

Zeitreihenauswertung von NMR Messungen im Erdmagnetfeld

Tino Radić (Berlin)

www.radic-research.de

Einleitung

Die NMR (Nuclear Magnetic Resonance) Methode ist in den letzten 10 Jahren zum festen Bestandteil des geophysikalischen Messrepertoires geworden. Nicht zuletzt weil sie eine zerstörungsfreie Bestimmung von Porenradienverteilungen und Wassergehalten von Gesteinen des Untergrundes ermöglicht.

Dabei haben sich zwei Haupteinsatzfelder haben sich etabliert:

1. Messungen an Laborproben bei mittleren und hohen Magnetfeldstärken (0.01 - 7 T)
2. Tiefensondierende (SNMR) Feldmessungen im schwachen Erdmagnetfeld (50 μ T)

Interessanterweise klafft zwischen beiden Einsatzfeldern eine große Lücke. So fehlten bisher Messgeräte für:

- SNMR Messungen mit Spulendurchmesser <10 m,
- Messungen an Probenmaterial im Erdmagnetfeld

Hiermit ließen sich:

- Probenmaterialien bei der gleichen Feldstärke vermessen wie der Untergrund (SNMR)
- Probenmaterialien im Gelände vermessen, ohne Transportschäden zu riskieren
- die vadosen Zonen des oberflächennahen Untergrundes erkunden

Verantwortlich für diese Situation sind vor allem messtechnische Probleme. So sind in diesen Fällen einerseits die Signalamplituden sehr klein und andererseits die natürlichen und, vor allem in dicht besiedelten Gebieten, technischen Störsignalpegel vergleichsweise sehr groß.

Bedauerlicher Weise erlauben die verfügbaren NMR Messgeräte (NUMIS, HydroScope) keine Aufzeichnung der primären Zeitreihen, so das eine gezielte Störsignalanalyse und Unterdrückung bisher nicht möglich ist. Im Folgenden wird daher eine neu entwickelte NMR Messapparatur vorgestellt, die es erlaubt solche Zeitreihen im Erdmagnetfeld aufzuzeichnen und eine NMR spezifische Zeitreihenanalyse durchzuführen. Das modulare Messgerät kann sowohl zu Messungen an Probenmaterialien (Radić, 2005), als auch zu SNMR Messungen mit kleinen Spulendurchmessern verwendet werden. Letzteres stellt besonders hohe Anforderungen an die Messtechnik und die Zeitreihenverarbeitung und ist Gegenstand nachfolgenden Erfahrungsberichtes.

Grundprinzip der NMR Messung

Grundlage der NMR Methode sind die kernmagnetischen Spins der Atome. In der Geophysik spielen vor allem die ^1H Wasserstoffprotonen eine dominante Rolle, da sie wichtiger Bestandteil des Porenraumfluids (Grundwasser evtl. mit Kohlenwasserstoffen kontaminiert) sind. Die Spins sind im Ruhezustand parallel zum Erdmagnetfeld B_E orientiert. Mittels eines zusätzlichen künstliche Feldes können sie jedoch ausgelenkt werden. Wird dieses Feld abgeschaltet, dann benötigen sie bis zu einigen Sekunden um in ihre Ruhelage zurückzukehren. Dieser Relaxationsvorgang ist begleitet von einer Präzessionsbewegung der Spins im Erdmagnetfeld. Die charakteristische (Larmor) Frequenz f_0 ist nur von der Feldstärke abhängig und beträgt im Erdfeld etwa 2 kHz (Gln. 1).

$$2\pi f_0 = \gamma_p B_E \quad \gamma_p = 0.267 \cdot 10^9 \text{ Hz/T} \quad ^1\text{H Larmor Frequenz} \quad (1)$$

$$E(t) = E_0 \sin(\omega_0 t) e^{-\frac{t}{T_2^*}} \quad \text{Free Induction Decay (FID)} \quad (2)$$

Mit Gleichung 2 kann der FID mathematisch beschrieben werden. Das Signal kann mit einer Induktionsspule gemessen werden. Seine Anfangsamplitude E_0 ist direkt proportional zur Protonendichte und damit zum Wassergehalt im Boden bzw. im Probengestein. Freies

