer Parametermodelle mittels fuzzy c-means Clusteranalyse und anschließende Parameterumsetzung. Modelle der (a) Georadar-Geschwindigkeit und (b) Dämpfung, (c) integriertes Drei-Zonen-Modell und (d) Rekonstruktion der 2D Porositätsverteilung basierend auf den Resultaten der Clusteranalyse und den gezeigten Porositätslogs, die an den Bohrungen C5 und C6 zur Verfügung stehen.

Geostatistische Ansätze zur Daten- und Modellintegration

Neben statistischen Ansätzen bietet sich auch das Methodenspektrum der Geostatistik an, das eine Reihe von Verfahren zur Datenanalyse und Integration zur Verfügung stellt (z.B. Kelkar & Perez, 2002). Beispielhaft seien Methoden wie das Co-Kriging oder sequentielle Gaußsche Simulationstechniken (z.B. Cassiani et al., 1998; Hyndman et al., 2000) genannt, die erfolgreich zur Integration und Parameterumsetzung auch in der oberflächennahen, geophysikalischen Standortcharakterisierung eingesetzt wurden. Als besonders flexibel haben sich Techniken der konditionierten geostatistischen Simulation erwiesen, die die Simulationsaufgabe als globales Optimierungsproblem formulieren und durch Techniken wie das Simulated Annealing lösen (z.B. Tronicke & Holliger, 2005; Dafflon et al., 2009). Neben der Flexibilität in der Handhabung unterschiedlichster Daten und Informationen, sei hier besonders auf die Möglichkeit hingewiesen, ein Ensemble von möglichen (gleich wahrscheinlichen) Parametermodellen zu generieren. Die Analyse eines solchen Modellensembles erlaubt es, Unsicherheiten im Modellraum zu quantifizieren und bei der weitergehende Analyse und Interpretation zu berücksichtigen (Tronicke & Holliger, 2005).

Abb. 2 zeigt das Resultat einer solchen stochastischen Simulation am Beispiel der in Abb. 1 dargestellten Datenbasis (geophysikalische Parametermodelle plus Porositätslogs). Das gezeigte Modell reproduziert die Porositätslogs an den Bohrungen und vereinigt diese Information mit den dominanten Strukturen aus den geophysikalischen Parametermodellen sowie mit aus den Daten abgeleiteten räumlichen Korrelationsmodellen. Vergleicht man die Charakteristika dieses Porositätsmodells (raues Modell, Variabilität auf der Skala der Bohrlochlogs) mit dem Modell in Abb. 1d (glattes Modell, Variabilität auf der Skala der geophysikalischen Parametermodelle) so wird deutlich, dass ein solcher Simulationsansatz sich vor allem dann anbietet, wenn kleinskalige Heterogenitäten jenseits des Auflösungsvermögens geophysikalischer Techniken untersucht werden sollen.

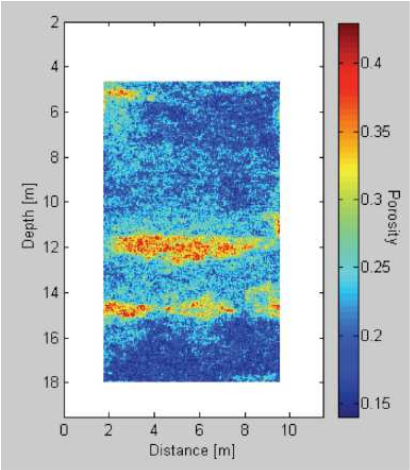

Abbildung 2: Porositätsmodell erstellt mit einer konditionierter stochastischen Simulationstechnik, die die Information aus den in Abb. 1 gezeigten geophysikalischen Parametermodellen (Georadar Geschwindigkeits- und Dämpfungstomogramm) sowie den Porositätslogs, die an den Bohrungen (linker und rechter Modellrand) vorliegen, integriert und in ein Modell überführt, welches mit allen einfließenden Informationen konsistent ist.

Gemeinsame geophysikalische Inversion

Wenn verschiedene geophysikalische Datensätze an einem Standort zur Verfügung stehen, bietet es sich an, diese unterschiedlichen Informationen über Aufbau und Beschaffenheit des Untergrundes während des Prozesses der Modellgenerierung miteinander zu verknüpfen, da so Mehrdeutigkeiten und Unsicherheiten im Modellraum minimiert werden können. Idealerweise resultiert daraus ein Untergrundmodell, welches mit allen unabhängigen geophysikalischen Datensätzen konsistent ist (Lines et al., 1988). Wenn für verschiedene physikalische Parameter invertiert wird, besteht prinzipiell die Möglichkeit a priori ein petrophysikalisches Modell zu definieren (z.B. Lees & VanDecar, 1991), um die Datensätze miteinander zu verknüpfen. Wie eingangs bereits diskutiert, sind die petrophysikalischen Parameterbeziehungen allerdings in der Regel so komplex, dass eine fixierte petrophysikalische Verknüpfung häufig problematisch ist. Aus diesem Grund basieren die meisten heutzutage eingesetzten gemeinsamen Inversionsansätze auf strukturellen Verknüpfungen wie sie zum Beispiel von Haber & Oldenburg (1997) und Gallardo & Meju (2004) vorgeschlagen wurden. Bei den meisten dieser Ansätze ist allerdings wiederum eine gemeinsame Interpretation der resultierenden Modelle (die manuell oder wie bereits diskutiert unter Zuhilfenahme statistischer Ansätze geschehen kann) notwendig, um die dominanten physikalischen Parametervariationen herauszuarbeiten. Eine Alternative, die als Weiterführung der oben diskutierten statistischen Integration angesehen werden kann, wurde von Paasche & Tronicke (2007) als „Zonal Cooperative Inversion (ZCI)“ vorgeschlagen. Bei diesem Ansatz wird die strukturelle Verknüpfung durch eine Clusteranalyse realisiert, die nach jedem konventionellen Inversionsschritt, den Modellraum integriert und somit für einen strukturellen Austausch zwischen den Datensätzen sorgt.

Abb. 3 zeigt ein Beispiel, in dem drei unterschiedliche Crosshole-Laufzeitdatensätze (seismische P- und S-Wellen- sowie Georadar-Laufzeiten) gemeinsam mit dem ZCI-Ansatz invertiert wurden (Linder et al., 2010). Die Datensätze wurden auf einem Testfeld in Horstwalde (ca. 30 km südlich von Berlin) aufgezeichnet, welches von der Universität Potsdam und der Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung (BAM) in Kooperation mit dem Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung (UFZ) zur Entwicklung und Erprobung oberflächennaher Erkundungsmethoden eingerichtet wurde. In Abb. 3a ist das resultierende zonale Untergrundmodell gezeigt, wobei jede der sechs Zonen (Cluster) durch eine bestimmte Kombination von P-Wellen-, S-Wellen- und Georadar-Geschwindigkeit charakterisiert ist (Abb. 4). Ähnlich dem Beispiel aus Abb. 1 kann dieses Resultat auch hier genutzt werden, um über eine Verknüpfung mit punktuellen Datensätzen Modelle der geforderten Zielparameter zu erstellen. Abb. 3b zeigt als Beispiel ein 2D Modell des Spitzenwiderstandes, welches unter Zuhilfenahme von zwei CPT-Sondierungen, die entlang des Profils zur Verfügung stehen (siehe Abb. 3a), abgeleitet wurde.

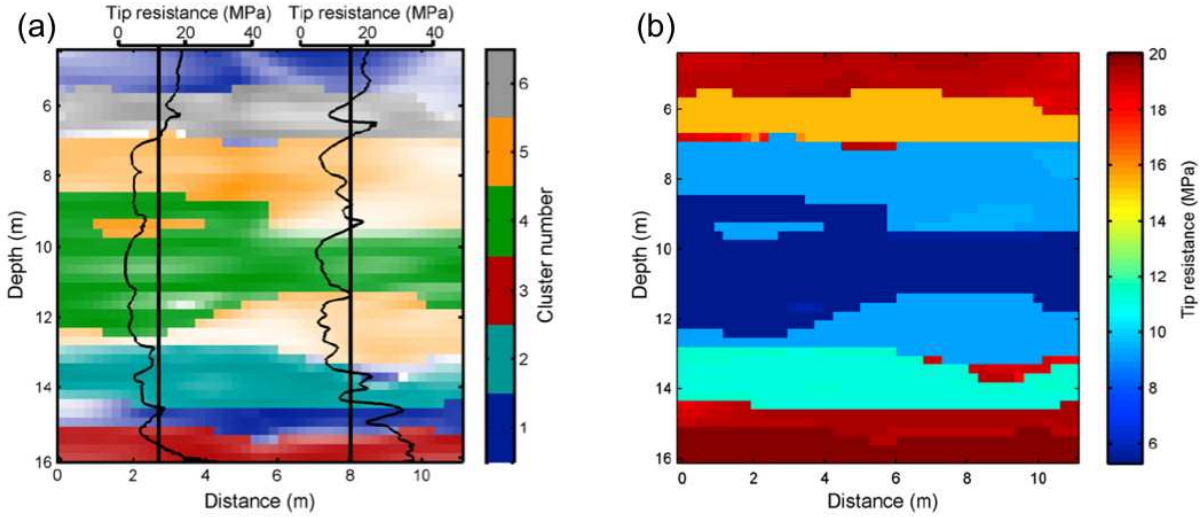

Abbildung 3: Gemeinsame Inversion von P-Wellen-, S-Wellen- und Georadar-Laufzeiten mit dem ZCI-Ansatz. (a) Finales Sechs-Zonen-Modell, wobei die Farbsättigung den Grad der Clusterzugehörigkeiten der einzelnen Modellzellen widerspiegelt. (b) Beispiel der Parameterumsetzung durch Integration des zonalen Modells mit punktuellen Daten (CPT-Spitzenwiderstand), die in (a) im Vergleich zum geophysikalischen Modell gezeigt sind (modifiziert nach Linder et al., 2010).

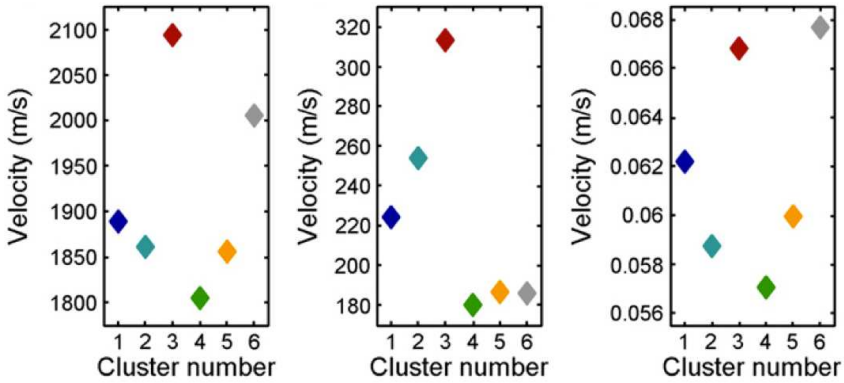

Abbildung 4: Mittlere (a) P-Wellen-, (b) S-Wellen- und (c) Georadar-Geschwindigkeiten für jedes Cluster des Sechs-Zonen-Modells in Abb. 3a (modifiziert nach Linder et al., 2010).

Globale geophysikalische Inversion

Eine wichtige Vorrausetzung zur verlässlichen Parameterumsetzung ist die Quantifizierung von Unsicherheiten in den beteiligten Datensätzen und Parametermodellen. Dies gilt vor allem auch für die geophysikalischen Parametermodelle, wo häufig auf die konkrete Angabe eines Fehlerbereichs verzichtet wird bzw. verzichtet werden muss. Globale Optimierungsverfahren, mit denen auch ein Ensemble von akzeptierbaren Lösungen (d.h. Modelle, die die Daten gleich gut erklären) generiert werden kann, bieten sich zur Abschätzung von Unsicherheiten im Modellraum bzw. des Auflösungsvermögens der Daten bei nicht-linearen geophysikalischen Inversionsproblem an (Sen & Stoffa, 1995). Die Möglichkeit, ein vom Startmodell unabhängiges Resultat zu produzieren und den Modellraum detailliert durchsuchen zu können, sollten als weitere typische Charakteristika von globalen Inversionsstrategien festgehalten werden. Die stetige Verbesserung der Computertechnik und die Entwicklung von effizienten globalen Optimierungsalgorithmen machen diese Verfahren auch für die Inversion typischer geophysikalischer Datensätze immer populärer.

Zum Beispiel schlagen Tronicke et al. (2011, 2012) einen Ansatz basierend auf der Partikel-Schwarm-Optimierung (PSO; Kennedy & Eberhart, 1995) zur 2D globalen und auch gemeinsamen Inversion von geophysikalischen Datensätzen vor. Abb. 5 zeigt beispielhaft für diesen Ansatz das Resultat der Inversion seismischer Crosshole-Laufzeitdaten, die auf dem Testfeld Horstwalde (s. o.) gemessen wurden (Tronicke et al., 2012). Unter Verwendung einer schichtbasierten Modellparametrisierung wurden hier 100 gleichwahrscheinliche Modelle der seismischen P-Wellen-Geschwindigkeit berechnet und analysiert. Dargestellt sind das Median-Modell (Abb. 5a), der Quartilenabstand (Abb. 5b) als Maß für die Streuung im finalen Modellensemble und zum Vergleich das Resultat einer Siebanalyse des Kernmaterials der Bohrung bei x = 31,25 m. Dieser Vergleich verdeutlicht zum Beispiel, dass wesentliche Änderungen in den Korngrößen auch durch die seismischen Geschwindigkeiten abgebildet werden. Abb. 6 deutet an wie die Resultate dieser globalen Inversionsstrategie zur weiteren Interpretation und Parameterverknüpfung genutzt werden können. Vor allem die Unsicherheitsinformation (Abb. 6b) erweist sich hierbei als hilfreich, da Bereiche, die durch eine hohe Variabilität im Modellraum gekennzeichnet sind, bei der Interpretation ausgeklammert werden können. Im gezeigten Beispiel konnten so fünf Zonen mit charakteristischen Geschwindigkeitswerten identifiziert werden, die dann mit zur Verfügung stehenden Bohrloch- und DP-Daten verknüpft wurden. Die gezeigten Parametermittelwerte plus/minus eine Standardabweichung bedeuten letztendlich, dass die Bohrloch- und DP-Daten auf die räumliche Skala der mit der seismischen Tomographie detektierten Strukturen skaliert werden und somit eine verbesserte Parameterumsetzung ermöglichen.

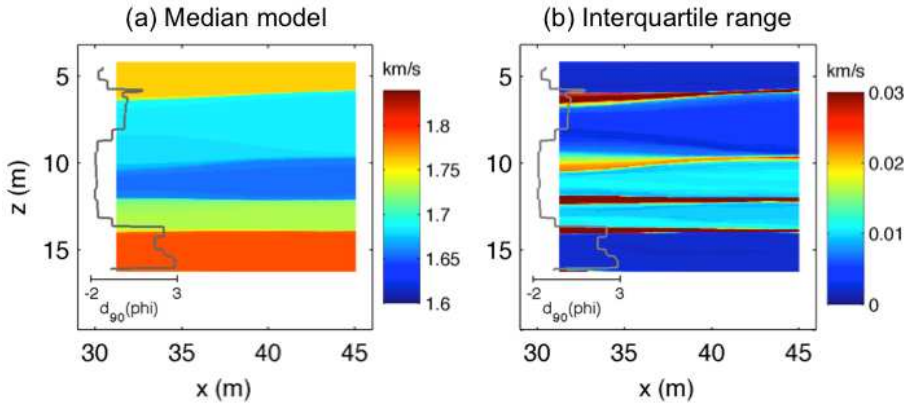

Abbildung 5: Resultate der globale Inversion von Laufzeiten seismischer P-Wellen mit einem PSO basierten Ansatz. (a) Median-Modell und (b) Quartilenabstand berechnet aus einem Ensemble bestehend aus 100 gleichwahrscheinlichen Geschwindigkeitsmodellen. Zum Vergleich sind die Resultate einer Korngrößenanalyse (d90: Korngröße bei 90% Siebdurchgang) dargestellt, die am Kernmaterial der Bohrung am linken Modellrand (x = 31,25 m) durchgeführt wurde (modifiziert nach Tronicke et al., 2012).

Abschließende Diskussion und Ausblick

Zur detaillierten struktur- und parameterbezogenen Charakterisierung des oberflächennahen Untergrundes erscheinen Erkundungsstrategien, die gezielt die Informationen aus verschiedenen geophysikalischen und nicht-geophysikalischen Messtechniken integrieren, unumgänglich. Auch wenn bei solchen Multi-Methoden-Ansätzen sicherlich noch Bedarf hinsichtlich der Entwicklung effizienter Akquisitionsstrategien und der Weiterentwicklung einzelner Feldmethoden besteht, liegt die wesentliche Herausforderung darin, die zur Verfügung stehenden Datensätze bei der Auswertung sinnvoll und quantitativ miteinander zu verknüpfen. Ein wichtiger Punkt bei einer solchen integrativen Modellbildung ist es, die Verlässlichkeit der zu integrierenden Daten zu beurteilen, diese Informationen möglichst bei der Modellbildung zu berücksichtigen und Unsicherheiten in den resultierenden Modellen zu quantifizieren und diese auch sinnvoll zu kommunizieren. Dabei ist auch zu beachten, dass

man in vielen Anwendungsfeldern (wie z.B. in der Hydrogeologie) es durchaus gewohnt ist, Unsicherheiten bei der Modellbildung und Prozessmodellierung zu berücksichtigen. Auch wenn ein vermehrtes Bewusstsein hinsichtlich der Quantifizierung von Daten- und Modellunsicherheiten in der Geophysik feststellbar ist und Ansätze wie die auch in diesem Beitrag vorgestellten stochastischen und globalen Methoden immer größere Aufmerksamkeit erfahren, besteht in diesem Bereich sicherlich noch Entwicklungsbedarf, um angemessenen, praktikable und effiziente Techniken zu identifizieren.

Die in diesem Beitrag exemplarisch vorgestellten Methoden der Daten- und Modellintegration sowie der gemeinsamen und globalen Inversion stellen Werkzeuge dar, deren Potential sich bisher nur in einzelnen Fallstudien angedeutet hat. Es sind jedoch zweifelsohne noch weitere detaillierte Untersuchungen und methodische Weiterentwicklungen notwendig, um die Robustheit, Flexibilität und Anwendbarkeit dieser Methoden bei unterschiedlichen, typischen Fragestellungen und Datengrundlagen endgültig beurteilen zu können. Dies beinhaltet auch die Frage nach der Adaptierbarkeit solcher Techniken zur Generierung von 2D oder auch 3D Modellen der jeweiligen Zielparameter auf unterschiedlichen räumlichen Skalen. Als Beispiel seien hier hydrologische Erkundungsaufgaben genannt, bei denen in der Vergangenheit der geophysikalische Forschungs- und Entwicklungsfokus vor allem auf der detaillierten und quantitativen Charakterisierung lokaler Systeme und Prozesse lag, und man sich erst in jüngster Zeit vermehrt mit Strategien und Ansätzen zur Lösung von Erkundungsaufgaben auf der Einzugsgebietsskala beschäftigt hat. Insgesamt kann davon ausgegangen werden, dass sich die oberflächennahe Geophysik in den erd-, ingenieur- und umweltwissenschaftlichen Nachbardisziplinen und deren vielfältigen Anwendungsfeldern nur dann weitreichend und langfristig etablieren kann, wenn es gelingt, die Methoden dahingehend zu entwickeln, dass sie neben einer strukturellen auch eine verlässliche zielparameterorientierte Charakterisierung des Untergrundes ermöglichen.

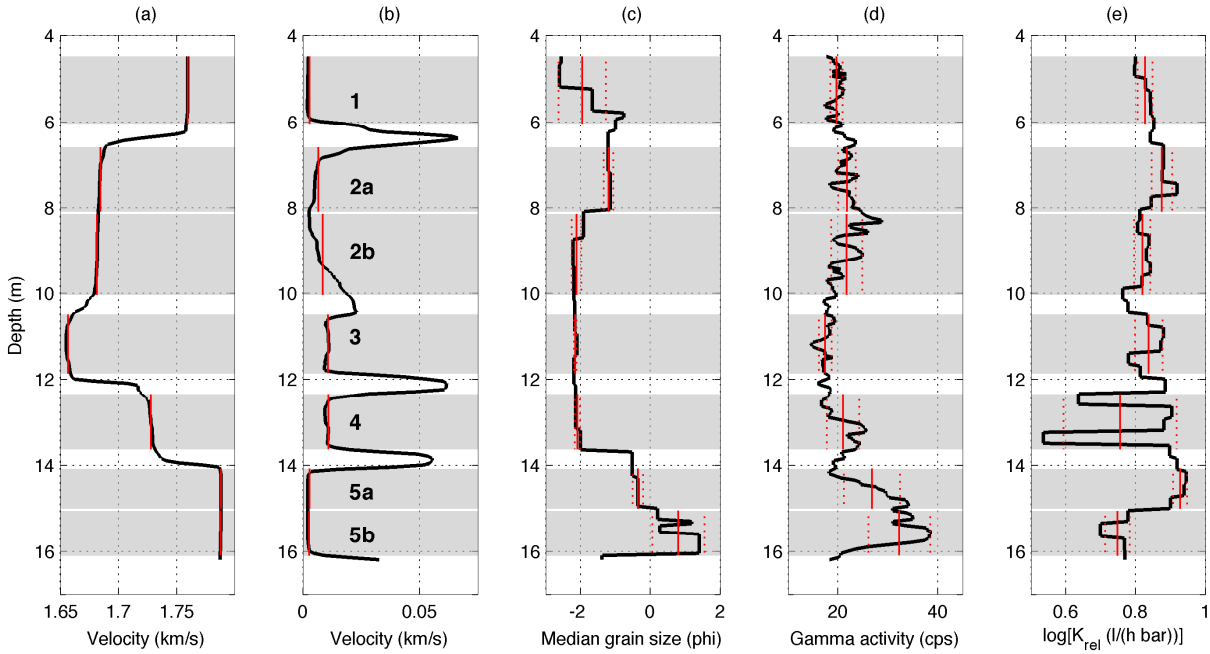

Abbildung 6: Vergleich und Verknüpfung von P-Wellen-Geschwindigkeiten zu ausgewählten Bohrloch- und DP-Logs. (a) 1D Geschwindigkeitstiefenfunktion (extrahiert aus Abb. 5a am linken Modellrand), (b) Quartilenabstand als Funktion der Tiefe (extrahiert aus Abb. 5b am linken Modellrand), (c) Median der Korngröße (d50) aus Siebanalysen von Kernmaterial, (d) natürliche Gamma-Aktivität aus entsprechender Borhlochmessung und (e) relative hydraulische Leitfähigkeit aus einer DP Injektionslog-Messung. In (a) bis (e) deuten die durchgezogenen und gestrichelten roten Linien Parametermittelwerte plus/minus eine Standabweichung für jede interpretierte Schicht an (modifiziert nach Tronicke et al., 2012).

Literatur

Alumbaugh, D., Chang, P. Y., Paprocki, L., Brainard, J. R., Glass, R. J., Rautman, C. A., 2002: Estimating moisture contents in the vadose zone using cross-borehole ground penetrating radar: A study of accuracy and repeatability. Water Resources Research, 38, 1309, doi:10.1029/2001WR000754.

Archie, G. E., 1942: The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics. Trans. Am. Inst. Min. Metall. Pet. Eng., 146, 54– 62.

Aster, R. C., Borchers, B., Thurber, C. H., 2005: Parameter estimation and inverse problems. Academic Press Inc.

Butler, D.K. (2005): Near-surface geophysics. Society of Exploration Geophysicists.

Cassiani, G., Böhm, G., Vesnaver, A., Nicolich, R., 1998: A geostatistical framework for incorporating seismic tomography auxiliary data into hydraulic conductivity. Journal of Hydrology, 206, 58–74.

