

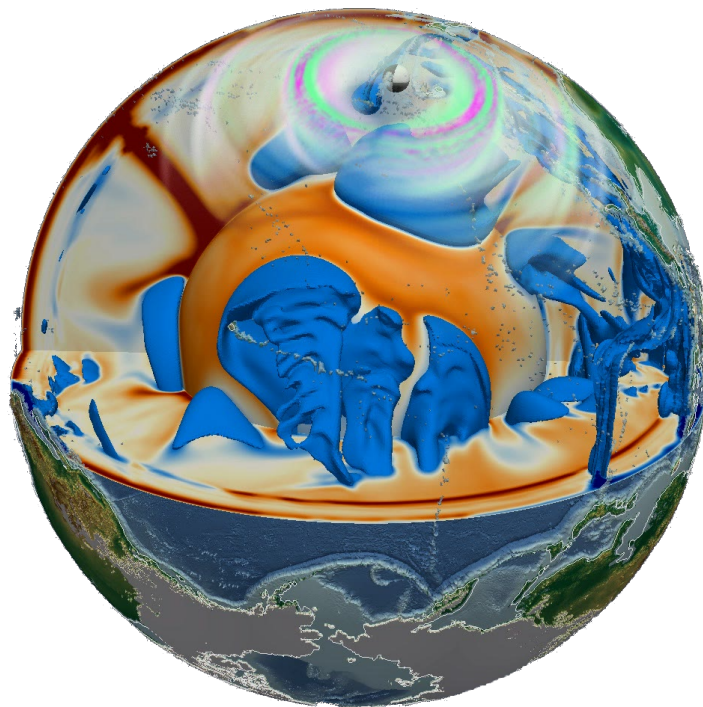
Fakultät für Geowissenschaften
Ludwig-Maximilians-Universität München



Kumulative Habilitationsschrift
Dr. Bernhard Schuberth

TIGHT CONSTRAINTS ON BUOYANCY IN EARTH'S MANTLE

An integrated framework to bridge the gap between geophysical
hypotheses and observations



München, März 2023

KURZZUSAMMENFASSUNG

Eine genaue Kenntnis der Kräfte, die die Plattentektonik antreiben, ist von grundlegender Bedeutung für die Untersuchung von Naturgefahren wie zum Beispiel Erdbeben. Es fehlt bisher jedoch ein ausreichendes, quantitatives Verständnis der Auftriebskräfte im Erdmantel, die für die Bewegung der Lithosphäre auf geologischen Zeitskalen verantwortlich sind. Die größte Herausforderung besteht heutzutage darin, sowohl die dynamisch relevanten Längenskalen als auch die Magnitude der Mantelheterogenitäten durch globale seismische Tomographie abzubilden, da diese aufgrund ungleichmäßiger Datenabdeckung und Datenunsicherheiten in ihrem Auflösungsvermögen begrenzt ist. Ziel meiner Forschung ist, eine genauere Bestimmung der Auftriebskräfte im Erdmantel zu ermöglichen, indem eine direkte und auf quantitativen Betrachtungen basierende Verbindung zwischen geodynamischen Hypothesen und Erdbeobachtungen hergestellt wird. Dies wird durch die Entwicklung eines integrierten, multidisziplinären Forschungsansatzes für die numerische Vorwärts-Modellierung und umfassende Aus- und Bewertung von synthetischen Erdmodellen erreicht. Durch Kombination verschiedener Simulations-, Modellierungs- und Analyseverfahren aus den Bereichen Geodynamik, Mineralphysik und Seismologie können unterschiedliche Sekundärdatensätze für diese Modelle erzeugt und mit Erdbeobachtungen verglichen werden. In den letzten Jahren konnte ich anhand der Berechnung von globalen dreidimensionalen seismischen Wellenfeldern in Mantelkonvektionsmodellen das große Potenzial dieses Vorwärts-Simulationsansatzes demonstrieren. Die Analyse von Wellenfeldeffekten in hypothetischen Erdmodellen, wie die hier betrachtete „elastische“ Laufzeitdispersion, eröffnet einen neuen Weg, um das Spektrum und die Magnituden seismischer Strukturen besser charakterisieren und eingrenzen zu können. Darüber hinaus hat meine Arbeit gezeigt, dass es mit heutigen Modellierungstechniken und Rechenressourcen möglich ist, systematische Untersuchungen der Effekte von Unsicherheiten in den mineralogischen Eingangsparametern durchzuführen. Diese gezielten Herangehensweisen werden es in Zukunft erlauben, robustere Aussagen über die Auftriebskräfte im Mantel zu treffen. Die Ergebnisse meiner Forschung wirken sich nicht nur auf seismologische und geodynamische Überlegungen zur Struktur und Entwicklung des Mantels aus, sondern auch auf Geodynamo-Simulationen und plattentektonische Modellierungen.