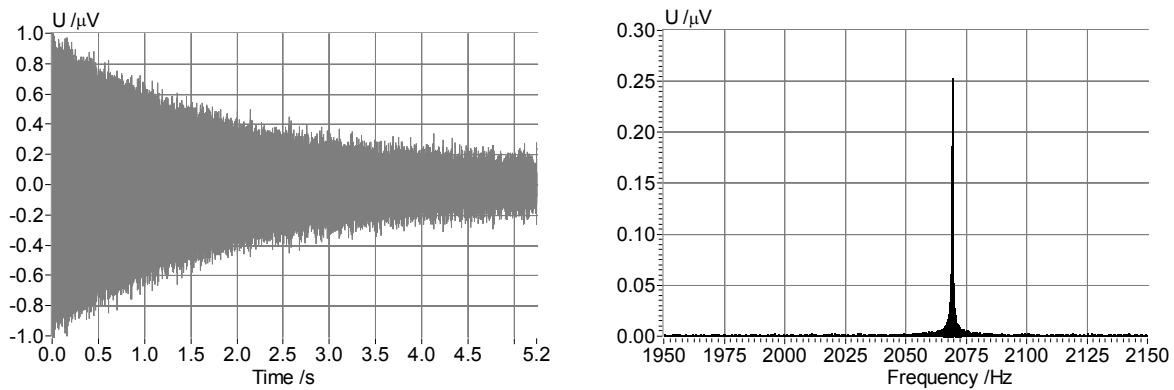


Abb. 1: Im Erdmagnetfeld an 120 ml Wasser gemessener FID. Links: Zeitreihe, rechts: Spektrum. Technische Information zum Messgerät: www.radic-research.de/nmr-mini.html.

Wasser weist eine Relaxationszeit von bis zu 3 Sekunden auf. Befindet sich das Wasser hingegen in einem engporigen Gestein, dann ist die Relaxationszeit (T_2) vermindert und lässt so Rückschlüsse auf die Porenradienverteilung zu (Mohnke et al., 2004). Allerdings beeinflusst auch die Viskosität, sowie der Gehalt an gelösten paramagnetischen Salzen (meist Schwermetallsalze) die Relaxationszeit (Radić, 2005).

Abbildung 1 zeigt exemplarisch den an einer Wasserprobe registrierten Relaxationsvorgang.

Tiefensondierende SNMR Methode

Die NMR Methode kann auch im Feldmaßstab eingesetzt werden. Abbildung 2 zeigt die hierbei am häufigsten verwendete Spulenkonfiguration. Die Anregungs- (rot) und die Empfangs Loop (schwarz) werden ebenerdig ausgebracht und haben bisher einen Durchmesser von 20-100 m. Bei Stromstärken von bis zu 200 A werden Anregungsfeldstärken von $\sim 1 \mu\text{T}$ erreicht, was 2%

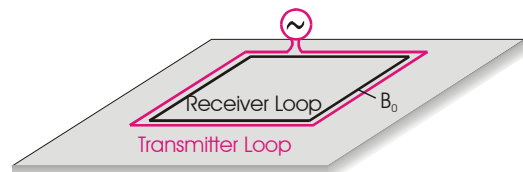


Abb. 2: Typische SNMR Messkonfiguration.

der Stärke des Erdmagnetfeldes entspricht. Die Protonenauslenkung erfolgt mittels resonanter Anregung. Hierzu wird ein vertikal orientiertes monofrequentes magnetisches Feld erzeugt, dessen Frequenz mit der aktuellen, lokalen Larmor Frequenz übereinstimmen muss. Nach etwa 40 ms (~ 80 Perioden) sind ein Teil der Protonen des Untergrundes um 90° aus ihrer ursprünglichen Richtung ausgelenkt. Dieser Teil liefert den größten Beitrag zum FID Signal, das nach dem Ende der Anregung registriert werden kann. Bei einer hohen Anregungsstromstärke liegt der Bereich mit 90° Auslenkung in einer größeren Tiefe, als bei einer niedrigen Stromstärke. Diese Eigenschaft der SNMR Methode erlaubt es, in Verbindung mit einer Inversionsrechnung, eine quantitative Tiefenaussage zu treffen.

Die Anfangsamplitude E_0 des FID ist mit einigen 10 fT etwa um 8 Größenordnungen kleiner als die Anregungsamplitude. Setzt man diesen Pegel in Relation zu den bei ~ 2 kHz auftretenden natürlichen und technisch bedingten meist räumlich kohärenten Störsignalpegeln, dann gelangt man häufig zu S/R-Verhältnissen $\ll 1$. Die Datenqualität ist in diesen Fällen unbefriedigend.

Minderung kohärenter Störsignale

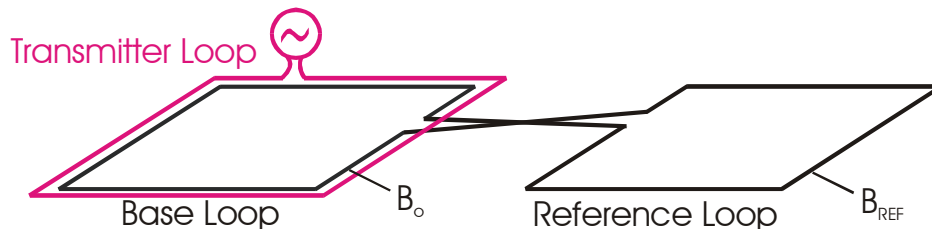
Zur Erhöhung des S/R Verhältnisses empfiehlt der Hersteller der NUMIS Apparatur (IRIS Instruments) eine „8 shaped loop“ (Abb. 3a) zu verwenden. Hiermit lässt sich ein homogenes Störfeld vollständig unterdrücken. In der Praxis zeigt sich jedoch, dass der Grad der Verbesserung nicht selten trotzdem noch unzureichend ist, zeitlich variiert und zudem von Messpunkt zu Messpunkt sehr unterschiedlich ausfällt.