Dafflon, B., Irving, J., Holliger, K., 2009: Simulated-annealing-based conditional simulation for the local-scale characterization of heterogeneous aquifers. Journal of Applied Geophysics, 68, 60–70.

Day-Lewis, F. D., Singha, K., Binley, A., 2005: Applying petrophysical models to radar traveltime and electrical resistivity tomograms: Resolution-dependent limitations. Journal of Geophysical Research, 110, B08206, doi: 10.1029/2004JB003569.

Dietrich, P., Leven, C., 2006: Direct push technologies. In: Kirsch, R. (Ed.), Groundwater Geophysics. Springer Verlag, Berlin, pp. 321–340.

Dietrich, P., Tronicke, J., 2009: Integrated analysis and interpretation of cross-hole P- and S-wave tomograms: a case study. Near Surface Geophysics, 7, 101-109.

Dietrich, P., Fechner, T., Whittaker, J., Teutsch, G., 1998: An integrated hydrogeophysical approach to subsurface characterization, in Groundwater Quality: Remediation and Protection, edited by K. Herbert and M. Kovar, IAHS Publ., 250, 513– 519.

Gallardo, L.A., Meju, M., 2004: Joint two-dimensional DC resistivity and seismic traveltime inversion with cross-gradient constraints. Journal of Geophysical Research, 109, B03311, doi:10.1029/2003JB002716.

Garambois, S., Sénéchal, P., Perroud, H., 2002: On the use of combined geophysical methods to assess water content and water conductivity of near-surface formations, Journal of Hydrology, 259, 32–48.

Greaves, R. J., Lesmes, D. P., Lee, J. M., Toksöz, M. N., 1996: Velocity variations and water content estimated from multi-offset, ground-penetrating radar. Geophysics, 61, 683-695.

Haber, E., Oldenburg, D., 1997: Joint inversion: a structural approach. Inverse Problems, 13, 63–77.

Hearst, J. R., Nelson, P. H., Paillet, F. L., 2000: Well Logging for Physical Properties: A Handbook for Geophysicists, Geologists, and Engineers. John Wiley & Sons.

Hubbard, S. S., Chen, J., Peterson, J. E., Majer, E. L., Williams, K. H., Swift, D. J., Mailloux, B., Rubin, Y., 2001: Hydrogeological characterization of the South Oyster bacterial transport site using geophysical data. Water Resources Research, 37, 2431–2456.

Hyndman, D. W., Harris, J. M., Gorelick, S. M., 2000: Inferring the relation between seismic slowness and hydraulic conductivity in heterogeneous aquifers. Water Resources Research, 36, 2121–2132.

Kelkar, M., Perez, G., 2002: Applied geostatistics for reservoir characterization. Society of Petroleum Engineers.

Kennedy, J., Eberhart, R. C., 1995: Particle swarm optimization. Proceedings of the IEEE International Joint Conference on Neural Networks, 1942–1948.

Knoll, M.D., 1996: A petrophysical basis for ground penetrating radar and very early time electromagnetics: electrical properties of sand-clay mixtures. Dissertation, University of British Columbia.

Lees, J. M., VanDecar, J. C., 1991: Seismic tomography constrained by Bouguer gravity anomalies: Applications in western Washington: Pure and Applied Geophysics, 135, 31–52.

Lines, L. R., Schultz, A. K., Treitel, S., 1988: Cooperative inversion of geophysical data: Geophysics, 53, 8–20.

Linder, S., Paasche, H., Tronicke, J., Niederleithinger, E., Vienken, T., 2010: Zonal cooperative inversion of crosshole P-wave, S-wave, and georadar traveltime data sets. Journal of Applied Geophysics, 72, 254-262.

Lunne, T., Robertson, P.K., Powell, J.J.M., 1997: Cone penetration testing in geotechnical practice. Spon Press.

Marion, D., Nur, A., Yin, H., Han, D., 1992: Compressional velocity and porosity in sand-clay mixtures: Geophysics, 57, 554–563.

Moysey, S., Singha, K., Knight, R., 2005: A framework for inferring field-scale rock physics relationships through numerical simulation. Geophysical Research Letters, 32, doi: 10.1029/2004GL022152.

National Research Council, 2000: Seeing into the earth. National Academy Press.

Paasche, H., Tronicke, J., 2007: Cooperative inversion of 2D geophysical data sets: a zonal approach based on fuzzy c-means cluster analysis. Geophysics 72, A35–A39.

Paasche, H., Tronicke, J., Holliger. K., Green, A.G., Maurer, H., 2006: Integration of diverse physical-property models: Subsurface zonation and petrophysical parameter estimation based on fuzzy c-means cluster analyses. Geophysics, 71, H33-H44.

Paasche, H., Wendrich, A., Tronicke, J., Trela, C., 2008: Detecting voids in masonry by cooperatively inverting P-wave and georadar traveltimes. Journal of Geophysics and Engineering, 5, 256-267.

Schön, J. H., 1998: Physical Properties of Rocks: Fundamentals and Principles of Petrophysics. Pergamon.

Sen, M. K., Stoffa, P. L., 1995: Global optimization methods in geophysical inversion. Elsevier Science B.V..

Slater, L., Binley, A., Versteeg, R., Cassiani, G., Birken, R., Sandberg, S., 2002: A 3D ERT study of solute transport in a large experimental tank. Journal of Applied Geophysics, 49, 211– 229.

Topp, G. C., J. L. Davis, and A. P. Annan, 1980: Electromagnetic determination of soil water content: Measurements in coaxial transmission lines. Water Resour. Res., 16, 574–582.

Tronicke, J., Holliger, K., Barrash, W. Knoll, M. D., 2004: Multivariate analysis of cross-hole georadar velocity and attenuation tomograms for aquifer zonation: Water Resources Research, 40, W01519, doi:10.1029/2003WR002031.

Tronicke, J., and K. Holliger, 2005, Quantitative integration of hydrogeophysical data: Conditional geostatistical simulation for characterizing heterogeneous alluvial aquifers. Geophysics, 70, H1–H10.

Tronicke, J., Paasche, H., Böniger, U., 2011: Joint global inversion of GPR and P-wave seismic traveltimes using particle swarm optimization. 6th International Workshop of Advanced Ground Penetrating Radar (IWAGPR 2011), Aachen, Germany (four pages).

Tronicke, J., Paasche, H., Böniger, U., 2012: Crosshole traveltime tomography using particle swarm optimization: a near-surface field example. Geophysics, 77, R19-R32.

Wave based parameter identification and process monitoring in Geotechnics

Frank Wuttke

Chair of Geomechanical Modeling
Bauhaus-University Weimar
99423 Weimar

1 Introduction

1.1 Geotechnical Motivation and Current State of the Art

The determination of material parameter and its change in the small-strain range, depending on environmental conditions, is a basic task in the description of strain-dependent material behavior of soils. For the determination of small-strain shear stiffness, different in situ and ex situ methods are available in Geoscience. The performance of laboratory tests permits an extensive study under controlled conditions. The study of the acoustical characteristics of granular material in laboratory experiments has been technically realized since many years, e.g. (Lee & Santamarina 2004), (Santamarina & Fratta 2005). By far, most of the literature is related to different interpretation of time-of-flight measurements (travel time difference) as base of small-strain shear modulus assessment (Arulnathan & Boulanger 1998), (Jovicic, Coop & Simic 1996), (Ismail & Rammah 2005), (Youn, Choo & Kim 2008). Due to several superimposed effects on the wave path, the determination of wave velocity is often a non-trivial task. During the laboratory tests, straightforward methods as peak or cross-over point differences were applied (Blewett, Blewett & P.K. 2000) as well as the more suitable application of cross-correlation methods (Arulnathan & Boulanger 1998), see fig. 1. Both of them can be difficult to interpret due to inherent dispersion characteristics in granular material, the cylindrical shapes of the test specimen and often insufficient signal coherence. A further method was presented by (Greening & Nash 2004, Wuttke et al. 2010). Based on a sweep signal, the phase difference method between the transmitter and receiver signal was successfully applied over a wide frequency range. However from SASW method, where the phase difference method is a basis, the large uncertainties and assignment problems in the low frequency range are known (Nazarian, Yuan & Baker 1994), (Yuan & Nazarian 1993). All of these methods are not suitable to detect small material perturbations in a satisfied way, to detect small changes in void ratio and associated stresses, see fig. 2 and 3.

In geophysics, there have been for some year's developments in theory and application of the multi-scattered waves by the Coda wave interferometry (CWI). Snieder (Snieder 2002), (Snieder 2006) developed the theoretical background of the CWI, in a strongly scattering medium. Whereas the idea to use the sensitivity of the coda wave is not new and variously used before in a more or less empirical sense for seismology applications, see (Poupinet, Ellsworth & Frechet 1984). During the last decade, the CWI was several times used in material science and illustrated the extreme sensitivity of multiple scattered (Cowan, Jones & Weitz 2002), (Grèt, Snieder & Scales 2006) to small perturbations. In this sense the method was used to analyze the change of rock properties (Grèt 2004), (Grèt et al. 2006) under different influences. The use of CWI in geotechnical related tasks is still open, but the method can be a useful tool in monitoring states or parameter. The current paper deals with the application of the CWI to monitor the change of stress and void ratio during isotropic pressure change. As the results show, the method is gives an excellent impression and a more sensitive view on the evolution of stress changes during experiments. Additionally, the results of the glass beads measurement fit in a good manner with the calculated velocity gradient of Hertzian Contact models.

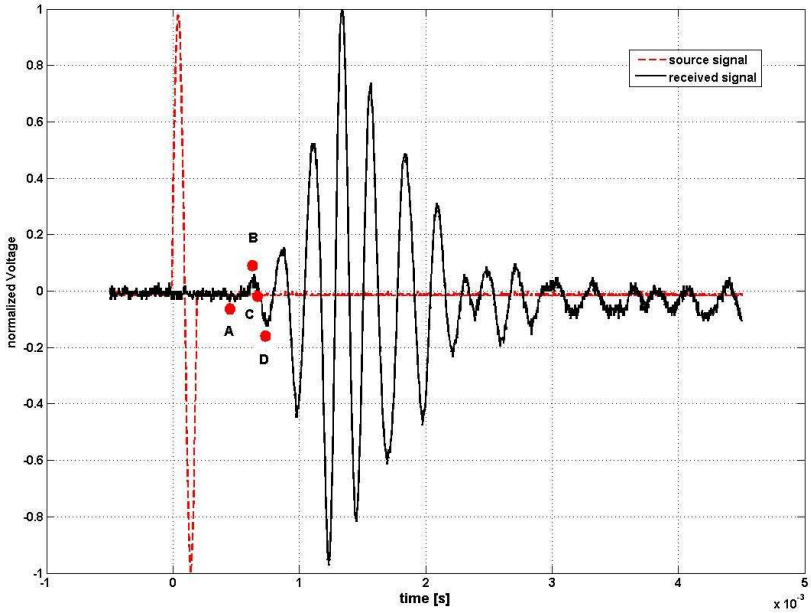

Fig. 1. Selection points for TOF analysis and the challenge in interpretation

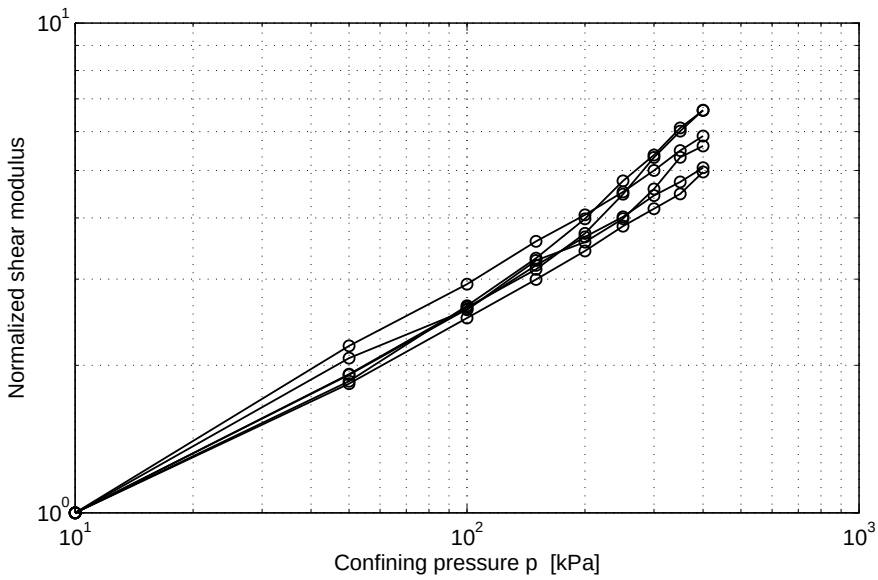

Fig. 2. Increase of normalized shear modulus G_{max} with confining pressure p for all dry natural samples.

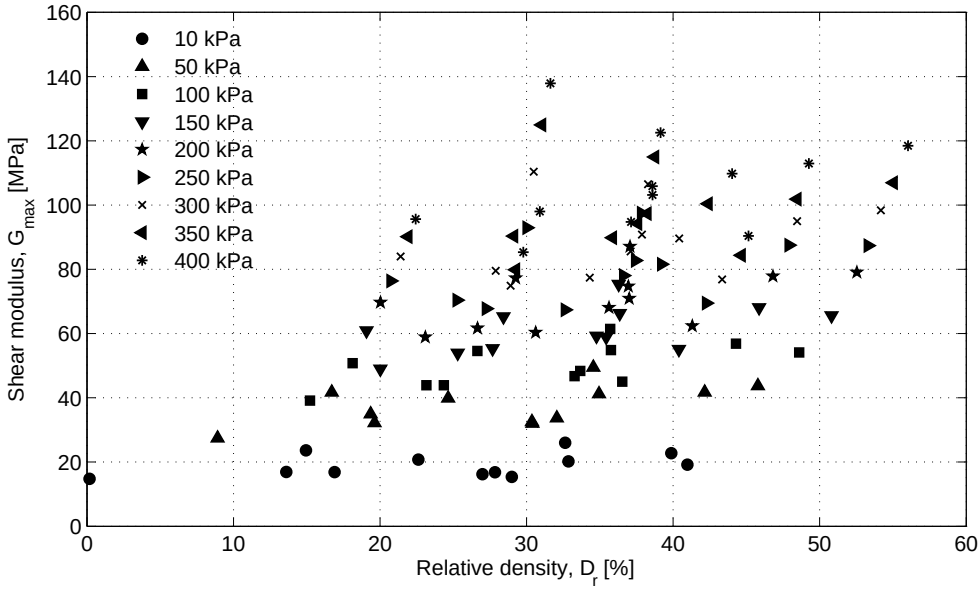

Fig. 3. Shear modulus G_{max} versus relative density Dr for each confining pressure step.

2 Wave based parameter identification in Geotechnics

Many measurements concerning the detection of the time-of-flight (TOF) were done in the past. Most of them tried to find the right point of the incoming wave train, whereas all analyses were related to first coherent part of the wave train and the determination of the effective modules in the material. The objective of research was mostly the investigation of different impulse functions, different impulse shapes, lengths, frequency content and others. Greening and Nash (2004) used a spectrum analyzer to investigate sweep signals for further phase velocity calculations based on the phase difference method (PD method). The results show differences between the TOF velocity and the phase velocity. In general the phase velocity as a consistent velocity linked with the wave length seems more suitable to explain the complex wave behavior in granular materials than the sharp wave front (TOF) of the ballistic wave. Additionally, the phase velocity beside the group velocity is connected to the energy transport in a wave package. Due to this feature, the group and phase velocity are more sensitive to characterize a dispersive material. Between the phase v_{ph} and group velocity, v_{gr}, with f, k $\in$ exist the following relations, Eq. (1)

$$v_{ph} = \frac{\omega}{k} = \lambda \cdot f \quad \text{and}$$

$$v_{gr} = \frac{\partial \omega}{\partial k} = v_{ph} + k \cdot \frac{\partial v_{ph}}{\partial k} \qquad (1)$$

where λ is wavelength, f frequency, ω angular frequency and k the wave number. The phase velocity v_{ph} used in (Greening & Nash 2004) can be calculated by using following relations, Eq. (6). In Eq. (4) and Eq. (5) the terms describe the unwrapped phase function $\varphi_{ij}(f)$, the cross-correlated function r_{ij} in time domain, Eq. (2)

$$(f \otimes g)(\tau) := \int_{-\infty}^{\infty} f^*(t) g(\tau + t) dt \qquad (2)$$

between the transmitted and received signals f and g, respectively as well as L the distance between transmitter and receiver. By applying the Fourier transform rules to Cross-Correlation, the following relation is given

$$\mathrm{F}(f \otimes g) = (\mathrm{F}\{f\})^* \cdot (\mathrm{F}\{g\}) \quad (3)$$

where the phase to a given frequency f_i of the cross-correlated function is defined as

$$\varphi_{ij}(f) = \tan^{-1} \frac{\Im\left(r_{ij}(f_i)\right)}{\Re\left(r_{ij}(f_i)\right)} \quad (4)$$

and the velocity of a given frequency f_i is determined by

$$v_{ph}(f_i) = L \frac{2\pi f_i}{\varphi(f_i)} \quad (5)$$

To calculate the group velocity of a given frequency f_i and phase v_{ph}, the following equation can be used (Greening & Nash, 2003)

$$v_{gr}(f_i) = 2\pi L \frac{df}{d\varphi(f_i)} \quad (6)$$

Another way to determine the group velocity of propagation waves during laboratory measurements is the application of time-frequency and time-scale methods (Arroyo 2007) and (Wuttke, Markwardt & Schanz 2010). For that objective, a sweep-signal excitation can be used to overcome the problems in the phase difference and TOF methods and to determine wave velocities as well as the dispersion characteristics. The time scaled signal transform methods like continuous wavelet transform (Santamarina and Fratta 2005), (Gucunski & Shokouhi 2004), (Mallat 1998) were successfully applied also to further tasks. The continuous wavelet transform is defined for s > 0, $\tau \in$ and the chosen wavelet function ψ to Eq. (7)

$$W(s,\tau) = \frac{1}{\sqrt{s}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \psi^* \left(\frac{t-\tau}{s} \right) dt \quad (7)$$

where s is the scaling, τ the shifting parameter and ψ^* is noted the conjugate complex of the function ψ. Beside this signal transform methods, in material science, the time-frequency signal transform methods or time-frequency distributions are often used to analyse the wave fields and dispersion characteristics. The application of the time-frequency and time-scaled methods are described in detail in (Wuttke et al. 2010).

3 Process motoring in Geotechnics

3.1 Basics of Coda Wave Interferometry

As explained before, the complete wave train consists of an initial coherent part followed by a noisy tail, the coda. The coda itself is compounded by different scattering effects, where the waves are interfered from different wave paths along the grain contacts (Snieder2002) and (Snieder2006). Due to this behavior, the small material changes accumulate in this superimposed diffuse wave field, consequently, the coda is extremely sensitive to any packing details. The base of the coda wave interferometry (CWI) is the determination of the velocity gradients between two stages of the system, before and after a small perturbation, as e.g. stress or density change, change of suction or water content. By use of the gradient function in combination with an absolute velocity as a start value, see Eq. (14), the approach is able to give exact and sensitive information about the absolute velocity changes. Whereas these information are directly aligned with the whole range of stress and porosity change. The theoretical background of the scattered waves is the Feynman path summation

(Lomax 1999) and (Snieder 2006) which describes stochastic arbitrary wave paths through a granular media and the genesis of a wave train as superimposed different wave fields. The analysis of this part is achieved by using the normalized windowed cross correlation (NWCC) in Eq. (8)

$$R^{t,T}(t_s) := \frac{\int_{t-T}^{t+T} u_{unp}(t')\, u_{per}(t'+t_s)\, dt'}{\left[\int_{t-T}^{t+T} u_{unp}^2(t')dt' \int_{t-T}^{t+T} u_{per}^2(t')\, dt'\right]^{\frac{1}{2}}} \qquad (8)$$

in which u_{unp} represents the wave field in the unperturbed und u_{per} in the perturbed system, T the window length and t_s the time markers. The detected time delay in the shifted and cross correlated windows shows a more or less linear gradient with the total time t. In more current publication a so-called stretched Coda wave interferometry is used (Sens-Schönfelder & Larose 2008)

$$R^{t}(\varepsilon) := \frac{\int_{t_1}^{t_2} u_{unp}(t) u_{per}\left(t(1-\varepsilon)\right) dt}{\left[\int_{t_2}^{t_2} u_{unp}^2(t)dt \int_{t_1}^{t_2} u_{per}^2\left(t(1-\varepsilon)\right)dt\right]^{\frac{1}{2}}} \qquad (9)$$

were $\boldsymbol{\varepsilon}$ is the gradient of the velocity $\boldsymbol{\varepsilon} = dv/v$, see (Hadziioannou, Larose, Coutant, Roux & Campillo 2009). The application of $\boldsymbol{\varepsilon}$ corresponds with the stretching of the time axis, whereas the value of $\boldsymbol{\varepsilon}$ is to be determined by application of a grid search or optimization strategies to find the maximum in the cross-correlation coefficient. The stretching itself assumes a linear time shift over the time axis, which might be not always the case.

Under use of frequency transformed signals the coda wave analysis can be performed in the frequency domain too. Regarding two signals A and B with a linear increase in time lag can be regarded as the same signal but sampled with two different sampling intervals: signal A using Δt and signal B with $(1 \pm \theta)\ \Delta t$. In other words, their amplitudes are identical when the discrete time $t_A = i \cdot \Delta t$ equals $t_B = i \cdot [(1 \pm \theta)\Delta t]$. Therefore, the spectral magnitude for signal A at frequency $\omega_A = 2\pi\ u\ /\ (N \cdot \Delta t)$ equals that for signal B at $\omega_B = 2\pi\ u\ /\ [N \cdot (1 \pm \theta)\ \Delta t]$. Then the stretching coefficient can be determined in the frequency domain, see (Dai, Wuttke & Santamarina 2012). All type of coda wave analysis give a comparable gradient.

For the originally work the windowed cross-correlation, the different steps should be visualized in fig. 4. The gray dots in fig.4a denote the used time windows for the analysis. The normalized cross-correlation is applied to each window in fig. 4a consequently; with increasing time an increasing time delay in the respective cross-correlation function is to be registered. In fig. 4b the initial coherent part is shown, where the stack of superimposed waves is still small and following no time lag is between the unperturbed and perturbed time history visible.

