

3D Inversion transientelektromagnetischer Daten

Roland Martin¹, Carsten Scholl², Stefan L. Helwig¹, Olaf Koch¹ und Bülent Tezkan¹

Zusammenfassung

Um die Interpretation von transient elektromagnetischen (TEM) Daten von mehrdimensionalen Leitfähigkeitsverteilungen zu ermöglichen wird derzeit ein Inversionsprogramm am Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln entwickelt. Zeitersparnis wird vor allem dadurch erreicht, dass ein effektiver Gleichungslöser zur Vorwärtsrechnung benutzt wird. Ausserdem werden die Sensitivitäten explizit mit der Methode der adjungierten Green'schen Funktionen berechnet. Dies erlaubt eine schnelle Berechnung der Sensitivitäten für eine Vielzahl von Modellparametern direkt im Zeitbereich. Ein großer Vorteil den diese Berechnung der Jacobimatrix birgt, ist u.A. die Möglichkeit zu einer eingehenden Analyse der Sensitivitäten.

Einleitung

Im Gegensatz zu anderen Verfahren der elektromagnetischen Tiefenforschung (z.B. Magnetotellurik) ist bislang kein automatisches Verfahren zur iterativen Rekonstruktion mehrdimensionaler Leitfähigkeitsmodelle für die Interpretation transient elektromagnetischer (TEM) Daten vorhanden. Dies liegt größtenteils daran, dass die Vorwärtslösungen der diffusiven Felder sehr aufwendig zu berechnen sind. Die anregenden Ströme sind dreidimensional und die zeitabhängigen diffusiven Prozesse lassen sich explizit nur mit großem Rechenzeitaufwand [Hohmann und Raiche, 1988] oder implizit nur mit komplexen linearen Gleichungssystemen [Druskin und Knizhnermann, 1988; Weidelt, 2000] lösen. Zeitabhängige Vorwärtslösungen, die auf der Grundlage der finiten Elemente (FE) basieren, fehlen bislang.

Erste mehrdimensionale TEM-Inversionen sind mit der Methode der konjugierten Gradienten von Wang et al. [1994]; Newman und Commer [2005] erfolgt. Das von Newman und Com-

mer [2005] vorgestellte Verfahren ist jedoch aufgrund des verwendeten Zeitschrittverfahrens zur Vorwärtsrechnung der EM-Felder sehr zeitaufwendig und bislang nur auf Großrechnern realisiert. Ausserdem wurde auf die explizite Berechnung der Sensitivitäten verzichtet. Daher ist die Lösung der Normalengleichung mit diesen Verfahren nur mit einer umständlichen rekursiven Berechnung der Sensitivitäten (vergl. [Haber, 2005]) möglich.

In Folgenden wird ein schneller Inversionscode zur dreidimensionalen Leitfähigkeitsrekonstruktion aus TEM-Daten vorgestellt. Zeitersparnis wird vor allem dadurch erreicht, dass ein effektiver Krylov-Löser zur Berechnung von 3D-TEM-Modellantworten benutzt wird. Das Programm wurde prinzipiell für den Einsatz auf kleineren Linux-Clustern entwickelt und die hier vorgestellten Ergebnisse zeigen das große Potential der Methode.

Grundlagen

In der üblichen Nomenklatur ist die Lösung des Optimierungsproblems ein stationärer Punkt

¹Institut für Geophysik und Meteorologie der Universität zu Köln

²Department of Physics, University of Toronto

der Kostenfunktion

$$\Phi(\mathbf{m}, \beta) = \phi_d(\mathbf{m}) + \beta\phi_m(\mathbf{m}) \quad (1)$$

mit

$$\phi_d(\mathbf{m}) = \frac{1}{2} (\mathbf{d} - \mathbf{f})^\top \underline{\underline{\mathbf{W}_d}} (\mathbf{d} - \mathbf{f}) \quad (2)$$

und

$$\phi_m(\mathbf{m}) = \frac{1}{2} \mathbf{m}^\top \underline{\underline{\mathbf{W}_m}} \underline{\underline{\mathbf{W}_m}} \mathbf{m} \quad (3)$$

ϕ_d ist ein Maß für die Übereinstimmung zwischen den tatsächlich gemessenen Daten $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^N$ mit der Fehlerwichtungsmatrix $\underline{\underline{\mathbf{W}_d}}$ und den berechneten Modellantworten $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^N$ vom arbiträren Leitfähigkeitsmodell $\mathbf{m} \in \mathbb{R}_+^M$. Zur Vereinfachung wird angenommen, dass die Datenfehler unkorreliert und gaußverteilt sind. Demnach hat $\underline{\underline{\mathbf{W}_d}}$ Diagonalgestalt und ist mit den Standartabweichungen der Datenpunkte besetzt:

$$\underline{\underline{\mathbf{W}_d}} = \text{diag} \{ \sigma_n^{-1} \}, \quad n = 1, \dots, N \quad (4)$$

ϕ_m ist ein regulierendes Funktional, welches durch die Differentialoperatormatrix $\underline{\underline{\mathbf{W}_m}}$ "künstliche" Eigenschaften des Modells mißt (z.B. Glattheit). Diese werden dann in Form von Zwangs- oder Nebenbedingungen bei der Lösung des Optimierungsproblems berücksichtigt. β ist ein Lagrang'scher Multiplikator der das Verhältnis zwischen Regularisierung ϕ_m und Datenanpassung ϕ_d steuert.