ABSTRACT

Accurate knowledge of the forces that drive plate tectonics is of fundamental importance for studying natural hazards such as earthquakes. However, we still lack a quantitative understanding of the buoyancy forces in Earth's mantle that drive surface motions on geologic time scales. The main challenge today is to constrain both dynamically relevant length-scales and magnitudes of mantle heterogeneity through global seismic tomography. Such inversions are limited in their resolving power owing to uneven data coverage and data uncertainties. Through my research, I aim at putting tighter constraints on mantle buoyancy variations through providing a direct link between geodynamic hypotheses and Earth observations based on quantitative considerations. This is achieved by building an integrated multidisciplinary framework for the numerical forward-modelling and comprehensive assessment of synthetic Earth models. A combination of simulation and post-processing tools from geodynamics, mineral physics and seismology is used to derive various secondary datasets from these models for comparison to the observations. Over the last years, I have demonstrated the great potential of this forward-simulation approach by computing 3-D global seismic wavefields in models of mantle flow. Analysing wavefield effects in hypothetical Earth models, such as the 'elastic' traveltime dispersion investigated here, opens up a new way for constraining the spectrum and the magnitudes of seismic structures. Furthermore, I have shown that with current modelling techniques and computational resources, it is possible to perform systematic investigations of the effects of uncertainties in mineralogical input parameters. These targeted approaches will in future allow more robust conclusions to be drawn on the buoyancy forces in Earth's mantle. The results of my research impact not only seismological and geodynamic considerations on mantle structure and evolution, but also bear on geodynamo simulations and tectonic modelling.

Figure on page 1: Snapshot of the three-dimensional wavefield in a geodynamic model of mantle heterogeneity simulated for an earthquake in the Fiji Islands region using a spectral element technique [Schuberth et al. 2012].

EIDESSTATTLICHE VERSICHERUNG

Hiermit versichere ich an Eides statt, dass die schriftliche Habilitationsleistung selbstständig verfasst und die Herkunft des verwendeten oder zitierten Material ordnungsgemäß kenntlich gemacht ist.

München, den 31. März 2023

Dr. Bernhard Schuberth

Hiermit versichere ich an Eides statt, dass ich nicht schon zweimal ein Habilitationsverfahren im gleichen Fach ohne Erfolg beendet habe, mir kein akademischer Grad entzogen worden ist und auch kein Verfahren gegen mich anhängig ist, das die Entziehung eines akademischen Grades zur Folge haben könnte.

München, den 31. März 2023

Dr. Bernhard Schuberth

INHALTSVERZEICHNIS/CONTENTS

1 Zusammenfassung der Forschungsergebnisse	6
1.1 Hintergrund und wissenschaftliche Fragestellung	6
1.2 Überblick über die zusammengefassten Publikationen	9
1.3 Abschließende Bemerkungen und Ausblick	12
1.4 Erklärung über den eigenen Beitrag zu den Publikationen	15
2 Summary of research achievements (Englische Zusammenfassung)	16
2.1 Background and scientific objectives	16
2.2 Overview of the subsumed publications	18
2.3 Conclusions and outlook	23
2.4 Declaration of own contribution to the publications	25
Danksagung/Acknowledgements	26
Literaturverzeichnis/References	27