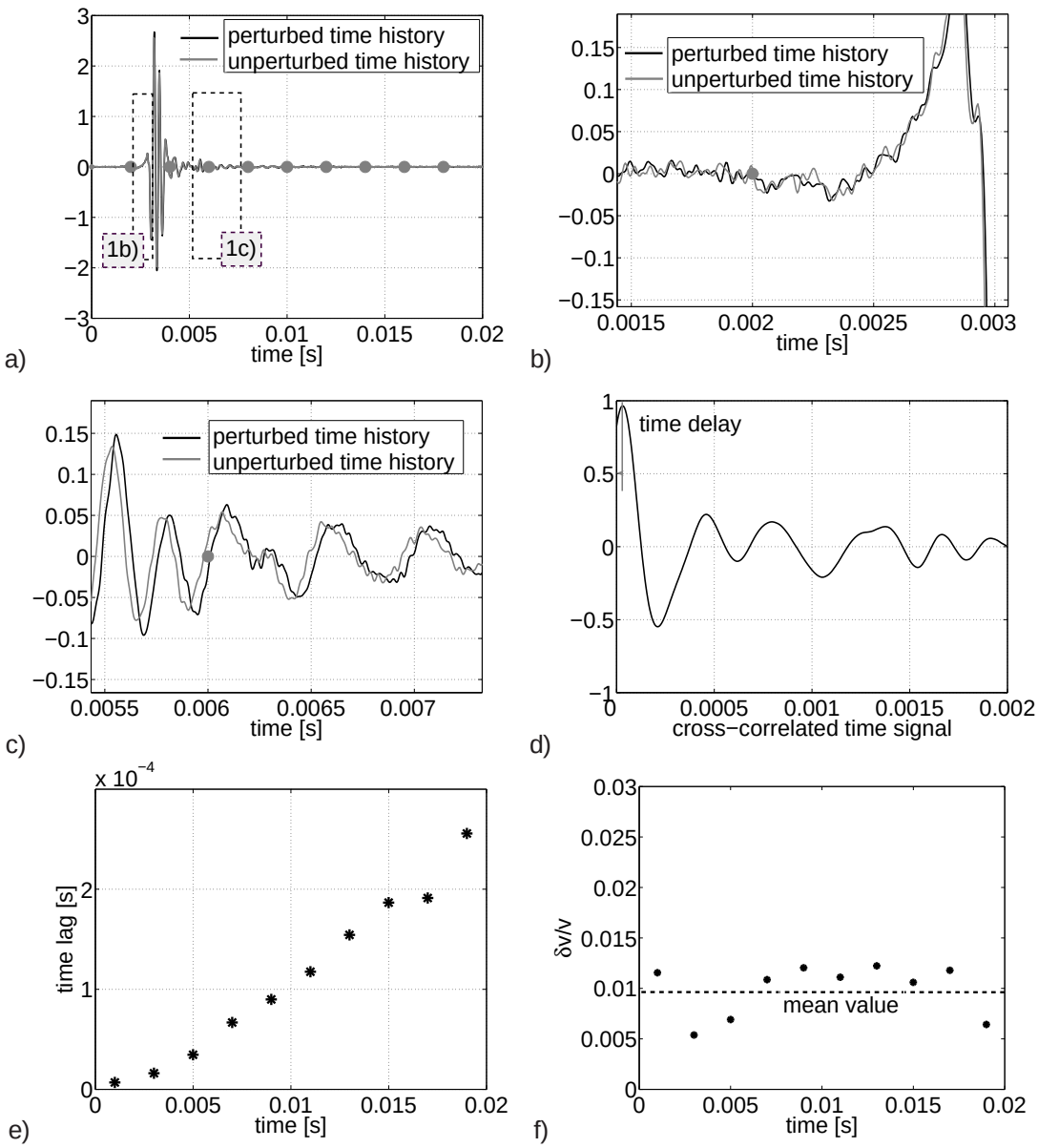

Fig.4: Scheme of velocity gradient determination: a) complete time history in the unperturbed and perturbed material with the selected window distances, b) zoom of the coherent wave field within a window, c) zoom of the scattered wave field within a window, d) Normalized windowed cross correlation of one window, e) time lag of the windows over time history, f) mean value of the velocity gradient between the unperturbed and perturbed wave field.

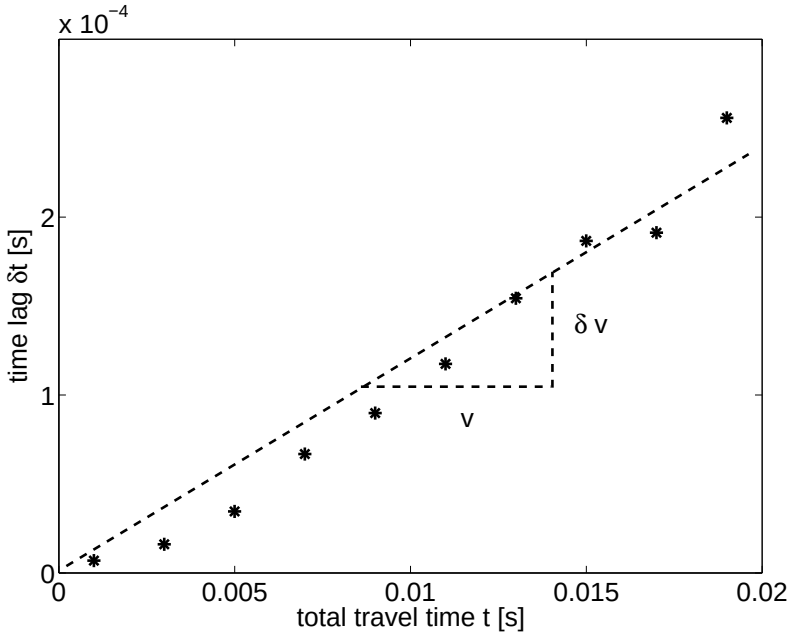

Fig.5: Definition of velocity gradient by the ratio dv/v between the total time t and the time lag δt of the shifted windows in the coda wave interferometry.

In opposite to fig. 4b the fig.4c shows a window from the coda, where the time lag between the unperturbed and perturbed time history is obvious. With application of the cross-correlation to these two time histories the time lag is found in fig. 4d. With application of the cross-correlation to each window the time lags δt yield a linear function, see fig. 4e. The representative time lag or peak point of the cross-correlated function is shifted along the time axis for each increasing time window too.
With determination of $\delta t/\Delta t$ the respective gradient for each window is found, where Δt means the medium time value of each window. By taking the mean value of the determined gradients the mean gradient as well as the variance of the gradient is found, see fig. 4f. The normalized cross-correlation (NCC) provides the statistical variance of each velocity gradient through the value of spectral magnitude. In fig. 5 the definition of the velocity gradient $\delta v/\Delta v$ itself is given inside of the time lag-travel time plot.
To use the CWI in order to monitor the change in stress or void ratio, the velocity gradient is to be determined for each small step of pressure or void ratio change. An automatic series of pulses during the slow measurement is to be applied. The present study analyzes a stacked time history every 5 kPa as base for the signal procedures. If the signal-to-noise-ratio was showing an insufficient value, the data was band-pass filtered.

4 Experimental Setup, Analysis and Results

Experimental Setup

Laboratory equipment in this study was controlled by LabView. To generate and record the seismic signals during laboratory tests, a function generator was implemented. The signal shapes cover harmonic, impulse and sweep signals, simultaneously and the change of polarization is possible for each signal. Additionally, a data logger with a maximal sampling rate of 1 MHz was used. The bender elements were excited by a voltage range of ±10 V. For the test a parallel type of bending elements was used to avoid the electrical cross-talk phenomenon. To amplify the low voltage of the received signal, the data logger was prefixed by a charge amplifier. The relevant frequency ranges for measurements are given according

to the specimen size and grain size. The laboratory specimens were prepared in a triaxial cell with a height of 0.2 m and a diameter of 0.1 m, whereas the distance between the bender elements is L = 0.184 m. The cells consist of a plastic top and steel bottom plate, where porous plates and piezo-elements are implemented. The cell itself was a calibrated cell to control and measure the volume change during the applied pressure steps under constant environment temperatures. For the analyzed frequency range, a band between 3 kHz to 30 kHz was used. To prove the applicability of the method for the given objective - the time lapse monitoring of fabric changes, different tests at sands, sand-kaolin mixtures and glass beads were done, see fig. 6.

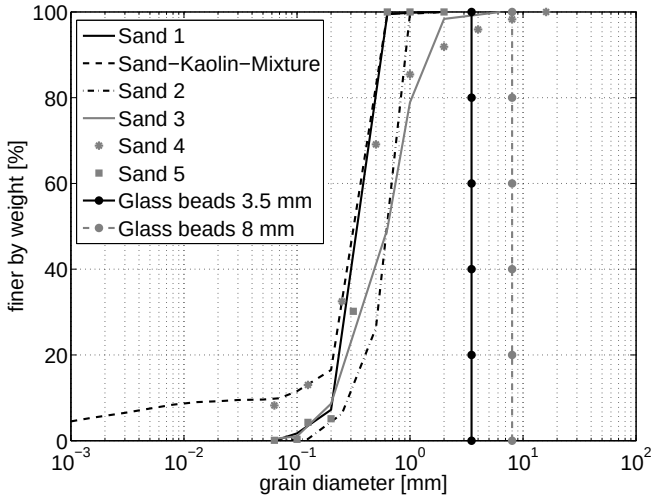

Fig. 6: Grain size distribution of tested materials.

To study the fabric change during laboratory tests, the confining pressure was increased in steps of 5 kPa from 10 kPa up to 400 kPa to monitor the small change in stress and porosity. All tests were done under dry and saturated conditions, the relevant results to monitor the fabric change are shown in this paper. To analyse the saturated soil samples, the saturation was done at the beginning of the test procedure. The test was performed under drained conditions to avoid pore water pressures during the increase of the cell pressures. During the whole tests the sample was either dry or fully saturated. There was no change in saturation level.

Experimental Analysis

In the following sections, eight different materials are analyzed in detail – five different Sands; one Sand-Kaolin Mixture and two mono-disperse glass beads of diameter 3.5 and 8 mm. To compare the determined velocities, based on the determination of the time-of-flight (TOF), phase velocity and the velocity gradients, a comparison of all results are given. For improvement of TOF picking, the transmitter signal was used twice in normal deviation and inverse polarized deviation. This second part, the coda, was subject of CWI to determine the velocity gradients. Related to this objective, fig. 7 shows examples of the velocity gradients evolution with pressure steps. It's visible that the change is primarily a function of the change in contact pressure between the grains. By use of the scattered wave field analysis, a smooth and detailed information about the velocity changes with increasing pressure results. Under consideration of the well-known problems in the identification of the first arrival in TOF methods, the application of the CWI is more reliable, because the cross-correlated function gives one peak in the cross-correlated function - the time delay between both time histories in the given window.

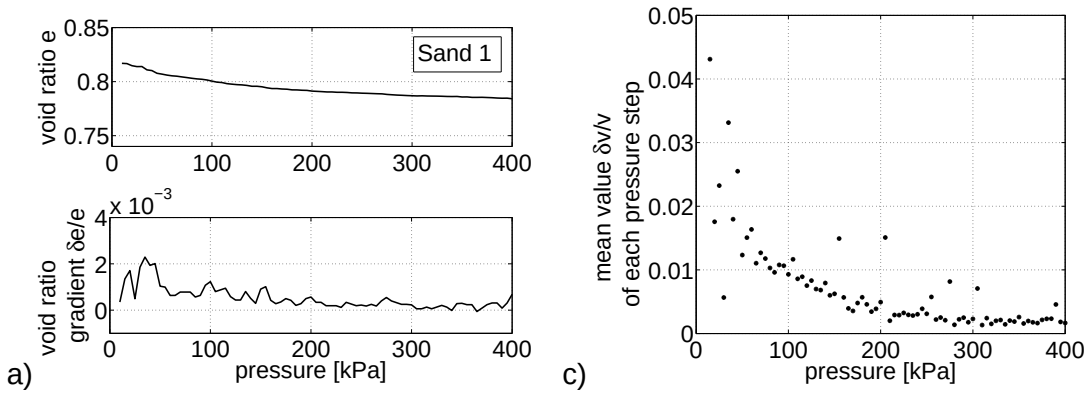

Fig. 7 a, b) Evolution of void ratio change and b) Evolution of velocity gradient for Sand

In figs. 7 it is visible that void ratio curves have a decimal power less amplitude evolution and has a much more rough function, which suggests that the evolution of velocity gradients is influenced by the contact stresses of the grains. To study that influence of the contact stresses between the grains, several mono-disperse glass beads specimen were analyzed by the CWI. The change in the void ratio by using mono-disperse glass beads equals zero. Hence, the influence of the contact stresses could analyzed.

Evolution of the wave gradients by contact stresses

To substantiate the interpretation of the experimental velocity gradient evolution, a comparison with synthetic generated results based on a Hertzian contact models is analyzed. Accordingly, the argumentation of (Bachrach, Dvorkin & Nur 2000) and (Brandt 1955) for the definition of a modified Hertz-Mindlin Theory, the interparticle normal skeletal average force for an isotropic random assembly of mono disperse spherical particles, $\langle N \rangle$, is defined as,

$$\langle N \rangle = \frac{4\pi R_g^2 \sigma_0}{cn(1-n)} \qquad (10)$$

where Rg is defined as in fig. 8, σ0 is the isotropic confining pressure, n is the porosity and cn is the coordination number, which describes the average number of contacts per grain, (Marion 1990) and (Santamarina, Klein & Fam 2001). The average force $\langle N \rangle$ applying on each contact point contains the assumptions that the contacts are distributed with a uniform probability of the sphere surface, the contacts deform identically and forces are conforming to normal forces. After (Saadatfar, Kabla, Senden & Aste 2005), the coordination number can differ between 6.9 and 8.2. Based on the accomplishments of (Bachrach et al. 2000), the Hertz-Mindlin model contains two contact models for the normal S_n and shear S_t stiffness,

$$S_n = \frac{4 r_c \mu}{1-\nu} \text{ and } S_t = \frac{8 r_c \mu}{2-\nu} \qquad (11)$$

$$r_c = \sqrt[3]{\frac{3NR_c(1-\nu)}{8\mu}} \text{ with } R_c^{-1} = 0.5\left(R_1^{-1} + R_2^{-1}\right) \qquad (12)$$

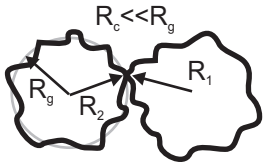

Fig.8: Contact definitions between two angular grains, after Bachrach (2000).

where μ and v are the grain shear stiffness and the Poisson's ratio, respectively. The radii R_1 and R_2 arelocal radii of two grains see fig. 8. The shear wave velocity c_S can finally defined to Eq.(13),

$$c_s = \sqrt{\frac{1}{\rho_b} \cdot \frac{cn(1-n)}{20\pi R_g}(S_n + 1.5S_t)} \qquad (13)$$

where ρ_b is the bulk density. Following material parameter for glass beads were used for the synthetic calculation of the shear wave velocities: E_g = 104 GPa, G_g = 31 GPa, ρ_g = 0.21, ρ_g = 2.5t /m, $R_g = R_c$ = 3.5/8 mm, n = 0.41, ρ_{skel} = 1.485 t/m³ , c_n = 6. The results of the synthetic calculation are shown in fig. 9. In fig. 9 the comparison between the synthetic calculation and the measured data are shown. It is obvious that the measured and synthetic data fit quite excellent. From the measured velocity gradient of the glass beads of 3.5 mm, the velocities were determined by using the initial value of the synthetic velocities and calculating the further velocities by increasing pressure with use of Eq. (14):

$$c_{s,abs,i+1} = c_{s,abs,i} + c_{s,abs,i} \cdot \chi_i \text{, where } \chi_i := \left\{ \frac{\delta c_s}{c_s} \right\}_i \qquad (14)$$

By applying Eq. (14), the absolute shear wave velocities in fig. 9(b) for the synthetic data and the calculated values from CWI should be similar because the gradients of both data are close. This point confirms the assumption that the changes in velocity of the skeleton of glass beads under increasing pressure only affects the inter-particular stress without change in volume. This behavior underlies the fact that the CWI monitors the velocity changes in a realistic manner. By applying this knowledge and assuming of the Hertz-Mindlin-Theory to the measurements of the experimental tests with visible influence of the void ratio, it should be possible to separate the influence of the confining pressure and the volume change during the tests with sand material. Whereas in opposite to the analyzed glass beads the velocity change accumulated in natural sands is associated with both the stress and porosity change. In terms of micro-mechanical description, that means, beside the pressure change there is a change in the number of contacts and radii between the grains.

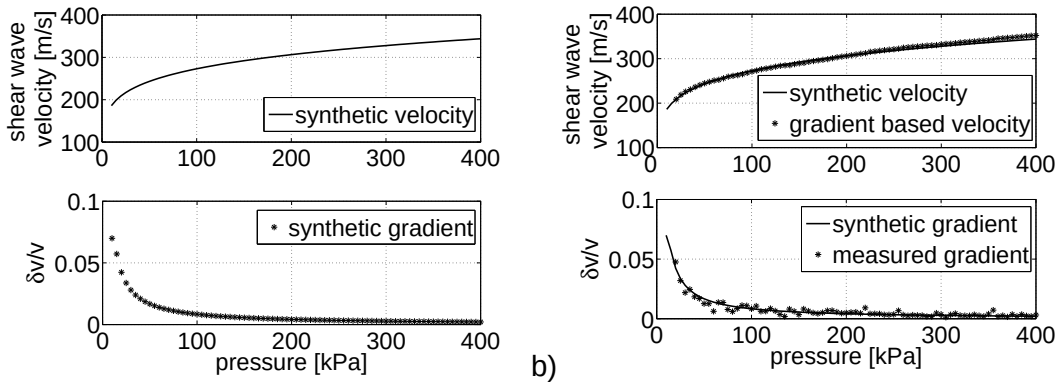

Fig. 9: a) Synthetic Wave velocity and velocity gradient for glass beads 3.5 mm after Hertz-Mindlin Theory, b) Comparison between measured and calculated wave velocity and velocity gradient.

Pressure evolution

To substantiate the interpretation of the experimental velocity gradient evolution, a comparison with synthetic generated results based on Hertzian contact models is analyzed. Accordingly to the Hertzian Theory, the velocity can be described by follow formula $v = \alpha\, \sigma^{\beta}$ were α is a constant and β an exponent. For P-wave velocities the exponent is given to 1/6 for elastic spherical grains and to ¼ for angular grains. Both parameter α and β are in general experimental determined. Under consideration of the gradient definition $\delta v/\Delta v$, the gradient based on Hertzian contact model is derived to

$$\frac{\delta v}{v} = \beta \frac{\delta \sigma}{\sigma}$$

To determine the stress from the measured velocity gradients the given formula is only to transpose after σ to follow equation:

$$\sigma = \frac{\delta \sigma}{\beta \frac{\delta v}{v}}$$

The given measurement are analysed after the above statements and formulas. For each loading situation – loading, creep and unloading, the first step is the determination of velocity gradients $\delta v/\Delta v$ to each couple of load/stress differences under use of coda wave interferometry, see fig. 10.

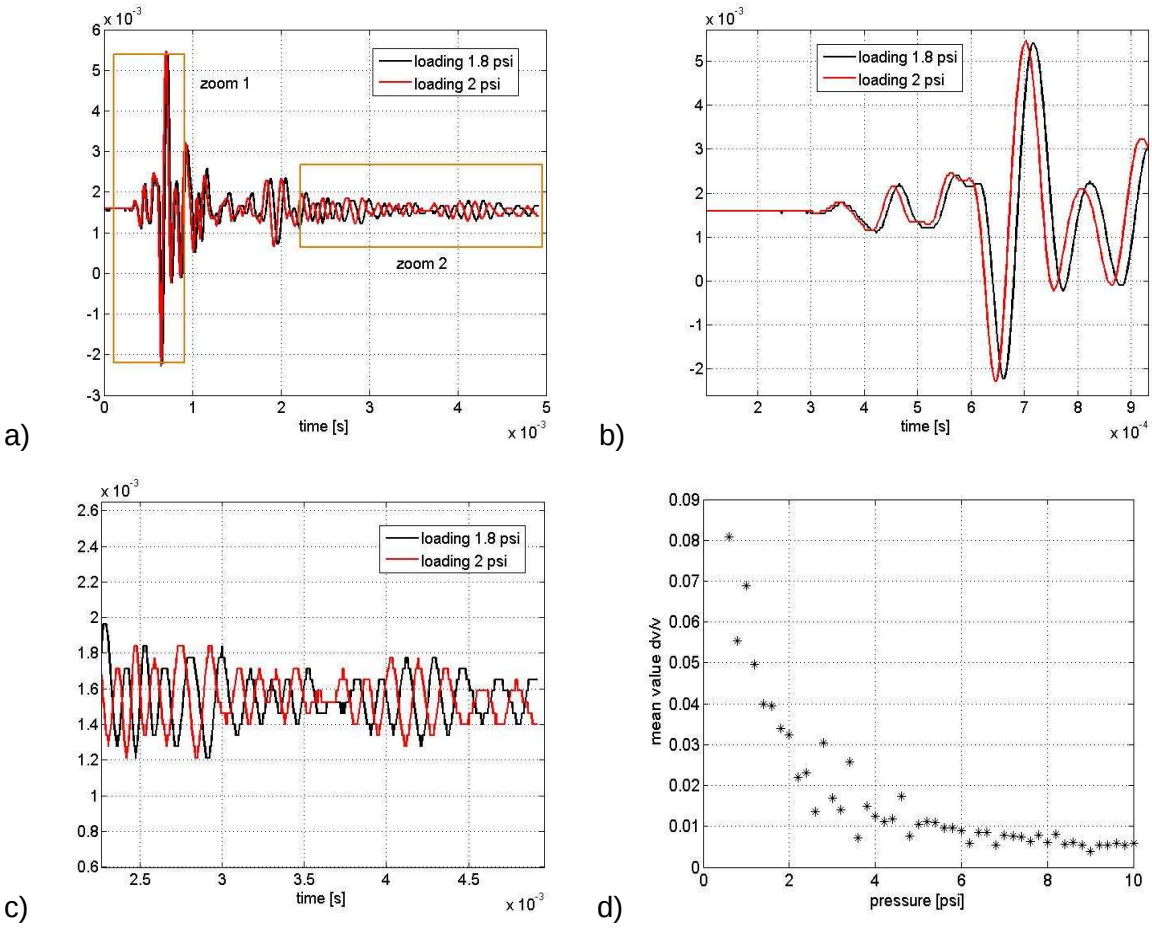

Fig. 10: Time histories to different pressures during the loading phase a) complete time history, b) zoom 1, c) zoom 2 and d) the velocity gradient evolution during loading phase

The comparison between the measurement and the results the synthetically calculated velocity gradient based on the Hertzian Theory is shown in fig. 11. It is visible that the use of parameter β for angular grains shows much better agreement.

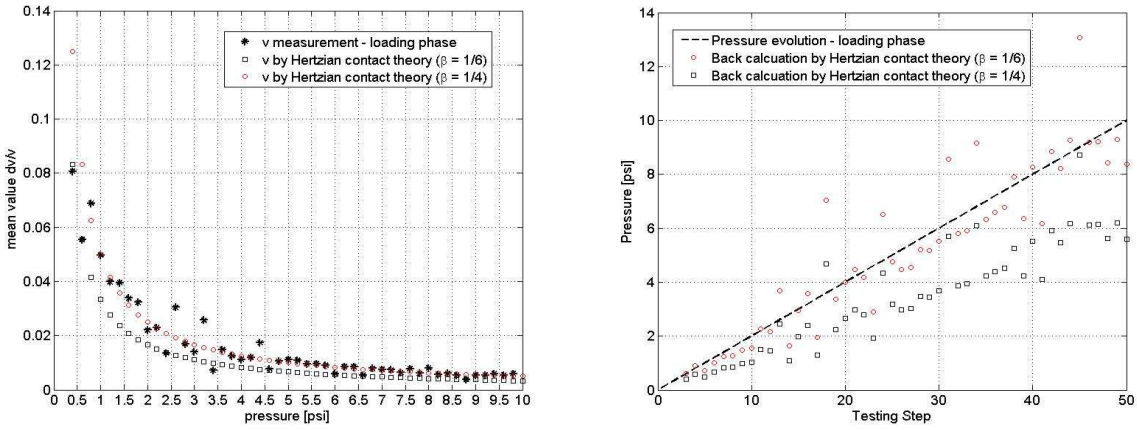

Fig. 11: a) The comparison of the velocity gradient evolution between measurement and calculation under use of exponents β = 1/6 for elastic spherical grains and β = ¼ for angular grains (loading phase) b) Back calculation of stress distribution under use of the measured velocity gradient evolution and exponents β = 1/6 for elastic spherical grains and β = ¼ for angular grains (loading phase)

The back calculation of the stress distribution during the experiment shows also a better agreement between the applied loads and the back calculation under use of β = ¼ in the Hertzian contact theory, see fig. 11.