Um eine Lösung des Optimierungsproblems von 1 zu erhalten werden i.d.R. nichtlineare iterative Inversionsverfahren im Modellraum angewendet (Newton-, quasi Newton-, Gauss-Newton- und deren spezielle Modifikationen) bei denen die Kostenfunktion für ein a-priori Modell $\mathbf{m}_{i=0}$ entwickelt wird. Dies beinhaltet, dass zu jedem Iterationsschritt i die $N \times M$ -dimensionale Jacobi- oder Sensitivitätsmatrix

$$\underline{\underline{\mathbf{S}}}_i = \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{m}_i)}{\partial \mathbf{m}}, \quad (5)$$

bzw. direkt der M -dimensionale Gradient der Kostenfunktion

$$\begin{aligned} \mathbf{g}_i &= \frac{\partial \Phi(\mathbf{m}_i, \beta)}{\partial \mathbf{m}} \\ &= -\underline{\underline{\mathbf{S}}}_i^\top \underline{\underline{\mathbf{W}_d}} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_i)) \\ &\quad + \beta \underline{\underline{\mathbf{W}_m}}^\top \underline{\underline{\mathbf{W}_m}} \mathbf{m} \end{aligned} \quad (6)$$

und die $M \times M$ -dimensionale Hessematrix

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\mathbf{H}}}_i &= \frac{\partial^2 \Phi(\mathbf{m}_i, \beta)}{\partial \mathbf{m}^2} \\ &= \underline{\underline{\mathbf{S}}}_i^\top \underline{\underline{\mathbf{W}_d}} \underline{\underline{\mathbf{S}}}_i - \frac{\partial^2 \mathbf{f}(\mathbf{m}_i)}{\partial \mathbf{m}^2} (\mathbf{d} - \mathbf{f}) \\ &\quad + \beta \underline{\underline{\mathbf{W}_m}}^\top \underline{\underline{\mathbf{W}_m}} \end{aligned} \quad (7)$$

oder deren Approximation (z.B.: $\underline{\underline{\mathbf{H}}} \approx \underline{\underline{\mathbf{S}}}^\top \underline{\underline{\mathbf{W}_d}} \underline{\underline{\mathbf{S}}} + \beta \underline{\underline{\mathbf{W}_m}}^\top \underline{\underline{\mathbf{W}_m}}$) berechnet werden müssen. Ausserdem muss zu jedem Iterationsschritt ein großes und dicht besetztes Gleichungssystem (Normalgleichung) der Form

$$\underline{\underline{\mathbf{H}}}_i \delta \mathbf{m}_i = -\mathbf{g}_i \quad (8)$$

zur Berechnung der Modellverbesserung $\delta \mathbf{m}_i$ gelöst werden, um ein neues Modell $\mathbf{m}_{i+1} = \mathbf{m}_i + \delta \mathbf{m}_i$ zu finden für welches die Konvergenzkriterien

$$\Phi(\mathbf{m}_{i+1}) / \Phi(\mathbf{m}_i) < \beta' \quad \text{und} \quad \|\delta \mathbf{m}_i\| > \beta'' \quad (9)$$

gelten.

Bei der Anwendung verschiedener Newton Verfahren muss entweder Gl. 5 oder direkt Gl. 6 sowie Gl. 7 berechnet und gespeichert werden. Ausserdem muss Gl. 8 gelöst werden. Für großskalige Probleme, bei denen $M \approx 10^{5-6}$ und $N \approx 10^{4-5}$ werden kann, ist die Lösung von Gl. 8 sehr aufwendig und entsprechend rechenzeintensiv. Um dennoch eine Optimierung von 1 zu erhalten wird bei großskaligen Problemen oft auf einfachere Gradienten Verfahren zurückgegriffen [Wang et al., 1994; Newman und Commer, 2005].

Modellantwort

Das Programm zur Berechnung von \mathbf{f} basiert

auf der spektralen Lanczos-Zerlegungsmethode (SLDM) von Druskin und Knizhnermann [1994]. Im folgenden wird kurz die Theorie zu diesem schnellen Gleichungslöser beschrieben, da diese nicht allgemein bekannt ist.

Es wird ein kartesisches Koordinatensystem

$$X = \{\mathbf{x}^i | i = 1, 2, 3\} \quad (10)$$

im euklidischen Vektorraum vorausgesetzt. Mit einer Vorwärtsrechnung wird die Änderung einer galvanisch oder induktiv gekoppelten Stromdichte $\mathbf{j}(X, t)$ in einem Körper der elektrischen Leitfähigkeit $\sigma(X)$ und magnetischen Permeabilität $\mu(X)$ simuliert. Die Änderung des Stroms als Funktion der Zeit verursacht elektromagnetische Wechselfelder im Medium, die den quasistationären Maxwellgleichungen

$$\nabla \times \mathbf{e}(t) + \mu \dot{\mathbf{h}}(t) = 0 \quad (11)$$

$$\nabla \times \mathbf{h}(t) - \sigma \mathbf{e}(t) = \mathbf{j}(t) \quad (12)$$

unterliegen. Hier bezeichnet \mathbf{e} und \mathbf{h} die zeitabhängigen elektrischen und magnetischen Feldstärken in X .

