

INAUGURAL – DISSERTATION

zur

Erlangung der Doktorwürde

der

Gesamtfakultät für

Mathematik, Ingenieur- und Naturwissenschaften

der Ruprecht-Karls-Universität

Heidelberg

vorgelegt von

Sven Christian Peyinghaus,

geboren in Ahlen

Tag der mündlichen Prüfung: 26. Januar 2022



**Musterbasierte Analyse von Georadarsignalen**  
**zur Anwendung in der Bodenhydrologie**

Gutachter:

Prof. Dr. Kurt Roth

Prof. Dr. André Butz



**Zusammenfassung** Eine auf der Beobachtung der Bodenwasserdynamik basierende Inversion von Georadarsignalen (GPR) zur Schätzung hydraulischer Bodeneigenschaften erfordert in jeder Iteration den Vergleich von Simulationen mit gemessenen Radargrammen. Das berechnete Residuum wird in einem Optimierungsverfahren beispielsweise mit dem Levenberg-Marquardt-Algorithmus im Parameterraum minimiert. In dieser Arbeit werden neue Methoden entwickelt, die es erlauben, auch kompliziertere Strukturen eines Radargramms zuverlässig zuzuordnen und zu vergleichen. Hierzu werden verschieden große Strukturen des Radargramms mit dem Template-Matching-Verfahren aus der Bildverarbeitung zugeordnet. So werden Fehlzuordnungen verringert und die Aussagekraft des Residuums erhöht. Zudem ergibt sich eine Einsparung an Rechenzeit von mehr als einer Größenordnung. Die Berechnung des Residuums wird durch Nutzung von Strukturähnlichkeitswerten aus dem Zuordnungsverfahren angepasst, sodass die Häufigkeit lokaler Minima im Parameterraum reduziert und so das Optimierungsverfahren vereinfacht werden kann. Dazu fließt die Strukturähnlichkeitsinformation zusätzlich zu Signallaufzeit- und Amplitudendifferenzen maßgeblich in das Gesamtresiduum ein. Die entwickelten Methoden werden beispielhaft an einem GPR-Experiment am ASSESS-Standort für Feldversuche zur Schätzung bodenhydraulischer Materialparameter mit einer Sequenz von Optimierungs-Ensembles verwendet.

**Abstract** Inversion of ground-penetrating radar (GPR) observations of soil water dynamics requires the comparison of simulated and experimental data in every iteration to estimate soil hydraulic material properties. Optimization methods like the Levenberg-Marquardt algorithm minimize the residuum in parameter space. Newly developed pattern-based techniques presented in this work are able to reliably associate and compare complicated structures in radargrams. Template matching is applied to associate radargram features covering a whole range of different feature sizes which reduces mismatches and improves residuum validity. In addition to this, application of the new association method accelerates computations by more than one order of magnitude. The quantification of structural similarity obtained through feature association is used to introduce a modified residuum calculation scheme which facilitates optimization by reducing local minima in parameter space. Hence, in addition to signal travel time and amplitude differences, the structural similarity information primarily contributes to the residuum. The new pattern-based methods are applied to an experimental data set from a GPR field experiment at the ASSESS site to estimate soil hydraulic properties of the available materials with a sequence of optimization ensembles.



# Inhaltsverzeichnis

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Einleitung</b>                                      | <b>3</b>  |
| <b>2</b> | <b>Grundlagen</b>                                      | <b>5</b>  |
| 2.1      | Bodenwasserdynamik in der vadosen Zone . . . . .       | 5         |
| 2.1.1    | Zustandsgrößen . . . . .                               | 6         |
| 2.1.2    | Dynamik . . . . .                                      | 7         |
| 2.1.3    | Materialeigenschaften . . . . .                        | 8         |
| 2.1.4    | Simulation . . . . .                                   | 10        |
| 2.2      | Experimentelle Basis . . . . .                         | 11        |
| 2.2.1    | Georadar (GPR) . . . . .                               | 11        |
| 2.2.2    | ASSESS-Standort für Feldversuche . . . . .             | 16        |
| 2.3      | Inversion von GPR-Messdaten . . . . .                  | 17        |
| 2.3.1    | Optimierungssoftware SHIP . . . . .                    | 18        |
| 2.3.2    | Optimierungsalgorithmen . . . . .                      | 18        |
| <b>3</b> | <b>Musterbasierte Datenzuordnung</b>                   | <b>21</b> |
| 3.1      | Schnittstelle des Bildanalyse-Softwarepakets . . . . . | 22        |
| 3.2      | Festlegung von Features . . . . .                      | 23        |
| 3.3      | Zuordnung von Features . . . . .                       | 24        |
| 3.3.1    | Strukturbasierter Vergleichsalgorithmus . . . . .      | 25        |
| 3.3.2    | Zuordnungsfeld . . . . .                               | 26        |
| 3.4      | Zuverlässigkeit der Zuordnung . . . . .                | 27        |
| 3.4.1    | Korrektheitsbegriff . . . . .                          | 29        |
| 3.4.2    | Unsicherheiten . . . . .                               | 30        |
| 3.5      | Modifikation der Bilddaten . . . . .                   | 31        |
| 3.6      | Programmlaufzeit . . . . .                             | 33        |
| <b>4</b> | <b>Berechnung des Residuums</b>                        | <b>35</b> |
| 4.1      | Residuumstypen . . . . .                               | 35        |
| 4.1.1    | Laufzeitresiduum . . . . .                             | 35        |
| 4.1.2    | Amplitudenresiduum . . . . .                           | 36        |
| 4.1.3    | Zuordnungsresiduum . . . . .                           | 37        |
| 4.1.4    | Grauwertresiduum . . . . .                             | 38        |
| 4.2      | Aussagekraft des Residuums . . . . .                   | 39        |
| 4.2.1    | Relevanz der Zuordnung . . . . .                       | 39        |
| 4.2.2    | Nutzung des Zuordnungsresiduums . . . . .              | 40        |
| 4.3      | Feature-Ebenen . . . . .                               | 41        |
| 4.4      | Gewichtung der Residuen . . . . .                      | 43        |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| 4.5      | Einfluss auf das Residuumfeld . . . . .                                      | 45        |
| <b>5</b> | <b>Schätzung von Materialparametern</b>                                      | <b>49</b> |
| 5.1      | Experimenteller Datensatz . . . . .  | 49        |
| 5.2      | Ensembles . . . . .  | 51        |
| 5.2.1    | Latin-Hypercube-Scan . . . . .   | 53        |
| 5.2.2    | Amplitudenbasierte Optimierung . . . . .                                     | 54        |
| 5.2.3    | Auslenkungsbasierte Optimierung . . . . .                                    | 55        |
| 5.3      | Parameterschätzung mit experimentellen Daten . . . . .                       | 55        |
| 5.3.1    | Optimierungsergebnisse . . . . .   | 56        |
| 5.3.2    | Fehlerbetrachtung . . . . .  | 60        |
| 5.3.3    | Einordnung des Beitrags von Datenzuordnung und Residuumsberechnung . . . . . | 62        |
| <b>6</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>  | <b>65</b> |
|          | <b>Literatur</b>   | <b>67</b> |



---

# 1 Einleitung

Die oberflächennahe Dynamik des Wassers im Boden hat entscheidenden Einfluss auf beispielsweise die Effizienz von Bewässerungsmaßnahmen in der Landwirtschaft<sup>1</sup> oder auch den Schadstoffeintrag über die Oberfläche in das Grundwasser.<sup>2,3</sup> Das Verständnis und die Modellierung der Bodenwasserdynamik sind daher im Kontext ökologischer Nachhaltigkeit zunehmend von Bedeutung.<sup>4-6</sup>

Zur Modellierung der Bodenwasserdynamik ist die Kenntnis verschiedener Materialeigenschaften notwendig, auf deren Basis Simulationen durchgeführt werden können.<sup>7-10</sup> Zur Schätzung dieser bodenhydraulischen Eigenschaften ist aufgrund der Bodenheterogenität auf verschiedenen Größenskalen<sup>11</sup> im Allgemeinen die Beobachtung der Bodenwasserdynamik vor Ort notwendig, die auf verschiedene Weise möglich ist. Ein Feldexperiment hat den Vorteil, dass die Eigenschaften des Bodens direkt auf der für eine bestimmte Fragestellung relevanten Größenskala untersucht werden können und nicht z. B. durch Ausgraben und Transport in ein Labor verändert werden. Werden TDR-Sensoren für die Beobachtung des Wassergehalts<sup>12</sup> in den Untergrund eingebracht, so können die dafür notwendigen Eingriffe ebenfalls Auswirkungen auf die zu beobachtende Dynamik haben. Die Nutzung nichtinvasiver Georadarmessungen<sup>13</sup> (GPR) zur Beobachtung der Bodenwasserdynamik<sup>14,15</sup> hat den Vorteil, dass das untersuchte Material nicht durch die Messung beeinflusst wird. Hinzu kommt, dass mit mobilen GPR-Messgeräten bei Vergrößerung des Untersuchungsbereiches der mit der Messung verbundene Aufwand nicht so stark steigt wie bei invasiven Verfahren.

Im Gegensatz zu GPR-Anwendungen beispielsweise in der Bauindustrie<sup>16</sup> oder der Archäologie<sup>17</sup>, wo an statischen Proben die Ortung bestimmter Materialien oder von Materialdefekten von Interesse ist, ist die Beobachtung dynamischer bodenhydraulischer Prozesse mit GPR im Allgemeinen komplizierter. Um Rückschlüsse auf Bodeneigenschaften zu ziehen, wird ein Inversionsverfahren<sup>18</sup> durchgeführt, das darauf basiert, die Messdaten mit Simulationen möglichst genau zu reproduzieren. Dabei werden iterativ durch Anpassung der Materialparameter in der Simulation die Residuen im Vergleich zu den Messdaten minimiert.

Hierzu ist in jeder Iteration der Vergleich der simulierten und gemessenen Radargramme notwendig. Dabei ist wegen der oft ähnlichen periodischen Daten die Zuordnung von Strukturen aus Simulation und Messung von zentraler Bedeutung, um aussagekräftige Residuen berechnen zu können. Ergeben sich dabei beispielsweise aufgrund von Fehlzuordnungen zu viele lokale Minima im Parameterraum, so kann dies die Parameterschätzung stark erschweren. Bisher stellt dies bei der Untersuchung komplizierterer Bodenwasserdynamik wie z. B. Infiltrationspulsen einen zentralen limitierenden Faktor der Inversion von GPR-Messungen dar.<sup>19</sup>

Im Rahmen dieser Arbeit werden unter Einsatz des musterbasierten Template-Matching-Verfahrens<sup>20,21</sup> aus der Bildverarbeitung Methoden entwickelt, um Datenstrukturen in Radargrammen zuverlässig zuzuordnen und deren Ähnlichkeit zu quantifizieren. Die dabei gewonnenen Informationen werden genutzt, um die Konvergenz von Inversionsensembles zu verbessern und damit die GPR-basierte Schätzung bodenhydraulischer Materialeigenschaften zu erleichtern.

---

## 2 Grundlagen

Zu Beginn werden in diesem Kapitel die zentralen Grundlagen vorgestellt, auf denen diese Arbeit aufbaut. Die Reihenfolge der betrachteten Themenbereiche orientiert sich dabei an einer Sortierung vom Allgemeinen zum Speziellen, von theoretischen physikalischen Grundlagen über experimentelle Methoden hin zu eingesetzten Datenauswertungsmethoden. So werden zunächst die Grundlagen der Bodenwasserdynamik betrachtet, die zur Schätzung von Bodeneigenschaften untersucht wird. Des Weiteren folgt die Vorstellung der GPR-Messmethode sowie des Standorts der ausgewerteten Feldexperimente. Außerdem wird das im Folgenden genutzte Optimierungs-Softwarepaket SHIP vorgestellt, an das die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Software angebunden ist, wobei insbesondere auch die genutzten Optimierungsalgorithmen betrachtet werden.

Der Fokus dieses Kapitels liegt auf der Verknüpfung der relevanten Grundlagen, die zu diesem Zweck kurz zusammengefasst und in Beziehung zueinander gesetzt werden, um einen geeigneten Einstieg in die vorliegende Arbeit zu bieten. Es ist zu beachten, dass es sich dabei ausschließlich um bereits bekannte Sachverhalte handelt. Der Fokus liegt jeweils auf den für die folgenden Kapitel relevanten Bereichen der betrachteten Themengebiete.

In den folgenden Gleichungen werden für die Gruppierung von Termen in den Berechnungen ausschließlich eckige Klammern verwendet zur klaren Unterscheidung von in runden Klammern angegebenen Argumenten von Funktionen, Einheiten etc.

### 2.1 Bodenwasserdynamik in der vadosen Zone

Zur theoretischen Betrachtung der Dynamik des Wassers im Boden wird der Boden hier als inkompressibles poröses Medium mit vollständig verbundenen Poren betrachtet. Die folgenden Betrachtungen orientieren sich an den vertiefenden Erläuterungen von Roth.<sup>22</sup>

Ist der Porenraum bis zu einer bestimmten Höhe mit Grundwasser gefüllt, so steigt das Wasser aufgrund der Kapillarkräfte noch über eine gewisse Höhe oberhalb des Wasserspiegels in den Poren nach oben. Je enger eine Kapillare im Porenraum ist, desto stärker wirken die Kapillarkräfte. Unter der Annahme eines maximalen Porenradius ergibt sich so ein gewisser Bereich oberhalb des Wasserspiegels, der noch vollständig mit Wasser gesättigt ist, der Kapillarsaum. Oberhalb des Kapillarsaums liegt die vadosen Zone, in der sowohl Wasser als auch Luft im Porenraum vorhanden sind. Weitere Bestandteile, beispielsweise Verunreinigungen etc. (oder auch z.B. Pflanzen und die damit verbundenen Prozesse) werden hier nicht betrachtet. Somit handelt es sich bei der Dynamik im

Porenraum der vadosen Zone zunächst um Mehrphasenfluss verschiedener Fluide. Ist der Wassergehalt jedoch niedrig genug, so ist der Luftdruck konstant, die beiden Phasen entkoppeln und die Dynamik des Wassers kann unabhängig von derjenigen der Luft betrachtet werden. Gleichzeitig wird angenommen, dass der Wassergehalt ausreichend hoch ist, um den gasförmigen Transport vernachlässigen zu können. Im Folgenden wird dieser Fall weiter betrachtet.

In Analogie zur obigen Annahme eines maximalen Porenradius wird nun darüber hinaus angenommen, dass zur Beschreibung einer physikalischen Größe auf Größenordnungen oberhalb des Porenradius ein minimales repräsentatives Elementarvolumen  $V_{\text{REV}}$  existiert, sodass die über dieses Volumen gemittelte Größe nicht von kleinen Änderungen dieses Volumens in Form und Größe abhängt. Dies erlaubt die Beschreibung eines porösen Mediums auf einer kontinuierlichen makroskopischen Skala. Die folgenden Definitionen und Berechnungen setzen durch den Bezug auf ein Gesamtvolumen  $V_0$  voraus, dass stets  $V_0 \geq V_{\text{REV}}$  gilt.

### 2.1.1 Zustandsgrößen

Die Porosität  $\phi (-)$  des Bodens wird definiert als Volumenanteil des Porenraumvolumens  $V_{\text{por}}$  am Gesamtvolumen  $V_0$ , sodass gilt

$$\phi := \frac{V_{\text{por}}}{V_0}. \quad (1)$$

Der volumetrische Wassergehalt  $\theta (-)$  des Bodens wird mit dem Wasservolumen  $V_{\text{w}}$  analog definiert als

$$\theta := \frac{V_{\text{w}}}{V_0}. \quad (2)$$

Zudem wird die Sättigung  $\Theta (-)$  des Bodens mit dem nach langer Trocknung des Bodens zurückbleibenden Restwassergehalt  $\theta_{\text{r}} (-)$  sowie dem aufgrund von Lufteinschlüssen maximalen Sättigungswassergehalt  $\theta_{\text{s}} (-)$  definiert als

$$\Theta := \frac{\theta - \theta_{\text{r}}}{\theta_{\text{s}} - \theta_{\text{r}}}. \quad (3)$$

Falls der Porenraum ohne verbleibende Lufteinschlüsse vollständig mit Wasser gefüllt werden kann, so sind Porosität und Sättigungswassergehalt gleich.

Analog zu den bisherigen Definitionen werden auch die folgenden Betrachtungen relativ zum Volumen durchgeführt, um eine kontinuierliche Beschreibung des Bodens zu ermöglichen. So wird anstelle der potentiellen Energie des im Boden enthaltenen Wassers die potentielle Energiedichte betrachtet, das Potential  $\Psi_{\text{w}}$  ( $\frac{\text{J}}{\text{m}^3}$ ) in Einheiten des Drucks.

Zum Potential des Bodenwassers trägt zunächst das Gravitationspotential  $\Psi_g$  bei. Mit der Dichte des Wassers  $\rho_w$ , dem Gravitationsvektor  $\mathbf{g} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ g \end{pmatrix}$  ( $z$ -Achse zeigt nach unten in die Tiefe) sowie einer Referenztiefe  $z_0$  ergibt sich

$$\Psi_g = -\rho_w g [z - z_0]. \quad (4)$$

Darüber hinaus trägt das Matrixpotential  $\Psi_m$  zum Bodenwasserpotential bei. Es beschreibt die Arbeit pro Volumen, die notwendig ist, um Wasser auf konstanter Höhe bei einem Referenzdruck, hier dem Umgebungsluftdruck  $p_a$ , gegen die Kapillarkräfte aus der Bodenmatrix zu entfernen. Dies entspricht der durch die Matrix verursachten Druckdifferenz des Wasserdruckes  $p_w$  zum Referenzdruck

$$\Psi_m = p_w - p_a, \quad (5)$$

wobei  $p_w$  mit stärkeren Kapillarkräften und dadurch verursachten höheren mechanischen Zugspannungen absinkt. Daher ist das Matrixpotential für im Porenraum gebundenes Wasser negativ.

Das Bodenwasserpotential ergibt sich aus Matrix- und Gravitationspotential zu

$$\Psi_w = \Psi_m + \Psi_g \quad (6)$$

$$= p_w - p_a - \rho_w g [z - z_0]. \quad (7)$$

Aus Gründen der Anschaulichkeit wird das Potential oft als Höhe  $h$  einer den gleichen Druck erzeugenden Wassersäule ausgedrückt. So ergibt sich für das Matrixpotential mit Division durch  $\rho_w g$  die Höhe

$$h_m = \frac{\Psi_m}{\rho_w g} \quad (8)$$

sowie analog für das Bodenwasserpotential

$$h_w = h_m - [z - z_0]. \quad (9)$$

### 2.1.2 Dynamik

Zur Beschreibung der Bodenwasserdynamik als entkoppelten Mehrphasenfluss wird das Buckingham-Darcy-Gesetz genutzt. Für den Wasservolumenfluss  $\mathbf{j}$  ( $\frac{\text{m}}{\text{s}}$ ) gilt mit dem wassergehaltsabhängigen hydraulischen Leitfähigkeitstensor  $\tilde{\mathbf{K}}_w(\theta)$  ( $\frac{\text{m}^3 \text{s}}{\text{kg}}$ )

$$\mathbf{j} = -\tilde{\mathbf{K}}_w(\theta) [\nabla \Psi_w]. \quad (10)$$

Dieses Gesetz basiert auf der Annahme, dass sich die mikroskopischen Prozesse im Porenraum stets im lokalen Gleichgewicht befinden. Diese Annahme ist erfüllt,

wenn die Zeitskala der makroskopischen Prozesse (z. B. Infiltration) deutlich größer ist als die der mikroskopischen Prozesse.

Zusätzlich ist die Massenerhaltung für ein inkompressibles Fluid zu beachten, die besagt, dass jede zeitliche Änderung des volumetrischen Wassergehalts eine Divergenz des Wasservolumenflusses bedeutet. Es gilt

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (11)$$

Einsetzen von Gleichung 10 in Gleichung 11 liefert

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \cdot [\tilde{\mathbf{K}}_w(\theta)[\nabla \Psi_w]] = 0. \quad (12)$$

Durch Einsetzen der Gleichungen 7 und 4 ergibt sich die Richards-Gleichung<sup>7</sup>

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \cdot [\tilde{\mathbf{K}}_w(\theta)[\nabla \Psi_m - \rho_w \mathbf{g}]] = 0. \quad (13)$$

Eine Vereinfachung kann durch Verwendung der Höhe  $h_m$  der mit dem Potential  $\Psi_m$  vergleichbaren Wassersäule aus Gleichung 8 erreicht werden. Dafür wird anstelle von  $\tilde{\mathbf{K}}_w(\theta)$  ( $\frac{\text{m}^3 \text{s}}{\text{kg}}$ ) ein modifizierter Leitfähigkeitstensor  $\mathbf{K}_w(\theta)$  ( $\frac{\text{m}}{\text{s}}$ ) verwendet. Im Folgenden wird darüber hinaus die hydraulische Leitfähigkeit als isotrop angenommen und daher stattdessen als Skalar  $K_w(\theta)$  geschrieben. Somit ergibt sich eine vereinfachte Form der Richards-Gleichung zu

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} - \nabla \cdot [K_w(\theta)[\nabla h_m - \mathbf{e}_z]] = 0, \quad (14)$$

wobei  $\mathbf{e}_z$  den Einheitsvektor in  $z$ -Richtung darstellt.

### 2.1.3 Materialeigenschaften

Zur Lösung der Richards-Gleichung ist neben dem Zusammenhang  $K_w(\theta)$  zwischen Leitfähigkeit und Wassergehalt auch ein Zusammenhang  $h_m(\theta)$  von Matrixpotential und Wassergehalt notwendig, der als Bodenwassercharakteristik bezeichnet wird. In beiden Fällen handelt es sich um materialabhängige physikalische Zusammenhänge auf der mikroskopischen Größenskala, die in der Richards-Gleichung nicht explizit enthalten sind. Stattdessen werden diese durch eine Parametrisierung berücksichtigt.

Eine von Topp und Miller<sup>23</sup> durchgeführte Messung dieser Zusammenhänge an einem porösen Medium basierend auf Glaskugeln eines mittleren Radius von  $90 \mu\text{m}$  zeigt ein hysteretisches Verhalten der Bodenwassercharakteristik, für das bisher

kein geeignetes physikalisches Modell zur quantitativen Beschreibung vorliegt. Dieser Effekt wird im Folgenden vernachlässigt.

Für die Bodenwassercharakteristik ist die van-Genuchten-Parametrisierung<sup>10</sup> weit verbreitet. Für die Beschreibung der am ASSESS-Standort (vgl. Kap. 2.2.2) vorhandenen Materialien ist jedoch die Brooks-Corey-Parametrisierung<sup>8</sup> gut geeignet, weswegen diese im Folgenden verwendet wird.<sup>24</sup> Von Brooks und Corey wird für die Sättigung  $\Theta$  aus Gleichung 3 angegeben:

$$\Theta(h_m) = \begin{cases} \left[ \frac{h_0}{h_m} \right]^\lambda & ; h_m < h_0, \\ 1 & ; h_m \geq h_0. \end{cases} \quad (15)$$

Für Sättigungen von  $0 < \Theta < 1$  kann Gleichung 15 invertiert und unter Verwendung von Gleichung 3 in die zur Lösung der Richards-Gleichung benötigte Form  $h_m(\theta)$  gebracht werden, sodass gilt

$$h_m(\Theta) = h_0 \Theta^{-\frac{1}{\lambda}} \quad \text{bzw.} \quad h_m(\theta) = h_0 \left[ \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right]^{-\frac{1}{\lambda}}. \quad (16)$$

Neben dem bereits bekannten Sättigungswassergehalt  $\theta_s$  und dem Restwassergehalt  $\theta_r$  werden hier zwei weitere Parameter eingeführt. Der Lufteintrittswert  $h_0$  (m) beschreibt, wie weit Luft in den Porenraum eindringen kann, und entspricht der Höhe des Kapillarsaums. Wegen der nach unten in die Tiefe zeigenden  $z$ -Achse ist die Höhe  $h_0$  negativ. Der Parameter  $\lambda$  (–) hängt mit der Verteilung der Porengrößen zusammen und hat daher Einfluss auf die Krümmung von  $h_m(\theta)$ .

Für den neben der Bodenwassercharakteristik für die Richards-Gleichung benötigten Zusammenhang von Leitfähigkeit und Wassergehalt wird von Mualem<sup>9</sup> unter der Annahme geometrisch ähnlicher Poren, also einer Proportionalität von Porenradien und -längen, zunächst in Bezug auf die Sättigung angegeben:

$$K_w(\Theta) = K_s \Theta^\tau \frac{\left[ \int_0^\Theta \frac{d\Theta'}{h_m(\Theta')} \right]^2}{\left[ \int_0^1 \frac{d\Theta'}{h_m(\Theta')} \right]}. \quad (17)$$

Daraus folgt unter Verwendung von  $h_m(\Theta)$  aus Gleichung 16 und von Gleichung 3 die in der Richards-Gleichung vorliegende Form  $K_w(\theta)$  als zweiter Teil der Parametrisierung, sodass gilt

$$K_w(\Theta) = K_s \Theta^{\tau+2+\frac{2}{\lambda}} \quad \text{bzw.} \quad K_w(\theta) = K_s \left[ \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right]^{\tau+2+\frac{2}{\lambda}}. \quad (18)$$

Hier werden neben den vier Parametern aus der Bodenwassercharakteristik zwei weitere eingeführt. Die Sättigungsleitfähigkeit  $K_s$  ( $\frac{m}{s}$ ) gibt die hydraulische Leitfähigkeit des Bodens im gesättigten Zustand bei  $\Theta = 1$  an. Der Parameter  $\tau$  ( $-$ ) enthält Information über die Tortuosität der Bodenporen.

Die Gleichungen 16 und 18 definieren zusammen die Mualem-Brooks-Corey-Parametrisierung, die mit den sechs hydraulischen Bodenparametern  $\theta_r$ ,  $\theta_s$ ,  $h_0$ ,  $\lambda$ ,  $K_s$  und  $\tau$  die Eigenschaften des Bodens auf der mikroskopischen Skala beschreibt, die nicht explizit in der Richards-Gleichung enthalten sind. Es ist zu beachten, dass die Annahme zeitlich konstanter Parameter auf den im Vorangegangenen getroffenen Annahmen beruht und somit im Anwendungsfall stets die Gültigkeit dieses Modells geprüft werden muss.