Erklären lässt sich dies, wenn man die Eigenschaften von elektromagnetischen Feldern in Gegenwart eines elektrisch leitenden Untergrundes berücksichtigt.

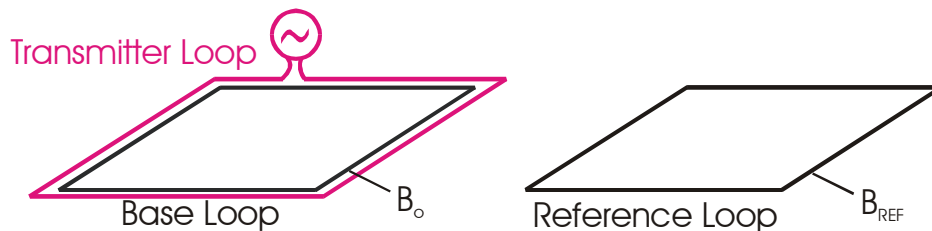
- Ein Störsignal am Ort der Basis Loop ist im allgemeinen nicht identisch mit dem am Ort der Referenz Loop. So verzerren Leitfähigkeitsinhomogenitäten im Untergrund das ursprünglich evtl. homogene Störfeld. Im Nahfeld nimmt zudem die Geometrie der Störquelle Einfluss auf die Störfeldgeometrie.
- Ein Störsignal am Ort der Basis Loop muss nicht zwingend trivial mit dem am Ort der Referenz Loop korreliert sein. Häufig setzt sich das Störfeld aus mehreren unabhängigen Komponenten zusammen. Im allgemeinen sind die Beiträge der einzelnen Störkomponenten an der Basis- und an der Referenz Loop unterschiedlich groß und heben sich daher nicht wechselseitig auf. In ungünstigen Fällen kann sich sogar der Pegel des Störsignals, bei Verwendung einer „8 shaped loop“, erhöhen.

Offensichtlich muss die Referenztechnik flexibler angewandt werden, um den in der Praxis auftretenden komplexeren Verhältnissen gerecht zu werden. In Abbildung 3b wird der Fall einer unabhängigen Referenz Loop wiedergegeben. In Verbindung mit einem zusätzlichen eigenständigen Messkanal eröffnet dies die Möglichkeit auch dann ein Störsignal effektiv zu unterdrücken, wenn sich die Amplituden und Phasen an beiden Orten unterscheiden. Hierzu ist eine univariate Ausgleichrechnung erforderlich, die im Ergebnis die Übertragungsfunktion des Störfeldes zwischen den beiden Orten ermittelt. Noch universeller ist die Verwendung zweier Referenz Loops die die beide Komponenten des horizontalen Magnetfeldes messen (Abb. 3c).

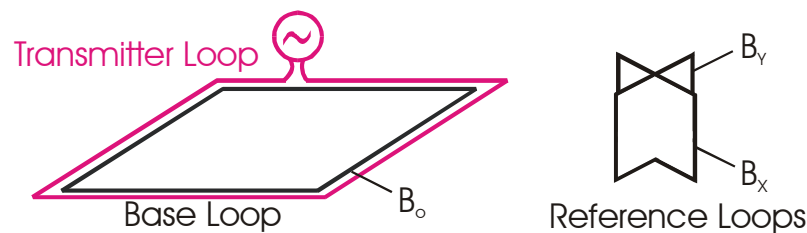
Man könnte die Übertragungsfunktion vor der NMR Messung bestimmen und dann bei der nachfolgenden NMR Messung verwenden um, wieder mit Hilfe der Referenzkanäle, das Störsignal an der Basis vorherzusagen und abzutrennen. Voraussetzung hierfür ist jedoch, dass die Übertragungsfunktion zumindest für diesen Zeitraum konstant ist. Entsprechende Versuche wurden erfolgreich durchgeführt. Eine etwas schnellere Methode besteht darin, die Übertragungsfunktion allein aus der NMR Messung zu bestimmen. Grundlage hierfür sind die



(a) 8 shaped loop (NUMIS)



(b) Unabhängige Referenz Loop



(c) Allgemeine Referenztechnik

Abb. 3: Spulenkonfigurationen zur Unterdrückung räumlich kohärenter Störsignale.