Influence of Suction to shear wave velocity change

Fig. 12 shows the soil-water characteristic curve (SWCC) of sand and the increment of shear wave velocity with matric suction, i.e. velocity gradient. The shear wave velocity is normalised to its initial value $v_{s,i}$. It is interesting to note that in fig. 12 both curves, SWCC and velocity gradient, have similar distinguished features. One can notice that at the air-entry value the velocity starts to rise for both specimens. As the degree of saturation rapidly decreases, the velocity has its highest increment. For example, between 2 and 4 kPa where saturation drops from 92 % to 15 %, shear wave velocity increases 4-6 %, i.e. shear modulus increases 8-12 %. This increase is for pure sand specimen, while for mixtures containing some percentage of fine content, the difference would be much larger. After this phase, saturation level and shear wave velocity are relatively stable. This demonstrates the importance of matric suction in determining shear wave velocity and shear modulus in soil. It can be also concluded that shear wave velocity increases with matric suction until residual water content and it does not have a peak point at optimum water content. The optimum water content for the sand is 10 % that corresponds to about 40 % saturation level. It is evident in fig. 12 that shear wave velocity increases further while saturation level decreases during the test. This agrees well with many researches from the literature (e.g. Alramahi et al. 2008, Hoyos et al. 2008, Picornell & Nazarian 1998).

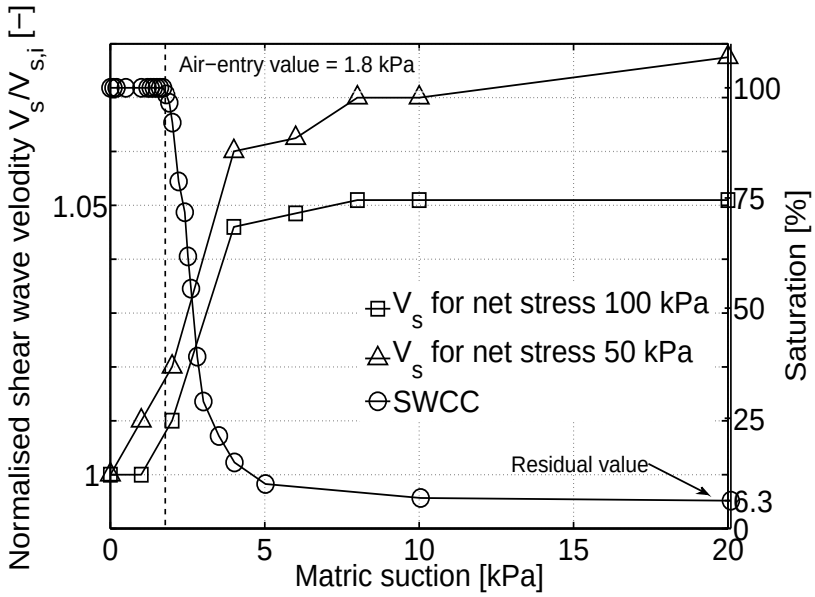

Fig. 12. Velocity gradient versus matric suction and SWCC of sand at two net stress values.

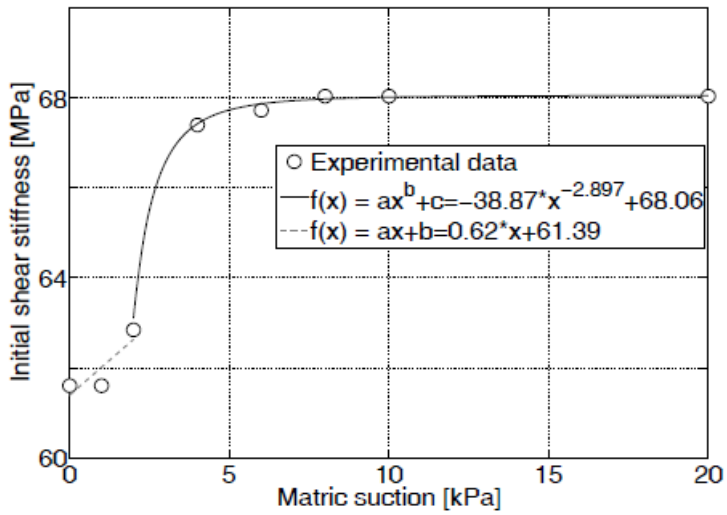

Fig. 13. Fitting models for initial shear stiffness with matric suction for net stress 100 kPa.

The experimental relation between shear wave velocity or respectively the small-strain shear modulus and the matric suction for net stress of 100 kPa is shown in fig. 14. As explained above, the most rapid increase of shear modulus/shear velocity occurs in the range between 2 and 4 kPa, i.e. shortly after the air-entry value. The experimental data could be fitted with two fitting models, one for low suction values before the air-entry value and the other one fits the data for values higher than the air-entry value.

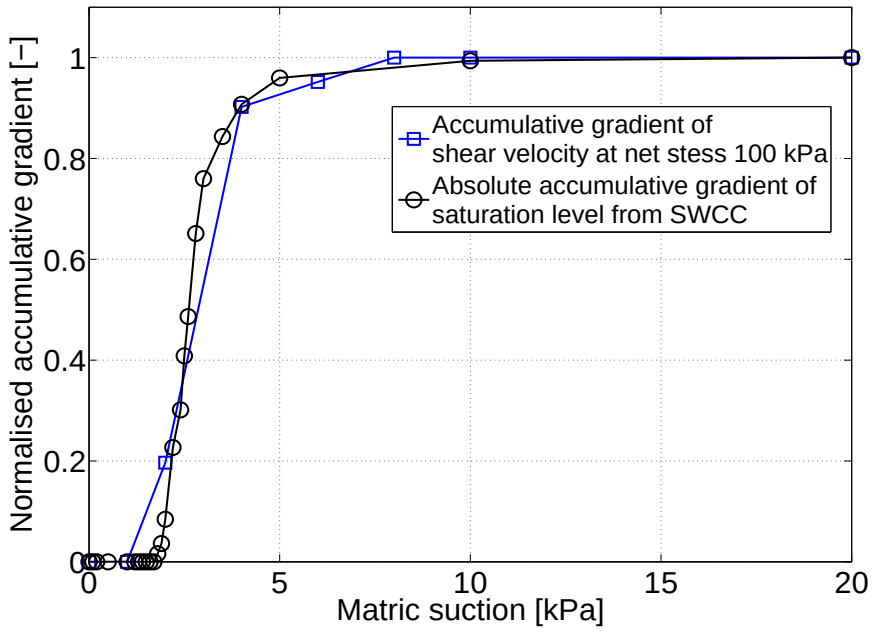

Fig. 14. Normalised accumulative gradient of shear velocity at 50 and 100 kPa net stress and normalised accumulative absolute change of saturation.

References

Alramahi B, Alshibli K A, Fratta D, Trautwein S (2008) A suction control apparatus for the measurement of p and s-wave velocity in soils. Geotechnical Testing Journal, 31(1): 12–23.

Arroyo, M. (2007), "Wavelet based analysis of pulse tests in soil samples", Rivista italiana di geotecnica. pp. 25–38.

Arroyo, M., Medina, L. and Muir Wood, D.(2002), "Scale effects in bender-based pulse tests", in P. . Pietrusckzak, ed., Numerical methods in Geomechnics, NUMOG VIII, Balkema, pp. 589–595.

Asslan M, Wuttke F (2010) An experimental study on the initial shear stiffness in granular dry and saturated material using bender elements test. Proceedings of 14th European Conference of Earthquake Engineering.

Arulnathan, R. and Boulanger, R. (1998), "Analysis of bender elements", Geotechnical Testing Journal, Vol. 21, No. 2, pp. 120–131.

Bachrach, R.,Dvorkin, J. and Nur, A. (2000), "Seismic velocities and poisson's ratio of shallow unconsolidated sands", Geophysics, Vol. 65, No. 2, pp. 559–564.

Blewett, J., Blewett, I. and P.K., W.(2000), "Phase and amplitude response associated with the measurement of shear-wave velocity in sand by bender elements", Canadian Geotechnical Journal, Vol. 37, pp. 1348–1357.

Brandt, H.(1955), "A study of the speed of sound in porous granular media", Journal of Applied Mechanics, Vol. 22, pp. 479–485.

Cho G, Santamarina J (2001) Unsaturated particulate materials—particle-level studies. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, ASCE, 127(1): 84–96.

Cowan, M., Jones, I. and Weitz, D. (2002), "Diffusing acoustic wave spectroscopy", Physical Review E, Vol. 65, 066605–1/11.

Dai, S., Wuttke, F., Santamarina, J.C., (2012) Coda wave analysis to monitor processes in soils, Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering (submitted in 2012)

Greening, P. and Nash, D. (2004), "Frequency domain determination of Gmax using bender elements", Geotechnical Testing Journal, Vol. 27, No. 3, pp. 288–294.

Grèt, A. A. (2004), Time-lapse monitoring with Coda Wave Interferometry, PhD thesis, Center of Wave Phenomena, Colorado School of Mines.

Grèt,A., Snieder,R. and Scales,J. (2006), "Time-lapse monitoring of rock properties with coda wave interferometry", Journal of Geophysical Research 111, B03305.

Gucunski, N. and Shokouhi, P.(2004), "Detection and characterization of cavities under the airfieldpavementsby wavelet analysis of surface waves", in FAA Worldwide Airport Technology Transfer Conference, New Jersey, USA.

Hadziioannou, C.,Larose, E.,Coutant, O., Roux, P. and Campillo, M.(2009), "Stability of monitoring weak changes in multiply scattering media with ambient noise correlation: Laboratory experiments", Journal of Acoustical Society of America, Vol. 125, No. 6, pp. 3688–3695.

Hoyos L R, Takkabutr P, Puppala A, Hosain M (2008) Dynamic Response of Unsaturated Soils Using Resonant Column and Bender Elements Testing Techniques. Proceedings of Geotechnical Earthquake Engineering and Soil Dynamics IV, 485–492.

Ismail, M. and Rammah, K.(2005), "Shear-plate transducers as a possible alternative to bender elements for measuring Gmax", Géotechnique, Vol. 55, No. 5, PP. 403–407.

Jovicic, V., Coop, M. and Simic, M.(1996), "Objective criteria for determining Gmaxfrom bender element tests", Géotechnique, Vol. 46, No. 2, PP. 357–362.

Lins Y, Schanz T, Fredlund D G (2009) Modified Pressure Plate Apparatus and Column Testing Device for Measuring SWCC of Sand. ASTM Geotechnical Testing Journal, 32(5): 1-15.

Lee, J.-S. and Santamarina, J. (2004), "Bender elements: Performance and signal interpretation", Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, Vol. 131, No. 9, PP. 1063–1070.

Lomax, A.(1999), "Path-summation wave forms", Geophysical Journal International, Vol. 138, PP. 702–716.

Mallat, S.(1998), A Wavelet Tour of Signal Processing, Academic Press.

Mancuso C, Vassallo R, D'Onofrio A (2002) Small strain behavior of a silty sand in controlled-suction resonant column–torsional shear tests. Canadian Geotechnical Journal, 39(1): 22–31.

Marion, D. (1990), Acoustical, Mechanical and Transport Properties of Sediments and Granular Materials, PhD thesis, Stanford University.

Nazarian, S., Yuan, D. and Baker, M. R.(1994), "Automation of spectral analysis of surface wave method", in Ebelhar, Drevinch and Kutter, eds, Dynamic Geotechnical Testing II, pp. 88–100.

Poupinet, G., Ellsworth, W. and Frechet, J. (1984), "Monitoring velocity variations in the crust using earthquake doublets: An application to the calaveras fault, California", Journal of Geophysical Research 89(B7), pp. 5719–5731.

Sawangsuriya A, Edil T B, Bosscher P J (2009) Modulus-Suction-Moisture Relationship for Compacted Soils in Postcompaction State. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, 135(10): 1390–1403.

Senthilmurugan T, Ilamparuthi K (2005) Study of compaction characteristics and strength through ultrasonic methods. Proceeding of Geo-Frontiers Conference, Austin, ASCE, Geotechnical special publication no. 130: 1–12.

Saadatfar, M., Kabla, A., Senden, T. and Aste, T. (2005), The Geometry and the Number of Mono disperse Sphere Packs Using X-Ray Tomography, Vol. 1, A. A. Balkema, pp. 33–36.

Santamarina, J. and Fratta, D. (2005), Discrete Signals and Inverse Problems, John Wiley and Sons.

Santamarina, J., Klein, K. and Fam, M. A. (2001), Soils and Waves, Wiley.

Sens-Schönfelder, C. and Larose, E. (2008), "Temporal changes in the lunar soil from correlation of diffuse vibrations", Physical Review E 78, 045601(R).

Snieder, R. (2002), "Coda wave interferometry and equilibrium of energy in elastic media", Physical Review, Vol. 66, No. 4, PP. 1–8.

Snieder, R. (2006), "The theory of coda wave interferometry", Pure and Applied Geophysics, Vol. 163, PP. 455–473.

Somfai, E., Roux, J., Snoeijer, J., VanHecke, M. and Van Saarloos, W.(2005), "Elastic wave propagation in confined granular systems", Physical Review E, Vol. 72, pp. 1539– 3755.

Wuttke, F., M. Asslan, and T. Schanz (2012). Time-lapse monitoring of fabric changes in granular materials by Coda Wave Interferometry. Geotechnical Testing Journal, 35(2), doi 10.1520/GTJ103546.

Wuttke F, Asslan M, Schanz M (2010) Wave velocity analysis of state parameter changes in multi-phase granular materials. Proceedings of 5th International Conference of Unsaturated Soils, UNSAT, Barcelona, 745-750.

Wuttke, F., Markwardt, K. and Schanz, T. (2010), "Dispersion analysis: Time-frequency and Time-scale transform methods", (submitted to Geotechnical Testing Journal 2010)

Youn, J.-U., Choo, Y.-W. and Kim, D.-S. (2008), "Measurement of small-strains hear modulus Gmax of dry and saturated sands by bender element, resonant column and torsional shear tests", Canadian Geotechnical Journal, Vol. 45, pp. 1426–1438.

Yesiller N, Inci G, Miller C J (2000) Ultrasonic testing for compacted clayey soils. Proceedings ofAdvances in Unsaturated Geotechnics, Denver, ASCE, Geotechnical special publication, no. 99: 54–68.

Yuan, D. and Nazarian, S. (1993), "Automated surface wave method: Inversion technique", Journal of Geotechnical Engineering, Vol. 119, No. 7, PP. 1112–1126.

Nuklear-Magnetische-Resonanz (NMR) - ein Tool der Gesteinsphysik

Mike Müller-Petke, Wiete Hübner, Thomas Wonik & Ugur Yaramanci
Leibniz-Institut für Angewandte Geophysik, Hannover

Einleitung

Die Methode der Nuklear-Magnetischen-Resonanz (NMR) hat seit ihren ersten experimentellen Nachweisen in den 40er Jahren des letzten Jahrhunderts (Bloch, 1946; Purcell et al., 1946) eine Vielzahl von Anwendungen gefunden. Einige unter diesen sind bemerkenswerte Bestandteile des alltäglichen Lebens, wie die Magnetische Resonanz Tomographie in der Medizinischen Diagnostik, andere sind unverzichtbare Werkzeuge der modernen Wissenschaft (NMR-Spektroskopie) geworden.

Das Potential der Methode für die Geophysik wurde in den 60er Jahren wesentlich durch die Erdöl/-gas Industrie erkannt und erste NMR-Logging Tools entwickelt (Brown & Gamson, 1960). Im Gegensatz zur Tomographie und der Spektroskopie ist für die Geophysik aber die Relaxometrie, also die Untersuchung des Abklingverhaltens des NMR-Signals der Wasserstoffprotonen das entscheidende Teilgebiet. Als erste Meilensteine können die Arbeiten von Seevers (1966) und Timur (1968) gelten, da sie das Potential der Methode zur Bestimmung von Permeabilitäten aus dem Abklingverhalten aufzeigen.

Eine breite Akzeptanz, wenngleich auch konzentriert auf die Erdöl/-gas Anwendung und Forschung, erlangte die Methode aber in den frühen 90er Jahren durch entscheidende Weiterentwicklungen im Design der Bohrlochsonden (Miller et al., 1990). Mit diesem Fortschritt der Bohrlochmesstechnik einhergehend wurden Laboruntersuchungen intensiviert. In diesen Kontext sind zahlreiche fundamentale Arbeiten zu petrophysikalischen Zusammenhängen zwischen NMR-Parametern und Gesteinseigenschaften, wie Permeabilität, Diffusionskonstanten des Porenfluids, Benetzbarkeit des Porenraumes durch das Porenfluid bis hin zur Differenzierung verschiedener Porenfluide die mithilfe von NMR-Messungen untersucht werden können, publiziert worden. Beide Entwicklungen im Labor und Bohrloch haben wesentlich dazu beigetragen, dass NMR innerhalb der geophysikalischen Bohrlochmessungen eine herausragende Stellung einnimmt.

Den nächsten Meilenstein markiert die Entwicklung einer Apparatur zur Anregung und Detektierung von NMR-Signalen aus dem Untergrund von der Erdoberfläche aus (Semenov, 1987) und die allgemeine Verfügbarkeit eines ersten kommerziellen Instruments durch Iris Instruments im Jahr 1996. Diese Apparatur erweiterte nicht nur den Anwendungsbereich von NMR innerhalb der Geophysik als Bohrlochtool und Labormessungen hin zu einer Erkundungsmethode, mittels derer zerstörungsfrei von der Oberfläche aus Information über den Untergrund erlangt werden können, sondern eröffnete Möglichkeiten, Fragestellungen aus dem Grundwasserbereich durch geophysikalische Untersuchungen neu zu beantworten. Gerade der direkte Nachweis von Wasser im Untergrund ist dabei von besonderem Interesse.

Gerade diese Fragestellungen aus der Hydrogeophysik, das sich als dezidiertes Forschungsgebiet innerhalb Geophysik mittlerweile etabliert, aber forcieren die Entwicklung einer kommerziell erhältlichen NMR-Bohrlochsonde für den flachen Grundwasserbereich, da die existierenden Sonden weder kommerziell erhältlich noch aufgrund der Größe der Sonden für die meisten Anwendungen (beispielsweise für Messungen in Grundwassermessstellen) nutzbar sind. Den vorerst letzten Meilenstein stellt somit die Entwicklung einer kleinen NMR-Sonde für den flachen Grundwasserbereich durch Vista-Clara im Jahr 2011 dar.

Dieser Übersicht und Motivation folgend gibt dieser Artikel eine kurze Zusammenfassung der theoretischen Grundlagen der NMR-Relaxometrie und zeigt wesentliche Anwendungen sowie Ausblicke auf aktuelle Forschungsthemen der Labor-NMR, der Bohrloch-NMR und der Oberflächen-NMR.

Grundlagen der Nuklear-Magnetischen-Resonanz

Basis aller NMR-Anwendungen in der Geophysik ist die Eigenschaft eines Ensembles von Wasserstoffprotonen ein makroskopisches magnetisches Moment $\vec{M}$ in einem statischen Magnetfeld $\vec{B}$ auszubilden (Abb. 1). Dieser makroskopischen Eigenschaft des Ensembles liegen mikroskopische magnetische Momente, genauer die Protonenspins der Wasserstoffprotonen, zugrunde. Die Stärke von $\vec{M}$ hängt dabei proportional von der Stärke $\vec{B}$ ab, ist aber grundsätzlich sehr klein. Der Prozess der Ausbildung von $\vec{M}$ kann durch eine Exponentialfunktion beschrieben werden, deren Zeitkonstante als Relaxationszeit $\boldsymbol{T_1}$ bezeichnet wird. Die Größe von T_1 hängt dabei unter anderem von der Umgebung in der dieser Aufbau stattfindet ab. So zeigt eine freies Porenfluid eine längere Relaxationszeit als ein Fluid im Porenraum. Aus dieser Beobachtung ergibt sich die Anwendung der NMR-Relaxometrie zur Charakterisierung von Porenräumen. Die Relaxationszeit T_1 ergibt sich unter Annahme des fast-diffusion regime (Brownstein & Tarr, 1979) zu

$$T_1 = \frac{1}{T_1^B} + \frac{1}{T_1^S} = \frac{1}{T_1^B} + \rho_1 \frac{S}{V}\,, \qquad (1)$$

wobei T_1^B die Relaxationszeit eines freien Porenfluids, ρ_1 die Oberflächenrelaxivität also Fähigkeit einer Porenwand auf die Relaxation zu wirken, S die innere Oberfläche und V das zugehörige Volumen einer Pore beschreiben. Allerdings ist dieser Effekt der Ausbildung von $\vec{M}$, d.h. der Veränderung des statischen Magnetfeldes direkt praktisch nicht messbar.

Die Nutzbarkeit dieses NMR-Phänomens ergibt sich durch Erzeugung eines sekundären nicht statischen Magnetfeldes $\overrightarrow{B_{osz}}$. Verändert man die Richtung von $\vec{M}$ kurzfristig, dann kehrt sie danach auf einer Präzessionsbewegung wieder in ihre ursprüngliche Richtung zurück.

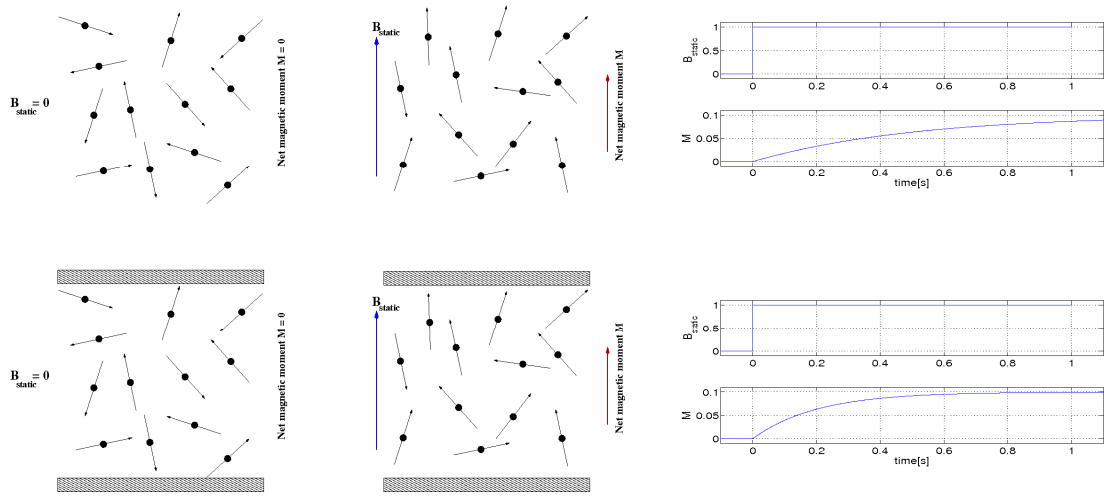

Abbildung 1: Bei Abwesenheit eines statischen Magnetfeldes $\vec{\boldsymbol{B}}$ existiert eine ungeordnete Orientierung der mikroskopischen magnetischen Momente. Es existiert kein makroskopisches magnetisches Moment $\vec{\boldsymbol{M}}$. Wird ein derartiges Ensemble nun einem statischen Feld $\vec{\boldsymbol{B}}$ ausgesetzt, dann bildet sich nach einer Zeit $\boldsymbol{T_1}$ ein makroskopisches magnetisches Moment $\vec{\boldsymbol{M}}$ aus. Die Zeitkonstante $\boldsymbol{T_1}$ ist abhängig von der Umgebung in der der Aufbau von $\vec{\boldsymbol{M}}$ stattfindet.

Die Frequenz, $\omega = \gamma B$, dieser Präzessionsbewegung ist die Larmorfrequenz, mit γ, dem gyromagnetischen Verhältnis. Gestaltet man die Frequenz des sekundären Feldes $\overrightarrow{B_{osz}}$ nun derart, dass sie der Larmorfrequenz entspricht, kann man die Richtung $\vec{M}$ nahezu beliebig manipulieren. Sinn dieser Manipulation ist nach Abschalten des sekundären Feldes die Präzessionsbewegung, genauer das damit verbundene elektromagnetische Feld, als Induktionsspannung in einer Spule zu messen.