In natürlichen inhomogenen Böden variieren die hydraulischen Bodenparameter auf makroskopischer Skala in Abhängigkeit vom Ort. Um diese Variation unterhalb der Skala verschiedener separat parametrisierter Bodenschichten in das Modell der Bodenwasserdynamik zu integrieren, ist es möglich, unter der Annahme geometrischer Ähnlichkeit der Poren auf die Miller-Skalierung<sup>25</sup> zurückzugreifen, die die makroskopisch homogenen  $h_m(\theta)$  und  $K_w(\theta)$  mit einem ortsabhängigen Parameter skaliert.

### 2.1.4 Simulation

Zur Lösung der Richards-Gleichung verbleibt die Definition der Rand- und Anfangsbedingungen, die den Zustand von bzw. die Prozesse in der Umgebung eines untersuchten Volumens repräsentieren. Als Randbedingung kann an der Grenzfläche des untersuchten Volumens ein hydraulisches Potential oder ein Fluss festgelegt werden.

Wird ein Potential festgelegt, so handelt es sich um eine Dirichlet-Randbedingung, die über die Materialeigenschaft  $\theta(h_m)$  direkt den Wassergehalt an der Grenzfläche festlegt. Dies repräsentiert beispielsweise einen festen Grundwasserspiegel, der durch ein externes Reservoir wie einen See o. Ä. konstant gehalten werden kann, sodass eventuelle Flüsse über die Grenzfläche ausgeglichen werden.

Wird stattdessen ein Wasservolumenfluss über die Grenzfläche festgelegt, so handelt es sich um eine Neumann-Randbedingung. Wird eine Neumann-Randbedingung an der Grenzfläche des Bodens zur Atmosphäre festgelegt, so kann auf diese Weise eine Infiltration (z. B. durch Regen) repräsentiert werden. Hierbei ist zu beachten, dass es im Falle einer Limitierung des Flusses durch den Boden stattdessen zum Abfluss eines Teils des Niederschlags an der Oberfläche kommen kann.

Zur Festlegung der initialen Wassergehaltsverteilung als Anfangsbedingung kann auf direkte Messungen zurückgegriffen werden oder auf eine vorangegangene Simu-



lation. Je nach Dichte und Unsicherheit der zur Verfügung stehenden Messungen kann eine Spinup-Simulation dazu beitragen, den initialen Zustand zu schätzen, oder aber auch durch im Modell enthaltene Unsicherheiten die Genauigkeit der vorhandenen Messungen verringern.

Basierend auf den gewählten Rand- und Anfangsbedingungen sowie den Materialeigenschaften  $h_m(\theta)$  und  $K_w(\theta)$  (vgl. Kap. 2.1.3) wird die Richards-Gleichung numerisch gelöst. Hierzu wird das Softwarepaket muPhi<sup>26</sup> verwendet, das auf einem rechtwinkligen Gitter mit einem zellbasierten Finite-Volumen-Verfahren arbeitet.

Es ist zu beachten, dass die Lösung der Richards-Gleichung auf allen in diesem Kapitel getroffenen Annahmen beruht, insbesondere der Annahme einer ausschließlich mit Luft und Wasser gefüllten inkompressiblen Bodenmatrix (Abwesenheit von Pflanzen, Verunreinigungen etc.), der Existenz eines repräsentativen Volumenelements (Abwesenheit makroskopischer Risse o. Ä.), der Entkopplung von Luft- und Wasserphase im Porenraum (ausreichend niedrige Sättigung) sowie der Vernachlässigung der Hysterese in der Bodenwassercharakteristik. Somit sind Lösungen der Richards-Gleichung stets unter Berücksichtigung dieser Aspekte zu betrachten.

## 2.2 Experimentelle Basis

Um die im vorhergehenden Kapitel 2.1 betrachteten Prozesse der Bodenwasserdynamik zu beobachten sowie Informationen über Schichtung und Eigenschaften der porösen Medien im Boden zu gewinnen, sind verschiedene experimentelle Ansätze denkbar. Diese sind zunächst unterteilbar in invasive und nichtinvasive Methoden. Zu den invasiven Methoden zählen beispielsweise das Einbringen von Messsonden in den Boden, Kernbohrungen oder Grabungen, die die direkte Untersuchung des Materials ermöglichen, gleichzeitig allerdings das untersuchte Probenvolumen durch die unvermeidliche Strukturveränderung beeinflussen. Darüber hinaus besteht auch die Möglichkeit, nichtinvasive Methoden anzuwenden. Um auf diesem Wege detaillierte lokale Informationen über die oberen Bodenschichten und damit auch den Bereich der vadosen Zone zu erhalten, ist die Nutzung von GPR eine verbreitete Methode. Das Konzept von GPR-Messungen sowie der hierfür genutzte Standort für Feldversuche werden in diesem Abschnitt kurz vorgestellt.

### 2.2.1 Georadar (GPR)

Mit GPR-Messungen werden durch die Beobachtung der Reflexionen von in den Boden eingestrahlten Radarstrahlungspulsen Informationen über Zustand und Eigenschaften des durchstrahlten Bodenvolumens gesammelt.

**Funktionsprinzip** Die Ausbreitungsgeschwindigkeit  $c$  elektromagnetischer Wellen<sup>27</sup> in einem Medium ergibt sich mit der Vakuumlichtgeschwindigkeit  $c_0$  und der relativen elektrischen Permittivität  $\varepsilon_r$  sowie der relativen magnetischen Permeabilität  $\mu_r$  des Mediums zu

$$c = \frac{c_0}{\sqrt{\varepsilon_r \mu_r}}. \quad (19)$$

Da die in dieser Arbeit untersuchten Bodenmaterialien als näherungsweise nicht magnetisierbar betrachtet werden können<sup>28</sup> ( $\mu_r = 1$ ), ist es zur Beschreibung der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen im Boden erforderlich, die relative Permittivitätsverteilung  $\varepsilon_r(\mathbf{x})$  zu bestimmen. In einer Mischung verschiedener Materialien, wie sie im Boden vorliegt, kann diese als gewichtetes Mittel der relativen Permittivitäten  $\varepsilon_{r,i}$  der einzelnen Materialien  $i$  betrachtet werden.<sup>29</sup> Wie in Kapitel 2.1 angenommen, wird der Boden als ausschließlich mit Luft ( $\varepsilon_{r,a}$ ) und Wasser ( $\varepsilon_{r,w}$ ) gefüllter Porenraum betrachtet, sodass unter Annahme einer Bodenmatrix räumlich konstanter relativer Permittivität  $\varepsilon_{r,m}$  (z. B. Sand aus  $\text{SiO}_2$ ) vereinfacht von drei Materialien ausgegangen wird, die zur relativen Bodenpermittivität  $\varepsilon_r$  beitragen.

Zur Bestimmung der Bodenpermittivität wird ähnlich zur Parametrisierung der hydraulischen Bodenparameter auf ein zumindest in Teilen empirisches Modell zurückgegriffen. Im Folgenden wird dafür das CRIM-Modell (complex refractive index model) verwendet, das die Bodenpermittivität mit dem CRIM-Parameter  $\alpha_c$  angibt als

$$\varepsilon_r(\theta, \phi, \varepsilon_{r,i})^{\alpha_c} = \theta \varepsilon_{r,w}^{\alpha_c} + [\phi - \theta] \varepsilon_{r,a}^{\alpha_c} + [1 - \phi] \varepsilon_{r,m}^{\alpha_c}. \quad (20)$$

Der CRIM-Parameter wird im Softwarepaket SHIP (vgl. Kap. 2.3.1) mit  $\alpha_c = 0,5$  verwendet.<sup>29–31</sup> Die Porosität wird als Näherung mit dem Sättigungswassergehalt gleichgesetzt (vgl. Kap. 2.1). Für die relative Permittivität von Luft wird  $\varepsilon_{r,a} = 1$  angenommen, für die des Bodenmaterials näherungsweise  $\varepsilon_{r,m} = 5$  für den Sand am ASSESS-Standort (vgl. Kap. 2.2.2).<sup>32</sup> Die temperaturabhängige elektrische Permittivität des Wassers wird nach Kaatze<sup>33</sup> bestimmt. Im Folgenden wird eine konstante Bodentemperatur von  $20^\circ\text{C}$  angenommen, sodass sich näherungsweise  $\varepsilon_{r,w} = 80$  ergibt.

Da die relative Permittivität von Wasser um ca. eine Größenordnung über derjenigen von häufig vorkommenden Bodenmaterialien bzw. um fast zwei Größenordnungen über derjenigen von Luft liegt, wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit elektromagnetischer Wellen im Boden maßgeblich vom Wassergehalt beeinflusst und GPR-Messungen reagieren sensitiv auf Veränderungen des Bodenwassergehalts. Somit sind die Messergebnisse bei der Beobachtung von dynamischen bodenhydraulischen Prozessen insbesondere abhängig von den hydraulischen Bodenparametern

(vgl. Kap. 2.1). Im Vergleich zum Wassergehalt hat daher z. B. eine Abweichung der Permittivität  $\varepsilon_{r,m}$  der Bodenmatrix relativ geringe Auswirkungen auf eine GPR-Messung.

Die räumliche Verteilung der elektrischen Leitfähigkeit basiert beispielsweise auf dem Salzgehalt des Bodens<sup>34–36</sup> und hat ebenfalls Einfluss auf die Ausbreitung von GPR-Signalen. Bei höherer elektrischer Leitfähigkeit (z. B. in lehmigen Böden) ist der Einsatz von GPR begrenzt, während auf sandigen Böden Untersuchungen in deutlich größeren Bodentiefen möglich sind.<sup>37</sup> Die elektrische Leitfähigkeit wird in SHIP für die Untersuchungen am ASSESS-Standort als konstant angenommen.

Auf Basis der Wassergehalts- und Porositätsverteilung des Bodens, die z. B. aus einer vorangegangenen Simulation der Bodenwasserdynamik bekannt sind, sowie den relativen Permittivitäten von Luft, Wasser und Bodenmatrix wird unter Verwendung von Gleichung 20 die Permittivitätsverteilung  $\varepsilon_r(\mathbf{x})$  bestimmt und basierend darauf die Ausbreitung eines GPR-Pulses simuliert. Reflexionen von eingestrahnten Radarpulsen treten an Stellen auf, an denen sich die elektrische Permittivität mit dem Ort verändert. So können beispielsweise an Schichtgrenzen verschiedener Bodenmaterialien, dem Kapillarsaum des Grundwasserspiegels oder einer Infiltrationsfront GPR-Reflexionen beobachtet werden.

Direkte Berechnungen der sechs bodenhydraulischen Parameter pro homogenem Materialbereich sind jedoch sogar bei einfachen Bodenarchitekturen nicht möglich, da die Auswirkungen der verschiedenen Parameter auf die Signallaufzeit und -amplitude nicht eindeutig trennbar sind. Es verbleibt lediglich die Möglichkeit des Vergleichs von Simulation und Messung sowie eines darauf basierenden Optimierungsprozesses zur Parameterbestimmung (vgl. Kap. 2.3).

**Messung** GPR-Messungen werden mit einer Sende- und einer Empfängerantenne durchgeführt, die sich in den hier betrachteten Experimenten direkt oberhalb des Bodens befinden. Ein Radarpuls einer bestimmten Frequenz wird vom Sender ausgestrahlt und daraufhin werden vom Empfänger die dort zu beobachtenden Signale aufgezeichnet. Somit ist zunächst nicht klar, von welchem Bereich des durchstrahlten Bodenvolumens eine bestimmte Reflexion verursacht worden ist. Aufgrund der Ausbreitung des Pulses in alle Richtungen kann es auch zu Interferenz mehrerer Reflexionen ähnlicher Laufzeit kommen, die von verschiedenen Bodenbereichen verursacht werden.

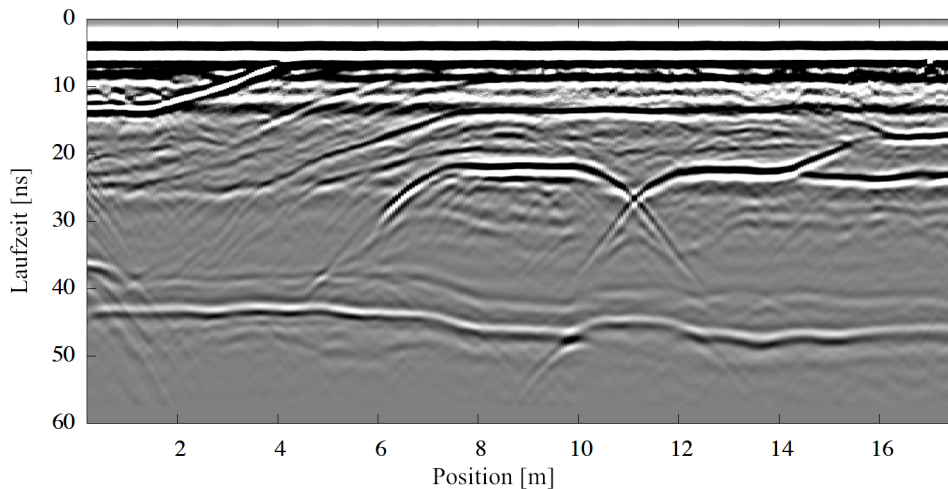
In den Experimenten, auf denen die Analysen dieser Arbeit aufbauen, wird eine Frequenz von 600 MHz verwendet.<sup>19</sup> Diese Wahl der Frequenz stellt einen Kompromiss dar zwischen möglichst hoher Auflösung sowie möglichst geringer Absorption der Strahlung durch das Bodenmaterial. Bei zu geringen Frequenzen sinkt die Auflösung so stark, dass der hier betrachtete Bereich der obersten 2 m

des Bodens nicht genau genug dargestellt werden kann, bei zu hohen Frequenzen dagegen kommt es zu derart starker Absorption im Bodenmaterial, dass die Eindringtiefe der Strahlung nicht ausreicht, um den gewünschten Bereich zu untersuchen.

Um die Auswirkungen der oben erwähnten Unklarheit des genauen Strahlengangs durch die Gewinnung von zusätzlichen Informationen aus mehreren Messungen abzuwachen, sind verschiedene GPR-Messverfahren üblich. Bei CO-Messungen (common offset, gemeinsame Verschiebung) werden Sender- und Empfängerantenne mit konstantem Abstand zueinander über den Boden bewegt und regelmäßige Messungen durchgeführt. Bei CMP-Messungen (common midpoint, gemeinsamer Mittelpunkt) werden Sender- und Empfängerantenne gleichmäßig von ihrem gemeinsamen Mittelpunkt wegbewegt, sodass sich der Antennenabstand vergrößert, der Mittelpunkt jedoch gleich bleibt. Bei WARR-Messungen (wide angle reflection and refraction, Weitwinkelreflexion und -brechung) bleibt dagegen die Sendeantenne an ihrem Platz, während die Empfängerantenne das Signal nacheinander an verschiedenen Positionen aufzeichnet. Des Weiteren ist es möglich, eine Messung in regelmäßigen zeitlichen Abständen zu wiederholen, um eine sogenannte Zeitraffermessung zu erzeugen, beispielsweise zur Untersuchung der Bodenwasserdynamik.

Alle oben genannten Messverfahren haben gemeinsam, dass aufeinanderfolgende korrelierende Messungen durchgeführt werden. Die räumliche Korrelation bei CO-, CMP- und WARR-Messungen ergibt sich daraus, dass die aufgezeichneten Signale benachbarter Messungen meist ein sich überschneidendes Bodenvolumen durchstrahlen und die Messabstände üblicherweise so klein gewählt werden, dass die beobachteten Strukturen gut aufgelöst werden können, benachbarte Messungen also ähnlich sind. Die zeitliche Korrelation der Zeitraffermessungen ergibt sich aus der üblicherweise im Vergleich zur beobachteten Dynamik hoch gewählten Messfrequenz und dem daher bei aufeinanderfolgenden Messungen ähnlichen Zustand. Somit enthalten derartige Messreihen mehrfach Information über das gleiche Probenvolumen, die genutzt werden kann, um die Zuverlässigkeit der aus einer Messung gezogenen Schlussfolgerungen zu erhöhen (vgl. Kap. 3).

Die Daten einer Messreihe können zu einem Radarogramm zusammengefügt werden, wobei jede Spalte eines Radargramms die Daten einer einzelnen Messung enthält, im Folgenden auch Trace genannt. In den meisten Fällen ist die Interpretation der beobachteten Reflexionen nicht trivial und wird durch Vergleich mit korrespondierenden Simulationen durchgeführt. Die anschaulichsten Radarogramme entstehen aus CO-Messungen, da hier die benachbarten Messungen direkt einer benachbarten Position entsprechen, während die Laufzeit einer Reflexion zumindest bei Architekturen mit überwiegend glatten horizontalen Bodenschichtgrenzen hauptsächlich von der Tiefe der Schichtgrenze abhängt. Ein Beispiel für ein auf dem



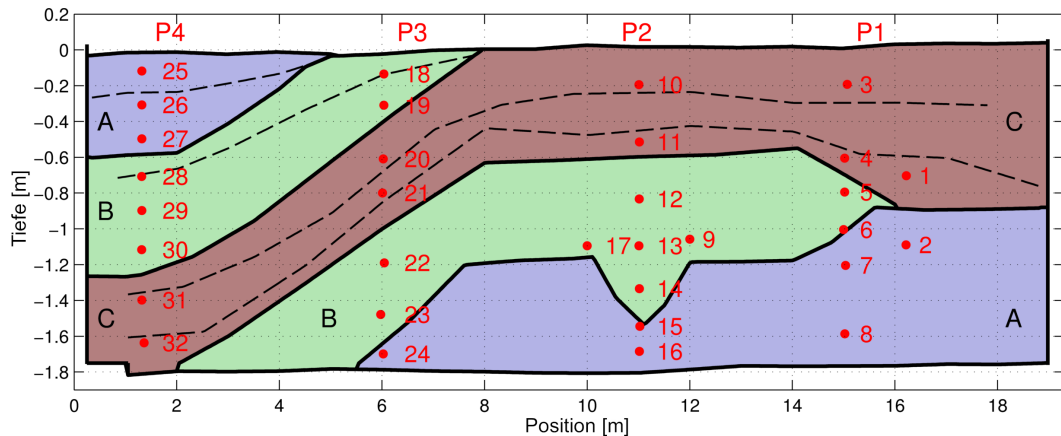
**Abbildung 1:** Beispielhaftes Radargramm einer CO-GPR-Messung auf dem ASSESS-Standort für Feldversuche. Die Auslenkung der gemessenen Radarstrahlung in willkürlichen Einheiten wird in Graustufen dargestellt, wobei dunklere Pixel negative und hellere Pixel positive Auslenkung bedeuten. Messdaten und Abbildung von Jaumann<sup>31</sup> (bearbeitet).

ASSESS-Standort für Feldversuche (vgl. Kap. 2.2.2) gemessenes CO-Radargramm ist in Abb. 1 dargestellt.

**Simulation** Zur Simulation von GPR-Messungen wird das Softwarepaket MEEP-GPR<sup>38</sup> verwendet, das auf dem frei verfügbaren Paket MEEP<sup>39</sup> zur Lösung der Maxwell-Gleichungen basiert. Hier wird die Finite-Differenzen-Methode genutzt<sup>40,41</sup> und zur genaueren Beschreibung der Ausbreitung elektromagnetischer Strahlung in anisotropen Medien und an Grenzflächen ist eine Subpixel-Glättung unterhalb der Simulationsauflösung implementiert.<sup>42,43</sup>

Die Simulation der Ausbreitung eines Radarpulses basiert auf der räumlichen Verteilung der elektrischen Permittivität zum Zeitpunkt der GPR-Messung, die aus der Simulation der Bodenwasserdynamik gewonnen werden kann (vgl. Kap. 2.1 sowie Gl. 20). Um diesen Bereich herum wird eine absorbierende PML-Randbedingung (perfectly matched layer) verwendet.<sup>44</sup> Als Anfangsbedingung wird ein von der als punktförmig angenommenen Sendeantenne abgestrahltes Ricker-Wavelet verwendet, wobei beispielsweise die Auswirkungen von Antennenform und -abschirmung hier vernachlässigt werden.<sup>45–47</sup> Wo nicht anders angegeben, wird eine Auflösung von  $90 \frac{\text{pix}}{\text{m}}$  verwendet.

Die Kopplung der Simulationen von Bodenwasserdynamik und Ausbreitung des Radarpulses wird durch das Softwarepaket SHIP bereitgestellt (vgl. Kap. 2.3.1).



**Abbildung 2:** Vertikaler Querschnitt durch die Bodenarchitektur des ASSESS-Standorts für Feldversuche mit den drei verschiedenen Sandtypen A, B, und C. Die darunter liegende Kiesschicht ist nicht dargestellt. In rot markiert sind die Positionen der TDR-Sensoren. Die gestrichelten Linien bezeichnen die bekannten beim Aufbau hinzugefügten Kompaktionsschichtgrenzen. Abbildung von Klenk<sup>52</sup> (bearbeitet).

### 2.2.2 ASSESS-Standort für Feldversuche

Die in dieser Arbeit beispielhaft mit der neu entwickelten Datenzuordnungsmethode (vgl. Kap. 3) ausgewerteten GPR-Daten stammen aus einem auf dem ASSESS-Standort für Feldversuche<sup>48</sup> bei Heidelberg durchgeführten Experiment (vgl. Kap. 5.1). Der Aufbau des ASSESS-Standorts, der bereits für etliche Untersuchungen<sup>19,24,31,49–54</sup> genutzt werden konnte, wird hier kurz skizziert.

In einem unten und an allen Seiten wasserdicht abgedichteten und nach oben offenen ehemaligen Fahrsilo aus Beton mit den Innenmaßen von ca. 20 m × 4 m × 2 m ist auf einer Kiesschicht zum Ausgleich des Wasserdrucks eine künstlich angelegte, effektiv zweidimensionale Bodenarchitektur aus drei verschiedenen Sandtypen angelegt (vgl. Abb. 2). Die Architektur umfasst verschiedene in der Natur vorkommende Strukturmerkmale wie horizontale und geneigt verlaufende Schichtgrenzen, das Zusammenlaufen zweier Schichtgrenzen oder eine lokale Senke in einer Schichtgrenze. Während des Aufbaus war es notwendig, das Material zur Stabilisierung sowie zur Vermeidung späterer Setzungen auch innerhalb der Schichten zu komprimieren, sodass zusätzliche Kompaktionsschichtgrenzen entstanden sind. Die Geometrie der verschiedenen Schichten wird von Antz<sup>48</sup> mit einer Fehlerabschätzung von  $\pm 5$  cm unter Berücksichtigung einiger Korrekturen von Jaumann<sup>31</sup> übernommen. Zu beachten ist, dass das Fahrsilo in der Längsrichtung mittig eine durch die Kiesschicht ausgeglichene Vertiefung hat, deren Tiefe nicht bekannt ist und anhand von Fotos vom Aufbau auf  $(6 \pm 2)$  cm abgeschätzt wird.

Verteilt über den ASSESS-Standort sind an mehreren Stellen TDR-Sensoren (time domain reflectometry) integriert, die die Bestimmung der elektrischen Permittivität der Umgebung des Sensors erlauben<sup>12</sup> sowie Rückschlüsse auf den Wassergehalt beispielsweise nach Gleichung 20. Zusammen mit einer Wetterstation überwachen sie den aktuellen Zustand des Standorts. Über einen Brunnen etwa bei Position 18 m kann der Wasserspiegel reguliert werden. Bei Bedarf kann zudem durch ein Dach der Niederschlag abgeleitet werden, um den Sand trocken zu halten. Zur Durchführung von GPR-Messungen ist ein Feldscanner installiert, der zwei GPR-Antennenboxen, jeweils ausgestattet mit Sende- und Empfangsantenne, über die Oberfläche bewegen kann.

## 2.3 Inversion von GPR-Messdaten

Dem in dieser Arbeit genutzten Optimierungsansatz liegt eine Aufteilung der mathematischen Beschreibung eines physikalischen Systems auf einer bestimmten Größenskala in vier grundsätzliche Bereiche<sup>55</sup> zugrunde: Aus (i) dem zur Repräsentation gewählten mathematischen Modell (Dynamik), (ii) der Parametrisierung der kleinerskaligen Prozesse sowie (iii) der Repräsentation der größerskaligen Prozesse durch Rand- und Anfangsbedingungen folgt (iv) die zeitliche Entwicklung des Zustandes des physikalischen Systems.<sup>55</sup>

Diese Berechnung des zeitabhängigen Zustands wird als Lösung des direkten Problems oder Vorwärtsproblems bezeichnet und entspricht der Simulation bzw. Vorhersage von Messdaten. Sind jedoch Messdaten der zeitlichen Zustandsentwicklung sowie das Modell und die größerskaligen Prozesse bekannt und es soll daraus der Rückschluss auf die Modellparameter gezogen werden, so wird dies als Inversion bzw. Lösung des inversen Problems bezeichnet.<sup>18</sup>

In diesem Fall ist meistens keine direkte Berechnung möglich, sondern die Parameter müssen indirekt bestimmt werden. Hierzu wird ein initiales Set von Parametern gewählt, um das Vorwärtsproblem zu lösen und die simulierten Ergebnisse mit den vorhandenen Messdaten zu vergleichen. Ein solches Vergleichsverfahren wird im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelt (vgl. Kap. 3 und 4). In einem Optimierungsprozess wird die so bestimmte Abweichung der Simulation von der Messung, im Folgenden als Residuum bezeichnet, durch Variation der Parameter minimiert. Hierzu wird im Folgenden hauptsächlich der Levenberg-Marquardt-Algorithmus genutzt (vgl. Kap. 2.3.2).

Mit dem Begriff des Optimierungsverfahrens wird in dieser Arbeit die Durchführung einer Optimierung unter Einsatz eines Optimierungsalgorithmus bezeichnet. Der Optimierungsprozess als Gesamtheit der von der Software ausgeführten Schritte kann z. B. auch mehrere aufeinander folgende Ensembles verschiedener Optimierungsverfahren beinhalten (vgl. Kap. 5.2).

### 2.3.1 Optimierungssoftware SHIP

Die oben skizzierte Abfolge von Schritten zur Inversion von GPR-Daten wird durch das Softwarepaket SHIP bereitgestellt und nach Konfiguration der notwendigen Einstellungen sowie Bereitstellung der notwendigen Daten (incl. Messdaten sowie Anfangs- und Randbedingungen der jeweiligen Simulationen) automatisch ausgeführt.