Nach Anwenden des Rotationsoperators auf Gl. 11 und einsetzen von Gl. 12 ergibt sich

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{e}(t) + \sigma \dot{\mathbf{e}}(t) = -\dot{\mathbf{j}}(t) \quad (13)$$

Bei den hier betrachteten Transientelektromagnetischen Methoden wird die Stromdichte zum Zeitpunkt $t = 0s$ abgeschaltet. Die Stromdichtefunktion lässt sich folglich ausdrücken als

$$\mathbf{j}(t) = -\sigma \mathbf{e}_0 \eta(t) \quad (14)$$

wobei \mathbf{e}_0 das elektrische Primärfeld des Senders bezeichnet und $\eta(t)$ als Heavyside Funktion

$$\eta(t) = \begin{cases} 0 & \text{für } t < 0, \\ 1 & \text{für } t \geq 0 \end{cases} \quad (15)$$

bekannt ist. Durch einsetzen in Gl. 13 erhält man

$$\nabla \times \nabla \times \mathbf{e} + \sigma \dot{\mathbf{e}}|_{t>0} = 0; \mathbf{e}|_{t \leq 0} = \mathbf{e}_0 \quad (16)$$

Um die zeitabhängigen und gekoppelten Maxwellgleichungen mit SLDM zu lösen müssen diese auf einem räumlich gestaffelten finite differenzen Gitter (fd-grid) [Yee, 1966] approximiert werden. Das fd-grid ist ein reguläres Gitter und wird durch das geordnete Tupel

$$X = \{x_0^i < x_1^i < \dots < x_{N^i}^i\} \quad (17)$$

mit den Randbedingungen

$$\hat{\mathbf{n}} \times \mathbf{e}|_{\partial X} = 0; \hat{\mathbf{n}} \times \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \hat{\mathbf{n}}}|_{\partial X} = 0 \quad (18)$$

definiert. Durch die Diskretisierung vereinfacht sich 16 zu

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}}\hat{\mathbf{e}} + \hat{\sigma}\hat{\mathbf{e}}|_{t>0} = 0; \hat{\mathbf{e}}|_{t \leq 0} = \hat{\mathbf{e}}_0, \quad (19)$$

Mit der diskretisierten Form des elektrischen Feldes $\hat{\mathbf{e}}$ und der diskretisierten Form des Differentialoperators

$$\underline{\underline{\mathbf{B}}} = \hat{\nabla} \times \frac{1}{\hat{\mu}} \hat{\nabla}, \quad (20)$$

Ausserdem werden beim SLDM die Feldgrößen und alle nötigen Differentialoperatoren mit den ebenfalls diskretisierten Leitfähigkeiten und Permeabilitäten gewichtet ("material averaging"). Dies ermöglicht es, dass die Parameterisierung von \mathbf{m} unabhängig vom fd-grid der Vorwärtsrechnung vorgenommen werden kann. Durch das material-averaging kann Gl. 19 zusätzlich in eine normalisierte Form gebracht werden

$$\underline{\underline{\mathbf{A}}}\mathbf{u} + \dot{\mathbf{u}}|_{t>0} = 0; \mathbf{u}|_{t \leq 0} = \mathbf{u}_0 \quad (21)$$

mit $\mathbf{u} = \sqrt{\hat{\sigma}}\hat{\mathbf{e}}$ und $\underline{\underline{\mathbf{A}}} = \frac{1}{\hat{\sigma}}\underline{\underline{\mathbf{B}}}\frac{1}{\hat{\sigma}}$. In Gl. 21 sind nun alle Größen unabhängig von der Leitfähigkeit und der Permeabilität formuliert. Nach Weidelt [2000] hat $\underline{\underline{\mathbf{A}}}$ die folgenden Eigenschaften:

- Symmetrisch

- Hochdimensional ($n \approx 3N^1N^2N^3$)
- nicht negative Eigenwerte
- Dünn besetzt (ausgenommen an den Randpunkten hat $\underline{\mathbf{A}}$ nur 13 nichtverschwindende Einträge pro Zeile/Spalte)

Die Lösung von Gl. 21 kann nun durch Anwenden der eleganten Spektralzerlegung nach Lanczos [1950] und mittels des Gram-Schmidt'schen Orthogonalisierungsverfahrens auf die Lösung eines Tridiagonalproblems zurückgeführt werden. Hierbei wird die Lösung von Gl. 21 in dem m -Dimensionalen Lösungsraum, dem Krylov-Raum, berechnet. Der Krylov Raum ist durch die Menge der Basisvektoren

$$\begin{aligned} K^m &= \text{Span} \{ \mathbf{u}_0, \underline{\mathbf{A}}^1 \mathbf{u}_0, \dots, \underline{\mathbf{A}}^{m-1} \mathbf{u}_0 \} \\ &= \text{Span} \{ \mathbf{q}_{i=1, \dots, m} \} \end{aligned} \quad (22)$$

definiert [Parlett, 1980] und Gl. 21 kann in K^m als Produkt von Matrix-Funktionalen der Steifigkeitsmatrix $\underline{\mathbf{A}}$ mit dem Vektor der Anfangsbedingungen beschrieben werden. Die Lanczos Spektralzerlegung erlaubt die Konstruktion einer approximierten Lösung von Gl. 21 durch die Wahl einer geeigneten Basis des Krylov Raumes, die mit dem Gram-Schmidt'schen Orthogonalisierungsverfahren

$$\underline{\mathbf{A}} \mathbf{q}_i = \beta_{i-1} \mathbf{q}_{i-1} + \alpha_i \mathbf{q}_i + \beta_i \mathbf{q}_{i+1} \quad (23)$$