LISTE DER ZUSAMMENGEFASSTEN PUBLIKATIONEN

LIST OF SUBSUMED PUBLICATIONS

1. **Schuberth, B.S.A.**, C. Zaroli and G. Nolet (2012), *Synthetic seismograms for a synthetic Earth: long-period P- and S-wave traveltime variations can be explained by temperature alone*, Geophys. J. Int., 188(3), 1393–1412, doi:10.1111/j.1365-246X.2011.05333.x.
2. Davies, D.R., S. Goes, J.H. Davies, **B.S.A. Schuberth**, H.-P. Bunge and J. Ritsema (2012), *Reconciling dynamic and seismic models of Earth's lower mantle: the dominant role of thermal heterogeneity*, Earth Planet. Sci. Lett., 353–354, 253–269, doi:10.1016/j.epsl.2012.08.016.
3. **Schuberth, B.S.A.**, C. Zaroli and G. Nolet (2015), *Traveltime dispersion in an isotropic elastic mantle: Strong lower mantle signal in differential-frequency residuals*, Geophys. J. Int., 203(3), 2099–2118, doi:10.1093/gji/ggv389.
4. Nerlich, R., L. Colli, S. Ghelichkhan, **B.S.A. Schuberth** and H.-P. Bunge (2016), *Constraining central Neo-Tethys Ocean reconstructions with mantle convection models*, Geophys. Res. Lett., 43, 9595–9603, doi:10.1002/2016GL070524.
5. Koelemeijer, P., **B.S.A. Schuberth**, D.R. Davies, A. Deuss and J. Ritsema (2018), *Constraints on the presence of post-perovskite in Earth's lowermost mantle from tomographic-geodynamic model comparisons*, Earth Planet. Sci. Lett., 494, 226–238, doi:10.1016/j.epsl.2018.04.056.
6. Simmons, N.A., **B.S.A. Schuberth**, S.C. Myers and D.R. Knapp (2019), *Resolution and Covariance of the LLNL-G3D-JPS Global Seismic Tomography Model: Applications to Travel time Uncertainty and Tomographic Filtering of Geodynamic Models*, Geophys. J. Int., 217, 1543–1557, doi:10.1093/gji/ggz102.
7. **Schuberth, B.S.A.** and T. Bigalke (2021), *From Mantle Convection to Seismic Observations: Quantifying the Uncertainties Related to Anelasticity*, in *Mantle Convection and Surface Expressions*, Eds. Marquardt, H., Ballmer, M., Cottaar S. and J. Konter, pp.97–120, AGU Geophysical Monograph Series Vol. 263, John Wiley & Sons Inc., Hoboken, NJ, USA, doi:10.1002/9781119528609.ch4.

Diese Seite wurde absichtlich leer gelassen./This page intentionally left blank.

1 ZUSAMMENFASSUNG DER FORSCHUNGSERGEBNISSE

Aus Gründen der Übersichtlichkeit sind Abbildungen nur in der englischen Fassung abgedruckt.

1.1 HINTERGRUND UND WISSENSCHAFTLICHE FRAGESTELLUNG

Konvektion im Erdmantel durch stetige langsame Bewegungen von festem Gestein, die im tiefen Erdinneren durch mikroskopische Kriechprozesse ermöglicht werden, ist die Ursache plattentektonischer Verschiebungen der Lithosphäre. Eine genaue Kenntnis der Verteilung und Stärke der Auftriebskräfte im Mantel und insbesondere der Scherkräfte an der Unterseite der tektonischen Platten ist eine Grundvoraussetzung für die Modellierung der Lithosphärendynamik und der die Erdoberfläche ständig verändernden geologischen Prozesse. So ist beispielsweise die Kenntnis der Spannungsverteilung rund um Verwerfungszonen eine wesentliche Voraussetzung für die Modellierung der Bruchdynamik von Erdbeben [z.B. Day 1982]. Die Gesteinsströme im Mantel wirken sich auch auf die Konvektion im Erdkern und damit auf den Geodynamoprozess aus, indem sie Randbedingungen liefern, sowohl thermische (d.h. laterale Wärmeflussvariationen) als auch geometrische (d.h. Topographie der Kern-Mantel-Grenze [CMB]). Strömungsmechanische Untersuchungen des Erdmantels sind daher für unser Verständnis der Funktionsweise des gesamten Planeten von grundlegender Bedeutung. Viele Modelle der Manteldynamik sind bisher jedoch noch weitgehend qualitativer Natur.

Um quantitative Abschätzungen der auf die Platten wirkenden basalen Scherkräfte treffen zu können, bedarf es besserer Kenntnisse über die Struktur und Dynamik des Erdmantels. Der Materialfluss im Mantel wird durch Auftriebskräfte angetrieben, die durch Schwankungen der Temperatur und der chemischen Zusammensetzung hervorgerufen werden. Eine der dringendsten Aufgaben in der Geodynamik ist die Interpretation seismischer Beobachtungen in Bezug auf die Dynamik und chemischen Zusammensetzung des Erdmantels sowie eine genau Bestimmung der Auftriebskräfte in Bezug auf charakteristische Längenskalen und Magnitude.