Hierzu wird zur Lösung des Vorwärtsproblems zunächst eine Simulation der Bodenwasserdynamik mit muPhi durchgeführt (vgl. Kap. 2.1.4). Aus deren Ergebnis wird über das CRIM-Modell aus Gleichung 20 die Verteilung der elektrischen Permittivität ermittelt und auf dieser Basis folgt die Simulation der GPR-Messung mit MEEPGPR (vgl. Kap. 2.2.1).

Der Vergleich von simulierten und gemessenen Radargrammen wird ursprünglich von dem Paket ProcessGPR durchgeführt, das auf der Arbeit von Buchner et. al.<sup>49</sup> beruht und von Jaumann<sup>31</sup> weiterentwickelt wurde. Dieser Prozess wird durch das im Rahmen der vorliegenden Arbeit neu entwickelte Datenzuordnungsverfahren (vgl. Kap. 3) und die modifizierte Berechnung des Residuums (vgl. Kap. 4) ersetzt. Hierzu wird das neu entwickelte Bildanalyse-Softwarepaket in SHIP eingebunden. Nur einige Datenprozessierungsschritte verbleiben aus technischen Gründen bei ProcessGPR, sodass dort die Schnittstelle zum Bildanalysepaket liegt.

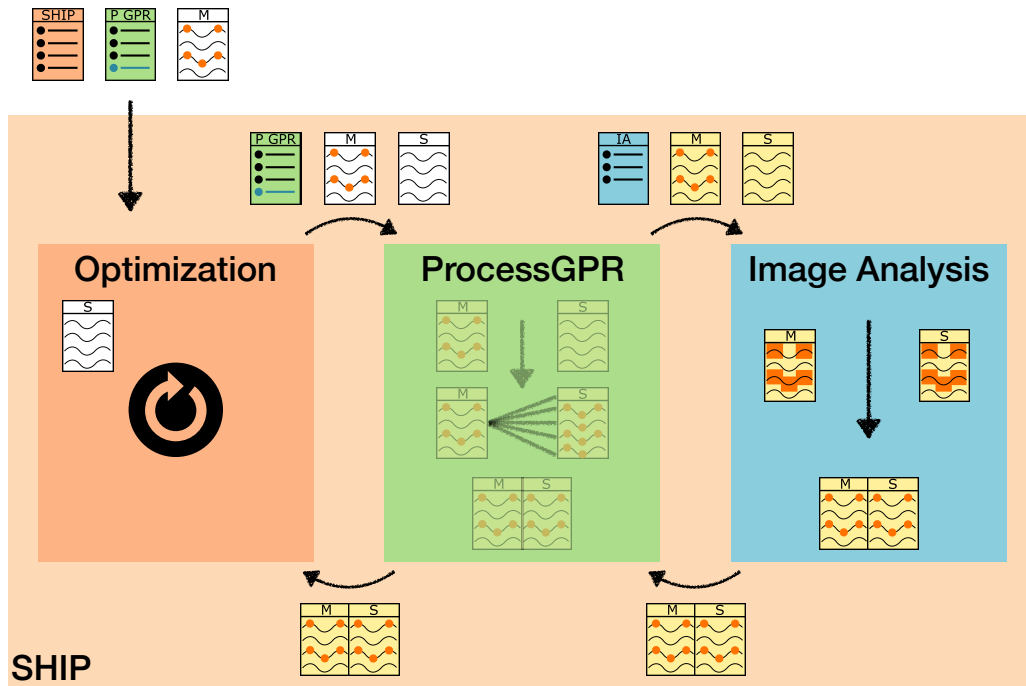
Basierend auf dem berechneten Residuum wird die nächste Iteration eines von verschiedenen in SHIP implementierten Optimierungsalgorithmen durchgeführt (vgl. Kap. 2.3.2). Mit dementsprechend modifizierten Parametern beginnt eine neue Iteration des Optimierungsverfahrens mit der erneuten Lösung des Vorwärtsproblems (s.o.). Das erläuterte Verfahren und die Struktur der verschiedenen Softwarepakete sind schematisch in Abb. 3 veranschaulicht. Details zu den Schnittstellen der Pakete folgen auch in Kapitel 3.1.

### 2.3.2 Optimierungsalgorithmen

Von den in SHIP implementierten Optimierungsalgorithmen wird in dieser Arbeit hauptsächlich der Levenberg-Marquardt-Algorithmus<sup>56-58</sup> eingesetzt. Dabei handelt es sich um einen weit verbreiteten iterativen Optimierungsalgorithmus für nichtlineare Optimierungsprobleme. Es wird das Gauß-Newton-Verfahren kombiniert mit dem Gradientenverfahren, wobei der Parameter  $\lambda_{LM}$  den fließenden Übergang zwischen den beiden Verfahren erlaubt und im Laufe der Optimierung automatisch angepasst wird.

Die Implementierung in SHIP basiert auf dem Verfahren von Moré<sup>58</sup> mit einigen Veränderungen<sup>59,60</sup> insbesondere zur Anpassung des Parameters  $\lambda_{LM}$  im Laufe der Optimierung und ist im Detail bei Jaumann<sup>31</sup> erläutert.





**Abbildung 3:** Funktionsschema der Software SHIP mit den bisherigen Softwarepaketen „Optimization“ zum Einsatz verschiedener Optimierungsalgorithmen und „ProcessGPR“, das ersetzt wird durch das neue Paket „Image Analysis“ zur musterbasierten Analyse aus der Bildverarbeitung. Zwei Konfigurationsdateien und eine Messung mit ausgewählten Ereignissen (orange markierte Punkte) werden vom Nutzer zur Verfügung gestellt. Im Optimierungspaket wird eine Simulation erzeugt, in ProcessGPR prozessiert (gelbe Unterlegung) und direkt an das Bildanalysepaket weitergegeben (ehemaliges Verfahren semitransparent sichtbar). Featurebasierte Zuordnung und Residuumsberechnung finden dort statt und die Ergebnisse werden in von den vorhandenen Paketen verwertbaren ereignisbasierten Formaten zurückgegeben an die Optimierung, die basierend darauf die Folgeiteration startet. Zur Wahrung der Übereinstimmung mit dem Quellcode werden die englischen Bezeichnungen der Softwarepakete beibehalten.

Zur Anpassung von  $\lambda_{\text{LM}}$  wird die Methode der verzögerten Belohnung (delayed gratification) nach Transtrum und Sethna<sup>60</sup> eingesetzt: Hat eine Parameteränderung keinen Erfolg, kann also das Residuum nicht reduzieren, so wird  $\lambda_{\text{LM}}$  um den Faktor 3 erhöht, was den Einfluss des Gauß-Newton-Algorithmus dämpft und das Gradientenverfahren stärkt. So können beispielsweise auf einem Plateau des Residuumsfeldes unkontrolliert große Schritte des Gauß-Newton-Algorithmus verhindert werden. Ist eine Parameteränderung dagegen erfolgreich, so wird  $\lambda_{\text{LM}}$  halbiert und damit der Einfluss des Gauß-Newton-Verfahrens gestärkt. Auf diese Weise kann dessen im Vergleich zum Gradientenverfahren oft schnellere Konvergenz nahe eines Minimums genutzt werden.

---

### 3 Musterbasierte Datenzuordnung

Im Folgenden wird die im Rahmen dieser Arbeit neu entwickelte Methode der Datenzuordnung von Simulations- und Messdaten aus GPR-Messungen vorgestellt, mit der die Zuordnung durch den Einsatz musterbasierter Bildanalysemethoden verbessert und beschleunigt werden kann. Diese Datenzuordnung ist ein zentraler Schritt zur Schätzung von Materialparametern (vgl. Kap. 5) durch Inversion von GPR-Messdaten (vgl. Kap. 2.3). Der Fokus dieses Kapitels liegt auf der detaillierten Funktionalität des Zuordnungsalgorithmus. Darüber hinaus wird an entscheidenden Stellen auch auf die konkrete Implementierung in dem zu diesem Zweck neu entwickelten Bildanalyse-Softwarepaket für SHIP eingegangen, um sowohl dessen Nutzung als auch eventuelle zukünftige Modifikationen des Programmcodes zu erleichtern.

Um die Zuverlässigkeit der Zuordnung zu erhöhen, verfolgt die Bildanalysemethode den Ansatz, aus den örtlich oder zeitlich aufeinanderfolgenden und dadurch oft korrelierten Traces eines Radargramms möglichst viele Informationen über die Plausibilität einer Reflexions-Zuordnung zu generieren und so Fehlzusordnungen zu reduzieren und die Aussagekraft des Residuums zu erhöhen. Es werden daher stets Daten mehrerer Traces eines Radargramms gemeinsam ausgewertet. Da die Daten eines Radargramms ein zweidimensionales Skalarfeld darstellen, liegt ein Datenformat analog zu dem eines Bildes vor und es lassen sich Methoden aus der Bildbearbeitung und -analyse auf die Daten übertragen. Hierbei werden einzelne Bereiche eines gemessenen Radargramms betrachtet, die üblicherweise eine Reflexion und einen Teil ihrer Umgebung beinhalten. Diese im Folgenden als Features bezeichneten Bereiche werden mit entsprechenden Features aus einem korrespondierenden simulierten Radargramm verglichen, um die am besten passende Zuordnung zu bestimmen.

Aufgrund der aufgezeigten Analogie zu Bilddaten werden hier für Radargrammdaten Begriffe verwendet, die aus dem Kontext der Bildverarbeitung stammen wie beispielsweise Position, Abstand oder Umgebung. Es ist zu beachten, dass es sich dabei stets um eine Referenz zur oben beschriebenen Analogie handelt und die Verwendung dieser Begriffe außerhalb dieser Analogie zunächst physikalisch unzutreffend ist. Stattdessen sind einzelne Datenpunkte im Radargramm ausschließlich durch die Koordinaten Signallaufzeit und Tracenummer zu identifizieren. Die Betrachtung einer Umgebung in der Bilddatenanalogie ist physikalisch zunächst nur in der Dimension der Signallaufzeit sinnvoll, da jeder von der Antenne ausgestrahlte Signalpuls eine zeitliche Ausdehnung hat. Die Umgebung in der Dimension der Tracenummer ist im Gegensatz dazu von der individuellen Auswahl der Messdaten abhängig, stammt daher aus verschiedenen Messungen und kann sowohl räumliche als auch zeitliche Veränderung bedeuten. Bei den üblichen

GPR-Messverfahren (vgl. Kap. 2.2.1) ist diese Veränderung oft so gering, dass eine Korrelation aufeinanderfolgender Traces zu erwarten ist, da das untersuchte Volumen sich überschneidet bzw. noch in ähnlichem Zustand ist. Aus diesem Grunde ist es hilfreich, auch diese Korrelation zur Datenzuordnung zu nutzen und in der Bildverarbeitungsanalogie die zweidimensionale Umgebung einer Reflexion im Radargramm zu betrachten. Dabei sind die oben beschriebenen Einschränkungen der Analogie und insbesondere der verwendeten Begrifflichkeiten stets zu beachten. Dies wird im Folgenden vorausgesetzt und nicht mehr explizit benannt.

## 3.1 Schnittstelle des Bildanalyse-Softwarepakets

Zunächst soll die Schnittstelle des Bildanalyse-Softwarepakets zum ursprünglichen Programmcode der Optimierungssoftware SHIP vorgestellt werden. Hierbei stehen Überlegungen zur größtmöglichen Abwärtskompatibilität und damit der einfachen Anwendung auf Altfälle im Vordergrund.

Die Position des Bildanalysepakets in der Softwarearchitektur (vgl. Abb. 3) wird daher so definiert, dass ausschließlich Kontakt zum ProcessGPR-Paket von SHIP besteht, das im Originalzustand die gesamte Verarbeitung der GPR-Daten übernimmt. Auf diese Weise ist vonseiten des SHIP-Optimierungsverfahrens zunächst keine Abweichung der Datenstrukturen erkennbar und alle SHIP-internen Prozesse und Schnittstellen bleiben unverändert in ihrer Funktion. Dies gewährleistet eine einfache Schnittstelle und damit Flexibilität bei eventuellen späteren Änderungen der Software.

Durch einen Eintrag in der ProcessGPR-Konfigurationsdatei kann die Verwendung der Bildanalyse ein- oder ausgeschaltet werden. Sollen ansonsten Standardeinstellungen verwendet werden, so ist dies der einzige notwendige Schritt, um die Bildanalyse anstelle des bisherigen Verfahrens auf einen bereits vorhandenen Altfall anzuwenden.

Zur Verwendung des Bildanalysepakets werden die Eingabedaten in ProcessGPR in jedem Optimierungsschritt automatisch zusammengestellt. Dabei handelt es sich um das gemessene Radargramm incl. der Mittelpunkte der vom Nutzer ausgewählten Features, die zugeordnet werden sollen, das simulierte Radargramm des aktuellen Optimierungsschrittes sowie eine Bildanalyse-Konfigurationsdatei, in der alle weiteren Einstellungsmöglichkeiten festgehalten werden. Diese Datei ist der einzige Teil der Eingabedaten, der nicht ohnehin bereits in der ursprünglichen Version zur Laufzeit verfügbar ist. Sollen hier bestimmte Einstellungen angepasst werden, können deren Werte in der ProcessGPR-Konfigurationsdatei angegeben werden und werden daraufhin in die automatisch neu erstellte Bildanalyse-Konfigurationsdatei übernommen. So wird die Einführung einer neuen vom Nutzer zu erstellenden Konfigurationsdatei vermieden und die Nutzung von SHIP daher nahezu identisch zur

ursprünglichen Situation gehalten. Die verschiedenen Einstellungsmöglichkeiten der Bildanalyse werden in den Folgenden Abschnitten im Zuge der Erläuterungen zu den jeweiligen Funktionen erklärt.

Um die Kompatibilität zu gewährleisten, orientiert sich auch die Struktur der Ausgabedaten an den Fähigkeiten von ProcessGPR. Hierfür werden die Zuordnungsdaten stark vereinfacht und auf die zugeordnete Position sowie einen weiteren Zahlenwert pro Feature reduziert. Dieser Zahlenwert wird von SHIP als Amplitude interpretiert, kann aber unter Kenntnis der Originalamplitude auch verwendet werden, um in Form der Differenz beider Werte beliebige Residuen zurückzugeben. Dies wird insbesondere für die Variation der Residuumberechnung verwendet, auf die in Kapitel 4 eingegangen wird. So wird erreicht, dass für die Bildanalyse-Berechnungen sowie die Neuberechnung des Residuums die gesamte Vielfalt von modernen python-Paketen zur Verfügung steht, ohne das Nutzungserlebnis über minimale Anpassungen hinaus zu verändern.

### 3.2 Festlegung von Features

Der erste wichtige Schritt des Bildanalyseverfahrens ist die Extraktion der zuzuordnenden Features aus den Eingabedaten. Dazu ist es zunächst nötig, interessante Positionen im Radargramm zu erkennen. Im Anschluss wird zu jeder Position die relevante Umgebung bestimmt, die das Feature enthalten soll und die damit als Vergleichsbereich die Datengrundlage für die Zuordnung darstellt.

**Erkennung** Die Erkennung zuzuordnender Positionen in einem Radargramm, im Folgenden auch Ereignisse genannt, wird stets auf den Messdaten durchgeführt. Dies hat den Vorteil, dass die Daten vor Beginn des Optimierungsverfahrens vorliegen und sich im Verlauf desselben auch nicht mehr verändern. Somit kann die Erkennung einmalig vor Beginn durchgeführt werden und definiert damit einen zentralen Teil des zu lösenden Optimierungsproblems.

Auf den simulierten Daten, die in jeder Iteration des Optimierungsverfahrens neu berechnet werden, ist keine Erkennung notwendig. Es wird dort direkt nach passenden Zuordnungspositionen für die Features der Messdaten gesucht (vgl. Kap. 3.3).

Da die Erkennung bzw. Auswahl zuzuordnender Ereignisse nur einmalig durchzuführen ist, kann dieser Schritt manuell vom Nutzer ausgeführt werden. Die hierzu genutzte Funktion ist in ProcessGPR bereits enthalten und kann auch in Kombination mit dem Bildverarbeitungspaket weiter genutzt werden. Es können beliebig viele Positionen des Radargramms ausgewählt werden. Hierbei sollte beachtet werden, dass die Anzahl der gewählten Ereignisse pro GPR-Reflexion deren Gewicht im Optimierungsprozess mitbestimmt (vgl. Kap. 4). Daher sollte

soweit möglich auf eine ausgewogene Verteilung der Ereignisse auf die verschiedenen Reflexionen bzw. Materialien im untersuchten Volumen geachtet werden. Die Auswahl einer Position als Ereignis bedeutet allgemein eine Kennzeichnung der Wichtigkeit des umgebenden Datenbereiches für das Optimierungsverfahren. Es ist dementsprechend auch denkbar, anstelle von Reflexionen bewusst Radargrammbereiche geringer Amplituden auszuwählen, wenn deren Reproduktion durch die Simulation als wichtig eingestuft wird.

**Featuregröße und -form** Um aus einer ausgewählten Referenzposition ein Feature zu generieren, muss der Bereich bestimmt werden, der zum Zweck der Datenzuordnung als relevante Umgebung der Position betrachtet werden soll.

Hierzu hat der Nutzer die Möglichkeit, zwei Steuerungsparameter anzugeben. Zunächst wird je Dimension des Bildes die Einheitsgröße in Pixeln angegeben, die den Daten zugrunde liegt. Diese entspricht, sofern nicht anders angegeben, üblicherweise der Periodendauer des Radarpulses in der Dimension der Signallaufzeit und einer einzelnen Trace in der Dimension der Traces. Somit ist auf einem Bildbereich einer Einheitsgröße genau eine Wellenlänge einer Reflexion auf einer Trace zu sehen. Die gewünschte Featuregröße wird dann je Dimension in Vielfachen der Einheitsgröße angegeben. Der Featurebereich wird symmetrisch und auf ganze Pixel reduziert um die Referenzposition herum eingeteilt, sodass diese zunächst den Mittelpunkt des Features bildet.

Liegt ein auf diese Weise definiertes Feature teilweise außerhalb des Radargrammbereichs, weil die angegebene Position nahe am Rand gelegen ist, so wird das Feature entsprechend zugeschnitten und auf den Bereich des Radargramms verkleinert. Abschließend liegt daher die Referenzposition nicht mehr zwingend im Mittelpunkt des Features.

Des Weiteren ist zu erwähnen, dass bereits die Struktur der Speicherung der Bilddaten im Bildverarbeitungspaket sicherstellt, dass unabhängig von dessen Nutzung stets zwei zusammengehörige zuzuordnende Bilder incl. deren relativer Position gespeichert werden. Dies sind im Falle dieser Arbeit immer ein gemessenes und ein simuliertes Radargramm.

### 3.3 Zuordnung von Features

Die Zuordnung der in Kapitel 3.2 festgelegten Features des gemessenen Radargramms zu jeweils einer Position in dem in jeder Iteration des Optimierungsverfahrens neu berechneten simulierten Radargramm muss aufgrund der wiederholten Durchführung automatisch stattfinden.

### 3.3.1 Strukturbasierter Vergleichsalgorithmus

Zur automatischen Feature-Zuordnung werden verschiedene Algorithmen getestet. Die Verwendung von Verfahren aus der Bildanalyse hat den Vorteil, dass bereits eine große Zahl von Funktionen in Form von frei verfügbaren Softwaremodulen zur Verfügung steht. Im Gegensatz zur ursprünglichen Lösung in SHIP, der kombinatorischen Zuordnung von Extrema der Daten einer Trace (vgl. Kap. 2.3.1), kann hier also durch Einsatz erprobter Algorithmen eine Steigerung von Stabilität und Geschwindigkeit erreicht werden (vgl. Kap. 3.6).

Von den getesteten Algorithmen liefert das Template Matching<sup>20</sup> aus der Softwarebibliothek scikit-image<sup>61</sup> die zuverlässigsten Resultate. Dieses Verfahren basiert auf einer effizienten Implementierung der Berechnung von Kreuzkorrelationen zweier Bilder – einer Vorlage und allen gleich großen Ausschnitten aus einem Vergleichsbild.<sup>21</sup> Hierbei ist jeweils ein Feature der Messdaten die Vorlage und ein Bereich des simulierten Radargramms das Vergleichsbild.

Der Vergleichsbereich kann vom Nutzer je Bilddimension in Vielfachen der Featuregröße angegeben werden. Dieser Wert wird im Folgenden als Mobilität  $m$  des Features bezeichnet und entscheidet darüber, wie weit das Feature bei der Zuordnung zur Simulation maximal verschoben werden kann. Für ein Feature mit Ursprungspunkt  $F_0 (n_{F_0}, t_{F_0})$  und Endpunkt  $F_1 (n_{F_1}, t_{F_1})$  sowie der Breite  $N_F = n_{F_1} - n_{F_0}$  und Höhe  $T_F = t_{F_1} - t_{F_0}$  gilt daher für dessen Verschiebungen  $\Delta n$  und  $\Delta t$

$$|\Delta n| \leq \Delta n_{\max} = m_n N_F \quad \text{bzw.} \quad |\Delta t| \leq \Delta t_{\max} = m_t T_F. \quad (21)$$

Eine Verschiebung über den Rand der Daten hinaus ist nicht möglich. Im Standardfall wird eine Mobilität von  $m_t = 2,5$  in der Laufzeitdimension sowie  $m_n = 0$  in der Dimension der Tracenummer verwendet. Auf diese Weise wird gewährleistet, dass die Daten benachbarter Traces zwar wegen ihrer Korrelation als Informationsquelle zur Zuordnung genutzt werden können, allerdings die Zuordnung über Traces hinweg nicht stattfindet. Da verschiedene Traces Daten aus separaten Experimenten enthalten, darf bei der Zuordnung keine Vermischung der Daten verschiedener Traces stattfinden.

Für die folgenden Betrachtungen wird der auf die maximale Verschiebung normierte relative Verschiebungsvektor

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} v_n \\ v_t \end{pmatrix} \quad (22)$$

betrachtet, dessen Komponenten sich ergeben zu

$$v_n = \begin{cases} \frac{\Delta n}{\Delta n_{\max}} & ; \Delta n_{\max} \neq 0, \\ 0 & ; \text{sonst} \end{cases} \quad \text{bzw.} \quad v_t = \begin{cases} \frac{\Delta t}{\Delta t_{\max}} & ; \Delta t_{\max} \neq 0, \\ 0 & ; \text{sonst.} \end{cases} \quad (23)$$

Für alle möglichen Verschiebungspositionen berechnet der Algorithmus des Template Matching Übereinstimmungswerte  $\tilde{\beta}(\mathbf{v}) \in [-1, 1]$ , die der Einfachheit halber als Strukturfeld

$$\beta(\mathbf{v}) = \frac{1}{2} [\tilde{\beta}(\mathbf{v}) + 1] \quad (24)$$

im Intervall  $[0, 1]$  weiterverwendet werden.

### 3.3.2 Zuordnungsfeld

Um auf Basis des Strukturfeldes eine am besten geeignete Zuordnung zu bestimmen, wird zusätzlich die Ausgangsposition des Features genutzt, denn zunächst ist eine direkte Zuordnung ohne Verschiebung die naheliegendste Variante. Dieses unabhängig von der Betrachtung der Datenstruktur vorhandene Vorwissen wird genutzt, um das Strukturfeld  $\beta(\mathbf{v})$  so zu gewichten, dass bei gleicher struktureller Ähnlichkeit eine Zuordnung mit kleinerer Verschiebung bevorzugt wird. So wird mit der Verschiebungsstrafgewichtung  $\gamma(\mathbf{v})$  das Zuordnungsfeld  $\alpha(\mathbf{v})$  berechnet zu

$$\alpha(\mathbf{v}) = \gamma(\mathbf{v})\beta(\mathbf{v}). \quad (25)$$

**Verschiebungsstrafe** Die Verschiebungsstrafgewichtung wird so gewählt, dass sie nur vom relativen Verschiebungsbetrag  $v = |\mathbf{v}|$  abhängig ist, und folgt einer nicht normierten Beta-Verteilung im Intervall  $(v_{\min}, v_{\max})$ . Auf die Normierung kann hier verzichtet werden, da nur der relative Vergleich verschiedener Zuordnungen relevant ist. Es ergibt sich

$$\gamma(v) = [v - v_{\min}]^{p-1} [v_{\max} - v]^{q-1}. \quad (26)$$

Es wird eine symmetrische konkave Beta-Verteilung (beide Parameter  $p = q = 2$ ) um die Ausgangsposition des Features bei  $v = 0$  herum gewählt, die bis zur maximal möglichen Verschiebung bei  $v = 1$  auf null abfällt, wodurch sich die Verteilungsparameter zu  $v_{\min} = -1$  und  $v_{\max} = 1$  ergeben. Unter Beachtung von  $v \geq 0$  folgt für die Verschiebungsstrafgewichtung

$$\gamma(v) = \begin{cases} 1 - v^2 & ; 0 \leq v \leq 1, \\ 0 & ; \text{sonst.} \end{cases} \quad (27)$$

Diese Verteilung wird gewählt, da sie das unabhängig vom Strukturfeld vorhandene Vorwissen gut repräsentiert. Die sich so ergebende quadratische Verschiebungsstrafe trägt der Tatsache Rechnung, dass in der Umgebung der Ausgangsposition Verschiebungen wegen noch nicht optimierter hydraulischer Parameter zu erwarten sind. Hier soll bei mehreren strukturell ähnlich guten Zuordnungsmöglichkeiten der



Einfluss  $\left|\frac{d\gamma}{dv}\right|$  der Verschiebung relativ gering sein und vorrangig die strukturelle Ähnlichkeit über die Zuordnung entscheiden. Mit zunehmender Größe der Verschiebung steigt jedoch die Wahrscheinlichkeit einer Fehlzusordnung an, sodass der Einfluss der Verschiebung zunehmen muss. Dies wird durch die gewählte Verteilung gewährleistet.

Die entscheidenden Parameter sind hier die Featuregröße und -mobilität aus Gleichung 21, die die Größe des Bereichs möglicher Zusordnungen und damit auch die Breite der Verteilung  $\gamma(v)$  bestimmen. Diese sind je nach Struktur der Eingabedaten und Variation der hydraulischen Parameter im Optimierungsensemble so anzupassen, dass relevante Strukturen erfasst werden und der Suchbereich für passende Zusordnungen eine angemessene Größe erhält. Um diese Anpassung weitgehend zu automatisieren, werden im Folgenden verschiedene Feature-Ebenen eingeführt, die die simultane Berücksichtigung von Strukturen verschiedener Größe erlauben (vgl. Kap. 4.3).