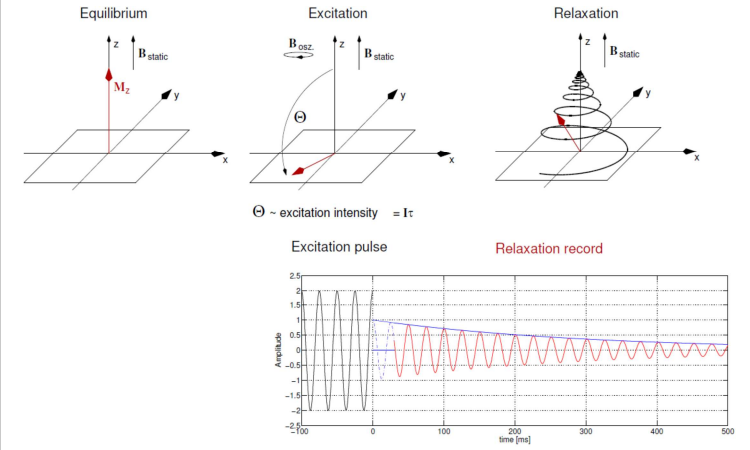

Abbildung 2: FID-Experiment.

Das einfachste Experiment auf dieser Grundlage ist das „free induction decay“ (FID) Experiment (Abb. 2). Dabei gestaltet man die Auslenkung mittels $\overrightarrow{B_{osz}}$ derart, dass die Orientierung von $\vec{M}$ senkrecht zur ursprünglichen Lage ist, weswegen man derartige Pulse zur Auslenkung auch als 90° Pulse oder P90 bezeichnet. Das exponentiell abklingende Signal, das man dann aufzeichnen kann, beschreibt die Abnahme der Komponente von $\vec{M}$ in der x-y Ebene mit einer Zeitkonstante T_2^*, während sich die z-Komponente wieder mit T_1 aufbaut. Beide Relaxationszeiten sind unabhängig voneinander, da sie verschiedenen Einflüssen unterliegen. Einerseits unterscheidet sich die Wirkung der Porenoberfläche auf die Relaxation, andererseits setzt sich das Gesamtsignal aus allen zu Grunde liegenden mikroskopischen Signalen zusammen. Das bedeutet, dass sich lokale auch geringe Magnetfeldgradienten als lokal verschiedene Larmorfrequenzen auswirken und eine Dephasierung der zu Grunde liegenden Signale folgt. Entsprechend schreibt man

$$T_2^* = \frac{1}{T_2^B} + \rho_2 \frac{S}{V} + \frac{1}{T_2^P}\,, \qquad (2)$$

wobei T_2^P dieser Dephasierung Rechnung trägt.

Da dieser Dephasierungsterm zumeist die dominierende Größe darstellt und damit eine Interpretation hinsichtlich der Porengrößen erschwert wird, erweitert man das FID-Experiment durch eine Sequenz von P180 Pulsen (CPMG Sequenz – nach Carr & Purcell, 1954 sowie Meiboom & Gill, 1958), welche eine fokussierende Wirkung auf das Ensemble haben und erzeugt damit ein Set von Spinechos. Allerdings können diese P180 Pulse die Dephasierung nur dann vollständig umkehren, wenn sich die mikroskopischen Momente nicht bewegen. Da Fluide im Porenraum allgemein einer molekularen Bewegung unterworfen sind, ist diese Fokussierung nicht perfekt und der Dephasierungsterm T_2^P wird durch einen diffusionsabhängigen Term T_2^D ersetzt. Mit D der Diffusionskonstante, G dem Gradienten des Magnetfeldes und τ dem Abstand der P180 Pulse, ergibt sich die Relaxationszeit T_2 damit zu

$$\frac{1}{T_2} = \frac{1}{T_2^B} + \rho_2 \frac{S}{V} + \frac{D\gamma^2 G^2 \tau^2}{12} \qquad (3)$$

Der Diffusionsrelaxationsterm ist nicht nur wesentlich kleiner als der vollständige Dephasierungsterm, sondern kann mittels τ kontrolliert und partiell zur Analyse der Diffusion genutzt werden. Ist τ hinreichend klein, vernachlässigt man T_2^D. Außerdem ist T_2^B, also die Relaxationszeit des freien Porenfluids, zumeist sehr lang verglichen mit der Relaxation hervorgerufen durch die Oberflächenrelaxivität ρ_2, so dass man eine einfache Beziehung

$$\frac{1}{T_2} = \rho_2 \frac{S}{V} \qquad (4)$$

zwischen der gemessenen T_2 Relaxationszeit und dem Verhältnis aus innerer Oberfläche S der Pore zu deren Volumen V erhält. In dieser einfachen Beziehung, die allerdings nicht allgemeingültig ist, begründet sich die Ableitbarkeit von Porenradienverteilungen aus der NMR-Relaxometrie und damit die Abschätzung der hydraulischer Leitfähigkeit.

Wie schon beschrieben ist die Bewegung der Wasserstoffprotonen innerhalb der Pore ein Prozess der Einfluss auf die gemessenen Relaxationszeiten ausüben kann und damit eine Größe, die mittels NMR untersucht werden kann. Die Bestimmung von Diffusionkonstanten des Porenfluids in porösen Medien wird allgemein aber durch Sequenzen die neben dem konstanten primären Magnetfeld ein gepulstes Gradientenfeld (Pulsed Field Gradient NMR – PFG NMR) benutzen, erlaubt. Die Signalreduktion der Echoamplitude

$$\Psi(b) = e^{-bD} \tag{5}$$

aufgrund der Diffusion ist dann eine Funktion von b und ist abhängig vom angewendeten Gradienten und der gewählten Sequenz (Stallmach & Galvosas, 2007). Durch Variation des Gradienten kann die Diffusionskonstante des Porenfluids bestimmt werden. Da diese von der Porengröße (beschränkte Diffusion) beeinflusst wird, ergibt sich wiederum ein Weg zur Analyse des Porenraums, ermöglicht aber auch die Untersuchbarkeit von Viskosität oder Tortusosität. Die Diffusometrie ist damit neben der Relaxometrie ein weiterer Teilbereich der NMR-Gesteinsphysik.

Die derzeit komplexesten Sequenzen stellen mehrdimensionale NMR-Experimente (Song et al., 2002; Hürlimann et al., 2002) dar. Kombiniert man beispielsweise Diffusionsmessungen mit T_2 Messungen, so ist es möglich, Wasser und Erdöl im Porenraum zu unterscheiden.

Labor-NMR

Instrumenteller Aufbau

Geophysikalische Labor-NMR-Instrumente benutzen üblicherweise künstliche möglichst homogene Magnetfelder im Bereich von einigen hundert milliTesla als Primärfelder, es gibt aber auch Instrumente die im Erdmagnetfeld arbeiten. Die Messspule zum Senden der Pulssequenzen und Empfangen der NMR-Signale umschließt die zu untersuchende Probe und befindet sich innerhalb des primären Feldes. Typische Probengrößen sind von wenigen Millimetern bis zu wenigen Zentimetern Durchmesser.

Porenradienverteilung – Hydraulische Leitfähigkeit

Neben der Bestimmung des Wassergehaltes, respektive der Porosität unter der Annahme der Vollsättigung der Probe, ist die Bestimmung der Verteilung der T_2 Relaxationszeiten eine typische Anwendung in der Angewandten Geophysik.

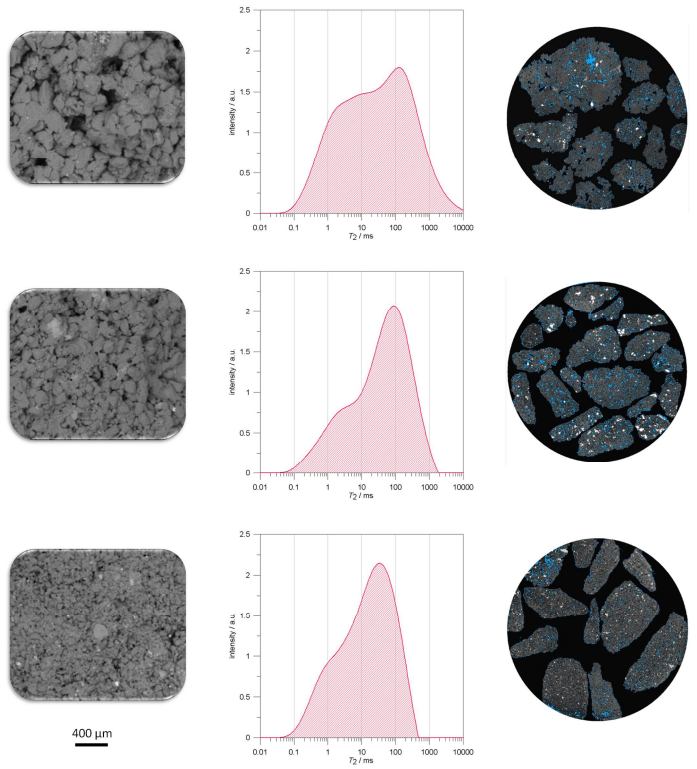

Abbildung 3: NMR-Relaxometrie: Untersuchungen an Bohrklein (Hübner et al., 2011). SEM (Links), NMR-Relaxationszeitverteilung (Mitte) und CT-Images (Rechts).

Dabei werden Koeffizienten a_i bestimmt, derart das

$$d_{est} = \sum a_i e^{-t/T_{2,i}} \quad (6)$$

die mittels der CPMG gemessenen Daten d_{obs} befriedigen. Damit wird jeder Relaxationszeit $T_{2,i}$ eine Amplitude a_i zugeordnet. Die NMR T_2 Verteilungen in Abbildung 3 zeigen eine gute Korrelation mit den Porenräumen aus Rasterelektronenaufnahmen einerseits und µ-CT Aufnahmen andererseits und bestätigen damit die einfache Beziehung (Gleichung 4) zwischen der Verteilung der Relaxationszeiten und der Porenradienverteilung einer Probe.
Die besondere Herausforderung hier bestand darin, die Untersuchungen nicht an Kernproben durchzuführen, die im Allgemeinen nur sehr kostenintensiv gewonnen werden können, sondern an Bohrklein, welches als Nebenprodukt einer Bohrung anfällt (Hübner et al., 2011). Gerade unter dem Gesichtspunkt der Anwendung von NMR Untersuchen auf verschiedensten Skalen im Labor, Bohrloch und Feld stellt sich dabei zukünftig die Frage nach dem repräsentativen Probenvolumen.

Ausgehend von der T_2 Verteilung kann die hydraulische Leitfähigkeit mittels semi-empirischer Gleichungen abgeleitet werden, deren Grundform als

$$k_f = c\phi^a {T_2}^b \quad (7)$$

beschrieben wird. T_2 ist dann der Mittelwert der Logarithmen, ϕ die Porosität, a, b, c empirisch zu bestimmende Koeffizienten bzw. Exponenten für die aufgrund der zahlreichen Untersuchungen im Erdöl/-gas Bereich gute Schätzungen existieren. Diese Koeffizienten beschreiben einerseits das Zusammenspiel zwischen Porosität, Porengrößen, Porenhalsgröße und Tortuosität der Probe, also Parameter, die das poröse Medium beschreiben und andererseits dem Satz an Parametern wie Oberflächenrelaxivität und Viskosität.

Dieser Ansatz ist nicht nur im Sinne einer Betrachtung und des Verständnis der physikalischen Parameter unbefriedigend sondern versagt für gerade im Grundwasserbereich relevante Systeme mit großen Porenräumen, da hier die Relaxationzeit des freien Porenfluids nicht mehr vernachlässigt werden kann.

Ein Ansatz der explizit diese Parameter enthält und für alle Porengrößen gültig ist (Abb. 4) wurde kürzlich von Dlugosch et al. (2011) vorgestellt. Die Autoren verbinden die Beschreibung des laminieren Fluss in zylindrischen Poren (Kozeny, 1927), wie er in der Hydrologie weit verbreitet ist, mit einer Lösung des NMR-Vorwärtsproblem, das auch für große Poren gültig ist (Godefroy et al., 2001).

Die explizite Beschreibung der Abklingzeit schließt die Oberflächenrelaxivität ρ als Gesteinsparameter ein. Dieser Parameter ist bisher nur über Messungen der inneren Oberfläche S via BET möglich, unterscheidet sich aber für verschiedene Materialien deutlich und ist beispielweise ein Indikator für Eisenablagerungen im Porenraum (Keating & Knight, 2007). Allerdings ist durchaus diskutabel, ob

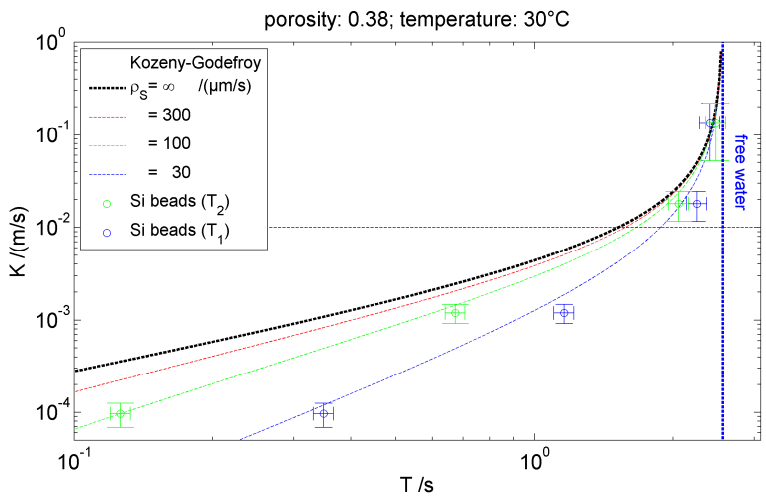

Abbildung 4: NMR T1 und T2 Messungen, sowie Durchflussmessungen an Glasperlen zur Überprüfung des erweiterten Models (Dlugosch et al., 2011) zur Berechnung der hydraulischen Permeabilität aus NMR-Messungen.

S aus BET- Messungen nicht eine wesentlich zu große Fläche darstellt als für den NMR- Relaxationsprozess relevant ist. So unterscheiden sich ρ bestimmt aus BET einerseits und Durchflussmessungen andererseits um Größenordnungen.

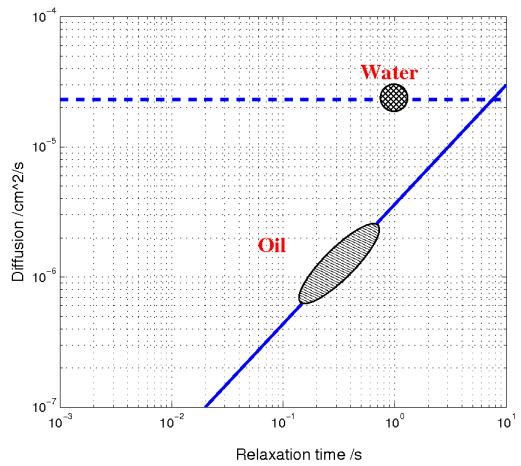

Abbildung 5: Schematische Darstellung zur Fluid-unterscheidung Wasser/Öl im Porenraum mittels mehrdimensionaler NMR.

Mehrdimensionale NMR-Experimente

Mehrdimensionale NMR-Experimente in der Gesteinsphysik beziehen sich zumeist nicht auf die räumliche Auflösung von Gesteinsparametern sondern auf gemeinsam, d.h. in einer Sequenz gemessene NMR-Parameter. Als Übersicht sei hier auch auf den Kolloquiumsartikel von Stallmach & Schönfelder (2007) verwiesen. Mehrdimensionale Experimente erlauben die Untersuchung der Korrelationen zwischen NMR-Parametern wie T_1, T_2 und D.

Die Korrelation zwischen T_2 und D ermöglicht eine quantifizierbare Differenzierung von Wasser und Erdöl im Porenraum (schematisch in Abbildung 5), welche mittels Relaxometrie oder Diffusometrie allein nicht möglich wäre. In diesen $T_2 - D$ Diagrammen stellt sich Erdöl nicht durch einen einheitliche Diffusionskoeffizienten wie bei Wasser dar, sondern zeigt in Abhängigkeit von der Relaxationszeit verschiedene Diffusionskoeffizienten. Diese Abhängigkeit kann durch die heterogene Struktur/Verteilung der Kohlenwasserstoffe des Erdöls erklärt werden. Da Erdöl ebenfalls die nichtbenetzende Phase im Porenraum darstellt, wirkt sich die Oberflächenrelaxivität auf die Relaxationszeit geringer aus als bei Wasser.
Eine weitere Korrelation besteht zwischen T_1 und T_2. Da T_1 nicht von Gradienten, d.h. Inhomogenitäten des Magnetfeldes im Porenraum beeinflusst ist, wohingegen man diesen Einfluss auf T_2 nur minimieren kann, erlauben $T_1 - T_2$ Diagramme einen Rückschluss auf interne Gradienten und damit auf die Porenraumstruktur.

Digital Rock NMR

Ausgehend von den Möglichkeiten der modernen µ-CT Instrumente, Porenräume in der Auflösung unterhalb der Mikrometerskala aufzulösen, ergibt sich das Schlagwort des Digital-Rock. Eine derart realistische Abbildung des Porenraums einer Probe gestattet diesen als geometrische Grundlage von Modellierungen, in diesem Fall der NMR-Signale zu benutzen. Der entscheidende Vorteil dieses Ansatzes liegt darin, den Porenraum nicht mehr durch eine im Sinne der Lösung der Differentialgleichung günstige Geometrie wie Kugeln oder Zylinder zu abstrahieren, sondern echte Geometrien zu verwenden. Ausgehend von diesen Geometrien lassen sich eine Vielzahl von Simulation und damit Parameterstudien durchführen, welche

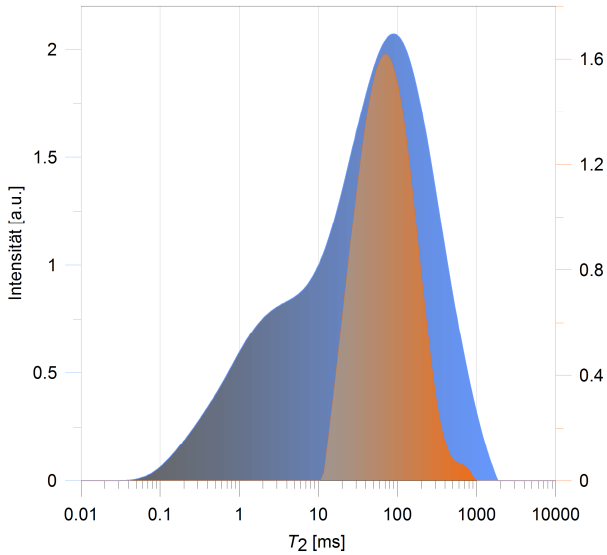

Abbildung 6: Vergleich realer (orange) und aus CT basierter Porengeometrie simulierter (blau) T2-Verteilung von Bohrkleinproben (siehe Abbildung 3). Aus: Hübner et al. (2011).

entweder nur sehr zeit-/materialintensiv oder im Sinne einer Vergleichbarkeit gar nicht real durchführbar wären. Außerdem erlaubt der Ansatz beispielweise NMR- mit Durchfluss-Simulationen zu vergleichen und daraus gesteinsphysikalische Beziehungen besser zu verstehen. Abbildung 6 zeigt einen ersten Vergleich zwischen realen und simulierten NMR-Messungen (Hübner et al., 2011).

Bohrloch-NMR

Instrumenteller Aufbau

Obwohl frühe Bohrloch-NMR Sonden das Erdmagnetfeld als Primärfeld benutzten, bestand der entscheidende Fortschritt darin, vergleichbar der Labor-NMR starke Permanentmagnete in die Sonde zu implementieren. Das Magnetfeld außerhalb der Sonde ist damit ein Gradientenfeld. Abhängig von der Anregungsfrequenz der Messspule sind nur in einem schmalen Volumen, dort, wo das Magnetfeld gerade der Anregungsfrequenz entspricht, die Resonanzbedingungen gegeben. Bohrloch-NMR Sonden messen entsprechend im Gradientenfeld in einer bestimmten Entfernung von der Sonde.
Das konstruktive Design der Magnete und der Spulen variiert je nach Sonde stark, da das Sondenkonzept im Allgemeinen Patent geschützt ist. Die wichtigsten Neuerungen bestehen in LDW (logging while drilling) Tools einerseits und der kommerziellen Verfügbarkeit einer Sonde für den flachen Grundwasserbereich, die sich durch einen geringen Durchmesser auszeichnet, andererseits.

Anwendungen im Erdöl/-gas Service

Ein nicht unerheblicher Teil der Anwendungen, die für die Labor-NMR entwickelt wurde, ist mit Fokus auf eine Anwendung im Bohrloch entstanden und findet ihre Entsprechung in den verschiedenen Bohrloch-NMR Sonden. Da die Sonden kommerziell nicht erhältlich sind und nahezu ausschließlich im Erdöl/-gas Bereich genutzt werden, existieren entsprechend wenig frei verfügbare Information und Daten. Neben Porositätslogs, Permeabilitäts- und Tongehaltsabschätzungen sind es gerade die mehrdimensionalen NMR-Experimente, die wesentliche und wichtige Reservoireigenschaften abbilden können. Detaillierte Beschreibungen dazu findet man unter anderem in Dunn et al. (2002) oder Coates et al. (1999), auf die an dieser Stelle verwiesen wird.

Anwendungen in der Hydrogeophysik

Die Möglichkeit mittels NMR-Methoden direkt Wasser nicht nur nachzuweisen sondern vor allem zu quantifizieren stellt für die Hydrogeophysik den essentiellen Vorteil der Methode gegenüber den meisten anderen geophysikalischen Verfahren dar. Im Besonderen in Lockermaterialien ist auch die Bestimmung von ungestörten Porositäten und Permeabilitäten im Labor durch die schwierige Probennahme oft fehlerbehaftet. Entsprechend ist die in-situ Messung mittels NMR von großem Interesse. Spricht man von in-situ Messungen an ungestörtem Material, stellt sich als praktisches Problem der gestörte Ringraum um die Bohrung. Hier ist vor allem ein großer Abstand des sensitiven Volumens bezüglich der Verrohrung notwendig. Die Messfrequenz einer derartigen Sonde muss gering genug sein, um mit einer Frequenz anzuregen, die bezüglich des Gradienten des Magnetfeldes mit einem sensitiven Volumen korrespondiert, das sich im ungestörten Material befindet. Eine geringe Messfrequenz bedeutet aber auch ein geringeres Signal-to-Noise und damit lange, für Bohrlochmessungen unübliche, Messzeiten bzw. Messungen während die Sonde steht.