Dieses Problem kann aus zwei unterschiedlichen Richtungen angegangen werden:

1. Seismische Tomographie kann verwendet werden, um dreidimensionale Bilder der Mantelstruktur durch Inversion von seismischen Daten zu erzeugen. Diese Bilder enthalten wertvolle Informationen über Materialeigenschaften in der Tiefe, und es ist –im Prinzip– möglich, daraus eine Abschätzung des (geologisch) heutigen thermodynamischen Zustands des Erdmantels abzuleiten.
2. Alternativ können numerische Vorwärts-Modelle der Mantelkonvektion auf Grundlage entsprechender Hypothesen erzeugt werden, die anschließend durch Berechnung verschiedener synthetischer Sekundärdatensätze und deren Vergleich mit Beobachtungen des Erdsystems auf ihre Erdähnlichkeit hin bewertet werden müssen. Hierzu eignet sich insbesondere die Fülle der verfügbaren seismischen Daten sowie Schwerfeld-/Geoidbeobachtungen und Abschätzungen der (zeitlich veränderlichen) dynamischen Topographie sowie der Rate der Echten Polwanderung.

Der erste Ansatz leidet unter einer Reihe von inhärenten Einschränkungen, die eine genaue Bestimmung der Auftriebsverteilung im Mantel (bisher) unmöglich machen. Die grundlegenden Probleme sind: 1) dass es eine große Herausforderung ist, sowohl die Längenskalen als auch die Stärke der seismischen Heterogenität in der Tiefe mit ausreichender Auflösung und Genauigkeit abzubilden, und 2) dass die Interpretation von tomographischen Bildern aufgrund der schlecht trennbaren thermischen und chemischen Effekte erschwert wird. Trotz der großen Fortschritte und Erfolge der seismischen Tomographie in den letzten drei Jahrzehnten ist es immer noch nicht möglich, die dreidimensionale Struktur des Mantels mit ausreichend hoher Auflösung abzubilden, um das gesamte Spektrum der sich aus der Dynamik ergebenden Längenskalen global abzudecken [Ritsema et al. 2011; Trampert et al. 2013; Fichtner et al. 2018]. Dynamisch relevante Längenskalen im konvektierenden Mantel sind beispielsweise die Dicke subduzierter ozeanischer Lithosphäre (in der Größenordnung von 90–100 km) oder der Durchmesser aufsteigender Plumes. Insbesondere letztere sind seismisch schwer abzubilden [Maguire et al. 2016; Stockmann et al. 2019]. In den letzten Jahren wurden sowohl Finite-Frequenz- als auch Wellenforminversionen (z. B. basierend auf der „Adjungierten“-Methode) durchgeführt, um die Grenzen der Auflösung zu verschieben und tomographische Bilder mit bisher unerreichter Detailgenauigkeit zu liefern [z.B. French & Romanowicz 2014; Bozdağ et al. 2016; Zaroli et al. 2014; Fichtner et al. 2018; Lei et al. 2020]. Es erweist sich jedoch nach wie vor als schwierig, die Auflösung über das durch die inhomogene Datenabdeckung vorgegebene Maß hinaus zu verbessern. Ein zweites Problem ist die Nichteindeutigkeit der tomographischen Abbildung und

die Notwendigkeit, die Inversionen zu regularisieren. Tomographische Modelle sind daher immer eine unscharfe, verschwommene und „gedämpfte“ (d.h. „low fidelity“) Version der wahren Erdstruktur [z. B. , *Ritsema et al.* 2007; *Simmons et al.* 2019]. Eine besondere Schwierigkeit besteht darin, die Magnitude der seismischen Heterogenitäten genau einzugrenzen. Ein gutes quantitatives Verständnis dieser wie ein Filter wirkenden Effekte und der damit verbundenen Amplitudenreduktion in einem gegebenen tomographischen Modell ist wichtig, da sich heutzutage die geodynamischen Studien über klassische Vorwärts-Simulationen hinaus zu sogenannten Retrodifikationen hin entwickeln. Während erstere von einem unbekannten Ausgangszustand zu irgendeinem Zeitpunkt in der geologischen Vergangenheit aus starten, kommt bei den geodynamischen Inversionen die Adjungierten-Methode zum Einsatz, um iterativ den Ausgangszustand, basierend auf einem als bekannt angenommenen „terminalen“ Zustand des Mantels, zu optimieren [z.B. *Colli et al.* 2018]. Für den terminalen (geologisch heutigen) thermodynamischen Zustand des Mantels wird dabei eines der vorhandenen tomographischen Modelle, gekoppelt mit Informationen aus der Mineralphysik, verwendet. Abschätzungen dieses Endzustandes sind jedoch nur aussagekräftig, wenn die Stärke der seismischen Heterogenitäten korrekt in Variationen des Auftriebs umgerechnet werden können, d. h. wenn die durch die in der Tomographie notwendige Regularisierung erzeugte Amplitudenreduktion berücksichtigt und bestenfalls rückgängig gemacht werden kann.