**Zuordnung und Zuordnungswert** Da das Zusordnungsfeld sowohl die Information aus dem Strukturvergleich als auch das Vorwissen über die zu erwartende Verschiebung beinhaltet, kann auf dessen Basis eine Zusordnung bestimmt werden. Als am besten geeignete Zusordnung  $\mathbf{v}_Z$  wird diejenige betrachtet, die durch das Maximum des Zusordnungsfeldes bestimmt wird, sodass gilt

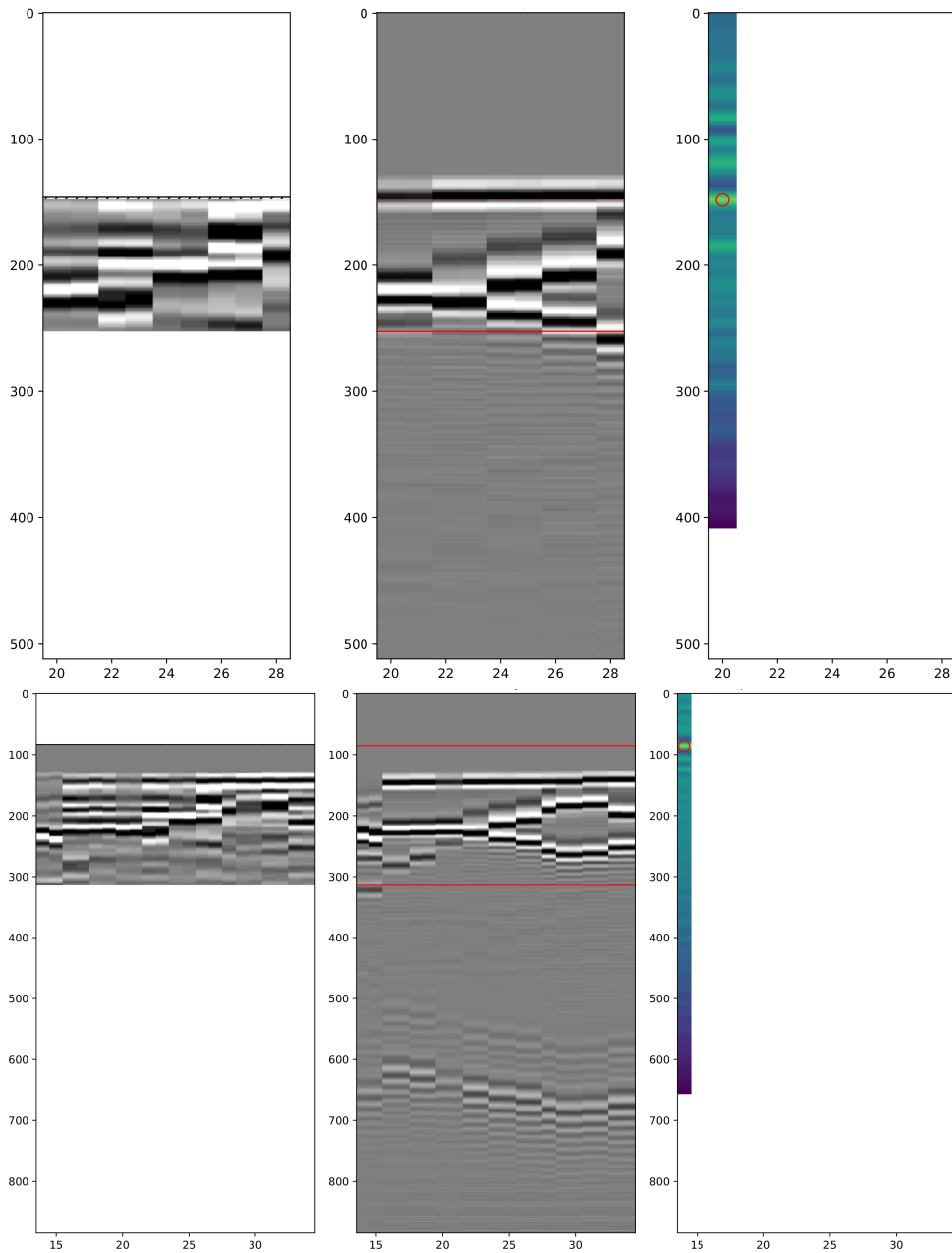
$$\alpha(\mathbf{v}_Z) = \max(\alpha(\mathbf{v})) =: \alpha_Z. \quad (28)$$

Insbesondere wird in der obigen Gleichung der Zusordnungswert  $\alpha_Z$  als maximaler Wert des Zusordnungsfeldes definiert. Da  $\beta(\mathbf{v}) \in [0, 1]$  und  $\gamma(\mathbf{v}) \in [0, 1]$ , liegt auch der Zusordnungswert gemäß Gl. 25 im Intervall  $[0, 1]$ . Er beinhaltet Informationen sowohl über die strukturelle Ähnlichkeit der zugeordneten Features als auch über deren Verschiebung (vgl. Gleichung 25) und ist somit ein Indikator der Zuverlässigkeit der Zusordnung. Angesichts der fehlenden Möglichkeit der Korrektheitsbestimmung einer Zusordnung (vgl. Kap. 3.4.1) handelt es sich hierbei um die bestmögliche Quantifizierung der Zuverlässigkeit. Unmittelbar mit dem Zusordnungswert verknüpft ist daher auch das in Kapitel 4.1.3 eingeführte Zusordnungsresiduum in Gleichung 34.

Die beispielhafte Zusordnung zweier Features unterschiedlicher Größe des gleichen Ereignisses und das jeweils zugrunde liegende Zusordnungsfeld sind in Abb. 4 dargestellt.

### 3.4 Zuverlässigkeit der Zusordnung

Bei der Verwendung der Zusordnungsdaten aus Kapitel 3.3 ist die Frage nach deren Zuverlässigkeit entscheidend. Hierzu werden in diesem Kapitel die Bedeutung der



**Abbildung 4:** Zuordnung eines kleineren (oben) und größeren (unten) Features des gleichen Ereignisses. Es befindet sich jeweils links das Feature der Messung und in der Mitte der durch die Mobilität bestimmte Vergleichsbereich in der Simulation mit rot markierter Zuordnung sowie rechts das Zuordnungsfeld mit rot markiertem Maximum. Dabei beziehen sich die Koordinaten des Zuordnungsfeldes auf den Ursprung des Features (linke obere Ecke). Die periodische Datenstruktur spiegelt sich im Zuordnungsfeld wider. Aufgrund der Verschiebungsstrafe sinkt das Zuordnungsfeld zum Rand hin ab. Alle Koordinaten in Pixeln. Messdaten von Hantschel<sup>19</sup>.

Korrektheit einer Zuordnung sowie die zugrunde liegenden Unsicherheiten genauer betrachtet.

### 3.4.1 Korrektheitsbegriff

Zunächst sei die Frage der Bedeutung des Korrektheitsbegriffs betrachtet. Dazu ist im Allgemeinen festzustellen, dass ein Vergleich zweier Reflexionen im Radargramm nur dann sinnvoll ist, wenn der zugrunde liegende Strahlengang vergleichbar ist.

Für die Vergleichbarkeit des Strahlengangs ist es notwendig, dass die Simulationen auf einem zumindest grob zutreffenden Modell der Bodenarchitektur aufbauen, beispielsweise auf der Annahme einer bestimmten Anzahl von Schichten. Ein solches grobes Architekturmodell kann bei unbekanntem Untergrund z. B. durch einige Kernbohrungen erstellt werden. Auf diese Weise können hydraulische und elektrodynamische Simulationen durchgeführt werden, die zumindest grundsätzlich mit dort durchgeführten GPR-Messungen vergleichbar sind. Dies ist Voraussetzung dafür, die Vergleichbarkeit von Strahlengängen einzelner Reflexionen zu diskutieren. Am ASSESS-Standort für Feldversuche, wo die Messungen der in dieser Arbeit genutzten Daten durchgeführt wurden, ist die Bodenarchitektur künstlich angelegt und daher bekannt, sodass diese Voraussetzung gegeben ist.

Bei der Betrachtung einer einzelnen Reflexion bzw. eines diese Reflexion enthaltenden Features und der zugeordneten Reflexion in der Simulation stellt sich nun die Frage, ob der Strahlengang, der der Reflexion in der Simulation zugrunde liegt, mit demjenigen übereinstimmt, der in der Messung zur zugeordneten Reflexion geführt hat. Beispielsweise ist entscheidend, ob die Reflexion an den gleichen Schichtgrenzen reflektiert wurde, die gleichen Schichten durchlaufen hat etc. Nur in diesem Fall wird die Zuordnung als korrekt bezeichnet und nur dann ist ein Vergleich physikalisch sinnvoll.

Der Feststellung der Korrektheit steht entgegen, dass bei Messungen der Strahlengang, der Reflexionen im Radargramm zugrunde liegt, im Allgemeinen nicht bekannt ist. Bei sehr einfachen Architekturen ist zwar ein direkter Rückschluss möglich, im Allgemeinen handelt es sich jedoch bei dem Begriff der Korrektheit einer Zuordnung stets um eine Annahme, die nicht direkt überprüft werden kann.

Indirekter Hinweis auf Korrektheit kann die Existenz einer Simulation sein, die die Messung ausreichend gut reproduziert. Um die Simulationsparameter einer solchen Simulation im Optimierungsprozess anzunähern, sind jedoch bereits Zuordnungen notwendig, die somit zunächst ohne Verifikation genutzt werden müssen.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass von verschiedenen Zuordnungen jeweils nur diejenige physikalisch zutreffend ist, die Reflexionen assoziiert, die in Simulation und Messung auf dem gleichen Strahlengang basieren und insbesondere

vom gleichen Reflektor verursacht werden. Da der Strahlengang im Experiment jedoch im Allgemeinen unbekannt ist, kann er hier nicht als Korrektiv herangezogen werden. Unabhängig davon ist jedoch nur eine einzige Zuordnung im oben beschriebenen Sinne als physikalisch korrekt, alle anderen als fehlerhaft zu betrachten.

#### 3.4.2 Unsicherheiten

Bei der Betrachtung der Frage nach der Zuverlässigkeit der Zuordnungen ist neben der Definition des Korrektheitsbegriffs die Erörterung der Ursachen von Unsicherheiten bei der Zuordnung von Bedeutung. In diesem Abschnitt stehen daher die Unsicherheiten im Fokus, die die Funktionalität Zuordnung unmittelbar betreffen und die Notwendigkeit eines speziellen Zuordnungsalgorithmus begründen. Weitere Unsicherheiten in Messung und Simulationen werden im Rahmen der beispielhaften Datenauswertung zur Bestimmung von Materialparametern in Kapitel 5 betrachtet.

Grundsätzlich ist hier zunächst die fehlende Möglichkeit der Korrektheitsbestimmung zu nennen (vgl. Kap. 3.4.1). Aufgrund dieser oben beschriebenen fundamentalen Unsicherheit ergibt sich die Notwendigkeit, anhand von Strukturmerkmalen der Daten nach Übereinstimmungen zu suchen.

Der notwendige Strukturvergleich führt aufgrund der Datenstruktur der Radargramme zu weiteren Unsicherheiten in der Zuordnung. So handelt es sich um eine Folge von Reflexionen des von der Antenne ausgestrahlten elektromagnetischen Pulses, die daher alle die gleiche Wellenlänge aufweisen. Diese Wellenstruktur der Daten wird im Folgenden als Mikrostruktur bezeichnet. Die Strukturen im untersuchten Material, die sich durch verschiedene Reflexionen zeigen, werden zur Unterscheidung als Makrostrukturen bezeichnet. Sobald neben den ohnehin ähnlichen Mikrostrukturen auch die Makrostrukturen Ähnlichkeiten aufweisen, z. B. mehrere parallele Schichtgrenzen im Boden, ist eine Unterscheidung rein auf Basis der Messdaten einer Reflexion nicht mehr eindeutig möglich. Dies gilt insbesondere, wenn die Laufzeitdifferenzen mehrerer Reflexionen gering sind.

Hinzu kommt die Abhängigkeit der Reflexionslaufzeit und -amplitude von den a priori unbekanntem geophysikalischen Parametern. So wird zur Bestimmung dieser Parameter ein Ensemble von Optimierungen über einen Bereich des Parameter-raums hinweg initialisiert, sodass besonders zu Beginn des Optimierungsprozesses die Makrostrukturen der simulierten Radargramme sich zum Teil deutlich von denen der Messung unterscheiden. Es kommt zu Verschiebungen, Verzerrungen oder auch zum Wegfall oder Erscheinen anderer Reflexionen. Angesichts der Ähnlichkeit in der Mikrostruktur bietet auch diese kein Unterscheidungs- bzw. Zuordnungskriterium. Somit sind Unterscheidung und Zuordnung von Reflexionen nicht immer

eindeutig. Besonders in Fällen, in denen es bereits in der Messung oder durch veränderte Parameter in der Simulation zu Interferenz verschiedener Signale kommt, kann bereits eine geringe Veränderung der zu bestimmenden geophysikalischen Parameter des Bodens zu verschiedenen denkbaren Zuordnungen führen.

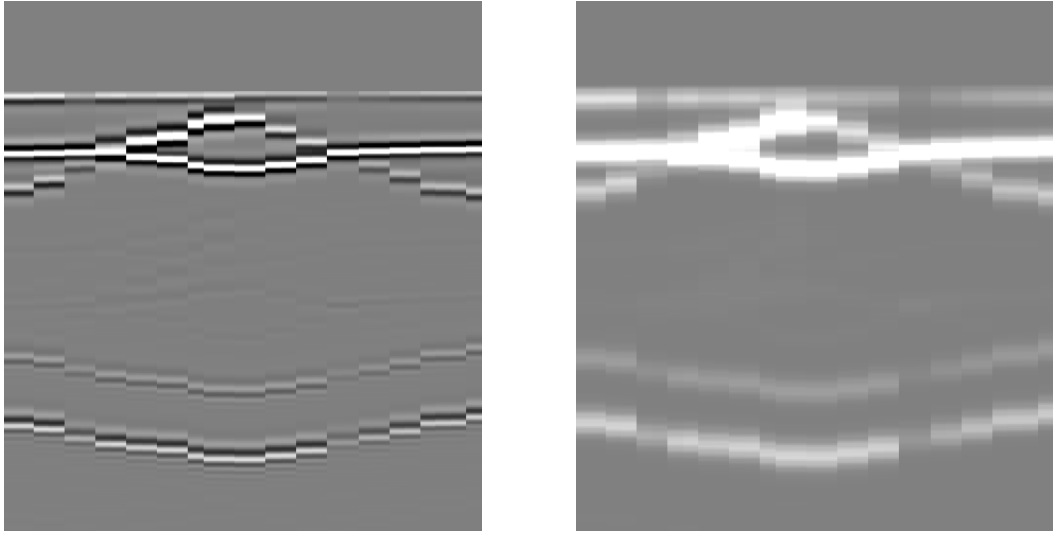
Oft ist bei der Auswertung von experimentellen Daten allein durch die Durchführung der Messung klar, welchen Daten einer korrespondierenden Simulation sie zugeordnet werden müssen, beispielsweise durch Ort oder Zeitpunkt der Messung. Im Fall von GPR-Daten hingegen sind zwar auch Ort und Zeitpunkt jeder Einzelmessung (Trace) bekannt, aufgrund der oben erläuterten Unsicherheiten ist jedoch die Zuordnung zu korrespondierenden Simulationen auf eine davon unabhängige Datenzuordnungsmethode angewiesen. Daher wird im Optimierungsprozess der Zuordnungswert aus Gleichung 28 als bestes verfügbares Maß der Zuverlässigkeit einer Zuordnung verwendet und bildet so die Basis des Zuordnungsresiduums (vgl. Kap. 4.1.3).

### 3.5 Modifikation der Bilddaten

Neben den Funktionen zur Zuordnung von Features bietet das Bildanalyse-Softwarepaket auch Funktionen zur Modifikation der Daten. In diesem Abschnitt steht besonders die Funktion zur Unterscheidung von Mikro- und Makrostruktur im Fokus, also der grundsätzlichen Wellenstruktur der Daten einerseits und der durch die verschiedenen Reflexionen aufgebauten größeren Struktur andererseits. Darüber hinaus bestehen noch einige weitere Modifikationsmöglichkeiten, die allerdings für diese Arbeit keine Relevanz haben und daher hier nicht vorgestellt werden.

Der strukturbasierte Vergleich von Simulations- und Messdaten berücksichtigt alle in einem Feature enthaltenen Merkmale und unterscheidet nicht zwischen Mikro- und Makrostruktur. Im Gegensatz zur Makrostruktur, die einen Großteil der relevanten Information über das untersuchte Materialvolumen enthält, ist die Mikrostruktur vor allem durch die Wellenlänge des eingestrahlten Signals bedingt. Ausnahme hiervon ist nur die Phaseninformation einer Reflexion, über die eine Unterscheidung von Reflexionen an Bereichen höherer bzw. niedrigerer Permittivität möglich ist.

Es ist interessant, die Makro- von der Mikrostruktur getrennt zu betrachten, denn das Vorhandensein der Mikrostruktur verursacht viele lokale Maxima des Zuordnungsfeldes, da eine um Vielfache ihrer Periode verschobene Wellenstruktur sich selbst strukturell ähnlich ist. Dies kann bei konkurrierenden Maxima ähnlicher Stärke zu Sprüngen in der Zuordnung schon bei kleinen Änderungen der hydraulischen Parameter führen und somit auch lokale Minima des Residuumsfeldes verursachen, die den Optimierungsprozess erschweren.



**Abbildung 5:** Die Betrachtung der Amplitude (rechts) anstelle der Originaldaten (links) eines beispielhaften Radargramms. Die Mikrostruktur wird ausgeblendet, während die Makrostruktur erhalten bleibt.

Um die Mikrostruktur auszublenden, besteht die Möglichkeit, anstelle der Auslenkung die Amplitude der Radardaten zu betrachten. Hierzu wird die gleitende Amplitude aus Gleichung 31 verwendet, die auch Grundlage der Berechnung des Amplitudenresiduums ist (vgl. Kap. 4.1.2). Diese Modifikation des Radargramms wirkt analog zu einer Glättung der Daten, sodass die Zuordnung nur noch auf Basis der Makrostruktur durchgeführt wird. Auf diese Weise verlieren die Daten ihre Wellenstruktur und damit werden durch diese Struktur verursachte lokale Extrema ausgeschlossen. Anhand eines Beispiels wird dieser Effekt in Abb. 5 visualisiert.

Aufgrund der verlorenen Information und Detailschärfe aus der Mikrostruktur eignet sich dieses Verfahren vor allem zu Beginn eines Optimierungsprozesses, um in einem großen Bereich des Parameterraumes in einem ersten Schritt Abweichungen von den optimalen Parametern ohne Behinderung durch mikrostrukturbedingte lokale Minima des Residuumsfeldes zu korrigieren. Es sollte stets ein weiterer Schritt unter Berücksichtigung aller Strukturmerkmale folgen (vgl. Kap. 5.2). Im Standardfall ist die Modifikation der Bilddaten deaktiviert.

### 3.6 Programmlaufzeit

Mit der Einführung des Bildanalyse-Softwarepakets wird ein sehr rechenaufwändiger Bestandteil der Software SHIP ersetzt. Auf diese Weise kann eine deutlich verkürzte Programmlaufzeit erreicht werden.

In der ursprünglichen Implementierung von SHIP werden für jede Trace einzeln alle Kombinationen der gemessenen Amplituden an den vom Nutzer angegebenen Ereignispositionen mit allen Kombinationen einer variierenden Anzahl automatisch bestimmter Extrema aus der Simulation verglichen, um die bestmögliche Übereinstimmung zu finden. Die Laufzeit dieses kombinatorischen Verfahrens ist stark abhängig von der Anzahl der Ereignisse in der Messung sowie der Anzahl automatisch erkannter und in das Verfahren einbezogener Extrema der Simulation. Die Anzahl der möglichen Kombinationen variiert leicht um mehrere Größenordnungen. Beschränkt werden können die in Betracht gezogenen Ereignisse durch einige Ausschlussverfahren wie z. B. die manuelle Festlegung von Suchbereichen, was jedoch die Übertragbarkeit auf andere Datensätze mit Reflexionen an anderen Bereichen verhindert. Die Laufzeit variiert somit deutlich und unvorhersehbar mit jeder Iteration eines Optimierungsalgorithmus.

Im Gegensatz dazu ist die Laufzeit der Zuordnung durch das Bildanalyse-Softwarepaket proportional zur Anzahl der vom Nutzer angegebenen Ereignisse, da unabhängig von den zu vergleichenden Daten stets die gleichen Berechnungen je Ereignis durchgeführt werden. Die sich so ergebenden Laufzeiten rechenintensiver Schritte einer Iteration von Simulation und Datenanalyse im Optimierungsprozess werden beispielhaft für den in Kapitel 5 genutzten Datensatz in Tabelle 1 angegeben. Es ergibt sich eine Beschleunigung der gesamten Iteration um einen Faktor von 26 sowie für die darin enthaltene reine Analyse der GPR-Daten sogar um einen Faktor von 132. Hierbei ist zu beachten, dass die Laufzeit des kombinatorischen Verfahrens variiert und in ungünstigen Fällen für vergleichbare Datensätze auch bis zu vier Stunden Laufzeit benötigen kann<sup>19</sup>, was die Beschleunigung durch die musterbasierte Datenanalyse weiter vergrößern kann.

Insbesondere führt diese Beschleunigung dazu, dass die benötigte Rechenzeit einer Iteration nicht mehr maßgeblich von der Dauer der GPR-Analyse, sondern hauptsächlich von der Simulation zur Ausbreitung des Radarpulses beeinflusst wird. Der Anteil der für die GPR-Analyse benötigten Rechenzeit an der Gesamtlaufzeit einer Iteration sinkt für den präsentierten Datensatz von 97 % auf 19 %.

|                                   | Kombinatorik |         | Mustervergleich |         | $\frac{t_1}{t_2}$ |
|-----------------------------------|--------------|---------|-----------------|---------|-------------------|
|                                   | $t_1$ (s)    | Anteil  | $t_2$ (s)       | Anteil  |                   |
| <b>Simulation Hydraulik</b>       | 5            | 0,2 %   | 5               | 6,4 %   | 1                 |
| <b>Simulation GPR-Ausbreitung</b> | 58           | 2,8 %   | 58              | 74,4 %  | 1                 |
| <b>Analyse GPR</b>                | 1980         | 96,9 %  | 15              | 19,2 %  | 132               |
| <b>Gesamtlaufzeit</b>             | 2043         | 100,0 % | 78              | 100,0 % | 26                |

**Tabelle 1:** Beispielhafte Programmlaufzeiten rechenintensiver Schritte einer Iteration von Simulation und Datenanalyse im Optimierungsprozess mit der bisherigen kombinatorischen ( $t_1$ ) und der neuen musterbasierten GPR-Datenanalyse ( $t_2$ ). Die Werte basieren auf der Nutzung des in Kapitel 5 genutzten Datensatzes und sind sowohl daten- als auch computerabhängig. Zur Summe von 100 % fehlende Anteile werden durch Rundung verursacht.



---

## 4 Berechnung des Residuums

Um die Ergebnisse der Datenzuordnung aus Kapitel 3 für den Optimierungsprozess einer Inversion (vgl. Kap. 2.3) bestmöglich zu nutzen, ist die Berechnung des Residuums von zentraler Bedeutung. Das Residuum fasst die Informationen aus der Zuordnung zusammen und dient im Optimierungsprozess als zu minimierendes Maß der verbleibenden Abweichung der Simulation von der zugrunde liegenden Messung. Aus seiner Veränderung bei Störung der Parameter werden zudem vom Levenberg-Marquardt-Algorithmus effiziente Optimierungsschritte berechnet. Somit ist das Verfahren der Residuumberechnung entscheidend sowohl für die Effizienz als auch für das Ergebnis des gesamten Optimierungsprozesses.

Um den Unterschied zwischen einem simulierten und einem gemessenen Radarogramm zu quantifizieren, können verschiedene physikalische Größen herangezogen werden. Hier sind insbesondere die Amplitude und die Laufzeit einer Reflexion zu nennen, die bei gegebener Zuordnung zweier Reflexionen verglichen werden können, um ein Residuum zu berechnen. Zudem stehen auch weitere Informationen aus der Datenzuordnung zur Verfügung, beispielsweise der Zuordnungswert. Im Folgenden wird erläutert, welche Verfahren im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden, um aus den verfügbaren Daten verschiedene Typen von Residuen zu berechnen. Diese werden gewichtet und aus den einzelnen Residuen der verschiedenen Features wird abschließend das Gesamtresiduum berechnet. Dabei ist sowohl auf die physikalische Aussagekraft des Residuums zu achten, als auch darauf, dass ein auf Basis des Gesamtresiduums operierendes Optimierungsverfahren hohe Effizienz aufweist, was beispielsweise durch die Verringerung der Häufigkeit lokaler Minima des Residuums im Parameterraum erreicht werden kann.

In diesem Kapitel stehen die aufeinander aufbauenden Bestandteile der Residuumberechnung und deren Zusammenhang im Mittelpunkt. Gleichzeitig soll, wo angemessen und notwendig, auch ein kurzer Überblick über die zugehörige Implementierung des Bildanalyse-Softwarepakets gegeben werden.

### 4.1 Residuumstypen

#### 4.1.1 Laufzeitresiduum

Zu Beginn soll das naheliegendste Residuum vorgestellt werden. Bei dem Vergleich von simulierten und gemessenen Radarogrammen kommt es vor, dass eine Reflexion zwar in beiden Radarogrammen vorkommt, allerdings die Signallaufzeit unterschiedlich ist. Diese Abweichung wird durch das Laufzeitresiduum charakterisiert.

Es ist zu beachten, dass die Berechnung einer Laufzeitdifferenz unmittelbar auf der Korrektheit der Zuordnung der beiden verglichenen Reflexionen beruht, da nur

bei Betrachtung korrespondierender Strahlengänge in Simulation und Messung ähnliche Laufzeiten zu erwarten sind. Somit verliert das Laufzeitresiduum bei Fehlzuordnungen jede physikalische Bedeutung (vgl. Kap. 4.2.1).