Eine erste derartige Messung in einer Grundwassermesstelle mit weniger als 2 Zoll Innendurchmesser zeigt Abbildung 7. In jeder Tiefe werden die invertierten Koeffizienten a_i der T_2 Verteilung dargestellt, d.h. der partielle Wassergehalt zugehörig einer Relaxationszeit $T_{2,i}$. Die Messungen wurden auf den Testfeld Schillerslage (Holland et al., 2011) durchgeführt. Als Vergleich dient ein Gamma Ray-Log zur strukturellen Identifizierung der

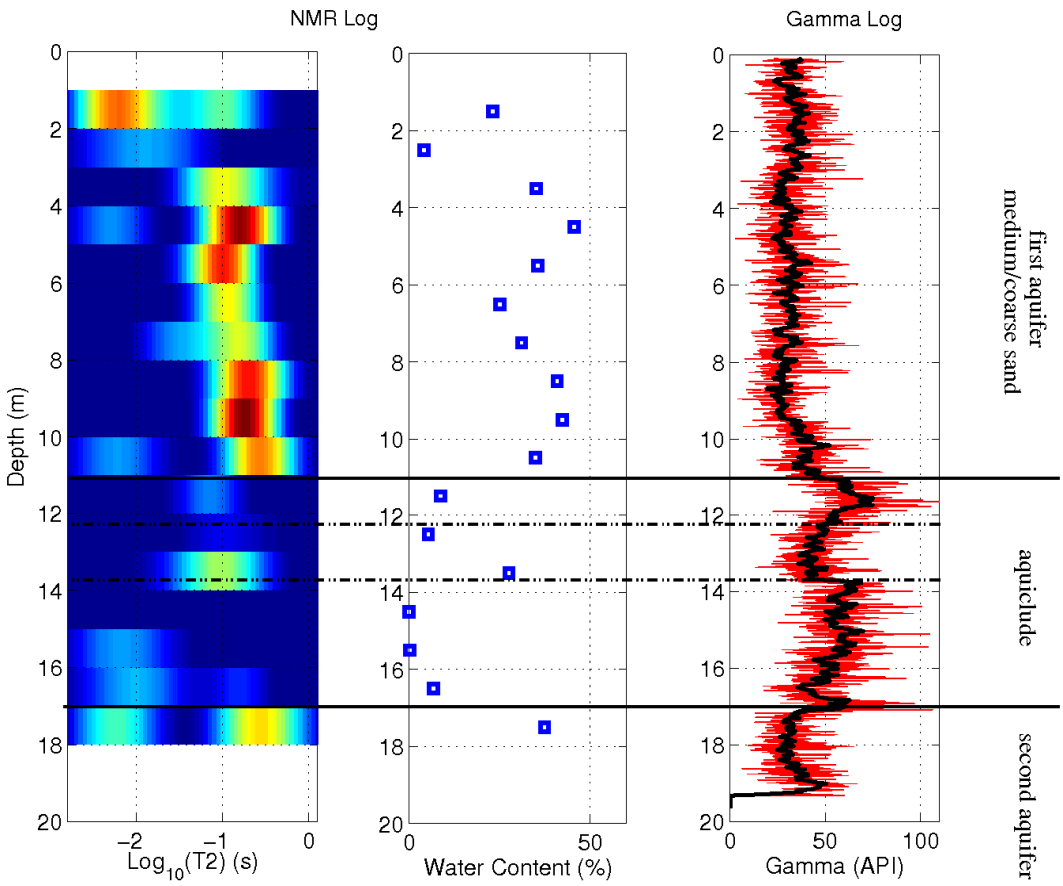

Abbildung 7: NMR- und Gamma Ray-Logs in einer 2 Zoll Grundwassermessstelle auf dem Testfeld Schillerslage – Bohrung Eng20. In jeder Tiefe werden die Koeffizienten $\boldsymbol{a_i}$ der $\boldsymbol{T_2}$ Verteilung analog zur Labor-NMR dargestellt.

Aquifere und Aquitarde. Eine erhöhte Gammastrahlen-Aktivität deutet auf erhöhten Feinkorn-/Tonanteil hin, wodurch sich Aquitarde/-clude abzeichnen. Sandige Aquifere zeigen nur geringe Gammastrahlung.

Eine gute Abschätzung der T_2 Relaxationszeit eines schluffigen Aquitards ist kleiner 10 ms und eines tonigen Aquicluds kleiner 3 ms. Die Sonde detektiert das erste Echo nach 2 ms. In Abhängigkeit von der Datenqualität ist das Wasser in Aquitard/-clude Strukturen entsprechend nur schwer detektierbar, so dass diese im Log auch mit geringem oder keinem Wassergehalt abgebildet sein können. Bezieht man dies in den Vergleich ein, sind die Übereinstimmung zwischen NMR- und Gamma Ray-Log deutlich. Oberflächennah zwischen $2\,m - 3\,m$ ist die Datenqualität nicht gut genug, um verlässliche Aussagen zu treffen.

Gleichwohl die Datenqualität allgemein noch zu verbessern ist, kann ein mittlerer Wassergehalt für den ersten Aquifer von $38\,\% \pm 8\,\%$ ermittelt werden. Der Trend zu längeren Relaxationszeiten zwischen $8\,m - 10\,m$ hat seine Ursache im Übergang von Mittelsand zu Grobsand/Feinkies und ist durch Siebanalysen gewonnener Kerne an anderer Stelle bekannt. Einige feinkörnige Fraktionen ($16\,m - 18\,m$) zeichnen sich durch kurze Zeiten ab.

Zukünftig sollen auch im Grundwasserbereich mehrdimensionale NMR-Experimente implementiert werden, um Diffusionsmessungen durchzuführen. Gerade im Bereich der Identifikation und Quantifizierung von Kohlenwasserstoffkontaminanten im Boden und Grundwasser kann NMR wichtige Beiträge, ähnlich der Wasser/Erdöl-Differenzierung liefern.

Oberflächen-NMR

Instrumenteller Aufbau und messbare Parameter

In der Oberflächen-NMR werden Kreis- oder Rechteckspulen zwischen wenigen Metern bis zu hundert Meter Durchmesser bzw. Kantenlänge an der Erdoberfläche ausgelegt (ähnlich einer TEM-Spule) die zumeist den NMR-Pulse senden als auch das NMR-Signal empfangen. Als Primärfeld dient das Erdmagnetfeld. Das zu untersuchende Objekt befindet sich somit in einem meist homogenen Magnetfeld wie bei der Labor-NMR, die Sende-/Empfangspule befindet sich aber außerhalb vergleichbar zur Bohrloch-NMR. Eine tiefenorientierte Auflösung der NMR-Parameter erreicht man durch unterschiedlich starke Pulse verschiedene Volumina maximal anregt, wobei aber immer auch andere Tiefenbereiche Signalbeiträge liefern, also ein kumulatives Signal des Untergrundes gemessen wird. Eine Inversion über alle gemessenen Pulse ordnet dann die gemessenen Parameter den richtigen Tiefen zu.

Im Gegensatz zu Labor und Bohrloch werden bisher fast ausschließlich FID-Experimente durchgeführt, aus denen die Verteilung des Wassergehalts im Untergrund bestimmt werden kann. Multipulssequenzen zur Messung von T_1 oder T_2 beschränken sich aufgrund der benötigten Energie auf maximal zwei Pulse, da ein einziger Puls (durchaus 40 ms lang) 400 A benötigt. Desweiteren sind die theoretischen NMR-Grundlagen von Multipulssequenzen für T_2 Messungen (CPMG) nicht vollständig erarbeitet. Für T_1 Messungen wurden diese durch Walbrecker et al. (2011) publiziert und werden zukünftig verfügbar sein.

Die Ableitung hydraulischer Parameter aus FID-Experimenten, d.h. aus der T_2^* Relaxationszeit sind, wie Gleichung 2 nahelegt, schwierig und hängen wesentlich davon ab, ob Inhomogenitäten des Magnetfeldes sowohl global oder als interne Gradienten im Porenraum vorhanden sind. Allerdings wirken sich diese auf Grund der geringen Messfrequenz im Erdmagnetfeld (~2 kHz) weniger stark aus als bei Laborbedingungen (~2 MHz) wodurch eine Auswertung prinzipiell nicht unmöglich ist. Nimmt man zukünftige T_1 Messungen hinzu, eröffnet sich die Möglichkeit, aus der Beziehung zwischen T_2^* und T_1 Aussagen über die Suszeptibilitätsverteilung im Untergrund zu treffen.

Magnetic Resonance Sounding (MRS) – 1D Wassergehalt und Relaxationszeiten

Die häufigste Anwendung von Oberflächen-NMR ist die tiefenorientierte Abbildung des Wassergehalt, respektive der Porosität unter Annahme der Vollsättigung und der T_2^* Relaxationszeiten. Abbildung 8 zeigt das Inversionsresultat einer weiteren Messung auf dem Testfeld Schillerslage ca. 100 m entfernt von der Bohrung aus Abbildung 7. Eine stabile und hochauflösende Abbildung der Koeffizienten a_i der T_2^* Relaxationszeitverteilung ermöglicht die QT-Inversion (Müller-Petke & Yaramanci, 2010), die damit ein analoges Abbild zum Resultat einer Bohrlochsonde liefert. Den totalen Wassergehalt erhält man als Summe über alle Relaxationszeiten. Als Vergleich dient die geologische Ansprache der gewonnenen Kerne. Da die FIDs aus den Aquitarde/-clude Strukturen auch in der Oberflächen-NMR in der Regel zu schnell abklingen, um aufgezeichnet zu werden, stellen sie sich mit verringertem Wassergehalt dar. Die längsten Relaxationszeiten (~300 ms) werden im Tiefenbereich zwischen $7\,m - 12\,m$ invertiert und entsprechen der geologischen Ansprache einer Sandes mit höherem Grobsandanteil im Vergleich zum darüber befindlichen Mittelsand.

Vergleichbare Resultate liefert die oben gezeigte Bohrlochmessung, gleichwohl diese in einer ca. 100 m entfernten Bohrung erfolgte.

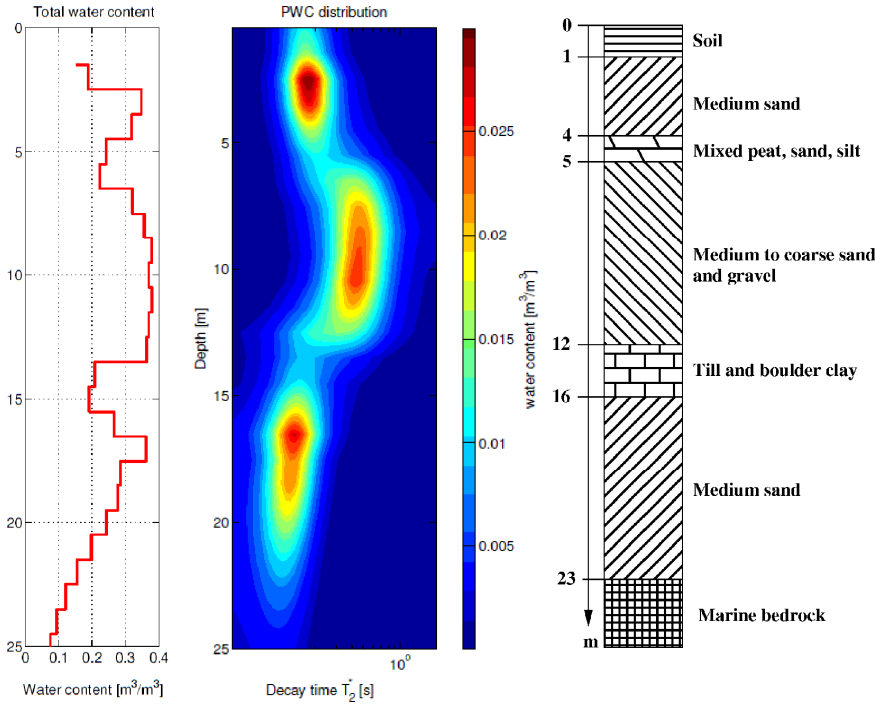

Abbildung 8: Oberflächen-NMR Messung (Magnetic Resonance Sounding - MRS) auf dem Testfeld Schillerslage an der Bohrung Eng03, ca. 100 m entfernt von Eng20 (siehe Abb. 7).

MRS – relative hydraulische Leitfähigkeit

Einen von den Relaxationszeiten unabhängigen Ansatz zur Bestimmung der relativen hydraulischen Leitfähigkeit, d.h. der hydraulischen Leitfähigkeit in der ungesättigten Zone, präsentieren Costabel & Yaramanci (2011). Basierend auf der Abnahme des Wassergehalts (genauer der Sättigung S_E im Porenraum) in der kapillaren Aufstiegszone und der Beschreibung durch das Books-Corey-Model (Brooks & Corey, 1964)

$$S_E = (\frac{h}{h_0})^{\lambda} \qquad (8)$$

mit h der Höhe Grundwasserspiegels, h_0 der Höhe der Vollsättigung oberhalb des Grundwasserspiegels und λ als Parameter der Porengrößenverteilung, lässt sich die relative hydraulische Leitfähigkeit

$$k_{rel} = S_E{}^{a\frac{2}{\lambda}} \qquad (9)$$

über diese Modelparameter bestimmen. Abbildung 9 zeigt zum einen die Abnahme der Wassersättigung oberhalb der Vollsättigung in sandgefüllten Säulen durch Labor-NMR-Experimente und die Beschreibung mittels Books-Corey-Model durch Anpassung der Parameter h_0 und λ.

Wendet man diesen Ansatz auf die Inversion der MRS-Wassergehalte an (Abbildung 9), lassen sich nicht nur die gemessenen Daten durch plausible Parameter befriedigen, sondern man erhält die hydraulische Leitfähigkeit der ungesättigten Zone.

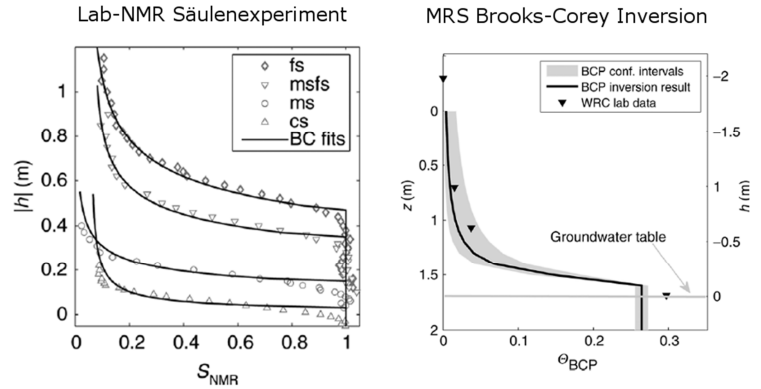

Abbildung 9: Messungen der Abnahme der Wassersättigung mittels NMR oberhalb der Vollsättigung an Säulen im Labor sowie deren Anpassung durch das Brooks-Corey-Model, sowie die Anwendung auf MRS-Messungen (Costabel & Yaramanci, 2011).

Zusammenfassung

Die Methode der Nuklear-Magnetischen-Resonanz, ob als Anwendung im Labor, Bohrloch oder auf Feldskala, erlaubt der Gesteinsphysik einen einzigartigen Zugang zur Beschreibung fluidgesättigter poröser Medien. Der Satz an bestimmbaren Parametern ist vielfältig und reicht von geometrischen Beschreibungen des Porenraums (Porosität, Porenradienverteilung, Tortuosität) über Fluideigenschaften (Identifizierung des Fluid, Diffusionskoeffizienten, Viskosität) bis hin zu Zustandsgrößen (Sättigung). Die Methode, anfangs vornehmlich geprägt durch Aufgaben der Erdöl/-gasreservoircharakterisierung, findet zunehmend Verbreitung im hydrogeophysikalischen Kontext. Gerade die Verfügbarkeit der Oberflächen-NMR und zuletzt der kleinkalibrigen Bohrloch-NMR unterstützt diese Entwicklung und verspricht eine zukünftig weitverbreitete Nutzung.

Danksagung

Die Autoren danken Stephan Costabel (Brooks-Corey-Model), Raphael Dlugosch (Labor- und Feld-NMR), Thomas Günther (Inversion) und Mathias Ronczka (Bohrloch-NMR) für die aktive NMR-Arbeitsgruppe im Geozentrum Hannover und ihre Beiträge zu dieser Übersicht.

Referenzen

Bloch, F. (1946): Nuclear Induction. Physical Review, American Physical Society, 70 (7-8), 460-474.

Brooks, R.H. & Corey, A.T. (1964): Hydraulic properties of porous media. Colorado State University Hydrology Papers 3.

Brown, R.J.S. & Gamson, B.W. (1960): Nuclear, magnetism logging. J. Pet. Tech., 219, 201.

Brownstein, K.R. & Tarr, C.E. (1979): Importance of classical diffusion in NMR studies of water in biological cells. Physical Review A, American Physical Society, 19 (6), 2446-2453.

Carr, H.Y. & Purcell, E.M. (1954): Effects of Diffusion on Free Precession in Nuclear Magnetic Resonance Experiments. Physical Review, American Physical Society, 94 (3), 630-638.

Coates, G., Xiao, L. & Prammer, M. (1999): NMR Logging Principles and Application. Halliburton Energy Services.

Costabel, S. & Yaramanci, U. (2011): Relative hydraulic conductivity in the vadose zone from magnetic resonance sounding - Brooks-Corey parameterization of the capillary fringe. Geophysics, SEG, 76 (3), G61-G71.

Dlugosch, R., Mueller-Petke, M., Guenther, T. & Yaramanci, U. (2011): An Extended Model for Predicting Hydraulic Conductivity from NMR Measurements. Ext. Abstr. 17th European Meeting of Environmental and Engineering Geophysics, Leicester, UK.

Dunn, K.J., Bergman, D.J., Latorraca, G.A. Helbig, K. & Treitel, S. (Eds.) (2002): Nuclear magnetic resonance. Pergamon.

Godefroy, S., Korb, J., Fleury, M. & Bryant, R. (2001): Surface nuclear magnetic relaxation and dynamics of water and oil in macroporous media. Physical Review E, AMERICAN PHYSICAL SOC, 64 (2), 1-13.

Holland, R., Dlugosch, R., Günther, T., Sass, S., Holzhauer, J., Suaer, J., Binot, F. & Yaramanci, U. (2011): Das hydrogeophysikalische Testfeld Schillerslage. DGG-Mittlg. 1, 51-54.

Hübner, W., Orilski, J., Halisch, M. & Wonik, T. (2011): NMR- und CT-Untersuchungen an Bohrklein. 71. Jahrestagung der Deutschen Geophysikalischen Gesellschaft. 21.-24.02.2011, Köln.

Hürlimann, M.D., Venkataramanan, L., Flaum, C., Speier, P., Karmonik, C., Freedman, R. &

Heaton, N. (2002): Diffusion-editing: New NMR measurement of saturation and pore geometry. SPWLA 43rd Annual Logging Symposium.
Keating, K. & Knight, R. (2007): A laboratory study to determine the effect of iron oxides on proton NMR measurements. Geophysics, 72 (1).
Kozeny, J. (1927): Über kapillare Leitung des Wassers im Boden. Sitz.Ber. d. Akad. d. Wiss., Math. -Nat. Kl. Wien, 136 , 271-306.
Meiboom, S. & Gill, D. (1958): Modified Spin-Echo Method for Measuring Nuclear Relaxation Times. Review of Scientific Instruments, 29 (8), 688.
Miller, M.N., Paltiel, Z., Gillen, M.E., Granot, J. & Bouton, J.C. (1990): SPE Paper 20561, Society of Petroleum Engineers.
Mueller-Petke, M. & Yaramanci, U. (2010): QT inversion - Comprehensive use of the complete surface NMR data set. Geophysics, SEG, 75 (4), WA199-WA209.
Purcell, E., Torrey, H. C. & Pound, R. (1946): Resonance absorption by nuclear magnetic moment in a solid. Physical Review, 69, 37-38.
Seevers, D. (1966): A nuclear magnetic method for determining the permeability of sandstones. Society of Professional Well Log Analysts Transactions, Paper L , 1-14.
Semenov, A. (1987): NMR hydroscope for water prospecting. Proceedings of the Seminar on Geotomography, , 66-67.
Stallmach, F. & Galvosas, P. (2007): Annual Reports on NMR Spectroscopy 61, 52.
Stallmach, F. & Schönfelder, W. (2007): Mehrdimensionale NMR-Methoden zur Untersuchung gesteinsphysikalischer und geotechnischer Parameter. DGG-Kolloquium NMR, Deutsche Geophysikalische Gesellschaft, I , 3-16.
Song, Y.-Q., Venkataramanan, L., Hurlimann, M.D., Flaum, M., Frulla, P. & Straley, C. (2002): T1–T2 Correlation Spectra Obtained Using a Fast Two-Dimensional Laplace Inversion. J. Magn. Reson. 154, 261.
Timur, A. (1968): An Investigation Of Permeability, Porosity, and Residual Water Saturation Relationships For Sandstone Reservoirs. The Log Analyst, IX (4), 8-17.
Walbrecker, J.O., Hertrich, M., Lehmann-Horn, J.A. & Green, A.G. (2011): Estimating the longitudinal relaxation time T1 in surface NMR. Geophysics, 76 (2).

Petrophysikalische Ansätze zum Verständnis der Krustendynamik

Agnes Kontny[1] und Frank Schilling[2]

[1]Abteilung Strukturgeologie, [2]Abteilung Petrophysik
Institut für Angewandte Geowissenschaften, Karlsruher Institut für Technologie (KIT),
Adenauerring 20b, D-76131 Karlsruhe
agnes.kontny@kit.edu, frank.schilling@kit.edu

1. Einführung

Petrophysikalische Eigenschaften von Mineralen und Gesteinen aus Laboruntersuchungen bilden die Basis für die Interpretation einer Reihe von geophysikalischen Anomalien, die auf der Erde und erdähnlichen Planeten gemessen werden. Sie hängen von der mineralogischen Zusammensetzung, Struktur (Korngröße und Porosität) und Textur (Anordnung und Vorzugsorientierung der Minerale) des Gesteins ab. Diese Faktoren können außerdem zur Anisotropie von petrophysikalischen Eigenschaften führen. Für die Interpretation petrophysikalischer Daten ist es deshalb wichtig die räumliche Anordnung von Mineralen, Bänderung, Korngröße und Korngefüge, Korngrenzorientierung sowie die orientierte Verteilung von Poren oder Brüchen zu kennen. Einige petrophysikalische Eigenschaften (wie z.B. die elastischen oder magnetischen Eigenschaften) zeigen darüber hinaus eine Richtungsabhängigkeit in Einkristallen woraus für eine Vielzahl von gesteinsbildenden und akzessorischen Mineralen eine Kristallanisotropie resultiert. Deformationsprozesse, wie z.B. das Wandern von Fehlstellen und Rekristallisation verursachen eine Gittervorzugsorientierung und tragen ebenfalls zur Anisotropie bei.

Am Institut für Angewandte Geowissenschaften des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) werden insbesondere elastische Eigenschaften und Wärmetransportprozesse zum besseren Verständnis des mechanischen Verhaltens von Mineralen und Gesteinen in Kombination mit Textur- und Verformungsuntersuchungen durchgeführt. Außerdem wurden in den letzten Jahren eine Reihe von magneto-mineralogischen Projekten zum besseren Verständnis von gesteinsmagnetischen Anomalien z.B. über Impaktstrukturen und heißen Flecken bearbeitet. Im Folgenden werden einige dieser meist im Bereich der Grundlagenforschung angesiedelten Projekte und ihre Anwendung auf geologische Fragestellungen vorgestellt.

2. Methoden

Mechanische Eigenschaften werden am Institut für Angewandte Geowissenschaften mit einem Eplexor 500 N der Fa. Gabo Qualimeter im Temperaturbereich von -150 bis 1500 °C gemessen. Dieses Gerät verbindet die Thermoanalyse mit der frequenzabhängigen mechanischen Bestimmung des Elastizitätsmoduls. Hierbei werden Absolutwertmessungen der Verformung, Kraft und Temperatur erhalten, aus denen verschiedene Materialkennwerte ermittelt werden können.

In Zukunft können im Temperaturbereich -125 bis 1100 °C auch thermophysikalische Eigenschaften wie die Dichte, spezifische Wärme, und Temperaturleitfähigkeit mit der Laserflash-Methode bestimmt werden. Aus diesen Kenngrößen kann die Wärmeleitfähigkeit von Mineralen und Gesteinen ermittelt werden. Für diese Messungen steht ein LFA 457 Microflash System der Fa. Netzsch zur Verfügung.