bestimmt werden. Mit der Tridiagonalen Koeffizientenmatrix

$$\underline{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & \cdot & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \\ & \cdot & \cdot & \\ 0 & \cdot & \beta_{m-1} & \alpha_m \end{bmatrix} \quad (24)$$

und dem Ansatz

$$\mathbf{u} = \sum_{i=1}^m \mathbf{q}_i v_i \quad (25)$$

wird Gl. 21 auf das wesentlich einfacher zu lösenden Tridiagonalproblem

$$\underline{\mathbf{T}} \mathbf{v} + \dot{\mathbf{v}}|_{t>0} = 0; \quad \mathbf{v}|_{t \leq 0} = \mathbf{u}_0 \quad (26)$$

reduziert. Der Rechenzeitaufwand zur Lösung von Gl.25 entsteht im wesentlichen durch Matrix-Vektor-Multiplikationen und ist proportional zu m . Für EM Simulationen im Zeitbereich generieren konventionelle Zeitschrittverfahren, wie beispielsweise in Wang und Hohmann [1993] oder Newman und Commer [2005], Lösungen für eine feste Zeit t als ein Element von K^m mit viel größerem Rechenzeitaufwand. Dieser ist aufgrund der inherenten Stabilitätsbedingung proportional zu $h^{-2}t$ wobei h der kleinste räumliche Abstand (minimale Diffusionstiefe) im fd-grid bezeichnet. Im Gegensatz dazu Konvergiert das SLDM schon für $m = O \left[h^{-1} \sqrt{-\log(h)t} \right]$ [Druskin und Knizhnermann, 1989].

Sensitivitäten

Die Sensitivitätsmatrix wird mit zugeordneten (adjungierten) Greenschen Funktionen direkt im Zeitbereich berechnet. Betrachtet man eine Gitterzelle ijk , so kann nach Hördt [1998] die Sensitivität, die der n 'te Datenpunkt am Empfänger R aufgrund einer infinitesimalen Leitfähigkeitsänderung innerhalb des Volumenelements $\Delta V_{ijk} = \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k$ erfährt, durch die Konvolutionsgleichung

$$\frac{\delta f^R(t_n)}{\delta \sigma_{ijk}} = \int_{\mathbf{v}_{ijk}} \int_0^{t_n} \mathbf{g}_{ijk}^R(t_n - t') \mathbf{e}_{ijk}^p(t') dt' \Delta V_{ijk} \quad (27)$$

berechnet werden. Gleichung 27 ist die räumlich diskretisierte Formulierung der eigentlich kontinuierlichen, von Hördt [1998] hergeleiteten Gleichung. Bei der numerischen Berechnung beziehen sich die zu errechnenden Felder auf einen Gitterpunkt der Vorwärtslösung, daher ist es zweckmäßig, eine lokale Sensitivität

$$S_{ijk}(t_n) = \int_0^{t_n} \mathbf{g}_{ijk}^R(t_n - t') \mathbf{e}_{ijk}^p(t') dt' \quad (28)$$

einzuführen. Am Gitterpunkt ijk ist \mathbf{e}^p das von der Quelle angeregte elektrische Feld und

\mathbf{g}^R die Impulsantwort des Empfängers. \mathbf{g} verknüpft hier den Strom, der aufgrund der kleinen Leitfähigkeitsänderung bei ijk existiert, mit dem Empfänger. Die zugeordnete Impulsantwort lässt sich aufgrund des reziproken Feldverhaltens für alle Gitterpunkte berechnen, indem man die Impulsantwort am Gitterpunkt ijk berechnet, die von einer Einheits-Dipolquelle am Ort des Empfängers hervorgerufen wird. Je nach benutztem Empfänger ist die Quelle ein entsprechend orientierter elektrischer oder magnetischer Dipol. Die Impulsantwort lässt sich zusätzlich auf die Berechnung der Stufenantwort reduzieren [Hördt, 1998; Martin, 2003], was aufgrund des singulären Verhaltens der Impulsantwort in unmittelbarer Umgebung der Quellen numerische Vorteile hat [Martin, 2003].

Bei einer Inversion steht die schnelle Berechnung der Jacobimatrix im Vordergrund. Wenn keine a priori Informationen des Messgebiets vorhanden sind oder eine weitergehende Interpretation auf der Grundlage eines 1D-Modells durchgeführt wird, ist das Startmodell ein homogener oder geschichteter Untergrund. Für diese Kategorie von Startmodellen stellt die Berechnung von Sensitivitäten mit schnellen 1D-Lösungen eine sehr effiziente Methode dar, um die Berechnungszeit der Jacobimatrix erheblich zu reduzieren. Mit der diskreten Formulierung der von McGillivray et al. [1994] gezeigten Gleichung lassen sich frequenzabhängige Sensitivitäten

$$\frac{\delta f^R(\omega)}{\delta \sigma_{ijk}} = \int_{\mathbf{V}_{ijk}} \mathbf{e}_{ijk}^p(\omega) \mathbf{e}_{ijk}^R(\omega) \Delta V_{ijk} \quad (29)$$

lokal am Gitterpunkt ijk berechnen. Hier ist \mathbf{e}^p das frequenzabhängige Feld der Quelle für einen homogenen Halbraum oder geschichteten Untergrund mit einer infinitesimalen Leitfähigkeitsänderung am Gitterpunkt ijk . Ein Gitter ist für eine 1D-Vorwärtslösung eher unüblich, da prinzipiell zu jedem Punkt im Raum eine sehr genaue Lösung im Frequenz-Wellenzahlbereich berechnet werden kann. Die räumliche Diskretisierung der 1D-Lösungen richtet sich im Inversionsprogramm zur Vereinfachung nach fd-grid der 3D-Vorwärtsrechnung. Das frequenzabhängige adjungierte Feld \mathbf{e}^R wird berechnet in-