Der alternative, unter Punkt 2 genannte, Ansatz zur Bestimmung der Auftriebsverteilung im Erdmantel basiert auf Vorwärts-Modellierung, wobei bestimmte Hypothesen über die Dynamik der Mantelströmung als Ausgangspunkt genommen werden. Die zugrundeliegenden Gleichungen der Strömungsmechanik lassen sich routinemäßig auf modernen Höchstleistungsrechnern (HPC) lösen. Wichtig ist hierbei, dass Parameter wie Materialeigenschaften und der Wärmeeintrag in den Mantel (radioaktive Erwärmung und Wärmefluss aus dem Kern) die Stärke der Konvektion beeinflussen und damit die inhärenten Längenskalen und die Stärke von Temperaturanomalien, Dichteschwankungen und seismischen Heterogenitäten steuern. Das Problem eines besseren Verständnisses der Manteldynamik geht folglich in die Aufgabe über, die Eingangsparameter und die erforderliche Komplexität der Beschreibung von Deformation im Material (z. B. Temperaturabhängigkeit der Viskosität, Newtonsche vs. nicht-Newtonsche Rheologien usw.) besser zu bestimmen. Nachdem Eingabeparameter und entsprechende Rheologie ausgewählt wurden (d.h. eine geodynamische Hypothese formuliert wurde), kann eine eindeutige Lösung für die Konvektionsgleichungen berechnet werden, vorausgesetzt, dass Anfangs- und Randbedingungen vorgegeben werden [*Serrin* 1959]. Durch die Assimilierung von Daten zu den tektonischen Plattenbewegungen in der jüngeren Erdgeschichte als Oberflächenrandbedingung kann eine geologisch begründete theoretische Vorhersage der heutigen Strömungsgeschwindigkeiten und des Temperaturfeldes im Mantel gewonnen werden. Temperaturschwankungen sind folglich bei diesem Ansatz kein freier Parameter, sondern werden vollständig durch die Dynamik des Systems bestimmt. Sowohl die charakteristischen Längenskalen als auch die Stärke der lateralen Temperaturschwankungen sind dabei weitgehend unabhängig vom (unbekannten) Ausgangszustand und somit eine wichtige Vorhersage dieser sogenannten Mantelzirkulationsmodelle (MCMs). Es konnte gezeigt werden, dass der Einfluss des Anfangszustandes mit der Dauer der assimilierten Plattenbewegungshistorie abnimmt [*Colli et al.* 2015]. Moderne Plattenrekonstruktionen decken die letzten 400 Millionen Jahre (Ma) ab, also mindestens das Doppelte der Umwälzzeit des Mantels.

Eine klassische Methode zur Beurteilung von Vorwärts-Mantelzirkulationsmodellen sind qualitative Vergleiche ihrer spektralen Eigenschaften mit tomographischen Bildern [z.B. , *Becker & Boschi* 2002; *Nakagawa & Tackley* 2010; *Bull et al.* 2009]. Diese Herangehensweise ist in geodynamisch-seismischen Modellvergleichen weit verbreitet, es muss dabei aber bedacht werden, dass die spektralen Eigenschaften von Mantelzirkulationsmodellen weitestgehend von den Oberflächenrandbedingungen, d.h. den plattentektonischen Rekonstruktionen, beeinflusst werden. Somit geben spektrale Korrelationen nicht so sehr Aufschluss über die tatsächliche Dynamik des Systems, sondern vielmehr sind sie ein Hinweis auf die Genauigkeit der in den Simulationen verwendeten Plattenhistorie. Darüber hinaus sind Vergleiche von Modellspektren nur dann sinnvoll, wenn geodynamische Modellierungsergebnisse anhand von mineralogischen Modellen, die die Komplexität von Phasenveränderungen im Mantel adäquat darstellen, in seismische Geschwindigkeiten umgerechnet werden [*Schubert et al.* 2009b].