Zur Bestimmung gesteinsmagnetischer Eigenschaften steht am Institut für Angewandte Geowissenschaften eine Kappabrücke (KLY-4S, Fa. Agico) und ein Spinnermagnetometer (JR-5A, Fa. Agico) zur Verfügung (weitere Geräteausstattung s. http://www.agw.kit.edu

/636.php). Die Messfrequenz der Kappabrücke beträgt 875 Hz und das magnetische Feld kann zwischen 3 und 450 A/m variiert werden. Die hohe Empfindlichkeit des Gerätes (2 x 10-8 SI) ermöglicht es, selbst bei so schwach anisotropen Mineralen wie Calcit und Quarz die Anisotropie zu ermitteln. Die Anisotropie der magnetischen Suszeptibilität (AMS) wird häufig zur Charakterisierung des Gesteinsgefüges herangezogen. Grundlage dafür ist die Richtungsabhängigkeit der Suszeptibilität, welche Informationen über die Vorzugsorientierung von Mineralen liefern kann. Einige Studien haben darüber hinaus auch das Potential der AMS als Verformungsindikator aufgezeigt (z.B. Owens & Rutter 1978; de Wall et al. 2000). Neben der Feldabhängigkeit und der Anisotropie kann auch die Temperaturabhängigkeit der Suszeptibilität zwischen -190 und 800 ℃ bestimmt werden. Diese Messungen ermöglichen die Bestimmung von magnetischen Übergangstemperaturen (z.B. Curie Temperatur) zur Identifikation magnetischer Minerale.

3. Petrophysikalische Projekte am Institut für Angewandte Geowissenschaften, KIT

3.1 Änderung elastischer Eigenschaften am Übergang von Tiefquarz zu Hochquarz

Petrophysikalische Eigenschaften wie z.B. die P- und S-Wellengeschwindigkeit, Wärmekapazität sowie Temperaturleitfähigkeit zeigen am Übergang von Tiefquarz zu Hochquarz (573 ℃ bei atmosphärischem Druck) eine Veränderung. Hochtemperatur Dreipunkt-Biegezugversuche im Bereich der Phasenumwandlung zeigen in dem für die Seismologie relevanten Frequenzbereich von 0,1 bis 100 Hz ein Frequenz-abhängiges Verhalten des Elastizitätsmoduls mit einer Abnahme des Realteils und einer Zunahme des Imaginärteils in Abhängigkeit von der Temperatur (Abb. 2; Beck & Schilling 2010). Dieses Verhalten kann für die Diskriminierung von Quarz-reichen Gesteinen, die sich nahe am Tiefquarz-Hochquarz-Phasenübergang befinden bei der Interpretation von seismischen und seismologischen Daten genutzt werden.

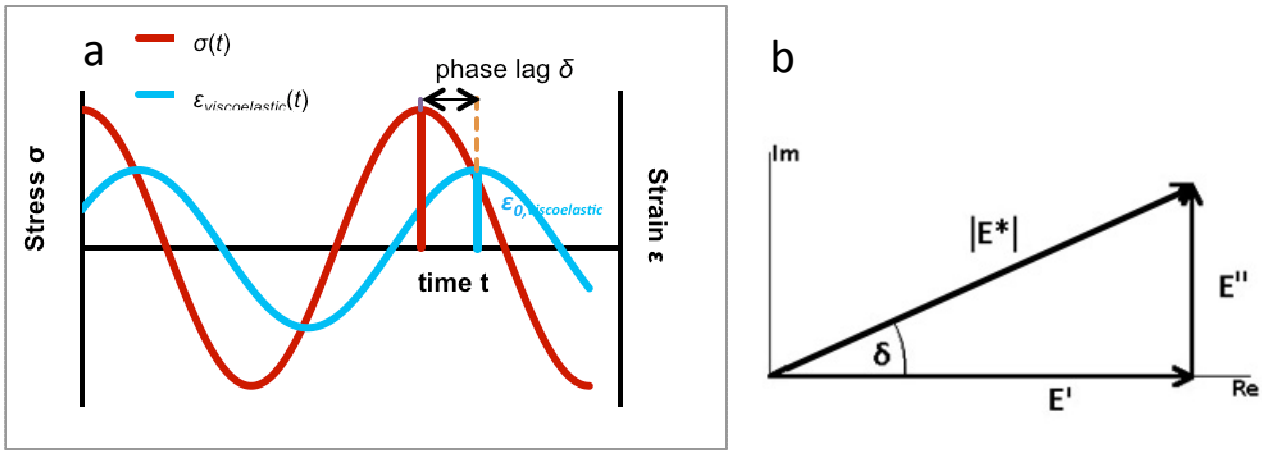

Abbildung 1: (a) Spannungs- und Verformungsverhalten eines viskoelastischen Materials. (b) Geometrische Darstellung des komplexen E-Moduls in der Gaußschen Ebene, mit Realteil (E') auf x-Achse und Imaginärteil (E'') auf y-Achse. Der Tangens des Phasenunterschieds (tan δ = E'' / E') gibt den Anteil des Verlustmoduls am Speichermodul an.

Die Messungen zeigen ein deutliches und scharfes Minimum des Qualitätsfaktors am Tiefquarz-Hochquarz-Phasenübergang (Abb. 3). Dieses Minimum könnte als Temperatur-sensor innerhalb der Erdkruste, die durch Quarz-reiche Gesteine gekennzeichnet sind, angewendet werden. Weitere Untersuchungen an Quarz-Einkristallen sind in Arbeit.

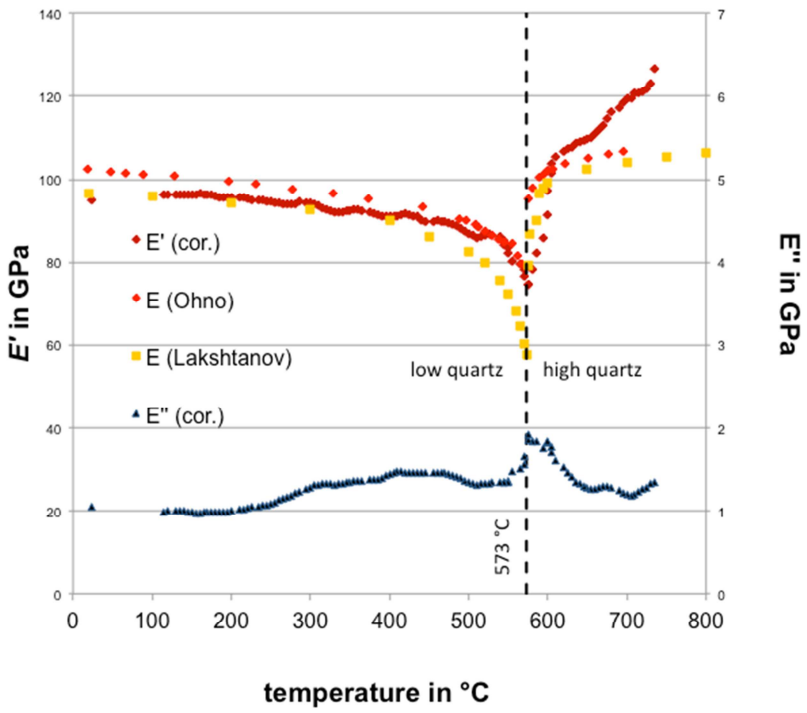

Abbildung 2: Speichermodul (E') und Verlustmodul (E'') vs. Temperatur von Quarzit im Vergleich zu den Daten von Lakshtanov et al. (2006) und Ohno et al. (2006), die an Quarz-Einkristallen gemessen wurden. Cor. bedeutet, dass das E' und E'' Modul des Quarzits mit einer Mikrorissdichte von 40% korrigiert wurden. Eine Rissdichte von 40% ist realistisch, da der Phasenübergang mit einem signifikanten Volumenverlust verbunden ist.

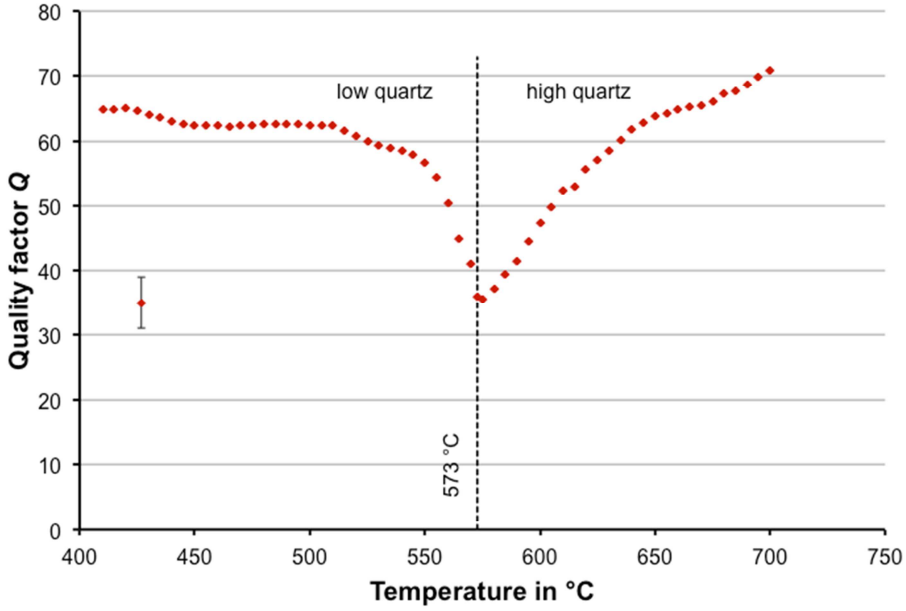

Abbildung 3: Qualitätsfaktor (Q = 1 / tan δ) in Abhängigkeit von der Temperatur für Quarzit. Da am Tiefquarz-Hochquarz-Phasenübergang das Speichermodul abnimmt und das Verlustmodul zunimmt zeigt der Qualitätsfaktor ein deutliches Minimum bei ca. 573 °C.

3.2 Krustenmagnetisierung über heißen Flecken und ihre Magnetomineralogie

Gesteinsmagnetische und magneto-mineralogische Daten tragen zu unserem Verständnis der tektonischen Entwicklung von vulkanischen Strukturen bei (wie z.B. Entwicklung des Ozeanbodens und von vulkanischen Inseln) und sind grundlegend für die Interpretation globaler magnetischer Anomalien. Im Rahmen von ICDP-Bohrungen auf Hawaii und Island wurden subaerische und submarine Basalte aus Schildvulkanen und Riftzonen erbohrt (Abb. 4) an denen gesteinsmagnetische Untersuchungen durchgeführt wurden. Diese Daten dienen als Grundlage für ein besseres Verständnis von magnetischen Krustenanomalien auf unterschiedlichen Skalen und die sie kontrollierenden geologischen Prozesse.

Die magnetischen Eigenschaften der untersuchten basaltischen Gesteine zeigen eine extrem starke Variation, sowohl in der induzierten (Suszeptibilität: 0.2 - 200 x 10-3 SI Einheiten) als auch in der natürlich remanenten Magnetisierung (NRM: 0.01 - 100 A/m). Die Gesamtmagnetisierung (induzierte + remanente Magnetisierung) wird überwiegend durch die NRM kontrolliert (Königsberger Verhältnis, Q, meist >1) (Abb. 5). Hydrothermal alterierte Basalte (gefüllte Symbole in Abb. 5) wie sie typischerweise im tieferen Bereich von Riftzonen vorkommen, zeigen im Vergleich zu frischen Basalten (ungefüllte Symbole in Abb. 5) eine Tendenz zu niedrigeren NRM und Q-Werten aber eine stärkere Variation der magnetischen Suszeptibilität. Dies gilt insbesondere für hydrothermal alterierte Basalte aus aktiven geothermalen Gebieten wie z.B. Krafla im NE Islands, wo außerdem eine negative magnetische Anomalie auftritt. Hier wird Titanomagnetit, der Hauptträger der magnetischen Eigenschaften, durch Tieftemperatur-Oxidation (< 350 ℃; Maghemitisierung) und Fluid-Gesteins-Wechselwirkungen zerstört (Oliva et al. 2011). Obwohl die Intensität der NRM stark reduziert wird, tragen die magnetischen Minerale eine stabile Richtung einer während des Alterationsprozesses erworbenen chemisch remanenten Magnetisierung (Abb. 6).

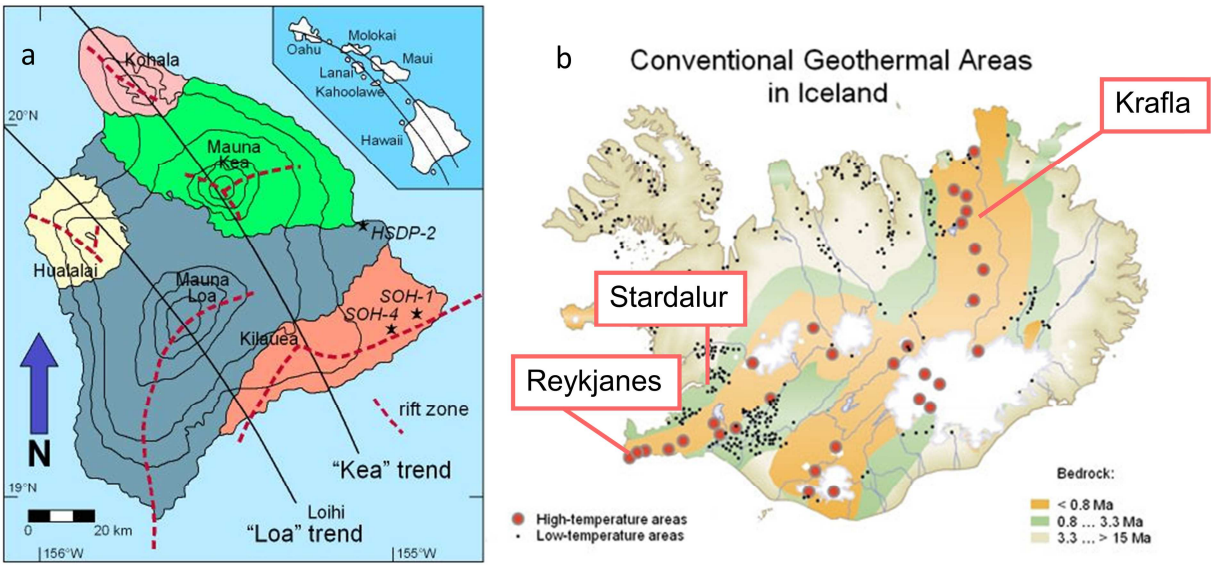

Abbildung 4: Lokation der bearbeiteten Gebiete und Forschungsbohrungen auf Hawaii (a) und Island (b).

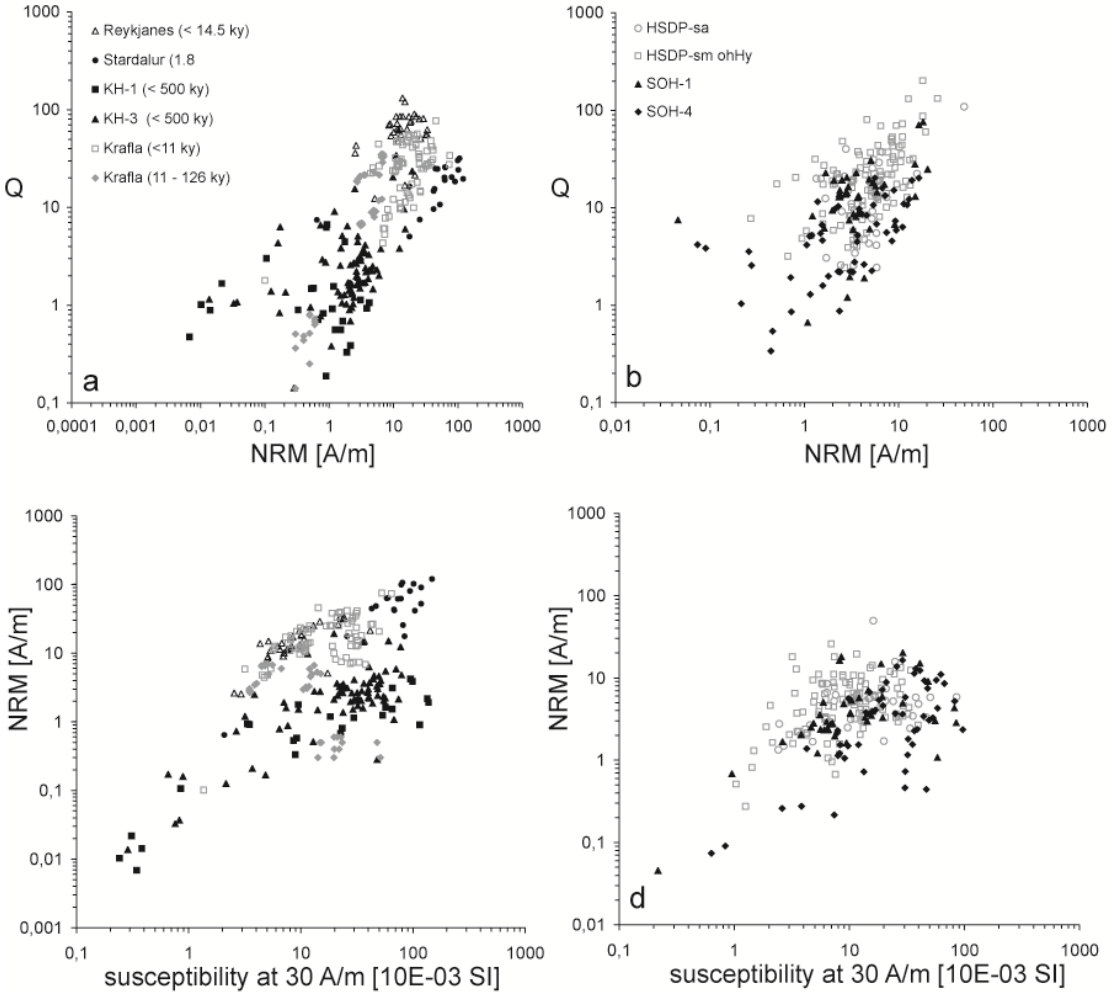

Abbildung 5: Diskriminierungsdiagramme der gesteinsmagnetischen Eigenschaften für frische und alterierte Basalte von verschiedenen Bohrungen oder Oberflächenaufschlüssen aus Island (links) und Hawaii (rechts). (a) und (b): Königsberger Verhältnis (Q, Verhältnis zwischen remanenter und induzierter Magnetisierung) aufgetragen gegen die natürliche remanente Magnetisierung (NRM). (c) und (d): NRM gegen die magnetische Suszeptibilität (induzierte Magnetisierung = magnetische Suszeptibilität * äußeres Feld). Anzahl der Messungen: 504.

Die breite Variation der gesteinsmagnetischen Eigenschaften in den verschiedenen Basaltlithologien von Vulkangebäuden über heißen Flecken kann durch verschiedene primäre und sekundäre Prozesse während der Kristallisation und Abkühlung der Lava und anschließender Fluid-Gesteins-Wechselwirkungen in hydrothermal aktiven Gebieten erklärt werden. Diese Prozesse verändern die Zusammensetzung, Korngröße und Häufigkeit von Titanomagnetit. „Junge“ Basalte (< 500.000 Jahre) von heißen Flecken mit kleinen Titanomagnetit-Körnern (< 1 μm) zeigen im Durchschnitt deutlich höhere NRM-Intensitäten (ca. 10 A/m), als sie für Basalte der ozeanischen Kruste (3-4 A/m) beschrieben werden (z.B. Bleil und Petersen 1983). Abbildung 7 zeigt welche geologischen Prozesse für verschiedene Titanomagnetit-Texturen verantwortlich sein können und wie sich dabei magnetische Kenngrößen wie die NRM, die Koerzitivkraft (hier angegeben als MDF) und die magnetische Suszeptibilität (χ) verändern können.

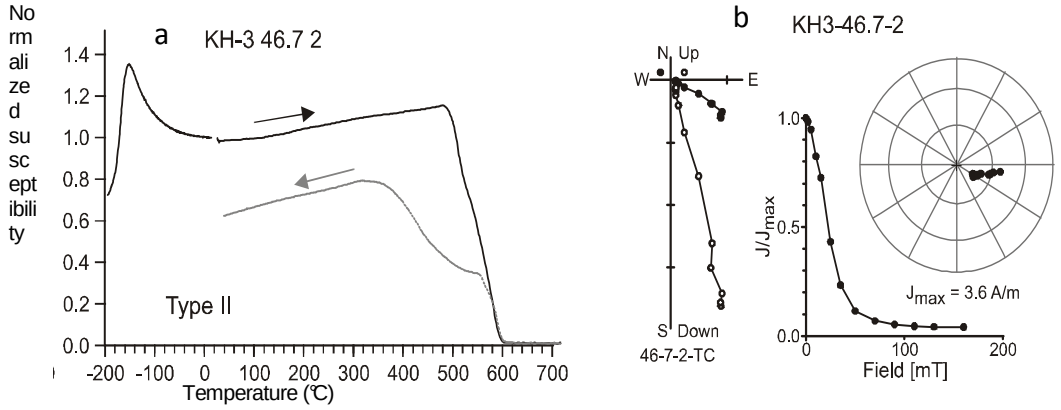

Abbildung 6: (a) Magnetische Suszeptibilität vs. Temperatur für hydrothermal alterierten Basalt (Chlorit-Zone) der Bohrung KH-3, Krafla-Gebiet, NE Island. Zwei magnetische Phasen können unterschieden werden mit einer dominierenden Curie Temperatur bei 587 °C (reversibel) und einer zweiten Curie Temperatur bei ca. 540 °C (irreversibel). Die Irreversibilität der Aufheiz- und Abkühlkurve (niedrigere Suszeptibilität in Abkühlkurve) ist ein charakteristisches Merkmal von Titanomaghemit (Oliva-Urcia et al. 2011). (b) Wechselfeld-Abmagnetisierung der Probe aus (a). Die Daten sind in stereografischer Projektion und im Zeijderveld-Diagramm dargestellt (schwarze / weiße Punkte zeigen horizontale / vertikale orthogonale Projektion) und zeigen eine stabile Remanenzrichtung mit einer Inklination von 73° (Deklination kann nicht bestimmt werden, da Bohrkerne nicht orientiert waren) (Oliva-Urcia & Kontny 2012).

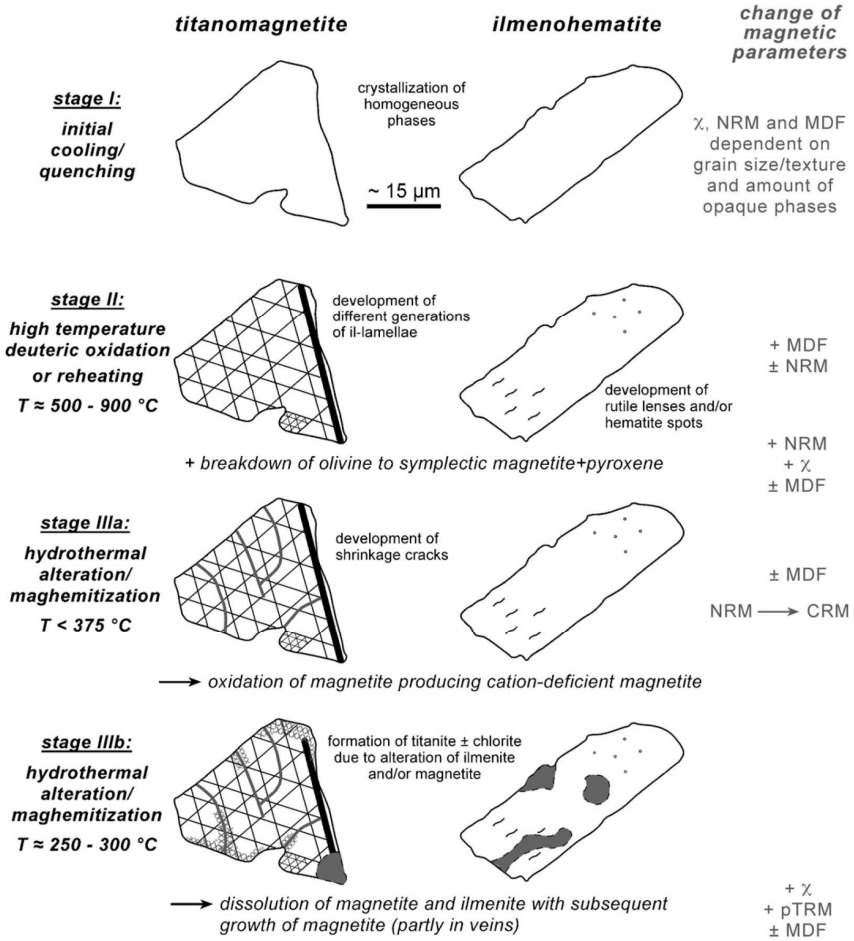

Abbildung 7: Skizze zeigt die Entwicklung der Titanomagnetit- und Ilmenohämatit-Texturen und die damit verbundene Änderung magnetischer Kenngrößen (MDF; median demagnetizing field; aus Vahle et al. 2007).