Das absolute bzw. relative Laufzeitresiduum  $r_{t,\text{abs}}$  bzw.  $r_{t,\text{rel}}$  eines Features ergibt sich aus den simulierten und gemessenen Laufzeiten  $t_S$  und  $t_M$  zu

$$r_{t,\text{abs}} = t_S - t_M \quad \text{bzw.} \quad r_{t,\text{rel}} = \frac{t_S - t_M}{t_M}, \quad t_M > 0. \quad (29)$$

Die Bedingung  $t_M > 0$  ist üblicherweise erfüllt, da die GPR-Signale eine gewisse Wegstrecke vom Sender zum Reflektor und dann zum Empfänger zurücklegen.

Des Weiteren besteht die Möglichkeit der Betrachtung des Laufzeitresiduums in Relation zur maximalen Verschiebung des Features, die insbesondere im direkten Bezug zu den Bildverarbeitungsmethoden des Zuordnungsalgorithmus interessant ist. Mit der Featuremobilität  $m$  und der Featuregröße  $t_F$  in Laufzeitdimension ergibt sich

$$r_{t,\text{img}} = \frac{t_S - t_M}{m t_F}. \quad (30)$$

Im Standardfall wird das relative Laufzeitresiduum  $r_{t,\text{rel}}$  verwendet, da dies am besten geeignet ist, um eine notwendige Parameterkorrektur der hydraulischen Parameter zu quantifizieren. Die gleiche Laufzeitdifferenz einer tiefer im Boden gelegenen Schichtgrenzreflexion kann durch eine kleinere Parameteränderung korrigiert werden, da die Strahlung eine längere Strecke durch das darüber liegende Material zurücklegt.

### 4.1.2 Amplitudenresiduum

Neben dem Laufzeitresiduum ist das Amplitudenresiduum als zweites Kriterium zur Unterscheidung von simulierten und gemessenen Radargrammen von Bedeutung.

Anders als bei der Laufzeitdifferenz ist hier der Amplitudenwert nicht unmittelbar verfügbar, da der Nutzer ein beliebiges punktförmiges Ereignis zu beliebiger Laufzeit  $t_E$  angibt, um das herum ein Feature konstruiert und verglichen wird (vgl. Kap. 3.2). Am Ereigniszeitpunkt liegt nicht zwingend ein Extremum der Radardaten, sodass die Amplitude der Schwingung nicht unmittelbar abgelesen werden kann.

Stattdessen wird der mittlere Auslenkungsbetrag der Schwingung im Bereich einer Periodendauer um den angegebenen Ereigniszeitpunkt herum verwendet, um einen gleitenden Amplitudenwert  $A(t_E)$  für jeden beliebigen Zeitpunkt  $t_E$

berechnen zu können. Mit Radardaten  $y(t)$ , Periodendauer  $T$  der Radarstrahlung sowie einem Korrekturfaktor  $c$  ergibt sich

$$A(t_E) = \frac{c}{T} \int_{t_E - \frac{T}{2}}^{t_E + \frac{T}{2}} dt |y(t)|. \quad (31)$$

Als Korrekturfaktor wird das Verhältnis von Amplitude  $\hat{u}$  und mittlerem Auslenkungsbetrag  $\tilde{u}$  einer Periode einer harmonischen Schwingung  $u(t) = \hat{u} \cdot \sin(\omega t)$  verwendet, das sich ergibt zu

$$c = \frac{\hat{u}}{\tilde{u}} = \frac{\pi}{2}. \quad (32)$$

Das absolute bzw. relative Amplitudenresiduum  $r_{A,\text{abs}}$  bzw.  $r_{A,\text{rel}}$  eines Features ergibt sich mit den simulierten und gemessenen Amplituden  $A_S$  und  $A_M$  nach Gleichung 31 zu

$$r_{A,\text{abs}} = A_S - A_M \quad \text{bzw.} \quad r_{A,\text{rel}} = \frac{A_S - A_M}{A_M}, \quad A_M > 0. \quad (33)$$

Die Bedingung  $A_M > 0$  ist üblicherweise erfüllt, da es sich um vom Nutzer ausgewählte Ereignisse handelt und somit ein GPR-Signal ungleich null zu erwarten ist.

Des Weiteren ist festzustellen, dass das Amplitudenresiduum genau wie das Laufzeitresiduum auf einer Zuordnung basiert, deren Korrektheit Grundlage für die physikalische Aussagekraft des Residuums ist (vgl. Kap. 4.2.1).

Im Standardfall wird das relative Amplitudenresiduum  $r_{A,\text{rel}}$  verwendet, da die Amplitudenwerte einer Reflexion proportional sind zur Amplitude des eingestrahlten Radarpulses, die mit größerer Eindringtiefe in den Boden abnimmt.

### 4.1.3 Zuordnungsresiduum

Das Zuordnungsresiduum nimmt eine besondere Rolle unter den verschiedenen Residuustypen ein. Es basiert auf der strukturellen Ähnlichkeit sowie Verschiebung der zugeordneten Features und steht gleichzeitig auch für die Zuverlässigkeit der Zuordnung selbst.

Das Zuordnungsresiduum  $r_Z$  ergibt sich mit dem Zuordnungswert  $\alpha_Z$  aus Gleichung 28 zu

$$r_Z = 1 - \alpha_Z. \quad (34)$$

Bei Betrachtung der Berechnung des Zuordnungswertes (vgl. Kap. 3.3.2) wird deutlich, dass das Zuordnungsresiduum mit steigender struktureller Ähnlichkeit

sowie mit sinkender Verschiebung der Features abnimmt. Somit vereint es bereits zwei Optimierungskriterien in sich und bietet sich daher als zentraler Bestandteil des Gesamtresiduums an.

Im Gegensatz zu allen anderen Residuen steht das Zuordnungsresiduum jedoch nicht nur für einen Unterschied zwischen Simulation und Messung, sondern auch für die Zuverlässigkeit der Zuordnung und damit die Zuverlässigkeit aller Residuen. Eine zu geringe Gewichtung dieses Residuums kann daher dazu führen, dass sich die Zuordnungsfehlerrate im Laufe des Optimierungsprozesses erhöht, obwohl das Residuum abnimmt. Die Einbeziehung des Zuordnungsresiduums ist somit essenziell für die Aussagekraft des Gesamtresiduums (vgl. Kap. 4.2.2).

#### 4.1.4 Grauwertresiduum

Da das Zuordnungsresiduum wie der Zuordnungswert (vgl. Kap. 3.3.2) nur die normierten strukturellen Eigenschaften verschiedener Features vergleicht, wird als Ergänzung das Grauwertresiduum zur Verfügung gestellt. Seine Bezeichnung beruht auf der Funktion, im Optimierungsprozess bei Features mit bereits ähnlichen Strukturen für die Annäherung der Grauwerte zu sorgen. Hierzu wird der mittlere Auslenkungsbetrag  $\tilde{y}$  eines Features über seine gesamte Fläche betrachtet.

Für ein Feature mit Ursprungspunkt F0 ( $n_{F0}, t_{F0}$ ) und Endpunkt F1 ( $n_{F1}, t_{F1}$ ) sowie der Breite  $N_F = n_{F1} - n_{F0}$  und Höhe  $T_F = t_{F1} - t_{F0}$  ergibt sich mit Radardaten  $y(n, t)$  der mittlere Auslenkungsbetrag zu

$$\tilde{y} = \frac{1}{N_F T_F} \int_{n_{F0}}^{n_{F1}} dn \int_{t_{F0}}^{t_{F1}} dt |y(n, t)|. \quad (35)$$

Das absolute bzw. relative Grauwertresiduum  $r_{G,abs}$  bzw.  $r_{G,rel}$  eines Features ergibt sich aus den simulierten und gemessenen mittleren Auslenkungsbeträgen  $\tilde{y}_S$  und  $\tilde{y}_M$  nach Gleichung 35 zu

$$r_{G,abs} = \tilde{y}_S - \tilde{y}_M \quad \text{bzw.} \quad r_{G,rel} = \frac{\tilde{y}_S - \tilde{y}_M}{\tilde{y}_M}, \quad \tilde{y}_M > 0. \quad (36)$$

Die Bedingung  $\tilde{y}_M > 0$  ist üblicherweise erfüllt, da es sich um vom Nutzer ausgewählte Ereignisse handelt und somit ein GPR-Signal ungleich null zu erwarten ist, dessen mittlerer Auslenkungsbetrag über den Bereich eines Features hinweg ebenfalls ungleich null ist.

Außerdem wird eine in  $\tilde{y}_M$  und  $\tilde{y}_S$  symmetrische Variante des Grauwertresiduums bereitgestellt, die insbesondere im direkten Bezug zu den Bildverarbeitungsmethoden des Zuordnungsalgorithmus interessant ist:

$$r_{G,img} = 1 - \min\left(\frac{\tilde{y}_M}{\tilde{y}_S}, \frac{\tilde{y}_S}{\tilde{y}_M}\right). \quad (37)$$

Im Standardfall wird das relative Grauwertresiduum  $r_{G,rel}$  verwendet, da der mittlere Auslenkungsbetrag genau wie die Amplitudenwerte einer Reflexion proportional ist zur Amplitude des eingestrahnten Radarpulses, die mit größerer Eindringtiefe in den Boden abnimmt.

## 4.2 Aussagekraft des Residuums

### 4.2.1 Relevanz der Zuordnung

Die automatischen Zuordnungen des Vergleichsalgorithmus in Kapitel 3.3.1 sind nicht vollständig sicher (vgl. Kap. 3.4). Im Sinne des Strahlenganges unzutreffende Zuordnungen und Wechsel zwischen ihnen sind möglich. Es ist keine eindeutige Aussage über die Richtigkeit der Zuordnung möglich, da der Strahlengang aus dem gemessenen Radargramm im Allgemeinen nicht hervorgeht (vgl. Kap. 3.4.1).

Um die Aussagekraft des Residuums einzuschätzen ist es vor diesem Hintergrund hilfreich, das Ziel des Optimierungsverfahrens genauer zu betrachten. Unter der Annahme, alle Zuordnungen seien im Sinne des Strahlenganges korrekt, ergibt sich das (im allgemeinen unbekannte) theoretische Gesamtresiduumsfeld  $R_{th}(\mathbf{p})$  in Abhängigkeit vom Parametervektor  $\mathbf{p}$  aller zu optimierenden Parameter. Ziel der Optimierung ist es, mit möglichst geringem Rechenaufwand die Position  $\mathbf{p}_{th,opt}$  des globalen Minimums zu finden, sodass gilt  $R_{th}(\mathbf{p}_{th,opt}) < R_{th}(\mathbf{p}) \forall \mathbf{p}$ . Anstelle des unbekanntes  $R_{th}(\mathbf{p})$  findet die Optimierung allerdings stets auf Basis des realen Gesamtresiduumsfeldes  $R(\mathbf{p})$  statt, das möglicherweise von  $R_{th}(\mathbf{p})$  abweicht, da es auf tatsächlichen (unsicheren) Zuordnungen beruht. Insbesondere kann hier auch die Position  $\mathbf{p}_{opt}$  des globalen Minimums von  $\mathbf{p}_{th,opt}$  abweichen.

Unabhängig von der Abweichung von  $R(\mathbf{p})$  und  $R_{th}(\mathbf{p})$  bleibt es Ziel der Optimierung,  $\mathbf{p}_{th,opt}$  zu finden. Somit wird deutlich, dass die Aussagekraft des Residuums  $R(\mathbf{p})$  steigt, je weniger es von  $R_{th}(\mathbf{p})$  abweicht, je näher also die Zuordnungen an den im Sinne des Strahlengangs theoretisch korrekten Zuordnungen liegen. So wird der Vergleich von Simulation und Messung physikalisch sinnvoll und das Residuum erhält physikalische Bedeutung.

Eine falsche Zuordnung hat zur Folge, dass der daraus berechnete Anteil am Residuum ebenfalls fehlerhaft ist, da Eigenschaften zweier Reflexionen verglichen werden, die aufgrund verschiedenen Strahlengangs unterschiedlich sein können und im Laufe der Optimierung keinesfalls aneinander angepasst werden sollen. Dadurch basiert im Optimierungsverfahren die nächste Iteration auf verfälschten Informationen.

Die Suche nach einem lokalen Minimum des Residuumsfeldes wird durch fehlerhaft berechnete Werte ebendieses Feldes fehlgeleitet. Dies ist insbesondere von Nachteil, wenn Optimierungsalgorithmen wie der Levenberg-Marquardt-

Algorithmus anhand von Störungen in den Parametern den folgenden Optimierungsschritt bestimmen. Hier scheint dann beispielsweise eine Parameteränderung vorteilhaft, die die oben erwähnten falsch zugeordneten Reflexionen einander annähert. Tatsächlich kann dies allerdings kontraproduktiv sein, da sie sich möglicherweise von den ihnen jeweils theoretisch korrekterweise zuzuordnenden Reflexionen entfernen. So wird also durch fehlerhafte Zuordnungen nicht nur das Optimierungsergebnis verfälscht, sondern der Verlauf der Optimierung beruht bereits auf unzutreffenden Informationen und wird fehlgeleitet. Dies führt im besten Fall nur zu Effizienzverlusten, kann aber auch zu einem lokalen Minimum führen, das durch eine solche Fehlzuordnung erst entsteht – anschaulich betrachtet zu einem Kompromiss zwischen richtigen und so gut wie möglich passenden falschen Zuordnungen.

Je weniger falsche Zuordnungen vorliegen, desto eher wird der oben erläuterte Mechanismus vermieden und die richtige Optimierungsrichtung ist öfter zutreffend bestimmbar.

### 4.2.2 Nutzung des Zuordnungsresiduums

Als Alternative zu als sicher angenommenen Zuordnungen wird in dieser Arbeit der Zuordnungswert aus Gleichung 28 als Maß für die Qualität einer Zuordnung und damit auch für deren Zuverlässigkeit verwendet (vgl. Kap. 3.3.2). Der Zuordnungswert ist somit Indikator für den Informationsgehalt der auf einer Zuordnung basierenden Residuen. Daher ist die dauerhafte Berücksichtigung dieses Wertes bei der Gewichtung verschiedener Residuumentypen über das gesamte Optimierungsverfahren hinweg von essenzieller Bedeutung. Dies wird in Form des Zuordnungsresiduums umgesetzt (vgl. Kap. 4.1.3). So wird erreicht, dass im Laufe des Optimierungsverfahrens die Zuverlässigkeit der Zuordnungen Optimierungskriterium ist und somit die Aussagekraft des Gesamtresiduums ebenfalls optimiert wird.

Hierbei werden somit die Qualität der Zuordnung und die Werte der daraus berechneten Residuen gegeneinander abgewogen. Dies ist systembedingt aufgrund der fehlenden Sicherheit der Zuordnungen notwendig. Anderenfalls wäre es denkbar, dass mit einer Verbesserung des Residuums im Laufe des Optimierungsprozesses gleichzeitig eine zu starke Verringerung seiner physikalischen Aussagekraft einhergeht, die jedoch unberücksichtigt bliebe. So könnte ein Optimierungsergebnis zum Großteil auf im Sinne des Strahlenganges unzutreffenden Zuordnungen basieren und dadurch seine physikalische Aussagekraft verlieren. Dadurch begründet sich die hervorgehobene Wichtigkeit des Zuordnungsresiduums im Vergleich zu weiteren Residuen in Kapitel 4.1, die sich in der Berechnung des Gesamtresiduums widerspiegelt (vgl. Kap. 4.4).

### 4.3 Feature-Ebenen

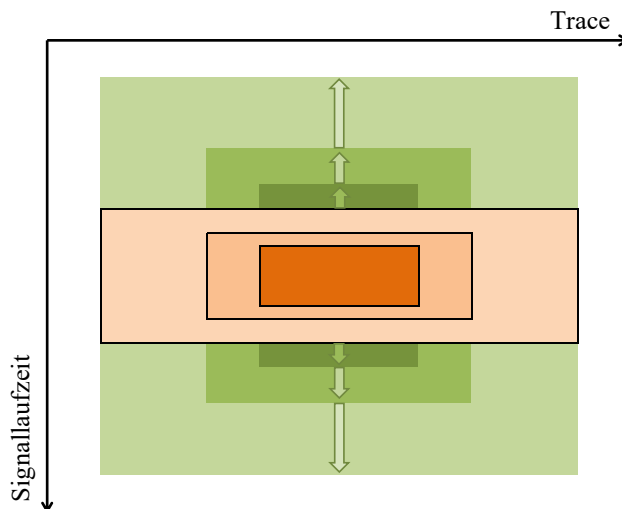
Um den Einfluss einer einzelnen Zuordnung auf das Gesamtresiduum zu begrenzen, besteht die Möglichkeit, für jedes vom Nutzer markierte Ereignis mehrere Features unterschiedlicher Größe zu erstellen und zuzuordnen. Diese werden als Features verschiedener Ebenen bezeichnet. Über die Ebenen hinweg wird gewährleistet, dass feinere und gröbere Datenstrukturen um ein Ereignis herum von Features der jeweiligen Größe erfasst und verglichen werden. Einzelne unzutreffende Zuordnungen werden zudem durch die Zuordnungen auf anderen Ebenen ergänzt und fallen auf diese Weise nicht so stark ins Gewicht.

Zur Konfiguration der Feature-Ebenen kann der Nutzer die Maße des Features der kleinsten und größten Ebene sowie die Anzahl der Ebenen angeben. Die dazwischen liegenden Features werden dann so erstellt, dass Breite und Höhe von Features aufeinander folgender Ebenen jeweils im gleichen Verhältnis zueinander stehen und sich somit die Größe mit dem Schritt zur nächsthöheren Ebene stets um den gleichen Faktor erhöht. Schematisch zur Veranschaulichung dargestellt ist dies in Abb. 6. Im Standardfall werden sieben Ebenen verwendet, wobei das größte Feature bei einer Radargrammgröße  $n_{\text{ges}} \times t_{\text{ges}}$  die Maße  $\frac{2}{3}n_{\text{ges}} \times \frac{1}{3}t_{\text{ges}}$  erreicht und das kleinste Feature mit der Periodendauer  $T$  (vgl. Kap. 4.1.2) die Maße  $10 \times 5T$  erhält. Diese Werte sollten vor der Nutzung jedoch auf Eignung überprüft und gegebenenfalls modifiziert werden, sodass Strukturen auf den relevanten Größenordnungen berücksichtigt werden.

**Unabhängigkeit der Feature-Ebenen** Das Vorhandensein von Zuordnungsinformationen aus mehreren Ebenen zu denselben Positionen des Radargramms führt zur Frage der Kombination dieser Informationen zur Extraktion bestmöglicher Zuordnungsergebnisse. Diese Frage gewinnt noch an Wichtigkeit, wenn Zuordnungen verschiedener Ebenen stark voneinander abweichen und nicht miteinander vereinbar sind.

Diese Tatsache kann grundsätzlich auf zwei verschiedene Weisen behandelt werden. Entweder werden bestimmte Ebenen priorisiert und deren Ergebnisse als Randbedingung für die Zuordnung auf anderen Ebenen genutzt oder alle Ebenen werden unabhängig voneinander betrachtet und die Zuordnungen rein statistisch ausgewertet.

Die Methode der Priorisierung scheint zunächst der Realität am Nächsten zu kommen, da es auch bei unvereinbaren Zuordnungsergebnissen stets nur eine im Sinne des Strahlenganges zutreffende Zuordnung gibt. So scheint es konsequent, Zuordnungen größerer Features rekursiv als Randbedingung für in ihnen enthaltene kleinere Features zu nutzen, um Widersprüche zu verhindern. Diese Methode garantiert zwar eine widerspruchsfreie Zuordnung, unterstellt jedoch auch die



**Abbildung 6:** Schematische Veranschaulichung der Features eines Ereignisses am Beispiel von drei Feature-Ebenen. Die orange eingefärbten Features werden im über die Mobilität definierten grün eingefärbten Vergleichsbereich zugeordnet (vgl. Kap. 3.3.1). Dabei gehören die dunkleren bzw. helleren Vergleichsbereiche zu den jeweils dunkleren bzw. helleren Features.

Richtigkeit der Zuordnungen höherer Ebenen und ist im Fehlerfall nicht robust, da Fehler auf darunterliegende Ebenen übertragen werden.

Beim Vergleich gemessener und simulierter Radargramme treten Strukturen auf, die sich im Groben ähneln, im Detail aber unterscheiden, beispielsweise ein leicht zu langsamer, grundsätzlich aber tatsächlich stattfindender Durchgang einer Infiltrationsfront durch eine Schichtgrenze. Gleichermäßen treten allerdings auch Strukturen auf, deren Details zwar Ähnlichkeit zeigen, weil sie bereits korrekt simuliert werden, die allerdings im Groben unähnlich sind, z. B. wegen einer neben einem korrekten Detail zu nah simulierten weiteren Reflexion einer anderen Schichtgrenze. Um in derart verschiedenen Fällen die jeweilige bereits korrekt simulierte Ähnlichkeit auf ihrer jeweiligen Größenskala korrekt zu erfassen, ist es also bereits erforderlich, dass die Zuordnungen auf allen Feature-Ebenen unabhängig voneinander erfolgen und ohne Priorisierung verarbeitet werden. Hinzu kommt, dass auf allen Ebenen die Möglichkeit einer unzutreffenden Zuordnung in Betracht gezogen werden muss. Durch die unabhängige Zuordnung auf verschiedenen Ebenen wird die grundsätzliche Unsicherheit aller Zuordnungen anerkannt und es wird ermöglicht, dass Auswirkungen unzutreffender Zuordnungen durch Zuordnungen auf anderen Ebenen verringert werden können.



Folglich werden die Features der einzelnen Feature-Ebenen vollkommen unabhängig von Features anderer Ebenen zugeordnet. Insbesondere wird keine Information aus der Zuordnung großräumiger Features genutzt, um Features tieferer Ebenen innerhalb dieses Bereichs zuzuordnen. Zu jedem Feature der verschiedenen Ebenen werden separate Residuen berechnet, die mit gleicher Gewichtung in das Gesamtresiduum eingehen.

**Feature-Ebenen in der Optimierung** Es ist festzustellen, dass sich oft genau an Stellen, an denen die Assoziierung wechselt, ein lokales Maximum des Residuumsanteils eines einzelnen Features ergeben kann. Das liegt daran, dass ein Assoziierungswechsel immer dann stattfindet, wenn das Zuordnungsresiduum eines Features für zwei verschiedene Assoziationen gleich ist (vgl. Kap. 3.3). Da dieses Residuum sich bei weiterer Annäherung des in der Simulation assoziierten Features an dasjenige der Messung üblicherweise verkleinert, und zwar für beide Assoziationen in deren jeweilige Annäherungsrichtung, besteht an der Position des Assoziierungswechsels das Risiko eines lokalen Maximums. Mit der Existenz lokaler Maxima steigt gleichzeitig auch das Risiko lokaler Minima.

Diese Betrachtung betrifft zunächst nur den Residuumsanteil einer einzelnen Feature-Ebene. In der Summe aller Feature-Residuen der verschiedenen Ebenen kann sich jedoch an der fraglichen Stelle ein Gradient ergeben, der groß genug ist, um das Maximum auszugleichen, anschaulich betrachtet zu kippen. Genau dieser Effekt ist gewünscht und kann durch die Vergrößerung der Anzahl vorhandener Feature-Ebenen verstärkt werden. Je größer deren Anzahl, desto geringer ist der Einfluss einer einzelnen Ebene und der durch sie verursachten lokalen Maxima. Da alle Feature-Ebenen zu unterschiedlich großen Features gehören und deren Assoziationen daher im Allgemeinen an unterschiedlichen Positionen im Residuumsraum wechseln, liegen auch die Maxima an unterschiedlichen Stellen. So können sie leichter durch andere Ebenen ausgeglichen werden. Es ist zu beachten, dass es sich hier um die Möglichkeit eines Ausgleichs handelt. Sollte an ähnlicher Stelle im Parameterraum bei einer zu großen Anzahl Features und Ebenen ein lokales Maximum liegen, so ist kein Ausgleich zu erwarten.

## 4.4 Gewichtung der Residuen

Um die vorliegenden Residuen verschiedener Typen für den Optimierungsprozess nutzbar zu machen, werden zunächst die Residuen je Typ über alle Feature-Ebenen hinweg zu Ereignisresiduen gemittelt. Dies trägt zum statistischen Ausgleich möglicher Fehlzuordnungen auf einzelnen Feature-Ebenen bei (vgl. Kap. 4.3). Für jeden Residuustyp  $k$  wird das Ereignisresiduum  $R_{ek}$  eines Ereignisses  $e$  aus den

Einzelresiduen  $r_{ekl}$  der verschiedenen Ebenen  $l$  berechnet. Mit Standardabweichungen  $\sigma_k$  der verschiedenen Residuustypen sowie der Gesamtzahl  $L$  aller Ebenen ergibt sich

$$R_{ek} = \frac{1}{L} \sum_l \left[ \frac{|r_{ekl}|}{\sigma_k} \right]. \quad (38)$$

Die Normierung der Einzelresiduen auf die Standardabweichung  $\sigma_k$  erlaubt dabei den Vergleich von Residuen verschiedener Typen.

Anschließend wird aus den Ereignisresiduen das Gesamtresiduum  $R$  berechnet, das im Parameterraum minimiert wird. Hierzu wird die typgewichtete Quadratsumme der Ereignisresiduen  $R_{ek}$  aus Gleichung 38 gebildet. Mit den Typgewichten  $w_k$  ergibt sich

$$R = \sum_k \left[ w_k \sum_e R_{ek}^2 \right]. \quad (39)$$

Die Typgewichte  $w_k$  sind dabei vom Nutzer gewählte Gewichte, die den gesamten Beitrag aller Residuen des jeweiligen Typs zum Gesamtresiduum skalieren. Dadurch besteht die Möglichkeit, die Prioritäten der verschiedenen Residuustypen im Optimierungsprozess einzustellen.

An dieser Stelle sei kurz bemerkt, dass im Gegensatz zum Gesamtresiduum die einzelnen Beiträge  $r_{ekl}$  zu den jeweiligen Ereignisresiduen in Gleichung 38 nicht quadratisch addiert, sondern gemittelt werden, da die Zusammenfassung der Informationen aus dem Zuordnungsprozess für jedes Ereignis den Zweck verfolgt, den Einfluss möglicher Fehlzuordnungen gering zu halten. Aus diesem Grund ist es wichtig, dass alle Einzelresiduen entsprechend ihrem Betrag berücksichtigt werden, ohne große Abweichungen durch quadratische Addition stärker zu gewichten. So können die Auswirkungen möglicher Fehlzuordnungen statistisch verringert werden.