B_0 :	Gemessenes Gesamtsignal an der Basis Loop
B_0^N :	Vorhersagbarer Signalanteil in B_0
δB_0 :	Nicht vorhersagbarer Signalanteil in B_0
B_{FID} :	NMR Signal in B_0
B_X :	X-Komponente des Störsignals an der Referenz Loop
B_Y :	Y-Komponente des Störsignals an der Referenz Loop
T_X :	X-Komponente der Übertragungsfunktion des mag. Störfeldes
T_Y :	Y-Komponente der Übertragungsfunktion des mag. Störfeldes

synchron registrierten Zeitreihen: $B_0(t)$, $B_X(t)$, $B_Y(t)$. Von $B_0(t)$ erwarten wir, dass es sich aus drei Anteilen zusammensetzt:

1. dem gesuchten NMR Signal B_{FID} ,
2. einem räumlich kohärenten Störsignal B_0^N und
3. einem nicht vorhersagbaren Störsignal δB_0

Die an den beiden Referenzstationen registrierten Signale sollten sich idealer Weise nur aus Anteilen des räumlich kohärenten Störsignals zusammensetzen. Zur Vorhersage der Störsignalanteile an der Basis bietet sich die bivariate Ausgleichsrechnung an. Die bivariate Ausgleichsrechnung wird in der magnetotellurischen Zeitreihenanalyse häufig genutzt, daher sei hier der verwendete lineare Ansatz nur skizziert (Gln 3).

$$B_0 = T_X B_X + T_Y B_Y + \delta B_0 \quad (3)$$

Die Übertragungsfunktion (T_X , T_Y) des Störsignals ist eigentlich nur ein Nebenprodukt, dass zwar mit dem magnetotellurischen Tipper identisch ist, im Zusammenhang mit der NMR-Messung jedoch nicht von unmittelbarer Bedeutung ist.

Im nächsten Schritt werden die vorhersagbaren Störsignalanteile von B_0 abgetrennt (Gln. 4).

$$B_{\text{FID}} + \delta B_0 := B_0 - (T_X B_X + T_Y B_Y) \quad (4)$$

Der verbleibende Rest enthält das gesuchte, mehr oder minder verrauschte, Nutzsignal B_{FID} . Damit diese Vorgehensweise zulässig ist, müssen folgende Voraussetzungen erfüllt sein:

1. Das NMR Signal muss an der Referenz Loop vernachlässigbar klein sein,
2. Das NMR Signal muss an der Basis Loop klein gegen das Störsignal sein.

Die erste Bedingung ist erfüllt, wenn die Referenz Loop hinreichend weit von der Basis Loop entfernt ist. Die zweite Bedingung ist meistens erfüllt, wenn a) die technische Störfelder gegenüber den natürlichen dominieren und b) die Registrierung deutlich länger andauert als das exponentiell abklingende NMR Signal. Typische T_2^* Abklingzeiten betragen einige 100 ms. Sollten die Bedingungen nicht erfüllt sein, dann ist die NMR Amplitude systematisch verfälscht.

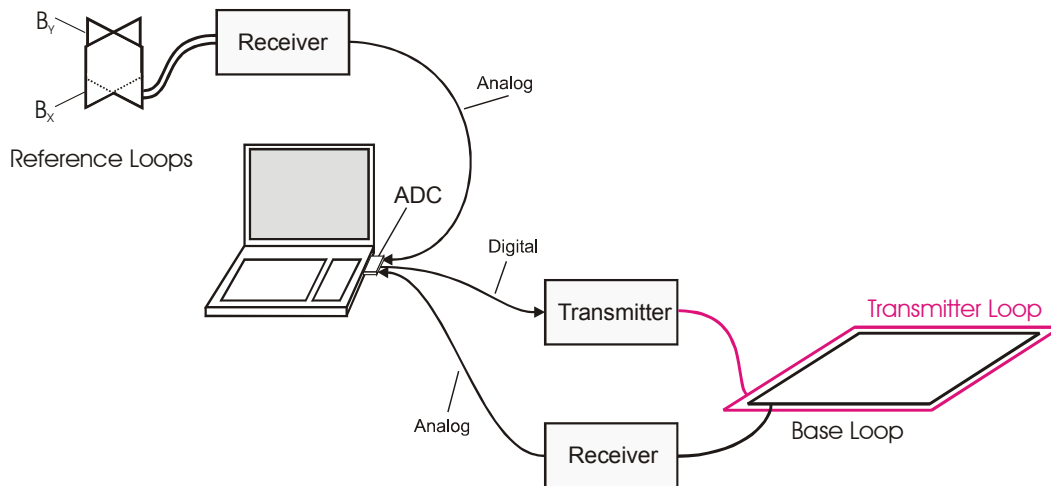


Abb. 4: Blockbild der für die Feldversuche benutzten Hardware (NMR-MIDI).

„NMR-MIDI“ - Hardware zur SNMR Tiefenerkundung

Das Blockbild in Abbildung 4 zeigt die von uns für die SNMR Messungen verwendete Hardware. Das modulare Messsystem besteht aus einem Steuerrechner (Notebook), einem SNMR Transmitter, sowie drei eigenständige Messkanäle. Jeder dieser Messkanal verstärkt, filtert und digitalisiert die Signale einer angeschlossenen kernlosen Induktionsspule. Zur Digitalisierung wird eine PCMCIA AD-Wandlerkarte mit 16 Bit Auflösung und je 60 kHz Abtastrate eingesetzt.