In einer Reihe von Studien habe ich einen theoretischen Forschungsansatz basierend auf reinen Vorwärts-Modellierungen entwickelt, der darauf abzielt, den tiefen Mantel zu untersuchen. Der Schwerpunkt liegt dabei darauf, geodynamische Modelle umfassend zu untersuchen und gegen Erdbeobachtungen auf der Grundlage quantitativer Überlegungen zu evaluieren. Mithilfe thermodynamischer mineralogischer Modelle [z.B. *Connolly* 2005; *Stixrude & Lithgow-Bertelloni* 2005, 2022; *Ricard et al.* 2005] können aus den Ergebnissen geodynamischer Simulationen theoretische Vorhersagen für verschiedene geophysikalisch relevante Größen berechnet werden (z.B. seismische Geschwindigkeit und Dichtestruktur des Mantels). Im Rahmen früherer Studien hat-

te ich solche Vorhersagen mit tomographischen Modellen [Schuberth et al. 2009b,a] sowie mit dem Geoid und Abschätzungen der Rate der Echten Polwanderung [Schaber et al. 2009] verglichen. In Schuberth et al. [2009a] wurden die geodynamischen Modelle zudem so modifiziert, dass sie das begrenzte Auflösungsvermögen und die langwellige Charakteristik tomographischer Bilder der Scherwellengeschwindigkeiten (v_s) im Mantel widerspiegeln. Auf diese Weise konnten die Auswirkungen der ungleichmäßigen seismischen Datenabdeckung und der Regularisierung in seismischen Inversionen berücksichtigt werden, wodurch ein konsistenter quantitativer Vergleich mit dem tomographischen Modell ermöglicht wurde. Dieses sogenannte „tomographische Filtern“ [Ritsema et al. 2007] von hypothetischen Mantelstrukturen ist heutzutage ein Standard-Verarbeitungsschritt in geodynamisch-tomographischen Modellvergleichen. Die auf diese Weise gefilterten Modelle liefern wertvolle Informationen darüber, wie Heterogenitäten, unter Berücksichtigung der verfügbaren seismischen Daten und der zugrundeliegenden Inversionsstrategie, verzerrt und unscharf dargestellt werden.

Eine spezifische Fragestellung, die von mir mit dem oben erwähnten Vorwärts-Modellierungsansatz behandelt wurde, ist der Ursprung von zwei großen Bereichen im tiefsten Mantel mit stark reduzierten seismischen Geschwindigkeiten (die sogenannten „Large-Low-Velocity-Provinces“ [LLVPs] unter Afrika und dem Pazifik). Diese beiden LLVPs haben seit ihrer Entdeckung beträchtliche Aufmerksamkeit auf sich gezogen, und es wurde eine Vielzahl an seismologischen und geodynamischen Untersuchungen durchgeführt, um die Ursache dieser Strukturen zu erforschen. Sie werden häufig als große Ansammlungen von im Vergleich zum Rest des Mantels chemisch unterschiedlichem Material interpretiert, da sie entlang ihrer vertikalen Ränder scharf zum Rest des Mantels abgegrenzt sind und sie anti-korrelierte Variationen in Scherwellen- und „Bulk-Sound-Geschwindigkeit“ (v_c) sowie Hinweise auf eine erhöhte Eigendichte aufweisen [van der Hilst & Karason 1999; Masters et al. 2000; Ishii & Tromp 2001; Wen et al. 2001; Ni et al. 2002; Ritsema & van Heijst 2002; Trampert et al. 2004; Wang & Wen 2004; To et al. 2005; Mosca et al. 2012]. Die Bulk-Sound-Geschwindigkeit ist eine rein theoretisch definierte seismische Geschwindigkeit, die nur vom Kompressionsmodul und der Dichte abhängt (die physikalisch relevante Kompressionswellengeschwindigkeit v_p hängt zusätzlich auch vom Schermodul ab). Das Vorhandensein von chemischen Heterogenitäten im Mantel ist aufgrund der Subduktion ozeanischer Kruste zusammen mit der abgereicherten Lithosphäre zu erwarten [z.B. Allègre & Turcotte 1986; Agranier et al. 2005], und die Akkumulation von ozeanischem Krustenmaterial oder eine mögliche Eisenanreicherung von Material in Kontakt mit dem Kern werden als mögliche Erklärungen für die LLVPs angesehen. Erkenntnisse aus einer großen Anzahl von geodynamischen, seismologischen und mineral-physikalischen Studien deuten jedoch darauf hin, dass die Temperatur an der CMB sehr hoch ist und es einen starken Temperaturgradienten über die D''-Schicht, verbunden mit einem hohen Kernwärmefluss, gibt [z.B. Glatzmaier & Roberts 1995; Kuang & Bloxham 1997; Boehler 2000; Buffett 2002; Gubbins et al. 2004; Nimmo et al. 2004; Alfè et al. 2007; Lay 2008; Fiquet et al. 2010]. Ein großer Temperaturgradient in der unteren thermischen Grenzschicht des Mantels, in der Größenordnung von 1000–1500 K, und die daraus resultierenden großen lateralen Temperaturschwankungen könnten eine alternative Erklärung zu chemischen Variationen für die seismischen Heterogenitäten im untersten Mantel, insbesondere die starken Reduktionen der Scherwellengeschwindigkeit, darstellen.