dem man eine dem Empfänger entsprechende Einheits-Dipolquelle am Ort des Empfängers installiert und entsprechend orientiert. \mathbf{e}^R ist daher das elektrische Feld am Gitterpunkt ijk vom Empfänger als Sender. Die lokale Sensitivität des Empfängers ist das Skalarprodukt aus Hintergrund- und adjungiertem Feld. Die Frequenzabhängigkeit der Sensitivität ist impliziert. Zur Transformation der im Frequenzbereich berechneten Sensitivitäten in den Zeitbereich wird eine schnelle Hankeltransformation unter Berücksichtigung des Einschaltvorgangs der Quelle durchgeführt.

$$S(t_n) = \tau_n \sum_{l=-\infty}^{\infty} \Im \left[\frac{\mathbf{e}^p(\omega_l) \mathbf{e}^R(\omega_l)}{i\omega_l} \right] \tilde{H}_{\frac{1}{2}}(n-l) \quad (30)$$

Mit $\tau_n = -(2/\pi)^{1/2} t_0^{-1} 10^{-n/10}$ und den Hankel-Koeffizienten $\tilde{H}_{\frac{1}{2}}$ [Anderson, 1989].

Mit den Gleichungen 27 und 29 ist es prinzipiell möglich kontinuierlich verteilte Sensitivitäten im gesamten Modellraum zu berechnen. Für die Sensitivitätsberechnung des geschichteten Untergrunds werden schnelle 1D-Vorwärtslösungen benutzt, die prinzipiell an jeder Stelle des Modellraums bestimmt werden können. Eine Beschränkung ist bei der Sensitivitätsberechnung mehrdimensionaler Leitfähigkeitsmodells nur durch das fd-grid der 3D-Vorwärtslösung gegeben, da es i.d.R. für einen speziellen Zeit-Tiefenbereich konstruiert ist.

Modellkovarianz

Um einen Einblick in die Auflösungseigenschaften der Inversion zu erlangen ist es zweckmässig die lineare Fehlerabschätzung der Modellparameter mit der Kovarianzmatrix [Menke, 1984]

$$\underline{\underline{\mathbf{C}}} = \left[\underline{\underline{\mathbf{S}}}^T \underline{\underline{\mathbf{W}_d}}^2 \underline{\underline{\mathbf{S}}} \right]^{-1} \quad (31)$$

durchzuführen. Da die Sensitivitäten zu jedem Iterationsschritt neu berechnet werden, jedoch die Speicherung und Inversion von $\underline{\underline{\mathbf{S}}}^T \underline{\underline{\mathbf{S}}}$ ein nicht-triviales Problem darstellt, verwenden wir in erster Näherung eine Vereinfachung für $\underline{\underline{\mathbf{S}}}^T \underline{\underline{\mathbf{S}}}$, indem die Summe der Hauptdiago-

nalelemente von $\underline{\underline{\mathbf{S}}}^T \underline{\underline{\mathbf{S}}}$ gebildet werden. Die normierten Überdeckung

$$c_m = \sum_{n=1}^N \frac{S_{nm}^2}{\sigma_n^2}; m = \dots, M \quad (32)$$

bzw. deren Inverses ist demnach wesentlich einfacher zu berechnen hat aber vollen Informationsgehalt für die Modellvarianz.

Lösung des Optimierungsproblems

Es sind derzeit zwei verschiedene Optimierungsstrategien realisiert. Für eine 2D-Inversion wird aufgrund des geringeren M 's die Normalengleichung 8 direkt gelöst [Scholl et al., 2004], während bei einer 3D Inversion ein einfaches gradienten Verfahren zur Minimierung der Kostenfunktion 1 implementiert ist. Die Entwicklung der Kostenfunktion um ein Startmodell wird beim Gradienten Verfahren nach der ersten Ordnung abgebrochen ($\underline{\underline{\mathbf{H}}} = \underline{\underline{\mathbf{I}}}$). Das Optimierungsproblem wird dann durch Hinzunahme des Schrittlängenparameters k gelöst. Dabei für verschiedene k und durch wiederholte Berechnung der Kostenfunktion $\Phi(\mathbf{m}_i + k\delta\mathbf{m}_i)$ deren Minimum über eine eindimensionale Suche bestimmt ("linesearch"). Dies ist auch als Methode des steilsten Abstiegs bekannt. Die Konvergenz der Methode des steilsten Abstiegs ist i.d.R. relativ schlecht und wird durch die Konjugierung der Gradienten eindeutig verbessert. Dabei wird der Gradient zu jeder Iteration senkrecht auf den der vorherigen Iteration projiziert (NLCG)

$$\delta\mathbf{m}_i = -(\mathbf{g}_i + \frac{\|\mathbf{g}_i\|}{\|\mathbf{g}_{i-1}\|} \mathbf{g}_{i-1}) \quad (33)$$

Dies nimmt dem Suchalgorithmus u.A. die Möglichkeit die gleiche Suchrichtung zweimal einzuschlagen und verbessert die Konvergenz deutlich.

Regularisierung

Es ist ratsam den Modellraum zu regularisieren, da das Optimierungsproblem nicht nur sehr stark vom Startmodell abhängt sondern von der Auflösung der einzelnen Parameter.