Die Gewichtung der verschiedenen Residuustypen in dieser Arbeit orientiert sich zunächst an der Relevanz des Zuordnungsresiduums (vgl. Kap. 4.2.1). Um zu gewährleisten, dass die Zuverlässigkeit der Zuordnung wichtiges Optimierungskriterium ist, wird hier ein hohes Gewicht von  $w_z = 0,7$  als Standard gewählt. Dies ist insbesondere auch dadurch begründet, dass das Zuordnungsresiduum sowohl die Zuverlässigkeit der Zuordnung als auch die Struktur der im Feature enthaltenen Daten und die Verschiebung des Features berücksichtigt (vgl. Kap. 4.1.3). Somit sind hier bereits einige zentrale Vergleichskriterien vereint.

Ergänzt wird das Residuum durch einen Anteil des Laufzeitresiduums (vgl. Kap. 4.1.1). Dies ist notwendig, da bei der Berechnung des Zuordnungsresiduums kleine Abweichungen in der Laufzeit nur schwach berücksichtigt werden, um dem Zuordnungsalgorithmus ausreichend Suchraum für die optimale Zuordnung zu

bieten (vgl. Kap. 3.3.2). Unabhängig davon ist die ausreichende Berücksichtigung von Laufzeitunterschieden im Ereignisresiduum zu gewährleisten, sodass das Laufzeitresiduum im Standardfall mit  $w_t = 0,2$  berücksichtigt wird.

Neben der Signallaufzeit ist die Berücksichtigung der Amplitude von Bedeutung für das Ereignisresiduum. Hierbei ist zunächst zu beachten, dass eine Amplitudenabweichung an einer bestimmten Stelle des Features (im Vergleich zu anderen Stellen) auch eine Strukturabweichung im Feature bedeutet und bereits im Zuordnungsresiduum repräsentiert wird (vgl. Kap. 4.1.3). Lediglich Amplitudenunterschiede, die sich über das gesamte Feature erstrecken sind nicht abgedeckt und werden durch die Einbeziehung des zu diesem Zweck eingeführten Grauwertresiduums ergänzt (vgl. Kap. 4.1.4). Hierzu wird im Standardfall ein Gewicht von  $w_G = 0,1$  gewählt. Die Differenz zu  $w_t$  ergibt sich aus der bereits starken Repräsentation im Zuordnungsresiduum. Insbesondere werden sogar auch Amplitudenabweichungen über gesamte Features niedriger Ebenen bereits als Strukturunterschied in korrespondierenden Features höherer Ebenen im Zuordnungsresiduum berücksichtigt.

## 4.5 Einfluss auf das Residuumfeld

Die Berechnung des Residuums auf Basis der Datenzuordnung aus Kapitel 3 sowie der Gewichtung der sich daraus ergebenden Residuumstypen in Kapitel 4.4 ist auf die Nutzung im Optimierungsverfahren fokussiert. Im Folgenden wird betrachtet, wie sich dies konkret auf den Optimierungsprozess auswirkt.

Bereits 2018 stellt Hantschel fest, dass die durch fehlerhafte Datenzuordnung hervorgerufene große Anzahl lokaler Minima des Residuumsfeldes eine zentrale Herausforderung bei der Inversion von GPR-Daten darstellt.<sup>19</sup> Die zu diesem Zeitpunkt eingesetzte kombinatorische Zuordnungsmethode<sup>31,54</sup> für Extrema einzelner Traces wird in Folgenden anhand eines Beispiels mit der in dieser Arbeit entwickelten Bildanalyse-Datenzuordnungsmethode verglichen. Die Auswirkungen der Datenzuordnung auf das Residuumsfeld können so direkt veranschaulicht werden. Um dies unabhängig von eventuellen Modellfehlern umzusetzen, wird ein synthetischer Datensatz mit bekanntem globalem Minimum im Parameterraum verwendet.

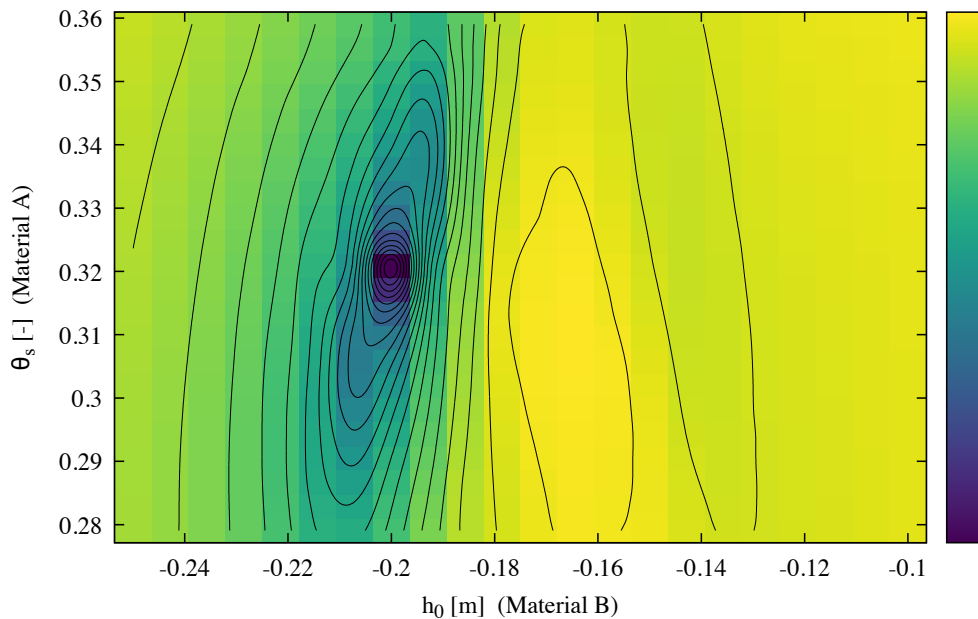
Als Basis zur Erstellung eines synthetischen Beispieldatensatzes dienen die Rand- und Anfangsbedingungen eines GPR-Experiments von Hantschel<sup>19</sup> auf dem ASSESS-Standort (vgl. Kap. 2.2.2). Hierbei handelt es sich um die Anhebung des Wasserspiegels aus dem unteren Material A über die Grenze zum darüber liegenden Material B hinweg und die folgende Absenkung zurück in den Ursprungszustand (Ausschnitt aus dem Experiment in Kap. 5.1). An diesem Datensatz wird ein Residuums-Scan unter Variation des Lufteintrittswertes  $h_0^B$  von Material B und des Sättigungswassergehalts  $\theta_s^A$  von Material A durchgeführt, während die anderen

16 hydraulischen Bodenparameter der drei Materialien in ASSESS konstant auf ihrem synthetisch korrekten Wert gehalten werden. So kann ein zweidimensionaler Schnitt durch das Residuumsfeld im achtzehndimensionalen Parameterraum betrachtet werden (vgl. Abb. 7 und 8). Da die bisherige kombinatorische Zuordnungsmethode eine Anpassung an die Daten erfordert, werden die von Hantschel verwendeten Einstellungen<sup>19</sup> genutzt, für die Bildanalysemethode die in dieser Arbeit angegebenen Standardeinstellungen. Ansonsten sind die Bedingungen für beide Methoden identisch.

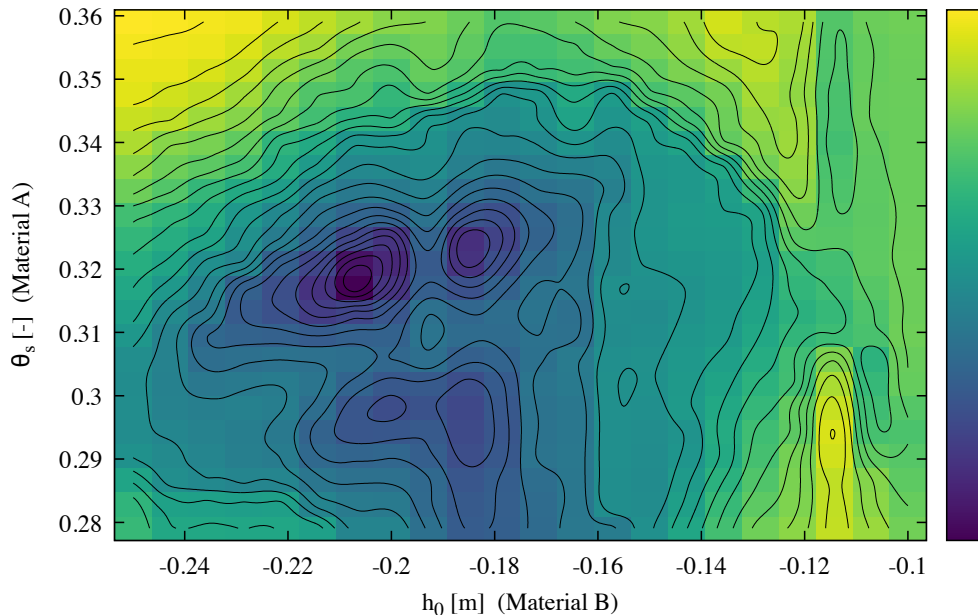
Aus Abb. 7 geht hervor, dass das globale Minimum von der in dieser Arbeit entwickelten musterbasierten Analyse im Rahmen der Scan-Auflösung von  $22 \times 22$  Pixeln genau erkannt wird. Der negative Gradient kann im Bereich  $h_0^B < -0,17$  m zuverlässig als Indikator für die Annäherung an das globale Minimum genutzt werden, während bei  $h_0^B > -0,17$  m ein Plateau mit leichter Senke auf insgesamt relativ zum Wertebereich hohem Residuumsniveau vorliegt. Dies ist ein Hinweis darauf, dass die simulierten Daten in diesem Bereich als erkennbar unpassend eingestuft werden, jedoch keine aussagekräftige Differenzierung zwischen verschiedenen Varianten möglich ist. Das Ziel, neben dem globalen Minimum weitere lokale Minima ähnlicher Residuumsgrößenordnung zu vermeiden, wird somit über den gesamten untersuchten Bereich des Residuumsfeldes erreicht. In einem Optimierungs-Ensemble können Startwerte bzw. Ensemblemitglieder auf einem solchen Plateau im Laufe des Optimierungsprozesses an den gleichbleibend hohen Residuumswerten erkannt werden. Wie dies umgesetzt wird, ist in Kapitel 5.2 erläutert.

Die in Abb. 8 genutzte kombinatorische Methode verfehlt das globale Minimum trotz grober Auflösung des Scans erkennbar um einige Prozent. Zudem ergeben sich mehrere lokale Minima in der Umgebung des globalen Minimums, was bedeutet, dass eine größere Anzahl an Ensemblemitgliedern notwendig ist, um die verschiedenen Minima zu erreichen und zu vergleichen. Eine Erkennung weniger erfolgversprechender Ensemblemitglieder anhand gleichbleibend hoher Residuen ist in diesem Fall nicht möglich, da die Tiefe jedes Minimums erst nach dessen Erreichen festgestellt werden kann. Falls zudem andere Schnitte durch den achtzehndimensionalen Parameterraum ähnliche Häufungen lokaler Minima aufweisen, so kann sich eine mit der Dimension exponentiell wachsende Anzahl lokaler Minima ergeben, deren Untersuchung aufgrund des hohen Rechenaufwandes schnell die Grenze des Machbaren erreicht.

Die Reduzierung lokaler Minima durch die musterbasierte Datenanalyse kann somit in diesem Fall das Erreichen des globalen Minimums deutlich vereinfachen, sofern es gelingt, das Plateau in Abb. 7 zu vermeiden.



**Abbildung 7:** Logarithmisches, auf Wertebereich normiertes Residuumfeld synthetischer Daten bei Nutzung der neuen musterbasierten Datenzuordnung mit interpolierten Konturlinien. Globales Minimum bei  $(h_0^B; \theta_s^A) = (-0,2 \text{ m}; 0,32)$  wird erkannt. Plateaubereich ab  $h_0^B > -0,17 \text{ m}$ .



**Abbildung 8:** Logarithmisches, auf Wertebereich normiertes Residuumfeld synthetischer Daten bei Nutzung der bisherigen kombinatorischen Datenzuordnung mit interpolierten Konturlinien. Globales Minimum bei  $(h_0^B; \theta_s^A) = (-0,2 \text{ m}; 0,32)$  wird leicht verfehlt. Weitere lokale Minima in der Nähe und z. B. bei  $h_0^B > -0,12 \text{ m}$ .



---

## 5 Schätzung von Materialparametern

Bereits in Kapitel 4.5 wird anhand von synthetischen Daten der Beitrag von Zuordnungsmethode (vgl. Kap. 3) und Residuumsberechnung (vgl. Kap. 4) zu charakteristischen Eigenschaften des Residuumsfeldes veranschaulicht. Darüber hinaus werden diese neu entwickelten musterbasierten Methoden nun für die GPR-basierte Schätzung bodenhydraulischer Materialparameter am ASSESS-Standort (vgl. Kap. 2.2.2 und Abb. 2) eingesetzt, um deren Beitrag zur Parameterschätzung auch anhand von experimentellen Daten zu untersuchen.

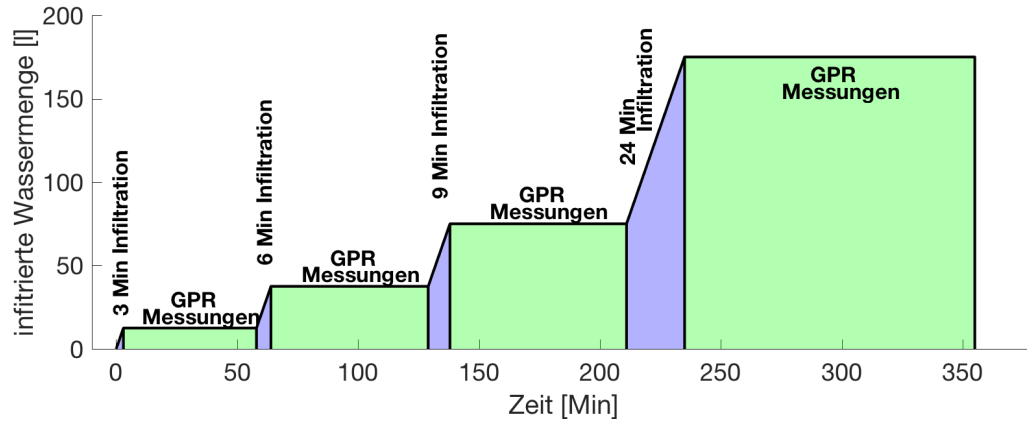
### 5.1 Experimenteller Datensatz

Als Grundlage für die folgenden Optimierungsensembles werden Daten aus einem Experiment zur Beobachtung von bodenhydraulischer Dynamik mit GPR von Hantschel<sup>19</sup> verwendet, das hier kurz zusammengefasst wird. Es wird das Experiment an der Position von 15 m auf dem ASSESS-Standort ausgewählt. Hier liegt eine Schichtung aus allen drei vorhandenen Materialien vor, wobei Material A die unterste Schicht bildet, gefolgt von den Materialien B und C in der mittleren und oberen Schicht.

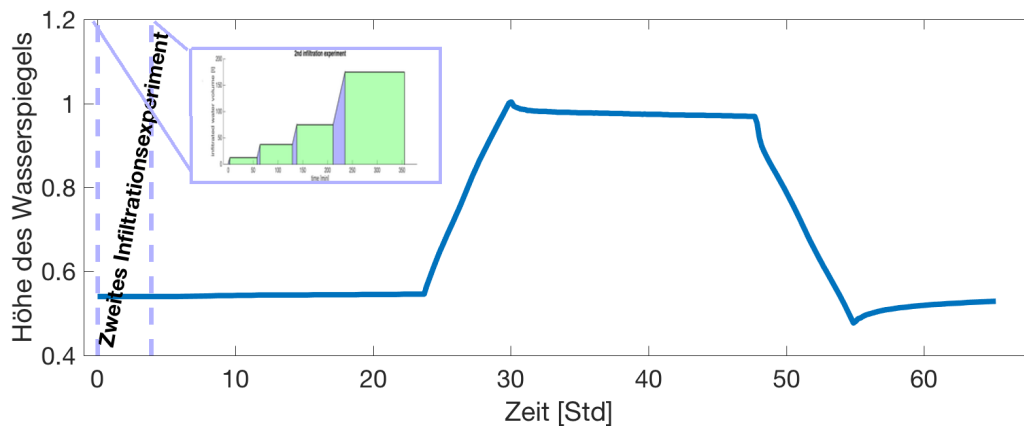
Um die hydraulische Anfangsbedingung des Experiments möglichst genau zu kennen, ist der Standort über die vorangegangenen Monate mit einem Dach vor Niederschlag geschützt, sodass sich ein hauptsächlich vom bekannten und über den Brunnen künstlich regulierbaren Wasserspiegel abhängiger Gleichgewichtszustand einstellt.

Mit einem zu diesem Zweck angefertigten Infiltrationsgerät<sup>62</sup> werden vier aufeinanderfolgende jeweils an Dauer zunehmende Infiltrationspulse auf die oberste Schicht durchgeführt, deren Ausbreitung im Boden jeweils in der Zwischenzeit mit GPR-Messungen beobachtet wird (vgl. Abb. 9). In einem zweiten Schritt wird am Folgetag der Wasserspiegel über den Brunnen erst angehoben sowie einen weiteren Tag später wieder abgesenkt (vgl. Abb. 10), ebenfalls begleitet von GPR-Messungen. Die Infiltrationsfront des vierten Infiltrationspulses erreicht die obere Schichtgrenze zwischen den Materialien C und B, während die Veränderung des Wasserspiegels über die untere Schichtgrenze zwischen den Materialien B und A hinweg stattfindet.

Zu den in Kapitel 2.1.4 erläuterten Randbedingungen für die Simulation der Bodenwasserdynamik zählen somit neben der bekannten Bodenarchitektur des ASSESS-Standorts auch der zeitliche Verlauf des Wasservolumenflusses der Infiltrationen als Neumann-Randbedingung sowie die darauf folgende Veränderung des Wasserspiegels als Dirichlet-Randbedingung. Die im Laufe der Optimierung



**Abbildung 9:** Zeitlicher Verlauf des Infiltrationsexperiments auf dem ASSESS-Standort bei Position 15 m. Infiltrationspulse wechseln sich ab mit GPR-Messungen zu deren Beobachtung. Daten und Abbildung von Hantschel<sup>19</sup>.



**Abbildung 10:** Zeitlicher Verlauf der auf das Infiltrationsexperiment folgenden Anhebung und Absenkung des Wasserspiegels auf dem ASSESS-Standort. Daten und Abbildung von Hantschel<sup>19</sup>.



zu schätzenden Parameter fungieren in jeder neuen Iteration des Levenberg-Marquardt-Algorithmus mit ihren aktuellen Werten ebenfalls als Randbedingung.

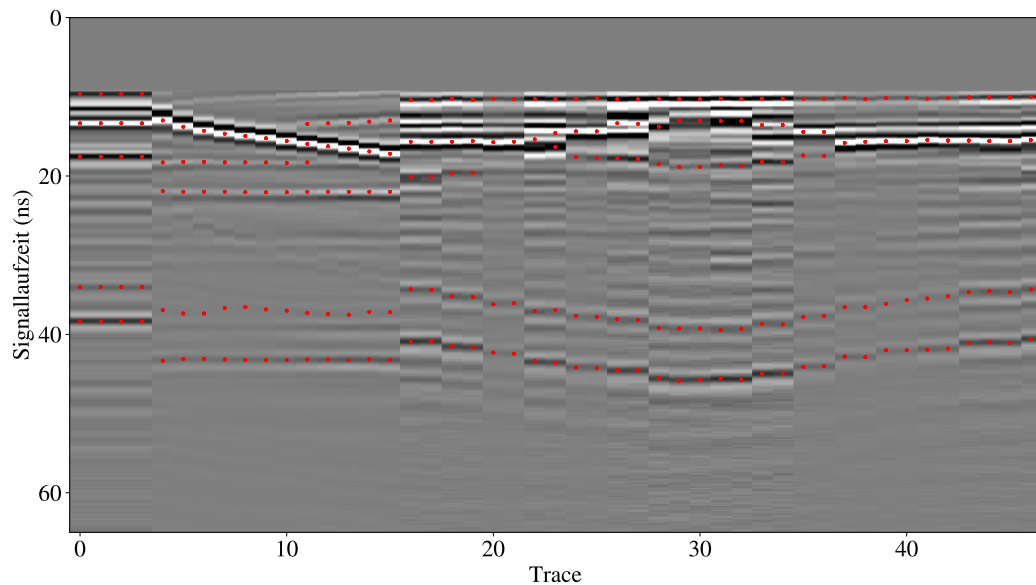
An diesem Experiment kann der Einfluss der entwickelten musterbasierten Methoden auf die Parameterschätzung sowohl für Wasserspiegeländerungen als auch für Infiltrationen getrennt betrachtet werden, da die Dynamik in Material A nahezu ausschließlich auf der Wasserspiegeländerung beruht, während in Material C die Infiltration die maßgebliche Bodenwasserdynamik ausmacht. Es wird zu diesem Zweck als Datensatz ein Zeitraffer-Radargramm (vgl. Kap. 2.2.1) an einer Position mittig oberhalb der Infiltrationspulse genutzt, das das Gleichgewicht zu Beginn, den Durchgang der Infiltrationsfront durch die obere Schichtgrenze sowie die Wasserspiegelanhebung und -absenkung beinhaltet (vgl. Abb. 11). Dabei handelt es sich um den von Hantschel unter der Bezeichnung „gesamtes Experiment bei 15 m“ untersuchten Datensatz.

Der ausgewählte Datensatz ist insbesondere auch deshalb interessant, weil noch kein Ensemble mit zufälligen Parameterstartwerten für die Inversion von ASSESS-GPR-Infiltrationsdaten präsentiert wurde. Wegen der mit der bisherigen Datenzuordnungsmethode hohen Anzahl lokaler Minima des Residuumsfeldes kamen dafür bisher nur einzelne Startwerte an Optimalpositionen aus vorherigen Studien zum Einsatz.<sup>19</sup>

## 5.2 Ensembles

Die Existenz mehrerer lokaler Minima des Residuumsfeldes kann trotz der Einführung der musterbasierten Zuordnung (vgl. Kap. 3) und der Berücksichtigung ihrer Zuverlässigkeit im Residuum (vgl. Kap. 4) nicht ausgeschlossen werden. Um die Wahrscheinlichkeit von Ergebnissen nahe des globalen Minimums zu erhöhen, wird daher ein Ensemble von Optimierungsverfahren an verschiedenen Stellen im Parameterraum gestartet. Hierfür ist es von Bedeutung, den Optimierungsprozess so zu gestalten, dass mit Startwerten aus einem möglichst großen Parameterbereich Ergebnisse in möglichst großer Nähe zum globalen Minimum erreicht werden.

Zu diesem Zweck soll die Optimierung zu Beginn soweit wie möglich von kleinskaligen Residuumsschwankungen entkoppelt werden, um lokale Minima weiter zu reduzieren. Neben der Datenzuordnung und der darauf basierenden Berechnung des Residuums wird hierzu auch die Steuerung des Optimierungsprozesses angepasst. Hierzu werden mehrere aufeinander aufbauende Ensembles von Optimierungsverfahren hintereinander durchgeführt. Dies erlaubt, zu Beginn der Ensemble-Sequenz die Optimierung basierend auf einem ungenaueren, aber weniger schwankenden Residuum durchzuführen (vgl. Kap. 5.2.2). In Folge-Ensembles auf Basis der vorhergehenden Ergebnisse sowie eines genaueren, aber stärker schwankenden Residuums werden die Ergebnisse präzisiert (vgl. Kap. 5.2.3). Die einzelnen En-



**Abbildung 11:** Experimentelles Zeitraffer-Radargramm an Position 15 m des ASSESS-Standorts mit rot markierten ausgewählten Ereignissen, die zugeordnet werden sollen. Enthalten sind das Gleichgewicht zu Beginn, der Durchgang der Infiltrationsfront durch die obere Schichtgrenze sowie die Wasserspiegelanhebung und -absenkung. Ereignisse sind ausgewählt in den jeweiligen Bereichen der beiden Schichtgrenzen, des Wasserspiegels sowie der Grenzen zu Kiesschicht und Betonboden. Die Phänomenologie der verschiedenen Reflexionen wird im Detail erläutert von Hantschel.<sup>19</sup> Es ist zu beachten, dass um die Ereignisse herum Features sieben verschiedener Ebenen erstellt und zugeordnet werden (vgl. Kap. 3) und lediglich aus Darstellungsgründen auf die Einzeichnung der überlappenden Features verzichtet wird. Auf diese Weise wird die Ereignisumgebung im Radargramm mitberücksichtigt, sodass die Optimierung gegen Variationen der Ereignispositionen bis zu einem gewissen Grad robust ist. (Dies gilt insbesondere für die vor der Optimierung versehentlich nicht waagrecht ausgewählte Kiesschichtreflexion im Bereich von Trace 7 bis 10.) Messdaten von Hantschel<sup>19</sup>.

sembles der genutzten Ensemble-Sequenz und die gewählten Steuerungsparameter der jeweiligen Optimierungsalgorithmen werden in den folgenden Abschnitten erläutert. Hierbei steht die Funktionsweise der Ensemble-Sequenz im Vordergrund.

Zur Automatisierung werden im Rahmen dieser Arbeit die benötigten Funktionen zur Konfiguration und Durchführung von Ensemble-Sequenzen bereitgestellt.

### 5.2.1 Latin-Hypercube-Scan

Zu Beginn des Optimierungsprozesses werden hier die Startwerte für den folgenden Optimierungsabschnitt bestimmt.

Zunächst werden Positionen auf einem Latin Hypercube<sup>63</sup> im Parameterraum ausgewählt. Um zu verhindern, dass Startwerte direkt in der Nähe einer Parametergrenze liegen, lässt der Latin Hypercube für jeden Parameter  $p$  mit den Grenzen  $p_{\min}$  und  $p_{\max}$  im Standardfall einen Abstand von  $\frac{1}{6}[p_{\max} - p_{\min}]$  zu den Parametergrenzen. Mittels jeweils eines Simulationsdurchlaufes werden an allen Positionen die zugehörigen Residuen berechnet. Ziel dieses Verfahrens ist, zunächst Bereiche des Parameterraums mit niedrigeren Residuen zu identifizieren.