Die quadratische Basis Loop weist eine Kantenlänge von 10 Metern auf. Bei 10 Windungen ergibt sich so eine Empfangsfläche von 1000 m². Entsprechend Abbildung 3c sind die beiden Referenzspulen (Abb. 5) so orientiert, dass sie die beiden Horizontalkomponenten des Störsignals empfangen. Sie verfügen derzeit über je 105 Windungen und messen 1 m x 1 m. Der Abstand zwischen der Basis und der Referenz Loops beträgt derzeit 30 Meter.

Feldtest am Standort Nauen

Für den im folgenden vorgestellten Feldtest wurde der etwa 40 km westlich von Berlin gelegene Standort Nauen gewählt. Der Standort wird seit mehreren Jahren vom geophysikalischen Institut der TU Berlin (Arbeitsgruppe Prof. Yaramanci) für vielfältige methodische Untersuchungen genutzt. Seit etwa 2004 werden die SNMR Messungen (NUMIS Apparatur) jedoch durch die angestiegenen Störpegel der nur 3 km entfernten ICE Bahntrasse stark erschwert.

Abbildung 6 zeigt exemplarisch die bei einer NMR Messung registrierten drei Zeitreihen. Während der ersten 40 ms ist das Messsignal vom Anregungssignal (hier 2092.93 Hz) überlagert. Da für die Zeitreihenanalyse nur der Zeitraum nach dem Ende der Anregungsphase bedeutsam ist, können die ersten 55 ms der Registrierungen entfernt werden. 15 ms hiervon dienen als Sicherheitsabstand zum Anregungssignal, um zu gewährleisten, dass dieses vollständig abgeklungen ist.

Die Darstellungen in Abbildung 6 geben die Spannungspegel an den drei Loops wieder. Berücksichtigt man, dass die Basis Loop eine 10-fach größere Empfindlichkeit aufweist als die Referenz Loops, dann folgt

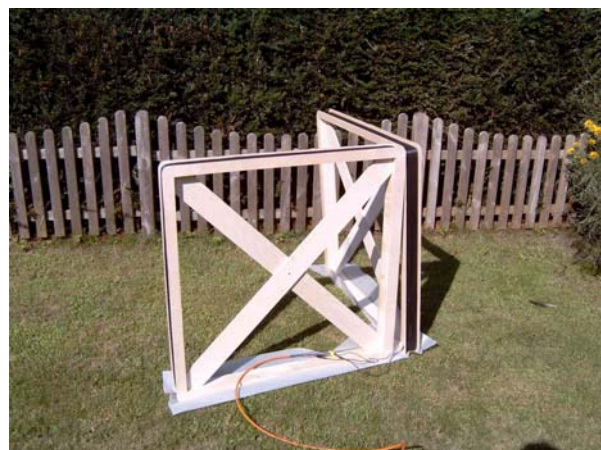


Abb. 5: Referenz Spulen zur Messung der beiden Horizontalkomponenten des magnetischen Störfeldes.

hieraus, dass das Störfeld (wie erwartet) nahezu horizontal orientiert ist.

Abbildung 7 (unten) gibt das Amplitudenspektrum des mit der Basis Loop gemessenen Signals wieder. Es zeigt sich, dass es sich vor allem aus technische Störspannungen zusammensetzt - erkennbar an den charakteristischen Oberwellen von 50 Hz und $16^{2/3}$ Hz. Ein analoger Bandpass Filter unterdrückt Signalanteile unterhalb von 1 kHz und oberhalb von 3 kHz.

Das Ergebnis der bivariaten Ausgleichsrechnung ist in Abbildung 7 (mitte) als Zeitreihe und darunter als Amplitudenspektrum (rot) wiedergegeben. Dieses Signal ist etwa 20-fach kleiner als das ursprünglich gemessene Signal. Offensichtlich setzte es sich zu mindestens 95 % aus kohärentem Noise zusammen.

Leider war der Störsignalpegel immer noch zu hoch um das Nutzsignal erkennen zu können. Aus diesem Grund wurde die Messung mehrfach wiederholt und die mittels der Referenztechnik verbesserten Zeitreihen gestapelt. Ein Stapeln ist möglich, da das NMR Signal im Gegensatz zu den Störsignalen zeitlich konstant und mit dem Anregungssignal synchronisiert ist. Die Larmor Frequenz variierte während der gesamten Messung in Nauen um weniger als 0.5 Hz. Eine vier Sekunden andauernde Einzelmessung, einschließlich der zugehörigen Ausgleichsrechnung, dauert etwa 10 Sekunden (Toshiba Tecra, 2.0 GHz).

Abbildung 8 (rot) zeigt das Ergebnis nach 16-fachem Stapeln. Tatsächlich kann bei der Larmor Frequenz jetzt ein eindeutiges Amplitudenmaximum beobachtet werden. Zum Vergleich ist das Amplitudenspektrum einer unbearbeiteten Einzelmessung dargestellt. Da das NMR Signal (FID) exponentiell abklingt, ist es in diesem Fall nur während der ersten 400 ms nachweisbar. Abbildung 9 zeigt diesen Zeitabschnitt nach einer Bandpassfilterung. Erst die BP-Filterung lässt das exponentiell abklingende NMR Signal (FID) auch im Zeitbereich sichtbar werden.