Eine geeignete Regularisierung kann beispielsweise durch die Nebenbedingung [Constable et al., 1987; Zhdanov, 2002]

$$\phi_m = \int_{\mathbf{V}} |\nabla^2 \mathbf{m}|^2 d\mathbf{V} = \min \quad (34)$$

erreicht werden. Da der Gradient der Kostenfunktion mit dieser zusätzlichen Bedingung gebildet wird, werden große Sprünge im Modell geglättet, d.h. der Lösungsraum wird künstlich verkleinert.

3D Inversion synthetischer Daten

Für erste Tests des 3D Inversionsalgorithmus zur automatischen Leitfähigkeitsrekonstruktion aus LOTEM Daten wurde in einem leitfähigen Halbraum ein gutleitender Körper mit einem Leitfähigkeitskontrast von 1/10 eingebettet. Für dieses Modell wurde ein synthetischer LOTEM-Datensatz von zwei Sender-Empfänger Konfigurationen mit dem 3D- Vorwärtslöser erzeugt und verrauscht. In Abb. 1 ist der gewählte Feldaufbau in einem Vertikalschnitt (xy-Ebene, oben) und einem Horizontalschnitt (yz-Ebene, unten) dargestellt. Eine Sender-Empfänger-Konfiguration besteht aus jeweils einem ein Kilometer langen geerdeten Bipol (T), dessen Stromsignal an jeweils 66 E_x -, H_y - und H_z -Empfängerpositionen (R) gemessen wurde. Die zum jeweiligen Sender gehörenden Empfänger wurden in der Abbildung in der gleichen Farbe (schwarz und grau) markiert. An jedem Empfänger wurde ein Transient zwischen 1 ms und 500 ms zu 10 Zeitpunkten pro Dekade simuliert (25 Datenpunkte pro Empfänger). Der gesamte Datensatz besteht demnach aus $N=9900$ Datenpunkten. In dem hier gezeigten Beispiel wurde der der Modellraum in $M=40572$ Blöcke unterteilt (Abb. 1).

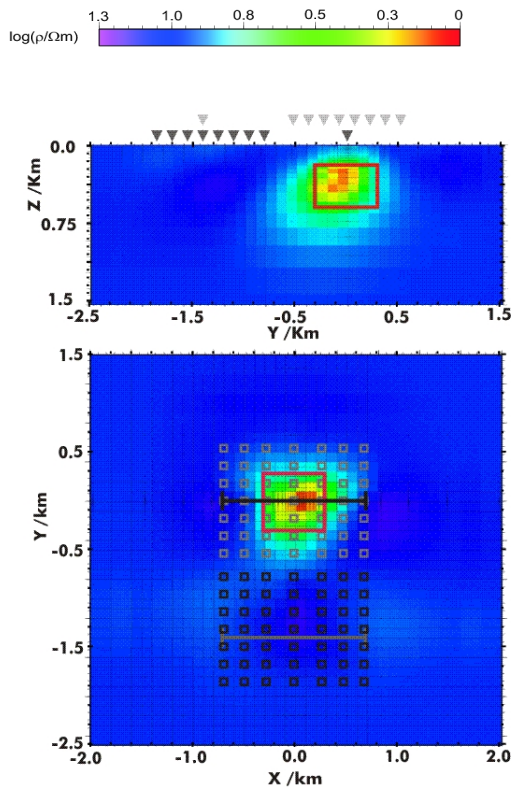


Abbildung 1: Ergebnis der 3D-Inversion mit NLCG nach 8 Iterationen (optimale Anpassung), ausgehend von einem homogenen $5\Omega\text{m}$ -Halbraum als Startmodell. Die Sender sind als grau/schwarze Linien im unteren (Horizontalschnitt bei $z=300\text{m}$) und als Dreiecke im oberen Bild (Vertikalschnitt bei $x=0\text{m}$) markiert. Die Abmessungen des Originalmodells sind in der jew. Abbildung rot umrandet.

Für den Test an synthetischen Daten wurde der Datensatz mit NLCG invertiert. Dazu wurde ein homogener $5\Omega\text{m}$ Halbraum als Startmodell benutzt. In Abb. 2 ist die Entwicklung der Anpassung als fehlergewichteter RMS $\chi = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \frac{(d_n - f_n)^2}{\sigma^2}}$ dargestellt. Je kleiner der Anpassungsfehler, desto größer ist die Übereinstimmung zwischen den simulierten Daten (\mathbf{d}) des Originalmodells und der Modellantwort (\mathbf{f}).

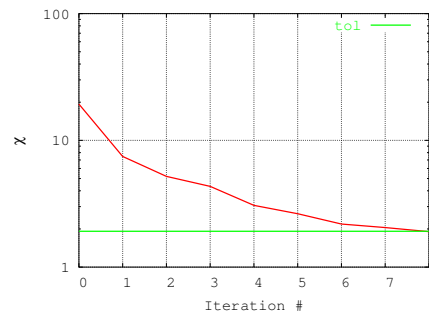


Abbildung 2: Entwicklung des Anpassungsfehlers der 3D-Inversion beim NLCG-Verfahren. tol ist die Anpassung, die mit dem Originalmodell erzielt wird.