Als Datengrundlage der Zuordnung wird die gleitende Amplitude des Radarsignals verwendet, wie in Kapitel 3.5 erläutert. Auf diese Weise wird gewährleistet, dass die Wellenstruktur der Daten keine zusätzlichen lokalen Minima verursacht, was jedoch verringerte Genauigkeit des Residuums bedeutet, da die Phaseninformation der Daten verloren geht.

Da dieses Verfahren je Position im Vergleich zu beispielsweise einem Levenberg-Marquardt-Optimierungsverfahren nur wenig Rechenzeit in Anspruch nimmt, kann das Residuumsfeld auf einem Latin Hypercube mit höherer Auflösung gescannt werden, sodass als Ergebnis dieses Scans die 2% der Positionen mit den niedrigsten Residuen als Startwerte für das erste Optimierungs-Ensemble verwendet werden. Bereits mit diesem Schritt wird die Wahrscheinlichkeit von Startwerten auf einem Plateau hoher Residuen wie in Abb. 7 verringert (vgl. Kap. 4.5).

Aufgrund dieser Filterung der Startwerte ist zu beachten, dass das Ensemble nicht den gesamten Parameterbereich repräsentiert, sondern Bereiche niedriger Residuen bevorzugt ausgewählt werden. Somit sind die folgenden Ensembles nicht geeignet, um statistische Aussagen über den untersuchten Parameterbereich als Ganzes zu treffen. Da der Optimierungsprozess jedoch ausdrücklich das Ziel der Bestimmung des globalen Minimums verfolgt, ist diese Vorgehensweise hier von Vorteil. Dadurch soll erreicht werden, dass die rechenaufwändigen Optimierungsverfahren möglichst in erfolgsversprechenden Bereichen des Parameterraums starten.

### 5.2.2 Amplitudenbasierte Optimierung

Basierend auf den Startwerten aus dem Latin-Hypercube-Scan wird in einem ersten Optimierungsensemble mit dem Levenberg-Marquardt-Algorithmus begonnen. Dafür soll zunächst der Einfluss kleinskaliger Residuumsschwankungen reduziert werden, wie zu Beginn des Kapitels erläutert. Als Datengrundlage des Zuordnungsprozesses wird daher wie bereits für den vorhergehenden Abschnitt die gleitende Amplitude verwendet (vgl. Kap. 3.5 und Abb. 5).

Die Genauigkeit der Ergebnisse ist hier von geringerer Bedeutung, da noch ein folgendes Ensemble die Ergebnisse präzisieren kann. Daher kann die Effizienz des Optimierungsprozesses im Vergleich zur Genauigkeit stärker berücksichtigt werden. Dies geschieht für den Levenberg-Marquardt-Algorithmus insbesondere durch die Auswahl der Abbruchbedingungen, die für ein Ensemblemitglied darüber entscheiden, wie lange die Annäherung an ein Minimum fortgesetzt wird, wie viel Rechenzeit also in die Genauigkeit des Ergebnisses investiert oder zu Gunsten weiterer Ensemblemitglieder gespart wird.

Als zentrales notwendiges Abbruchkriterium wird im aktuellen Schritt  $i$  des Levenberg-Marquardt-Algorithmus die Änderung  $p_i - p_{i-1}$  jedes Parameters  $p$  des zu optimierenden Parametervektors  $\mathbf{p}$  betrachtet. Unterschieden werden die Betrachtungen relativ zum aktuellen Wert  $p_i$  des jeweiligen Parameters sowie zur Größe des Parameterbereichs  $[p_{\min}, p_{\max}]$ . So ergeben sich die relativen Änderungen

$$\Delta p_{\text{LM1}} = \frac{p_i - p_{i-1}}{p_i} \quad \text{bzw.} \quad \Delta p_{\text{LM2}} = \frac{p_i - p_{i-1}}{p_{\max} - p_{\min}}. \quad (40)$$

Sobald für alle Parameter jeweils mindestens eine der beiden relativen Abweichungen  $\Delta p_{\text{LM1}}$  und  $\Delta p_{\text{LM2}}$  unterhalb der festgesetzten Genauigkeit liegt, ist diese Abbruchbedingung erfüllt. Die Betrachtung von  $\Delta p_{\text{LM2}}$  ist insbesondere für Parametersuchbereiche notwendig, die den Wert null enthalten, beispielsweise für die hydraulischen Parameter  $\tau$  oder  $\theta_r$ , da so verhindert wird, dass im Bereich um die Null herum sehr viel genauere Optimierungsschritte durchgeführt werden.

Um zu gewährleisten, dass nicht nur die Veränderungen der Parameter sondern auch die des Residuums den Abbruch der Optimierung rechtfertigen, wird zusätzlich die relative Residuumsänderung im aktuellen Schritt des Algorithmus geprüft. Liegt auch diese unterhalb der festgelegten Genauigkeit, so wird die Optimierung des jeweiligen Ensemblemitglieds nach dem aktuellen Schritt beendet.

Soweit im Folgenden nicht anders angegeben wird in der amplitudenbasierten Optimierung für die Abbruchbedingungen eine Genauigkeit von 2% verwendet. Aus den Ergebnissen des gesamten Ensembles werden die 50% der Positionen mit den niedrigsten Residuen als Initialisierungspositionen für das folgende Ensemble verwendet. Damit werden Ensemblemitglieder erkannt und entfernt, deren Residuum im Laufe der gesamten ersten Levenberg-Marquardt-Optimierung auf relativ

hohem Niveau verblieben ist. So wird die Wahrscheinlichkeit einer weiteren Optimierung in wenig erfolgversprechenden Bereichen wie z. B. auf Plateaus ähnlich dem in Abb. 7 weiter verringert.

### 5.2.3 Auslenkungsbasierte Optimierung

Nach dem ersten Optimierungsensemble folgt ein weiteres Levenberg-Marquardt-Ensemble für die genauere Optimierung auf kleinerer Skala, wie zu Beginn dieses Kapitels erläutert.

Im Gegensatz zu den bisherigen Optimierungsensembles wird nun die Datenzuordnung auf Basis der Originaldaten der Radargramme durchgeführt. Aufgrund der größeren Detailschärfe im Vergleich zu den in den vorhergehenden Abschnitten genutzten Amplitudendaten können so auch beispielsweise Reflexionsinterferenzen oder Reflexionen nahe beieinander liegender Schichtgrenzen in voller Genauigkeit unter Berücksichtigung der Phaseninformation verglichen werden. Die feinere periodische Datenstruktur kann jedoch das Risiko lokaler Minima erhöhen (vgl. Kap. 3.5).

Neben der veränderten Zuordnung wird das zweite Levenberg-Marquardt-Ensemble dadurch modifiziert, dass die Abbruchkriterien mit einer Genauigkeit von 0,5 % angewandt werden. Dies gilt sowohl für die Veränderungen der Parameter als auch des Residuums im aktuellen Schritt des Algorithmus. Durch diese erhöhte Genauigkeit wird geringeres Gewicht auf die Effizienz des Verfahrens gelegt, um dafür die Endposition der jeweiligen Ensemblemitglieder im Parameterraum genauer zu bestimmen.

## 5.3 Parameterschätzung mit experimentellen Daten

Mit der in Kapitel 5.2 vorgestellten Ensemble-Sequenz zur Parameterschätzung und unter Anwendung der neuen musterbasierten Datenanalyse aus den Kapiteln 3 und 4 wird der ausgewählte GPR-Datensatz (vgl. Kap. 5.1) zur Schätzung der hydraulischen Bodenparameter der drei Materialien auf dem ASSESS-Standort genutzt. Wie in der Einleitung dieses Kapitels bereits erläutert, steht dabei die Betrachtung des Beitrags der neuen Methoden im Mittelpunkt.

Es wird eine Ensemble-Sequenz mit 60 Ensemblemitgliedern im ersten Levenberg-Marquardt-Ensemble (vgl. Kap. 5.2.2) genutzt, sodass der Latin-Hypercube-Scan entsprechend mit 3000 zufälligen Scanpositionen im Parameterraum startet. Soweit im Folgenden nicht anders angegeben, werden die in den vorherigen Kapiteln angegebenen Standardeinstellungen genutzt.

Die Randbedingungen für die Simulation der Bodenwasserdynamik basieren auf der Durchführung des Experiments und sind zusammen mit dem verwendeten

Datensatz in Kapitel 5.1 erläutert. Für die Simulation von GPR sind diese in Kapitel 2.2.1 angegeben.

Da es sich bei den Materialien am ASSESS-Standort um verschiedene Sandtypen handelt, wird ein Parameterbereich grob um die ungefähr zu erwartenden hydraulischen Parameter von Sand herum gewählt, der sich auch mit den für andere Materialien üblichen Parameterbereichen teilweise überschneidet und der Optimierung somit ausreichend Flexibilität erlaubt. Dabei werden die Grenzen für alle drei Materialien gleich gewählt – einzige Ausnahme sind die Sättigungswassergehalte  $\theta_s$ , die basierend auf den ungefähr bekannten Porositäten jeweils leicht angepasst werden. Die genutzten Parametergrenzen finden sich in Tabelle 2 und sind in Grau in Abb. 13 eingetragen. Basierend auf diesen Grenzen werden die Startwerte mit dem Latin-Hypercube-Scan initialisiert, wie in Kapitel 5.2.1 beschrieben.

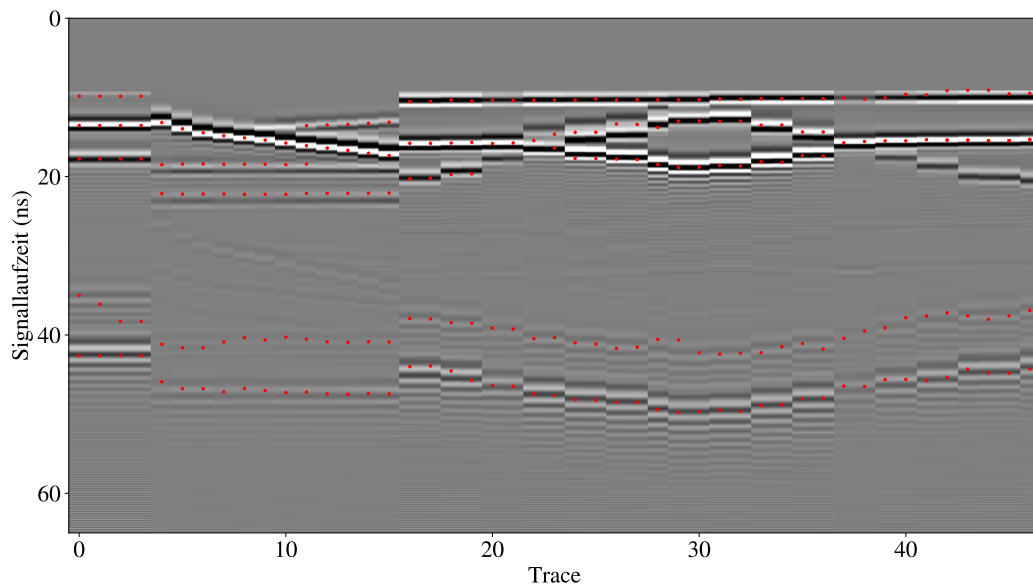
### 5.3.1 Optimierungsergebnisse

Das simulierte Radargramm des besten Ensemble-Mitglieds ist mit eingetragenen zugeordneten Ereignissen in Abbildung 12 dargestellt. Auffällig sind einzelne Fehlzuordnungen v.a. in der relativ schwachen Kiesschichtreflexion sowie eine verbleibende Laufzeitdifferenz der Reflexionen von Kies- und Betonschicht im Vergleich zum Experiment, worauf in der Fehlerbetrachtung genauer eingegangen wird (vgl. Kap. 5.3.2).

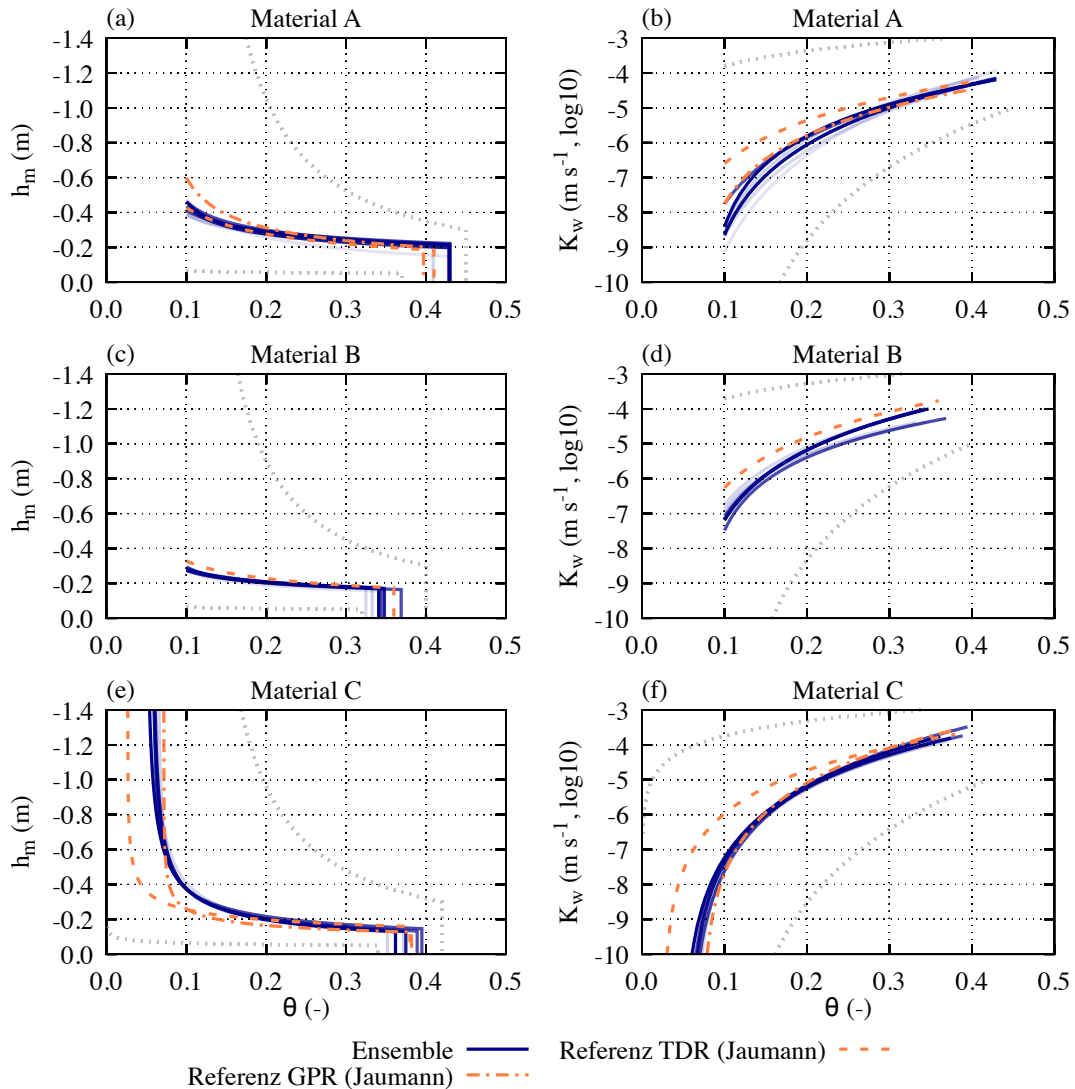
Die mit den besten acht Ensemblemitgliedern der Ensemble-Sequenz geschätzten bodenhydraulischen Eigenschaften  $h_m(\theta)$  und  $K_w(\theta)$  (vgl. Kap. 2.1.3) sind in Abbildung 13 dargestellt. Auf die zum Vergleich dargestellten Referenzen wird später genauer eingegangen. Die gemittelten Ergebnisparameter sind in Tabelle 2 angegeben.

Generell ist beim Vergleich von bodenhydraulischen Parametersätzen zu beachten, dass deren physikalische Bedeutung anhand der Materialeigenschaften  $h_m(\theta)$  und  $K_w(\theta)$  am besten zu erkennen ist. Je nach betrachtetem Wassergehaltsbereich können auch unterschiedliche Parametersätze zu vergleichbaren Werten führen, weswegen der direkte Vergleich einzelner Parameter nur bedingt aussagekräftig ist.

Bei der vergleichenden Betrachtung der Materialeigenschaften in Abb. 13 sind Abweichungen innerhalb des Ensembles festzustellen. Diese Abweichungen sind für  $h_m^B(\theta)$  und  $h_m^C(\theta)$  sowie  $K_w^C(\theta)$  über große Wassergehaltsbereiche relativ gering – insbesondere für  $h_m^C(\theta)$  vergleichbar mit und für  $K_w^C(\theta)$  größtenteils geringer als die Abweichungen der beiden Referenzen voneinander.  $h_m^A(\theta)$ ,  $K_w^A(\theta)$  und  $K_w^B(\theta)$  weisen im Vergleich dazu größere Abweichungen auf. Auffällig sind die Sättigungswassergehalte  $\theta_s^B$  und  $\theta_s^C$ , deren Abweichungen sogar im Vergleich zum gesamten Parameterbereich relativ groß sind. Darüber hinaus ergibt sich



**Abbildung 12:** Simuliertes Zeitraffer-Radargramm des besten Ensemble-Mitglieds im abschließenden Levenberg-Marquardt-Ensemble mit rot markierten ebenen-gemittelten zugeordneten Ereignissen. Es ist zu beachten, dass um die Ereignisse herum Features sieben verschiedener Ebenen erstellt und zugeordnet wurden und lediglich aus Darstellungsgründen auf die Einzeichnung der vielen überlappenden Features verzichtet wird. Vor allem in der Kiesschichtreflexion (2. v.u.) kommt es zu Fehlzugeordnungen.



**Abbildung 13:** Geschätzte bodenhydraulische Eigenschaften der drei Materialien am ASSESS-Standort für die besten 8 von 30 Ensemblemitgliedern des abschließenden Levenberg-Marquardt-Ensembles. Die Transparenz steigt mit dem Residuum. Die überlagerten Referenzen aus früheren Studien<sup>31,53,54</sup> dienen als Vergleich. In Grau sind die Grenzen des Parameterbereichs markiert. Der dargestellte Wassergehaltsbereich ist an die Verfügbarkeit der Messdaten angepasst.



| Material | Parameter               | Parameterbereich |           | mittlere<br>Schätzung |
|----------|-------------------------|------------------|-----------|-----------------------|
|          |                         | Minimum          | Maximum   |                       |
| <b>A</b> | $h_0$ (m)               | -0,30            | -0,05     | $-0,21 \pm 0,03$      |
|          | $\lambda$ (-)           | 1,0              | 5,0       | $3,1 \pm 0,7$         |
|          | $K_s$ ( $\frac{m}{s}$ ) | $10^{-5}$        | $10^{-3}$ | $10^{-4,12 \pm 0,09}$ |
|          | $\tau$ (-)              | -1,0             | 3,0       | $1,9 \pm 0,6$         |
|          | $\theta_s$ (-)          | 0,37             | 0,45      | $0,427 \pm 0,007$     |
|          | $\theta_r$ (-)          | 0,0              | 0,1       | $0,05 \pm 0,02$       |
| <b>B</b> | $h_0$ (m)               | -0,30            | -0,05     | $-0,168 \pm 0,008$    |
|          | $\lambda$ (-)           | 1,0              | 5,0       | $3,7 \pm 0,3$         |
|          | $K_s$ ( $\frac{m}{s}$ ) | $10^{-5}$        | $10^{-3}$ | $10^{-4,1 \pm 0,2}$   |
|          | $\tau$ (-)              | -1,0             | 3,0       | $1,0 \pm 0,4$         |
|          | $\theta_s$ (-)          | 0,32             | 0,40      | $0,35 \pm 0,02$       |
|          | $\theta_r$ (-)          | 0,0              | 0,1       | $0,06 \pm 0,01$       |
| <b>C</b> | $h_0$ (m)               | -0,30            | -0,05     | $-0,13 \pm 0,01$      |
|          | $\lambda$ (-)           | 1,0              | 5,0       | $1,9 \pm 0,3$         |
|          | $K_s$ ( $\frac{m}{s}$ ) | $10^{-5}$        | $10^{-3}$ | $10^{-3,8 \pm 0,2}$   |
|          | $\tau$ (-)              | -1,0             | 3,0       | $1,3 \pm 0,4$         |
|          | $\theta_s$ (-)          | 0,34             | 0,42      | $0,37 \pm 0,01$       |
|          | $\theta_r$ (-)          | 0,0              | 0,1       | $0,054 \pm 0,008$     |

**Tabelle 2:** Parameterschätzung für die bodenhydraulischen Parameter der drei am ASSESS-Standort vorhandenen Materialien A bis C. Die mittlere Schätzung und deren Standardabweichung berechnen sich aus den besten 8 von 30 Ensemblemitgliedern des abschließenden Levenberg-Marquardt-Ensembles (vgl. Abb. 13). Die Standardabweichungen werden ausschließlich zur Einschätzung der Ensemble-Sequenz angegeben. Es ist zu beachten, dass weitere mögliche Fehler (vgl. Kap. 5.3.2) nicht berücksichtigt sind.

eine auffällig große Unsicherheit in der Bestimmung des Restwassergehalts  $\theta_r^A$  der untersten Materialschicht A (vgl. Tab. 2).

**Vergleichbarkeit von Referenzergebnissen** Die Untersuchung des Beitrags der musterbasierten Datenanalysemethoden am ASSESS-Standort hat den Vorteil, dass bereits Referenzen für die hydraulischen Bodeneigenschaften aus vorherigen Studien verfügbar sind und als Indizien für die Beurteilung der Position eines erreichten Minimums dienen können. Für GPR-Feldexperimente sind derartige Referenzen oft nicht verfügbar.

Aus Experimenten zur Wasserspiegelveränderung werden in Abbildung 13 als Vergleich die aktuellsten mit TDR- bzw. GPR-Inversions-Ensembles geschätzten bodenhydraulischen Eigenschaften der ASSESS-Materialien als Referenz dargestellt.<sup>31,53,54</sup> Die GPR-Referenz ist dabei nur für die Materialien A und C verfügbar.

Dabei ist zu beachten, dass für die GPR-Referenz die bisherige kombinatorische Zuordnungsmethode genutzt wurde. Deren Zuordnungen am Ende des genutzten Optimierungsprozesses weisen nur wenige unerwartete Sprünge auf, was als Indiz für im Sinne des Strahlengangs korrekte Zuordnungen gewertet werden kann. Dies ist möglicherweise auf die genaue Anpassung vieler Feineinstellungen<sup>31</sup> dieser Methode an den genutzten Datensatz zurückzuführen. Es zeigt sich, dass die Übertragbarkeit solcher Einstellungen auf ähnliche Datensätze nicht gegeben ist.

Bei Vergleich mit TDR-Messungen ist zu beachten, dass es sich um lokale Messungen handelt, die von den Verhältnissen der unmittelbaren Umgebung stark beeinflusst werden können. So können z. B. eine naheliegende Kompaktionsschichtgrenze des ASSESS-Standorts oder lokale Heterogenitäten dazu führen, dass der Sensor unter Bedingungen misst, die nicht dem durchschnittlichen Material in der Umgebung entsprechen. GPR ist dagegen ein Verfahren, das im Vergleich zu TDR große Materialvolumina untersucht, sodass die Ergebnisse, insbesondere die bestimmten Materialparameter, von einzelnen Inhomogenitäten nicht so stark beeinflusst werden können, wie es bei TDR-Messungen in ungünstigen Fällen denkbar ist. Daher sind Abweichungen zwischen aus TDR- und GPR-Messungen bestimmten Parametersätzen zu erwarten und deren direkte Vergleichbarkeit ist begrenzt.

Somit ist festzuhalten, dass der Vergleich der Optimierungsergebnisse mit den Referenzen für  $h_m(\theta)$  und  $K_w(\theta)$  nur mit Einschränkungen aussagekräftig ist.

### 5.3.2 Fehlerbetrachtung

Im Gegensatz zu den in Kapitel 4.5 betrachteten synthetischen Daten sind bei der Verwendung experimenteller Daten zur Parameterschätzung mit einem Inversionsverfahren mehrere mögliche Fehlerquellen zu bedenken. Diese können zusätzlich

zu Datenzuordnung und Residuumsberechnung ebenfalls Ursache lokaler Minima sein und so die Konvergenz eines Optimierungsensembles erschweren.

Als mögliche Ursache lokaler Minima kommen beispielsweise Modellfehler in Betracht. Da ein physikalisches Modell oft auf vereinfachenden Annahmen beruht, ist nicht klar, ob das Modell die den Messdaten zugrunde liegende Physik ausreichend gut beschreibt. Somit ist insbesondere auch nicht klar, ob ein Modellparameterset existiert, mit dem das Modell in der Lage ist, die Messdaten zu reproduzieren. Im Allgemeinen muss davon ausgegangen werden, dass dies nur bis zu einem gewissen Grad der Ähnlichkeit möglich ist. Auch der Simulation von Bodenwasserdynamik und GPR-Messungen liegen verschiedene vereinfachende Annahmen zugrunde (vgl. Kap. 2.1 und 2.2.1), deren Gültigkeit beispielsweise bzgl. des Wassergehaltsbereiches im vorliegenden Experiment nicht immer gewährleistet ist. Daher sind Fälle denkbar, in denen verschiedene, nicht notwendigerweise im Parameterraum nahe beieinanderliegende Parametersets Modelldaten erzeugen können, die den Messdaten auf unterschiedliche Weise ähnlich nahe kommen. So können mehrere lokale Minima ähnlicher Residuumswerte entstehen.

Des Weiteren ist es möglich, dass die Rand- und Anfangsbedingungen des Modells die tatsächlichen Umgebungsbedingungen des Experiments fehlerhaft repräsentieren. Sofern diese nicht selbst als zusätzliche Modellparameter mitgeschätzt werden, führt dies dazu, dass die Optimierung die dadurch entstehenden Abweichungen durch Verschiebung der zu schätzenden Parameter auszugleichen versucht. Sind hierfür mehrere ähnlich geeignete Varianten denkbar, so können auch auf diese Weise mehrere lokale Minima im Residuumsfeld verursacht werden.