Der letzte Bearbeitungsschritt dient der quantitativen Auswertung des NMR Signals. Mittels einer Abschnittweisen Kreuzkorrelation mit einem larmorfrequentem Sinussignal wird dessen zeitabhängige Amplitude berechnet. Die sich so ergebende Hüllkurve kann mit einer Exponentialfunktion angepasst werden. Hierzu wurde ein Levenberg Marquardt Algorithmus verwendet. Die ermittelten NMR Parameter (Abb. 9) stimmen in etwa mit den von der TU-Berlin in Nauen gemessenen überein (Yaramanci, 2004). Abweichungen, wie die niedrigere Amplitude und die kürzere Relaxationszeit, rühren wahrscheinlich daher, dass ein kleinerer Loop Durchmesser verwendet wurde und die Schwerpunktstiefe folglich flacher lag, nämlich teilweise schon in der vadosen Zone.

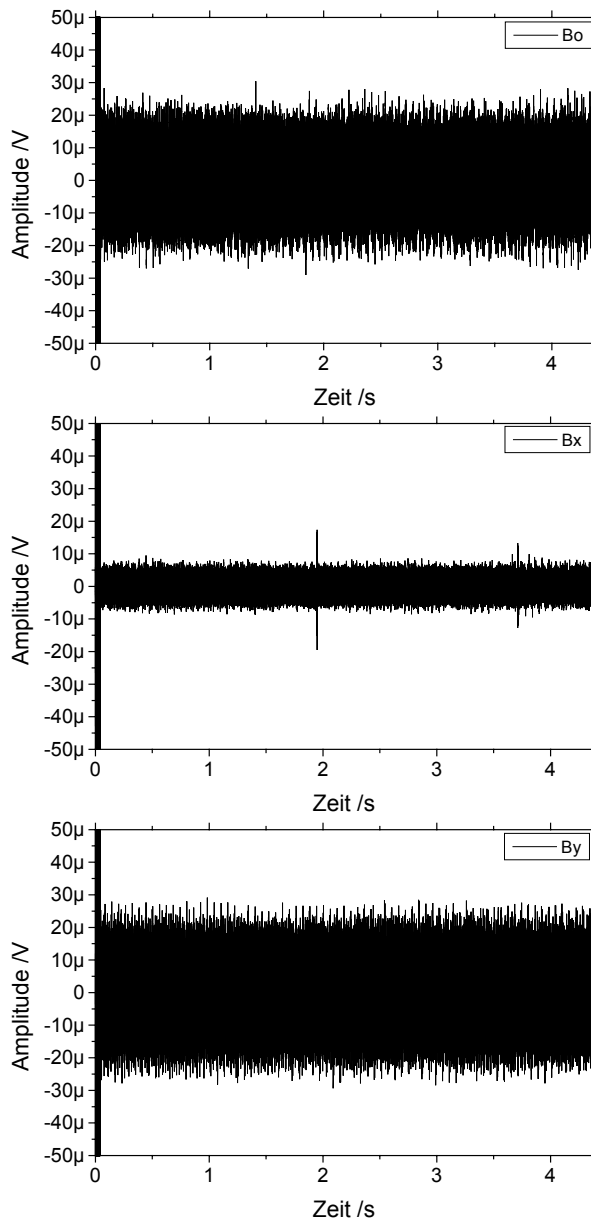


Abb. 6: Registrierbeispiel vom Standort Nauen. Die ersten 40 ms sind vom Anregungssignal (2092.93 Hz) überlagert.