Zur Berechnung der optimalen Anpassung (tol) wurde eine Vorwärtsrechnung mit dem Originalmodell angestellt und mit dem verrauschten Datensatz verglichen. Dass die optimale Anpassung nicht dem theoretischen Wert von 1 entspricht, ist darauf zurückzuführen, dass zur Simulation des Originalmodells ein anderes fd-grid benutzt wurde als das in der Inversion. Die große Dynamik der \dot{H}_y -Signale verursachen dann u.U. große systematische Rundungsfehler in der Vorwärtsrechnung. Die Regularisierung entspricht der aus Gl 34.

2D Inversion realer Daten

Im Rahmen des DESERT-Projekts wurden LOTEM-Messungen an der Araba-Störung zwischen dem Roten und Toten Meer durchgeführt. Als Ziel der LOTEM-Messungen galt es, bereits bestehende Ergebnisse von MT-Messungen zu verifizieren und darauf aufbauend, neue Informationen über den Tiefenbereich zwischen 100 m und 3 km zu erhalten. Außerdem sollten auch Untergrundbereiche mit hohen Widerständen erkundet werden, da die MT hierfür nicht sehr sensitiv ist.

Der Feldaufbau der LOTEM-Messung bestand aus vier Sendern mit jeweils einem Kilometer Länge und 65 Empfängern (E_x , \dot{H}_y und \dot{H}_z) die zu einem 2D Setup mit einer guten Überdeckung im Bereich der Störung zusammengefügt wurden. Die Streichrichtung der Störung liegt senkrecht zum LOTEM-Setup.

Das Ergebnis der 2D-Inversion ist in Abb. 3

dargestellt. Die Inversion wurde mit einer Modelldiskretisierung von 57×30 -Zellen durchgeführt und erreichte nach 8 Iterationen eine zufriedenstellende Anpassung. Das Ergebnis zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zu den Auswertungen der MT-Messungen von Ritter et al. [2003] und soll hier exemplarisch zeigen, dass eine 2D-Inversion mit Felddaten bereits erfolgreich durchgeführt wurde.

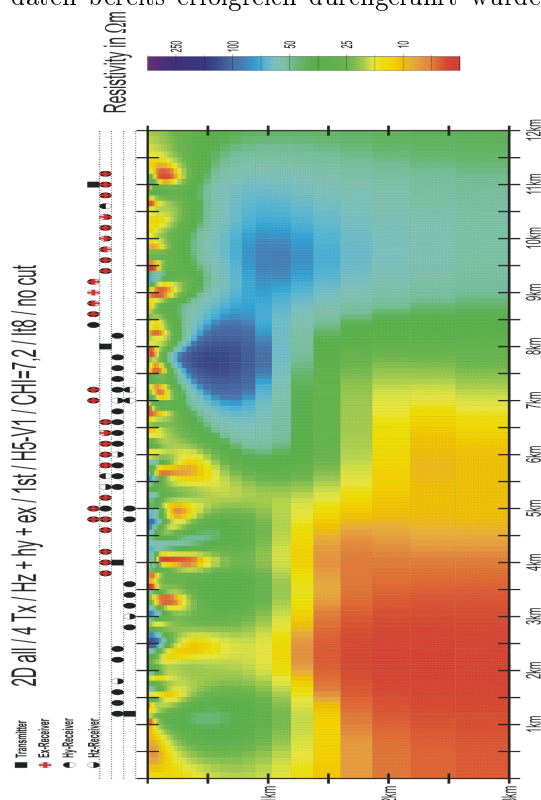


Abbildung 3: 2D-Inversionsergebnis der LOTEM-Messung im Rahmen des DESERT-Projekts. Die jew. Sender-Empfänger-Konfigurationen sind in der Kopfzeile der Abb. durch horizontale Linien voneinander getrennt und mit Symbolen kodiert. Das Regularisierungsverhältnis horizontal zu vertikal ist $h=5/v=1$ um vertikale Strukturen (insbes. die Verwerfung) deutlicher zu betonen. Als Regularisierung wurde eine Glättung erster Ordnung benutzt, um Sprünge im Modell stärker herauszuarbeiten. Der invertierte Datensatz bestand aus den gesamten Zeitreihen aller verfügbarer Empfänger ("no-cut") die alle mit einem Modell erklärt wurden. Ausgehend von einem homogenen $20 \Omega\text{m}$ -Halbraum als Startmodell wurde nach 8 Iterationen eine zufriedenstellende Anpassung von $\chi=7,2$ erreicht.

Diskussion

Da der Inversionscode primär für den Einsatz in mittelgroßen Linux-Clustern geschrieben wurde, ist der Anspruch an Speicher und Hauptprozessor im Bereich von normalen PC's anzusiedeln. Das Programm ist somit sehr gut für eine allgemeine Nutzung geeignet und nicht auf den Großrechnerbetrieb limitiert.

Die 2D/3d-Tests mit synthetischen und LOTEM-Felddaten zeigen, dass eine mehrdimensionale Inversion von TEM-Daten mit den hier vorgestellten Verfahren möglich ist. Für einen ersten Test zur 3D-Inversion diente eine stark vereinfachtes Modell, das mit dem Inversionscode zufriedenstellend rekonstruiert werden konnte. Die 2D-Inversion von realen Felddaten ist in sehr guter Übereinstimmung zu den Ergebnissen der MT-Messungen gelungen und lässt daher vermuten, dass dies mit 3D-Daten ebenfalls möglich ist.

Eine Gauss-Newton-Erweiterung bei der 3D Inversion zur Lösung der Normalgleichung mit effektiven CG-Verfahren ist prinzipiell möglich, wurde jedoch in der bisherigen Testphase noch nicht implementiert. Desweiteren wird derzeit an einer Erweiterung zur Interpretation von SHOTEM-Daten gearbeitet.