Da der Sättigungswassergehalt der Kiesschicht unter dem ASSESS-Standort im hier gezeigten Beispiel nicht mitgeschätzt wird, ist es beispielsweise möglich, dass dadurch auch der Sättigungswassergehalt  $\theta_s^A$  des angrenzenden Materials A beeinflusst wird. Aufgrund der Position unterhalb des Wasserspiegels hat an der Schichtgrenze dieser beiden Materialien der Sättigungswassergehalt starken Einfluss auf die Stärke der Reflexion. Dies gilt für Phasen hoher Sättigung im Verlauf des Experiments auch analog für die anderen Schichtgrenzen und könnte zu den hohen Unsicherheiten von  $\theta_s^B$  und  $\theta_s^C$  beitragen. Ebenfalls verursacht dies vermutlich die zu schwache Kies-Reflexionsintensität in der Simulation und damit die Fehlzuordnungen einiger Kiesschicht-Ereignisse (vgl. Abb. 12). Die verbleibende Laufzeitdifferenz in den Kies- und Betonreflexionen könnte durch zu hoch geschätztes  $\theta_s^A$  und dadurch zu lange Laufzeit in der Schicht A verursacht werden. Wie an diesem Beispiel erläutert, können auch andere Randbedingungen im Rahmen ihrer bekannten Genauigkeit mitgeschätzt werden. Da in dieser Untersuchung beispielhaft der Beitrag neuer Methoden betrachtet werden soll, werden zunächst die bodenhydraulischen Parameter der drei Materialien A bis C geschätzt.

Auch die Messdaten selbst sind als Fehlerquelle zu bedenken. Durch Messfehler können ebenfalls Abweichungen zur Simulation verursacht werden, die im Laufe der Optimierung durch Parameterverschiebung ausgeglichen werden und analog zu fehlerhaften Rand- und Anfangsbedingungen zur Entstehung lokaler Minima beitragen können. Zu möglichen Messfehlern des Experimentes, dessen Daten hier verwendet werden, sind ausführliche Erläuterungen bei Hantschel<sup>19</sup> zu finden.

Sogar unter der Annahme eines perfekten Modells mit exakt zutreffenden Randbedingungen sowie perfekter Messdaten verbleibt die Möglichkeit der Unterbestimmtheit des inversen Problems. Ist beispielsweise in einem Material über den Beobachtungszeitraum hinweg die Bodenwasserdynamik auf sehr hohe Wassergehaltsbereiche beschränkt, so können Parameter, die vor allem in niedrigen Wassergehaltsbereichen relevant sind, nur unzureichend bestimmt werden. Dies zeigt sich an der relativ großen Unsicherheit des Restwassergehalts  $\theta_r^A$  (vgl. Tab. 2), da aus dieser untersten Materialschicht A keine ausreichenden Messdaten für niedrige Wassergehalte verfügbar sind. Der Einfluss der langen (überdachten) Trocknungsphase ab September bis zum Experiment im Juni des Folgejahres ist begrenzt angesichts des in dieser Schicht liegenden Wasserspiegels und der Tiefe von über 1 m. Da Veränderungen eines solchen Parameters auf die Übereinstimmung von gemessenen und simulierten Daten nur geringen Einfluss haben, ist hier zu erwarten, dass bei vielen verschiedenen Parameterwerten ähnliche Residuen erreichbar sind, sodass bereits kleine Schwankungen lokale Minima hervorrufen können. Ein unterbestimmtes Problem ist im Vergleich zu den anderen oben betrachteten Ursachen lokaler Minima auch bei der Inversion synthetischer Daten denkbar.

### 5.3.3 Einordnung des Beitrags von Datenzuordnung und Residuumsberechnung

Wegen der Beeinflussung der Konvergenz eines Optimierungsensembles durch die in Kapitel 5.3.2 erläuterten verschiedenen Fehler kann im Allgemeinen anhand der Ergebnisse nicht unterschieden werden, welche Ursache fehlender Konvergenz zugrunde liegt. Daher ist auch nicht klar, ob die Zuordnungs- und Residuumsberechnungsmethoden zur Entstehung lokaler Minima beitragen. Im Konvergenzfall kann dagegen auf den ausreichend geringen Einfluss lokaler Minima geschlossen werden. Die insbesondere für Material C über große Wassergehaltsbereiche relativ gute Übereinstimmung innerhalb des Ensembles deutet somit auf relativ geringen Einfluss lokaler Minima hin. Ausnahme ist  $\theta_s^C$ , dessen Schätzung große Unsicherheiten aufweist.

Neben der Reduzierung lokaler Minima ist noch die Beurteilung des erreichten Minimums notwendig, um die genutzten Methoden einzuschätzen. Dass die Ergebnisse für  $h_m(\theta)$  und  $K_w(\theta)$  im Rahmen der Abweichungen innerhalb des

Ensembles bis auf  $K_w^B(\theta)$  über größere Wassergehaltsbereiche mit mindestens einer der vorhandenen Referenzen übereinstimmen, deutet auf eine gute Schätzung der bodenhydraulischen Materialparameter hin, wobei jedoch die Einschränkungen eines solchen Vergleichs zu bedenken sind (vgl. Kap. 5.3.1). Hinzu kommt die bereits anhand synthetischer Daten bestätigte grundsätzliche Eignung der musterbasierten Methoden zur korrekten Erkennung der Übereinstimmung von Radargrammen (vgl. Kap. 4.5).

Auf Basis dieser Betrachtungen wird das Optimierungsergebnis als Hinweis auf die zuverlässige Funktion von musterbasierter Datenzuordnung und Residuumsberechnung auch für experimentelle Daten eingeordnet.

Dies erscheint insbesondere vor dem Hintergrund plausibel, dass die Inversion des verwendeten Datensatzes im Rahmen dieser Arbeit erstmalig mit einem zufällig initialisierten Ensemble gelingt. An bisher mit einzelnen Startwerten an Optimalpositionen aus anderen Studien durchgeführten Inversionen dieses Datensatzes werden Schwierigkeiten durch die bisherige kombinatorische Methode bestätigt.<sup>19</sup>



---

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Für den bei der Inversion von GPR-Daten zur Schätzung bodenhydraulischer Materialparameter in jeder Iteration benötigten quantitativen Vergleich der Ähnlichkeit gemessener und simulierter Radargramme wird in dieser Arbeit ein zuverlässiges und schnelles Datenanalyseverfahren entwickelt, das sich aus zwei Bestandteilen zusammensetzt. Auf die musterbasierte Zuordnung von Strukturen in Radargrammen folgt die Berechnung des Residuums unter Berücksichtigung der aus der Zuordnung gewonnenen Quantifizierung der strukturellen Ähnlichkeit.

Zur Datenzuordnung wird das Template-Matching-Verfahren für den Strukturvergleich von ausgewählten Radargrammbereichen aus Messung und Simulation eingesetzt (vgl. Kap. 3). Dabei werden Features aus der Messung in korrespondierenden Bereichen der Simulation gesucht und an der unter Berücksichtigung ihrer Verschiebung besten Übereinstimmung zugeordnet. Aus der Strukturähnlichkeit jeder Zuordnung wird auf ihre Zuverlässigkeit geschlossen.

Durch die Nutzung der musterbasierten Zuordnung kann für einen Beispieldatensatz eine Iteration im Optimierungsprozess um mehr als eine Größenordnung beschleunigt werden, die darin enthaltene reine Analyse der GPR-Daten sogar um mehr als zwei Größenordnungen (vgl. Kap. 3.6).

Zur Quantifizierung der Ähnlichkeit der Radargramme wird das Gesamtresiduum aus verschiedenen Teilresiduen berechnet, wobei beispielsweise Signallaufzeit, Signalamplitude, Zuverlässigkeits- und Grauwerte der einzelnen Features gewichtet einfließen können (vgl. Kap. 4). Um den Einfluss einer bestimmten Featuregröße sowie mögliche Fehlzuordnungen zu reduzieren, werden an allen Positionen die Residuen unterschiedlich groß und unabhängig voneinander zugeordneter Features gemittelt. Die Zuverlässigkeit der Zuordnungen wird als Indikator der Aussagekraft des Residuums maßgeblich im Gesamtresiduum berücksichtigt.

Anhand synthetischer Daten kann gezeigt werden, dass die entwickelten Verfahren grundsätzlich geeignet sind, lokale Minima des Residuumsfeldes im Parameterraum zu reduzieren und die Übereinstimmung der Radargramme am globalen Minimum korrekt zu erkennen (vgl. Kap. 4.5). Dies kann die Minimierung des Residuums in einem Optimierungsverfahren vereinfachen.

Darüber hinaus gelingt die Inversion von GPR-Infiltrationsdaten vom ASSESS-Standort im Rahmen dieser Arbeit erstmalig mit einem zufällig initialisierten Ensemble (vgl. Kap. 5.3.1). Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass die Quantifizierung der Ähnlichkeit experimenteller und simulierter Radargramme hier kein limitierender Faktor mehr ist.

Auf diese Weise könnte auch die Untersuchung von Bodenwasserdynamik und bodenhydraulischen Eigenschaften in im Vergleich zum ASSESS-Standort weniger genau bekannten Böden erleichtert werden. Dabei sind die Limitierungen von

GPR als Messmethode (vgl. Kap. 2.2.1) zu berücksichtigen, sodass z. B. sandige Böden für die Durchführung der Messungen besser geeignet sind. In einem solchen Experiment treten in der Inversion vermutlich im Vergleich zum ASSESS-Standort signifikant höhere Modellfehler auf und zusätzlich könnte es notwendig sein, weitere unsichere Modellparameter mitzuschätzen. Vor diesem Hintergrund kann sich die Ensemble-Konvergenz verschlechtern, was die Bedeutung des zuverlässigen quantitativen Vergleichs von Radargrammen weiter erhöht.

Um der in unbekanntem Böden größeren Unsicherheit in den Rand- und Anfangsbedingungen entgegenzuwirken, ist der Ansatz denkbar, den Umfang der GPR-Messungen unter Variation der Methoden (CO, CMP, WARR) so zu erhöhen, dass über das untersuchte Volumen Informationen vieler verschiedener Strahlengänge aus verschiedenen Winkeln vorliegen. Um die dabei notwendige Rechenleistung möglichst gering zu halten, legt die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte musterbasierte Signalanalyse durch ihre signifikante Verkürzung der Rechenzeit ebenfalls eine entscheidende Grundlage.



---

## Literatur

- [1] A. Silber u. a., „Irrigation with desalinated water: A step toward increasing water saving and crop yields“, *Water Resources Research* **51**, Publisher: John Wiley & Sons, Ltd, 450–464 (2015) 10.1002/2014WR016398.
- [2] J. P. Martin und R. M. Koerner, „The influence of vadose zone conditions on groundwater pollution: Part I: Basic principles and static conditions“, *Journal of Hazardous Materials* **8**, 349–366 (1984) 10.1016/0304-3894(84)87031-4.
- [3] S. Baram u. a., „Estimating Nitrate Leaching to Groundwater from Orchards: Comparing Crop Nitrogen Excess, Deep Vadose Zone Data-Driven Estimates, and HYDRUS Modeling“, *Vadose Zone Journal* **15**, 10.2136/vzj2016.07.0061 (2016) 10.2136/vzj2016.07.0061.
- [4] E. Dominati, M. Patterson und A. Mackay, „A framework for classifying and quantifying the natural capital and ecosystem services of soils“, *Ecological Economics* **69**, 1858–1868 (2010) 10.1016/j.ecolecon.2010.05.002.
- [5] H. Vereecken u. a., „Modeling Soil Processes: Review, Key Challenges, and New Perspectives“, *Vadose Zone Journal* **15**, Publisher: John Wiley & Sons, Ltd, 10.2136/vzj2015.09.0131 (2016) 10.2136/vzj2015.09.0131.
- [6] W. May, M. Rummukainen, F. Chéruy, S. Hagemann und A. Meier, „Contributions of soil moisture interactions to future precipitation changes in the GLACE-CMIP5 experiment“, *Climate Dynamics* **49**, 1681–1704 (2017) 10.1007/s00382-016-3408-9.
- [7] L. A. Richards, „Capillary conduction of liquids through porous mediums“, *Physics* **1**, Publisher: American Institute of Physics, 318–333 (1931) 10.1063/1.1745010.
- [8] R. H. Brooks und A. T. Corey, „Properties of Porous Media Affecting Fluid Flow“, *Journal of the Irrigation and Drainage Division* **92**, 61–88 (1966) 10.1061/JRCEA4.0000425.
- [9] Y. Mualem, „A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media“, *Water Resources Research* **12**, 513–522 (1976) 10.1029/WR012i003p00513.
- [10] M. T. van Genuchten, „A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils“, *Soil Science Society of America Journal* **44**, 892–898 (1980) 10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x.

- [11] H.-J. Vogel und K. Roth, „Moving through scales of flow and transport in soil“, *Journal of Hydrology, Soil Hydrological Properties and Processes and their Variability in Space and Time* **272**, 95–106 (2003) 10.1016/S0022-1694(02)00257-3.
- [12] D. A. Robinson, S. B. Jones, J. M. Wraith, D. Or und S. P. Friedman, „A Review of Advances in Dielectric and Electrical Conductivity Measurement in Soils Using Time Domain Reflectometry“, *Vadose Zone Journal* **2**, 444–475 (2003) 10.2136/vzj2003.4440.
- [13] D. J. Daniels, *Ground Penetrating Radar* (IET, 2004), ISBN: 978-0-86341-360-5.
- [14] P. Klenk, S. Jaumann und K. Roth, „Monitoring infiltration processes with high-resolution surface-based Ground-Penetrating Radar“, *Hydrology and Earth System Sciences Discussions* **12**, Publisher: Copernicus GmbH, 12215–12246 (2015) 10.5194/hessd-12-12215-2015.
- [15] A. R. Mangel, B. A. Lytle und S. M. J. Moysey, „Automated high-resolution GPR data collection for monitoring dynamic hydrologic processes in two and three dimensions“, *The Leading Edge* **34**, Publisher: Society of Exploration Geophysicists, 190–196 (2015) 10.1190/tle34020190.1.
- [16] J. Hugenschmidt und R. Mastrangelo, „GPR inspection of concrete bridges“, *Cement and Concrete Composites, Non-Destructive Testing* **28**, 384–392 (2006) 10.1016/j.cemconcomp.2006.02.016.
- [17] W. Zhao u. a., „Advances in GPR data acquisition and analysis for archaeology“, *Geophysical Journal International* **202**, 62–71 (2015) 10.1093/gji/ggv121.
- [18] A. Tarantola, *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation* (Society for Industrial und Applied Mathematics, Jan. 2005), ISBN: 978-0-89871-572-9, 10.1137/1.9780898717921.
- [19] L. Hantschel, „Beobachtung von Infiltrationsprozessen in sandigen Böden mit GPR“, *Dissertation* (Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg, Deutschland, 2018).
- [20] R. Brunelli und T. Poggiot, „Template matching: matched spatial filters and beyond“, *Pattern Recognition* **30**, 751–768 (1997) 10.1016/S0031-3203(96)00104-5.
- [21] J. P. Lewis, „Fast Normalized Cross-Correlation“, *Industrial Light & Magic* **10** (2001), [https://www.researchgate.net/publication/2378357\\_Fast\\_Normalized\\_Cross-Correlation](https://www.researchgate.net/publication/2378357_Fast_Normalized_Cross-Correlation).

- 
- [22] K. Roth, *Soil Physics* (Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg, Deutschland, 2012), <http://ts.iup.uni-heidelberg.de/teaching/>.
- [23] G. C. Topp und E. E. Miller, „Hysteretic Moisture Characteristics and Hydraulic Conductivities for Glass-Bead Media“, *Soil Science Society of America Journal* **30**, 156–162 (1966) 10.2136/sssaj1966.03615995003000020008x.
- [24] A. Dagenbach, J. S. Buchner, P. Klenk und K. Roth, „Identifying a parameterisation of the soil water retention curve from on-ground GPR measurements“, *Hydrology and Earth System Sciences* **17**, Publisher: Copernicus GmbH, 611–618 (2013) 10.5194/hess-17-611-2013.
- [25] E. E. Miller und R. D. Miller, „Physical Theory for Capillary Flow Phenomena“, *Journal of Applied Physics* **27**, Publisher: American Institute of Physics, 324–332 (1956) 10.1063/1.1722370.
- [26] O. Ippisch, H. J. Vogel und P. Bastian, „Validity limits for the van Genuchten–Mualem model and implications for parameter estimation and numerical simulation“, *Advances in Water Resources* **29**, 1780–1789 (2006) 10.1016/j.advwatres.2005.12.011.
- [27] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, Third Edition (John Wiley & Sons, 1999).
- [28] R. Thompson und F. Oldfield, „Magnetic properties of solids“, in *Environmental Magnetism*, hrsg. von R. Thompson und F. Oldfield (Springer Netherlands, Dordrecht, 1986), S. 3–12, ISBN: 978-94-011-8036-8, 10.1007/978-94-011-8036-8\_2.
- [29] J. Birchak, C. Gardner, J. Hipp und J. Victor, „High dielectric constant microwave probes for sensing soil moisture“, *Proceedings of the IEEE* **62**, Conference Name: Proceedings of the IEEE, 93–98 (1974) 10.1109/PROC.1974.9388.
- [30] K. Roth, R. Schulin, H. Flühler und W. Attinger, „Calibration of time domain reflectometry for water content measurement using a composite dielectric approach“, *Water Resources Research* **26**, 2267–2273 (1990) 10.1029/WR026i010p02267.
- [31] S. Jaumann, „Estimation of Soil Water Dynamics Based on Hydrogeophysical Measurements“, Dissertation (Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg, Deutschland, 2017).

- [32] D. A. Robinson und S. P. Friedman, „A method for measuring the solid particle permittivity or electrical conductivity of rocks, sediments, and granular materials“, *Journal of Geophysical Research: Solid Earth* **108**, 10.1029/2001JB000691 (2003) 10.1029/2001JB000691.
- [33] U. Kaatze, „Complex permittivity of water as a function of frequency and temperature“, *Journal of Chemical & Engineering Data* **34**, Publisher: American Chemical Society, 371–374 (1989) 10.1021/je00058a001.
- [34] J. D. Rhoades, P. a. C. Raats und R. J. Prather, „Effects of Liquid-phase Electrical Conductivity, Water Content, and Surface Conductivity on Bulk Soil Electrical Conductivity“, *Soil Science Society of America Journal* **40**, 651–655 (1976) 10.2136/sssaj1976.03615995004000050017x.
- [35] S. P. Friedman, „Soil properties influencing apparent electrical conductivity: a review“, *Computers and Electronics in Agriculture, Applications of Apparent Soil Electrical Conductivity in Precision Agriculture* **46**, 45–70 (2005) 10.1016/j.compag.2004.11.001.
- [36] M. Gran u. a., „Dynamics of water vapor flux and water separation processes during evaporation from a salty dry soil“, *Journal of Hydrology* **396**, 215–220 (2011) 10.1016/j.jhydro1.2010.11.011.
- [37] J. L. Davis und A. P. Annan, „Ground-Penetrating Radar for High-Resolution Mapping of Soil and Rock Stratigraphy1“, *Geophysical Prospecting* **37**, 531–551 (1989) 10.1111/j.1365-2478.1989.tb02221.x.
- [38] J. S. Buchner, A. Kühne, B. Antz, K. Roth und U. Wollschläger, „Observation of volumetric water content and reflector depth with multichannel ground-penetrating radar in an artificial sand volume“, in 2011 6th International Workshop on Advanced Ground Penetrating Radar (IWAGPR) (Juni 2011), S. 1–5, 10.1109/IWAGPR.2011.5963910.
- [39] A. F. Oskooi u. a., „Meep: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method“, *Computer Physics Communications* **181**, 687–702 (2010) 10.1016/j.cpc.2009.11.008.
- [40] B. Lampe, K. Holliger und A. G. Green, „A finite-difference time-domain simulation tool for ground-penetrating radar antennas“, *Geophysics* **68**, 971–987 (2003) 10.1190/1.1581069.
- [41] A. Giannopoulos, „Modelling ground penetrating radar by GprMax“, *Construction and Building Materials, Non Destructive Testing: Selected papers from Structural Faults and Repair 2003* **19**, 755–762 (2005) 10.1016/j.conbuildmat.2005.06.007.

- 
- [42] A. F. Oskooi, C. Kottke und S. G. Johnson, „Accurate finite-difference time-domain simulation of anisotropic media by subpixel smoothing“, *Optics Letters* **34**, Publisher: Optical Society of America, 2778–2780 (2009) 10.1364/OL.34.002778.
- [43] A. Farjadpour u. a., „Improving accuracy by subpixel smoothing in the finite-difference time domain“, *Optics Letters* **31**, 2972–2974 (2006) 10.1364/OL.31.002972.
- [44] J.-P. Berenger, „A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves“, *Journal of Computational Physics* **114**, 185–200 (1994) 10.1006/jcph.1994.1159.
- [45] S. G. Millard, A. Shaari und J. H. Bungey, „Field pattern characteristics of GPR antennas“, *NDT & E International* **35**, 473–482 (2002) 10.1016/S0963-8695(02)00023-3.
- [46] C. Warren und A. Giannopoulos, „Investigation of the directivity of a commercial Ground-Penetrating Radar antenna using a Finite-Difference Time-Domain antenna model“, in 14th International Conference on Ground Penetrating Radar (GPR) (2012), S. 226–231, 10.1109/ICGPR.2012.6254865.
- [47] N. Diamanti und A. P. Annan, „Characterizing the energy distribution around GPR antennas“, *Journal of Applied Geophysics* **99**, 83–90 (2013) 10.1016/j.jappgeo.2013.08.001.
- [48] B. Antz, „Entwicklung und Modellierung der Hydraulik eines Testfeldes für geophysikalische Messungen“, Diplomarbeit (Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg, Deutschland, 2010).
- [49] J. S. Buchner, U. Wollschläger und K. Roth, „Inverting surface GPR data using FDTD simulation and automatic detection of reflections to estimate subsurface water content and geometry“, *Geophysics* **77**, H45–H55 (2012) 10.1190/geo2011-0467.1.
- [50] J. S. Buchner, „Constructive Inversion of Vadose Zone GPR Observations“, Dissertation (Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg, Deutschland, 2012).
- [51] A. Dagenbach, „Untersuchung der hydraulischen Bodeneigenschaften durch GPR: Analyse der Kapillarsaumreflexion durch numerische Simulationen“, Diplomarbeit (Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg, Deutschland, 2012).
- [52] P. Klenk, „Developing Ground-Penetrating Radar for Quantitative Soil Hydrology“, Dissertation (Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg, Deutschland, 2012).

- [53] S. Jaumann und K. Roth, „Effect of unrepresented model errors on estimated soil hydraulic material properties“, *Hydrology and Earth System Sciences* **21**, 4301–4322 (2017) 10.5194/hess-21-4301-2017.
- [54] S. Jaumann und K. Roth, „Soil hydraulic material properties and layered architecture from time-lapse GPR“, *Hydrology and Earth System Sciences* **22**, 2551–2573 (2018) 10.5194/hess-22-2551-2018.
- [55] H. H. Bauser, S. Jaumann, D. Berg und K. Roth, „EnKF with closed-eye period – towards a consistent aggregation of information in soil hydrology“, *Hydrology and Earth System Sciences* **20**, 4999–5014 (2016) 10.5194/hess-20-4999-2016.
- [56] K. Levenberg, „A method for the solution of certain non-linear problems in least squares“, *Quarterly of Applied Mathematics* **2**, 164–168 (1944) 10.1090/qam/10666.
- [57] D. W. Marquardt, „An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters“, *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics* **11**, 431–441 (1963) 10.1137/0111030.
- [58] J. J. Moré, „The Levenberg-Marquardt algorithm: Implementation and theory“, in *Numerical Analysis*, hrsg. von G. A. Watson, *Lecture Notes in Mathematics* (1978), S. 105–116, ISBN: 978-3-540-35972-2, 10.1007/BFb0067700.
- [59] W. H. Press, Hrsg., *Numerical recipes: the art of scientific computing*, 3rd ed (Cambridge University Press, Cambridge, UK ; New York, 2007), ISBN: 978-0-521-88068-8.
- [60] M. K. Transtrum und J. P. Sethna, „Improvements to the Levenberg-Marquardt algorithm for nonlinear least-squares minimization“, (2012), <http://arxiv.org/abs/1201.5885>.
- [61] S. van der Walt u. a., „scikit-image: image processing in Python“, *PeerJ* **2**, e453 (2014) 10.7717/peerj.453.
- [62] B. Hemmer, „Characterization of an Infiltration Device for Infiltration Experiments into Sandy Soils“, Bachelorarbeit (Institut für Umweltphysik, Universität Heidelberg, Deutschland, 2017).
- [63] M. D. McKay, R. J. Beckman und W. J. Conover, „Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code“, *Technometrics* **21**, 239–245 (1979) 10.1080/00401706.1979.10489755.

---

## Danksagung

Mein herzlicher Dank geht zuallererst an meinen Betreuer Prof. Dr. Kurt Roth für die große Freiheit bei der Bearbeitung dieses Themas und gleichzeitig die genau im richtigen Moment wichtigen, hilfreichen und inspirierenden Ratschläge und Diskussionen.

Herzlich danken möchte ich Prof. Dr. André Butz, der direkt bereit war, ein Gutachten zu dieser Arbeit zu verfassen.

Besonderer Dank geht auch an Dr. Stefan Jaumann für die Entwicklung des Softwarepakets SHIP, das als Grundlage der durchgeführten Datenanalysen unverzichtbar ist und an Dr. Lisa Hantschel für die Bereitstellung der experimentellen GPR-Daten, die es ermöglichen, die entwickelten Methoden unter realistischen Bedingungen zu erproben.

Dr. Hannes Bauser möchte ich danken für seine immer hilfsbereite Unterstützung und Begleitung meiner Arbeit als Mitbetreuer.

Allen jetzigen und ehemaligen Kollegen aus der TS-CCEES-Arbeitsgruppe möchte ich danken für ihre Hilfsbereitschaft und Unterstützung und die freundliche und aufgeschlossene Arbeitsatmosphäre, die auch aus der Ferne in den Videokonferenzen der letzten Zeit eine gute Begleitung und Motivation war.

An die Heidelberg Graduate School for Physics geht mein Dank für die Finanzierung dieses Projekts, die es ermöglicht hat, dass ich mich über einige Jahre der Forschung an diesem Projekt widmen konnte.

Abschließend möchte ich ganz besonders meiner Freundin Jennifer, meiner Familie und meinen Freunden danken für ihre Unterstützung, Ermutigung und Rücksicht in dieser Zeit.