3.3 Gesteinsmagnetische Untersuchungen an der Chesapeake Bay Impaktstruktur und Schock-induzierte Änderungen der magnetischen Eigenschaften in Pyrrhotin

Die ICDP-USGS Eyreville Bohrung in die Chesapeake Bay Impaktstruktur, USA (CBIS; 35 Ma), hat eine der vollständigsten geologischen Profile einer Impaktstruktur zu Tage gefördert. Anhand der Kerne aus der 1766 m tiefen Bohrung wurden die ursprünglichen und impakt-modifizierten Gesteine sowie deren gesteinsmagnetische Eigenschaften untersucht. Unsere Untersuchungen haben ergeben, dass die Gesteine, in welche der Meteorit einschlug, Pyrrhotin und Magnetit beinhalten (Elbra et al. 2009; Mang et al. in press). Diese beiden Minerale sind verantwortlich für das regionale magnetische Anomalienmuster. Das Anomalienmuster ist im Bereich des Kraters gestört und kann durch die Ablagerung von Suevit und lithischen Breckzien, in welche Megablöcke aus dem Grundgebirge eingeschaltet sind, erklärt werden (Shah et al. 2009) (Abb. 8).
Magnetische Suszeptibilität und natürlich remanente Magnetisierung für die verschiedenen Impakt-bezogenen Lithologien der CBIS sind in Abb. 8 dargestellt. Ferrimagnetische Suszeptibilitätswerte > 10-3 SI Einheiten und NRM-Werte > 0,1 A/m bis < 3 A/m wurden nur in Suevit der Eyreville-Bohrung sowie Schiefer und Granit gemessen. Für die magnetischen Anomalien spielen im Wesentlichen nur diese Lithologien eine Rolle.

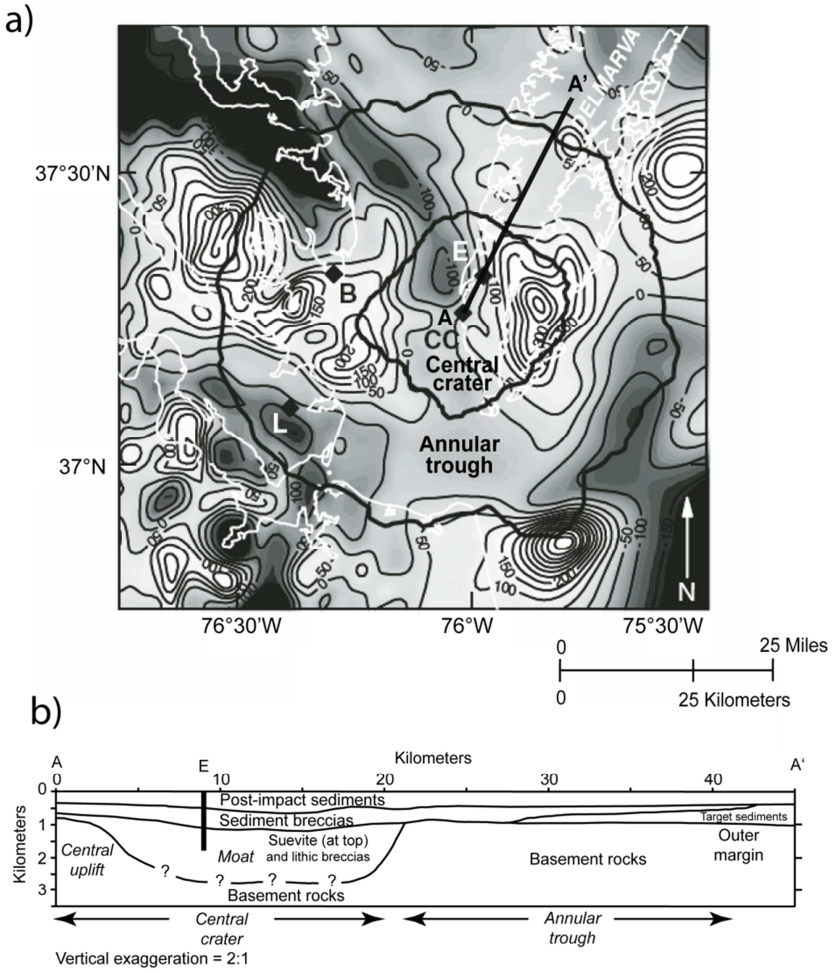

Abbildung 8: (a) Aeromagnetische Anomalienkarte der Chesapeake Bay Impakt Struktur (modifiziert nach Shah et al. 2009). Dunkle Bereiche markieren negative Gradienten des Magnetfeldes (in nT). Rauten geben die Lokation von vier Forschungsbohrungen an: B: Bayside, CC: Cape Charles, E: Eyreville, L: Langley. (b) Profil durch die halbe Kraterstruktur mit den wichtigsten lithologischen Einheiten und der Lokation der Eyreville Bohrung (modifiziert nach Gohn et al. 2008) (aus Mang et al. in press).

Eine Modifizierung der magnetischen Minerale konnte nur im Suevit beobachtet werden. Die allochthonen Grundgebirgsmegablöcke zeigen keine Anzeichen einer Schockdeformation. Unseren Ergebnissen zufolge ist die natürliche remanente Magnetisierung auf eine Schockremagnetisierung (SRM) und eine chemische remanente Magnetisierung (CRM) zurückzuführen. Im Gegensatz zu Befunden aus anderen Impaktstrukturen wie z.B. dem Nördlinger Ries (z.B. Pohl et al. 2010) konnten wir keinen bedeutenden Beitrag einer thermischen remanenten Magnetisierung (TRM) feststellen. Die stabile remanente Magnetisierung (Jr>Ji) wird im Suevit von Pyrrhotin (ferrimagnetische, monokline Modifikation mit hoher Anzahl an mechanischen Zwillingen und Gitterdefekten, einem signifikanten Metalldefizit und einer TC von 360℃; Abb. 10) und Magnetit (interpretiert als Ausfällungdprodukt aus Fe-haltigen Lösungen deren Chemismus überwiegend der Alteration von Schmelzpartikeln entstammt; Abb. 11) getragen. Da nur eine Richtung der NRM im Suevit beobachtet werden kann, haben beide Minerale ihre Magnetisierung entweder zeitnah zum Impaktereignis erworben oder sie sind zu einem späteren Zeitpunkt gemeinsam remagnetisiert worden. Steile Inklinationswerte der NRM könnten ein Hinweis darauf sein, dass beide magnetischen Minerale während des Bohrprozesses remagnetisiert wurden.

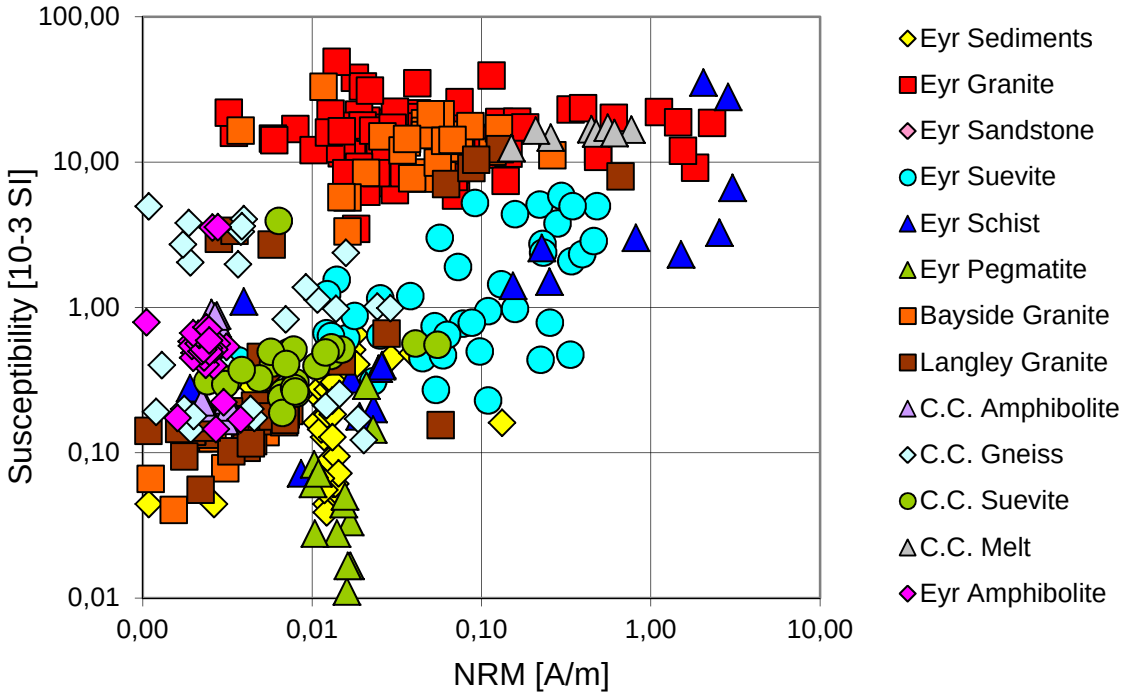

Abbildung 9: Gesteinsmagnetisches Diskriminierungsdiagramm (magnetische Suszeptibilität vs. natürlich remanente Magnetisierung, NRM) der Impakt-bezogenen Lithologien aus Bohrungen der Chesapeake Bay Impakt Struktur. C.C.: Cape Charles, Eyr: Eyreville, N = 210. (Dissertation C. Mang)

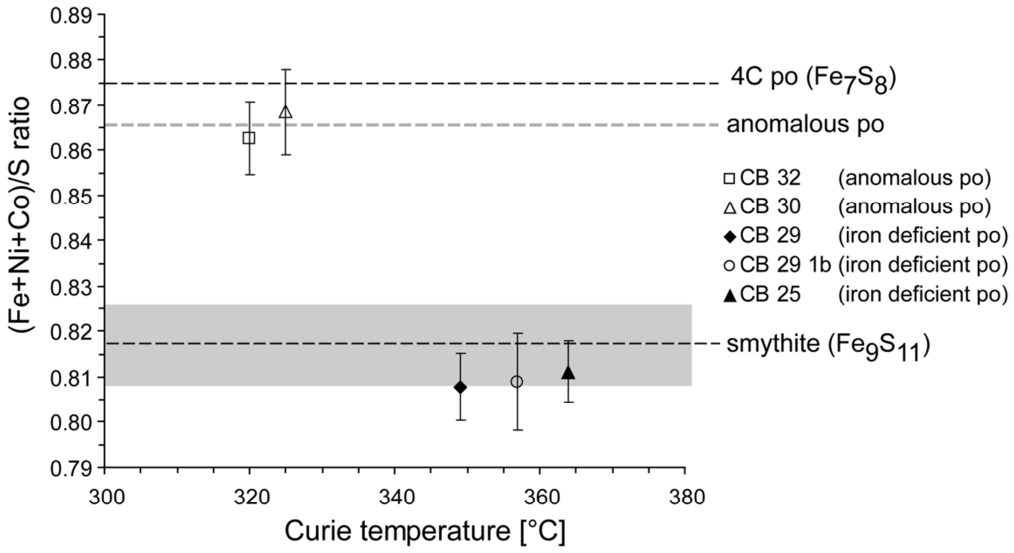

Abbildung 10: Durchschnittliche Metall/Schwefel-Verhältnisse vs. Curie Temperatur für Pyrrhotin aus dem Schiefer (anomalous po) und Metall-defizitärem „Pyrrhotin“ aus dem Suevit (iron deficient po) der Eyreville Bohrung. Der graue Balken markiert den Zusammensetzungsbereich von Smythit nach Taylor & Williams (1972) (aus Mang et al. In press).

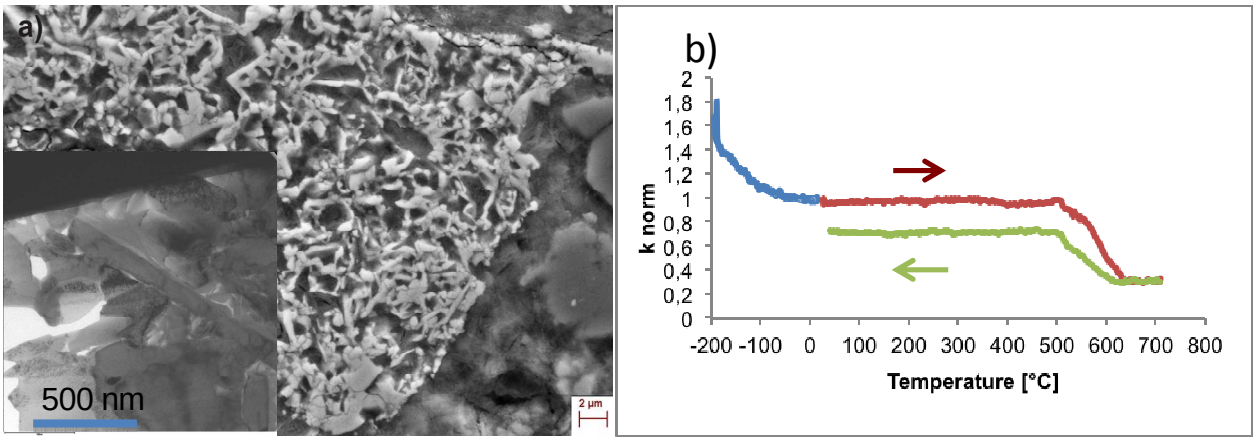

Abbildung 11: (a) Netzwerk aus feinen, sekundär gebildeten Magnetit-Leisten, die die Matrix des Suevits überwachsen (Probe CB23-2). Transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen (links in (a)) zeigen keine Deformation. (b) Temperaturabhängige Suszeptibilität mit Curie Temperatur bei 580 ℃ (Dissertation C. Mang). Der flache Abfall scheint typisch zu sein für Magnetit-Nanokristallite (eigene Untersuchungen).

Damit wir ein besseres Verständnis für den Schock induzierten Erwerb einer Magnetisierung in Pyrrhotin bekommen, haben wir Pyrrhotinerz der Mine Cerro di Pasco, Chile (Proben wurden freundlicherweise von Prof. H. Siemes, RWTH Aachen zur Verfügung gestellt) Schockexperimenten unterzogen. Die Schockexperimente wurden bei 3, 5, 8, 20 und 30 GPa am Fraunhofer Institut für Kurzzeitdynamik (Ernst-Mach-Institut) in Efringen-Kirchen in Zusammenarbeit mit Dr. U. Hornemann durchgeführt. Die magnetischen Übergangstemperaturen (monokliner Pyrrhotin: 34 K Umwandlung und Curie Temperatur bei 320℃; hexagonaler Pyrrhotin: □-Umwandlung bei 220 ℃ und Curie Temperatur (TC) bei 270 ℃; Abb. 12) bleiben bei allen Schockstufen erhalten, was auf ein reversibles Verhalten des Pyrrhotins während der Druckbeanspruchung hinweist. Allerdings führt der Schockdruck dazu, dass die Koerzitivkraft und damit auch das magnetische Gedächtnis zunehmen. Dieser

Effekt ist darauf zurückzuführen, dass die Pyrrhotinkörner stark zerkleinert werden und eine Vielzahl von Gitterdefekten im atomaren Maßstab entstehen (Mang et al. 2011).

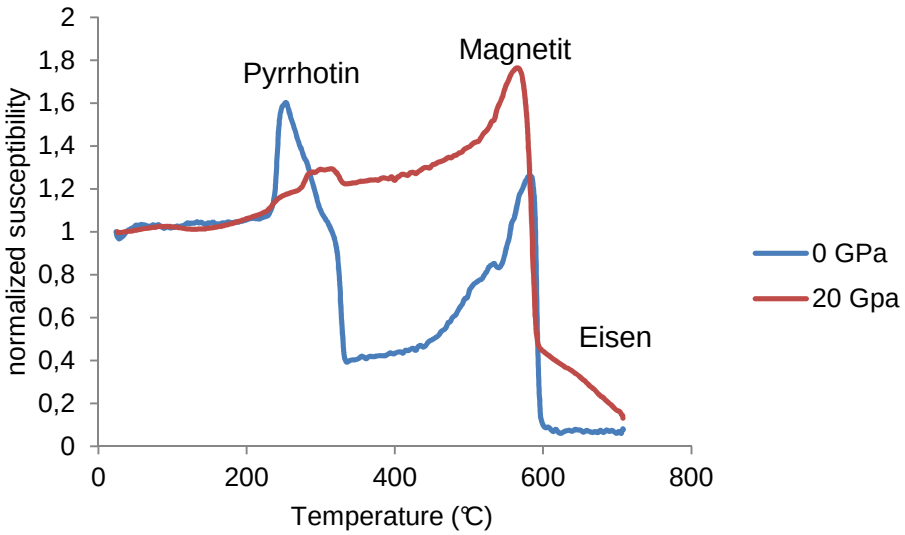

Abbildung 12: Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität für Pyrrhotinerz, das aus hexagonalem und monoklinem Pyrrhotin besteht. Die Lage der -Transition (Umwandlung von hexagonalem NC zu NA Pyrrhotin) sowie die TC von hexagonalem und monoklinem Pyrrhotin bleiben für das ungeschockte und geschockte Pyrrhotinerz gleich. Beide Proben enthalten wenig Magnetit und ein Teil des Pyrrhotins wandelt sich durch die Aufheizung zusätzlich in Magnetit um (Anstieg der Suszeptibilität oberhalb 400 ℃). In der 20 GPa-Pro be deutet die erhöhte Suszeptibilität bis 700 ℃ au f Eisen hin. Eisen wurde in rasterelektronenmikroskopischen Aufnahmen als Einschlüsse in Pyrrhotinschmelze der 30 GPa beobachtet und in der 20 GPa-Probe mittels TEM in 100 x 500 nm großen Flecken, die eine intensive Verwachsung mit Pyrrhotin aufweisen, vermutet.

Danksagung

An dieser Stelle danken die Autoren der Deutschen Forschungsgemeinschaft für die Förderung im Rahmen des SPP-ICDP (KO1514/3 und KO1514/6) und dem Bundesministerium für Bildung und Forschung für die Förderung des Projektes BMBF 03G0763A. Transmissionselektronenmikroskopische Untersuchungen wurden in Zusammenarbeit mit PD Dr. R. Schneider, Elektronenmikroskopisches Labor des KIT, durchgeführt.

Literaturverzeichnis

Beck, M.M., Schilling, F.R., 2010. Damping of elastic waves during low to high quartz transition. American Geophysical Union, Fall Meeting 2010, abstract.

Bleil, U., Petersen, N., 1983. Variations in magnetization intensity and low temperature titanomagnetite oxidation of ocean floor basalts, Nature, 301, 384–387.

De Wall, H., Bestmann M., Ullemeyer, K., 2000. Anisotropy of diamagnetic susceptibility in Thassos marble: a comparison between measured and modeled data. Journal of Structural Geology, 22 (11-12), 1761-1771.

Elbra T., Kontny, A., Pesonen L.J. 2009. Rock magnetic properties of the ICDP-USGS Eyreville core, Chesapeake Bay impact stucture. GSA Special Paper, 458, 119-136.

Gohn G. S., Koeberl C., Miller K. G., Reimold W. U., Browning J. V., Cockell C. S., Horton Jr. J. W, Kenkmann T., Kulpecz A. A., Powars D. S., Sanford W. E., Voytek M. A. 2008. Deep drilling into the Chesapeake Bay Impact Structure. Science 320:1740-1745.

Lakshtanov, D.L., Sinogeikin, S.V. and Bass, J.D., 2006. High-temperature phase transitions and elasticity of silica polymorphs. Physics and Chemistry of Minerals, 34(1), 11-22.

Mang, C., Kontny, A., Harries, D., Lamgemhorst, F., Hecht, L., in press. Iron deficiency in pyrrhotite of suevites from the Chesapeake Bay impact crater, USA – a consequence of shock-metamorphism? Meteoritics and Planetary Sciences, 1-19, doi: 10.1111/j.1945-5100.2012.01329.x.

Mang, C., Kontny, A. M., Hecht, L. (2011) Low-temperature magnetic study of naturally and experimentally shocked pyrrhotite. American Geophysical Union, Fall Meeting 2011, abstract.

Ohno, I., Harada, K. and Yoshitomi, C., 2006. Temperature variation of elastic constants of quartz across the α - β transition. Physics and Chemistry of Minerals, 33(1), 1-9.

Oliva-Urcia, B., Kontny, A., 2012. Remanent magnetization of maghemitized basalts from Krafla drill cores, NE-Iceland. Studia Geophysica et Geodaetica, 56, doi: 10.1007/s11200-011-9013-9.

Oliva-Urcia, B., Kontny, A., Vahle C. and Schleicher, A.M., 2011. Modification of the magnetic mineralogy in basalts due to fluid-rock interactions in a high-temperature geothermal system (Krafla, Iceland). Geophysical Journal International, doi: 10.1111/j.1365-246X.2011.05029.x.

Owens, W.H., Rutter E.H., 1978. Development of magnetic susceptibility anisotropy through crystallographic preferred orientation in a calcite rock. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 16 (3), 215-222.

Pohl J., Poschold K., Reimold W.U, Meyer C., Jacob J., 2010. Ries crater, Germany: The Enkingen magnetic anomaly and associated drill core SUBO 18. *Geological Society of America Special Papers*, 465, 141-163.

Shah, A.K., Daniels, D., Kontny, A. Brozena, J., 2009. Megablocks and melt pockets in the Chesapeake Bay impact structure constrained using magnetic field measurements and properties of the Eyreville and Cape Charles cores. GSA Special Paper, 458, 195-208.

Taylor L. A., Williams K. L. 1972. Smythite, $(Fe, Ni)_9S_{11}$ A Redefinition. American Mineralogist 57, 1571-1577.

Vahle C., Kontny, A., Gunnlaugsson, H.P., Kristjansson, L., 2007. The Stardalur magnetic anomaly revisited – new insights into a complex cooling and alteration history. Phys. Earth Planet. Inter., 164, 119-141.

Anzeige

GFL
Qualitätsgeprüfte Firma BDG

Dr. Lux
Geophysikalische Fachberatung GbR

Vermittlung, Planung, Beratung geowissenschaftlicher Messungen und Untersuchungen einschließlich Auswertung und Gutachtenerstellung mit Schwerpunkt Bohrlochgeophysik für:

- *Wassererkundung und -erschließung*
- *Brunnenbau*
- *Bau von Grundwassermeßstellen*
- *Altbrunnen*
- *Ingenieurgeologie*
- *Verkehrswegebau*
- *Deponieüberwachung und -sanierung*
- *Sanierung und Sicherung von Altbergbau*
- *Rohstofferkundung*

GFL - Dr. Lux Geophysikalische Fachberatung GbR Kleine Tabarzer Straße 6 99894 Friedrichroda
Tel.: 03623 - 200 927 Fax: 03623 - 200 925 eMail: dr-lux@t-online.de
Internet: www. gfl-geophysik.de