Literatur

- Anderson, W. L., 1989, A hybrid fast Hankel transform algorithm for electromagnetic modeling: *Geophysics*, **54**, no. 2, 263–266.
- Constable, S. C., Parker, R. L., und Constable, C. G., 1987, Occam's inversion: a practical algorithm for generating smooth models from em sounding data: *Geophysics*, **52**, 289–300.
- Druskin, V. L., und Knizhnermann, L. A., 1988, A spektral semi-discrete method for the numerical solution of 3d nonstationary problems in electrical prospecting: *Phys. Solid Earth*, **24**, 641–648.
- Druskin, V. L., und Knizhnermann, L. A., 1989, Two polynomial methods for computation of function of symmetric matrices: *J.*

- Comp. Math. Mathemat. Phys., **12**, in Russian.
- Druskin, V. L., und Knizhnermann, L. A., 1994, Spectral approach to solving three-dimensional maxwell's diffusion in the time and frequency domains: Radio Science, **29**, 937–953.
- Haber, E., 2005, Quasi-newton methods for large-scale electromagnetic inverse problems: Inverse Problems, **21**, 305–323.
- Hohmann, G. W., und Raiche, A. P., 1988, Electromagnetic methods in applied geophysics : Soc. Expl. Geophys., 469–503.
- Hördt, A., 1998, Calculation of electromagnetic sensitivities in the time domain: Geophys. J. Int., **133**, 713–720.
- Lanczos, C., 1950, An iteration method for the solution of the eigenvalue problem of linear differential and integral operators: J.Res.Nat.Bur.Standards, **45**, 225–280.
- Martin, R., 2003, Realisierung von laufzeitoptimierten Methoden zur Bestimmung der 3D-TEM-Jacobimatrix: Diplomarbeit, Universität zu Köln, Institut für Geophysik und Meteorologie.
- McGillivray, P., Oldenburg, D., Ellis, R., und Habashy, T., 1994, Calculation of sensitivities for the frequency-domain electromagnetic problem: Geophys. J. Int., **116**, 1–4.
- Menke, W., 1984, Geophysical data analysis: discrete inverse theory: Academic Press inc.
- Newman, G. A., und Commer, M., 2005, New advances in three dimensional transient electromagnetic inversion: Geophys. J. Int., **160**, 5–32.
- Parlett, B., 1980, The symmetric eigenvalue problem: Prentice Hall.
- Ritter, O., Ryberg, T., Weckmann, U., Hoffmann-Rothe, A., Abdueladas, A., und Garfunkel, Z., 2003, Geophysical images of the Dead Sea Transform in Jordan reveal an impermeable barrier for fluid flow: Geophys. Res. Lett., **30**, no. 14, 1–4.
- Scholl, C., Martin, R., Commer, M., Helwig, S. L., und Tezkan, B., 2004, 2D-Inversion von LOTEM-Daten, Dt. Geophys. Gesellschaft, Protokoll über das 20. Kolloquium Elektromagnetische Tiefenforschung.
- Scholl, C., 2001, Die periodizität von sendesignalen bei long offset transient electromagnetics: Diplomarbeit, Universität zu Köln, Institut für Geophysik und Meteorologie.
- Wang, T., Oristaglio, M., Tripp, A., und Hohmann, G. W., 1994, Inversion of diffusive transient electromagnetic data using conjugate-gradient method: Radio Science, **29**, 1143–1156.
- Wang, T., und Hohmann, G. W., 1993, A finite-difference, time-domain solution for three-dimensional electromagnetic modeling: Geophysics, **58**, 797–809.
- Weidelt, P., 2000, Numerical modelling of transient-electromagnetic fields in three-dimensional conductors: A comparative study *in* und J.B. Stoll, A. H., Hrsg., Elektromagnetische Tiefenforschung, 18. Kolloquium:: Dt. Geophys. Gesellschaft, 216–231.
- Yee, K. S., 1966, Numerical solutions of initial boundary problems involving maxwell's equations in isotropic media: IEEE Trans. Antennas Propag., **AP-14**, 302–309.
- Zhdanov, M., 2002, Geophysical inverse theory and regularization problems: Elsevier.

Appendix: Transformationen

Sind die aufzulösenden Parameter Widerstände, so muss berücksichtigt werden, dass mittels Gl. 27 oder Gl. 29 Sensitivitäten bzgl. der reziproken Widerstandsänderung bestimmt werden. Dabei ist

$$\partial\sigma = \partial(m^{-1}) = -m^{-2}\partial m$$

Bei der Inversion werden zudem die Transformationen $\mathbf{f} \rightarrow tr(\mathbf{f})$ und $\mathbf{m} \rightarrow ln(\mathbf{m})$ durchgeführt. Für Daten mit Vorzeichenwechsel stellte sich Area-Sinus-Hyperbolicus als geeignete Transformationsfunktion heraus [Scholl, 2001]. Die Transformationen führen i.d.R. zu einer stabileren Inversion. Die Transformation der Sensitivitätsmatrix ist dann gegeben durch:

$$\frac{\partial(tr(\mathbf{f}))}{\partial(ln(\mathbf{m}))} = -\frac{\mathbf{m}}{\mathbf{m}^2} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \sigma} \frac{\partial tr(\mathbf{f})}{\partial \mathbf{f}}$$