Datum: 22.2.2006
 Datensatz: m3.dat
 Messwerte: 262144

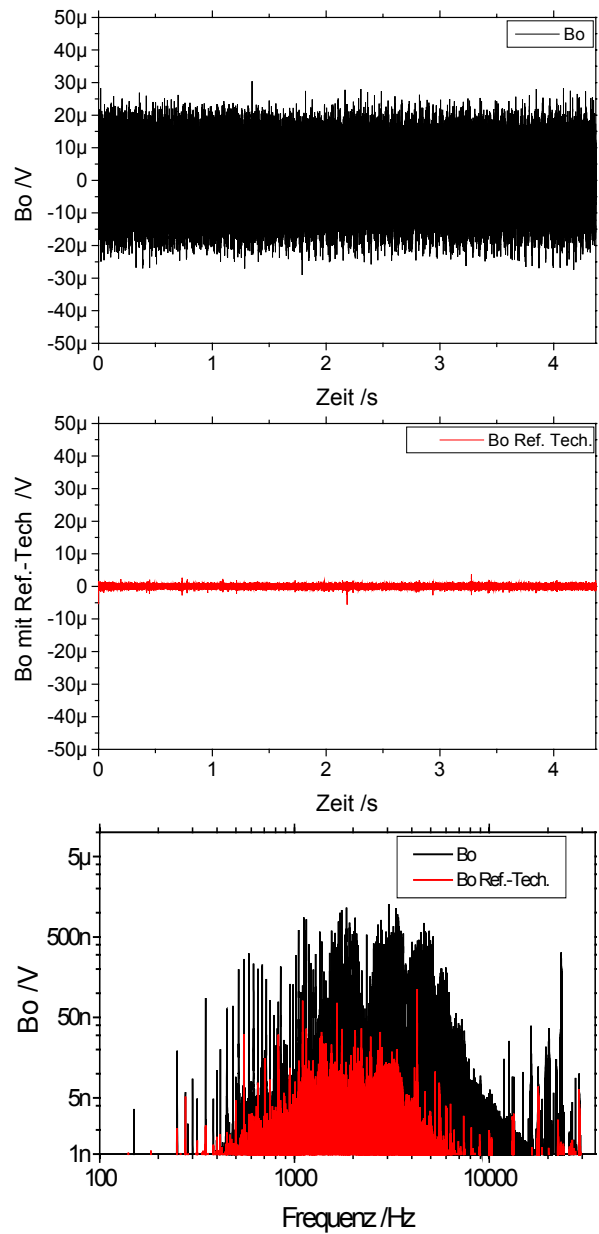


Abb. 7: Analyse der Zeitreihen aus Abb. 6. Mitte: Zeitreihe der Basis nach Beseitigung der mittels der Referenzkanäle vorhersagbaren Störsignalanteile. Unten: Amplitudenspektren der oberen und mittleren Zeitreihe.

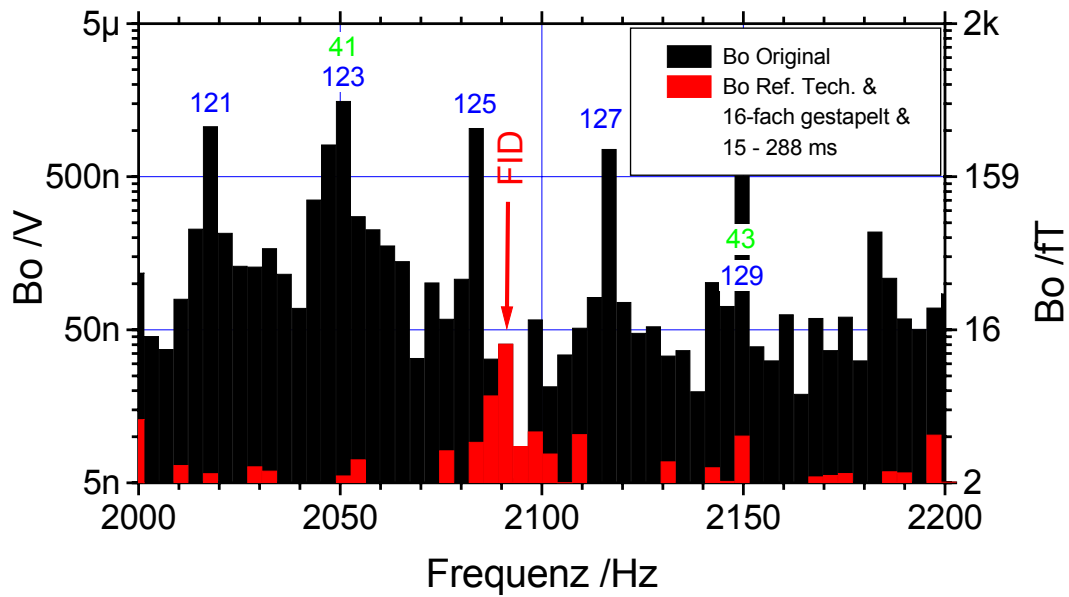


Abb. 8: Spektrale Amplituden einer Einzelmessung von Bo (sw) und nach der Unterdrückung von Störsignalen (rot) mittels Referenztechnik und Stacking. Das NMR Signal ist mit „FID“ gekennzeichnet. Ausgewertet wurde nur der Zeitraum 15 - 288 ms nach dem Ende der Anregung. In blau sind die Vielfachen von $16^{2/3}$ Hz (Bahn) und in rot die von 50 Hz (Netz) wiedergegeben.

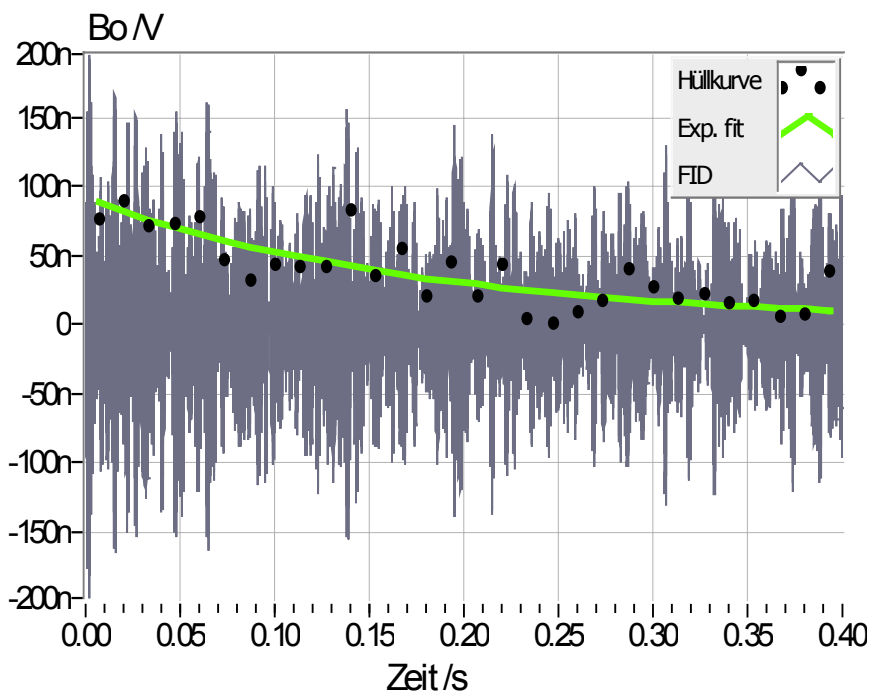


Abb. 9: FID aus Abbildung 8. Die Messdaten wurden bandpassgefilter: 1.8-2.4 kHz. Die Parameter der am besten angepassten Exponentialfunktion (Gln.2) lauten:

$E_0=101$ nV, $T_2^*=180$ ms.

Diskussion und Ausblick

Einerseits verbessert die Referenztechnik die Datenqualität ohne zusätzlichen Messzeitaufwand um 1-2 Größenordnungen, andererseits stellt sie aber auch einen erheblichen Eingriff in die an der Basis gemessene Zeitreihe dar. So kann die versehentliche Missachtung der genannten Voraussetzung für die Anwendung der hier beschriebenen Referenzmethode zu erheblichen systematischen Fehlern und damit zu völlig unsinnigen Ergebnissen führen. Es ist, aufgrund des sehr hohen Zeitbedarfs, leider nur ausnahmsweise möglich das Ergebnis allein mit Hilfe des viel übersichtlicheren Stapelns zu verifizieren. Zur Überprüfung könnte aber die etwas zeitaufwendigere Referenztechnik dienen, bei der die Störsignalübertragungsfunktion vor der NMR Messung bestimmt wird.

Bisweilen überlagern sehr amplitudenstarke Gewitter-Spikes die Zeitreihen, und stören sowohl die Referenztechnik als auch den Stapelungsprozess erheblich. Ein Selektionsalgorithmus der gestörte Zeitreihen sicher erkennt erscheint daher zukünftig unverzichtbar.

Als nächstes Ziel wird natürlich die Messung von Sondierungskurven angestrebt. Sondiert wird, indem die FID Messung, bei konstanter Loop Konfiguration, mit verschiedenen q-Werten (Produkt aus Stromstärke und Anregungsdauer) wiederholt wird. Dieser Datensatz muss dann invertiert werden. Hierzu stehen mittlerweile ein- und mehrdimensionale Inversionsprogramme zur Verfügung (Mohnke 1999, Hertrich 2005). Das Inversionsergebnis erlaubt dann eine tiefenabhängige lithologische Aussage.

Notwendig erscheint es auch, die Messergebnisse an einem sehr genau bekannten Objekt zu verifizieren. Ein Süßwassergewässer (geringer Skineffekt) mit hinreichender Wassertiefe wäre hierfür bestens geeignet. So beträgt die Wassersättigung bekanntermaßen 100%, die Relaxationszeit 2-3 Sekunden und es ist keine Inversionsrechnung erforderlich, da der Untersuchungsgegenstand hinreichend homogen ist.

Literatur

- Hertrich, M. (2005): Magnetic Resonance Sounding with separated transmitter and receiver loops for the investigation of 2D water content distributions. Dissertation, Inst. für Geophysik, TU Berlin.
- Mohnke, O. (1999): Entwicklung und Anwendung eines neuen Inversionsverfahrens für Oberflächen-NMR Sondierungen. Diplomarbeit, Inst. für Geophysik, TU Berlin.
- Mohnke, O., Braun, M. and Yaramanci, U. (2004): Inversion of decay time spectra from Surface-NMR data. Proceedings of 7th European Meeting on the Environmental and Engineering Geophysics. Birmingham, Great Britain, ed. EEGS-ES.
- Radić, T. (2005): Mobile instrument for NMR measurements on samples in the Earth's magnetic field. Extended Abstracts of the 11th European Meeting of Environmental and Engineering Geophysics, P034, Palermo, Italy.
- Weichmann, P.B., Lavelly, E.M. and Ritzwoller, M.H. (2000): Theory of surface nuclear magnetic resonance with applications to geophysical imaging problems. Physical Review E, Vol. 62, Number 1, 1290-1312.
- Yaramanci, U. (2004): New technologies in groundwater exploration. Surface Nuclear Magnetic Resonance. Geologica Acta, Vol. 2, No2, 2004, 109-120.