Bereits in meiner Doktorarbeit hatte ich mich mit den Implikationen eines großen Temperaturkontrasts zwischen Kern und Mantel sowie dessen Auswirkung auf seismische Modelle und direkte Beobachtungen beschäftigt. Startpunkt war dabei die Evaluierung eines bestimmten Szenarios der Mantelkonvektion, das auf der Hypothese einer hohen CMB-Temperatur (und entsprechend hoher Kernwärme) in Kombination mit isochemischen, d.h. rein thermisch getriebenen Mantelströmungen, eines dreilagigen Viskositätsprofils und einer pyrolitischen chemischen Zusammensetzung beruht. Dieses Setup stellt ein vereinfachtes, aber hinreichend realistisches Modell der Mantelzirkulation dar (d.h. die Komplexität wurde auf ein Minimum reduziert). In Schuberth et al. [2009b] hatten wir gezeigt, dass starke Verringerungen der Scherwellengeschwindigkeit (typisch für die LLVPs) und deren starke Gradienten (d.h. scharfe Ränder) mit den oben gemachten Annahmen in Einklang gebracht werden können. Die Magnitude der heißen Temperaturanomalien im untersten Mantel, die sich aus dem großen thermischen Gradienten über die D''-Schicht hinweg ergeben, können die Scherwellengeschwindigkeitsverringerung innerhalb der LLVPs erklären. Wie in Abbildung 1a zu sehen ist, stimmt die Stärke der v_s -Variationen im tomographisch gefilterten MCM mit hohem Kernwärmefluss [see Schuberth et al. 2009a] auch im Mittel gut mit denen des tomographischen Modells S20RTS [Ritsema et al. 2004] überein. Diese Arbeiten haben gezeigt, dass rein thermische Modelle der Mantelströmung statistisch betrachtet mit den tomographischen Modellen kompatibel sind. Zusammen mit der Studie von Schaber et al. [2009], die sich auf Geoidbeobachtungen und die Rate der Echten Polwanderung konzentrierte, deutet dies darauf hin, dass chemische Heterogenitäten für die Dynamik des unteren Mantels weniger wichtig sein könnten als allgemein angenommen.

1.2 ÜBERBLICK ÜBER DIE ZUSAMMENGEFASSTEN PUBLIKATIONEN

Der Schwerpunkt meiner Forschung liegt auf einem besseren Verständnis der Struktur und Dynamik des Erdmantels. Das übergeordnete Ziel ist es, die lateral variablen Auftriebskräfte besser bestimmen zu können, indem eine quantitative und physikalisch konsistente Verbindung zwischen geophysikalischen Hypothesen und Erdbeobachtungen hergestellt wird. Dies wird durch die Entwicklung eines umfassenden, multidisziplinären und auf numerischen Modellierungen basierenden Forschungsansatz für die Generierung und Evaluierung hypothetischer Erdmodelle erreicht, der Simulations- und Nachbearbeitungsmethoden aus den Bereichen Geodynamik, Mineralphysik und Seismologie zusammenführt.

Im Rahmen dieser Bemühungen habe ich in den letzten Jahren eine neuartige Methodik entwickelt, bei der großskalige geodynamische und seismische Simulationsanwendungen auf Höchstleistungsrechnern kombiniert werden: Vollsynthetische seismische Wellenformen werden mit einer Spektrale-Elemente-Methode für 3-D-Strukturen berechnet, die aus dem Temperaturfeld der Mantelzirkulationsmodelle generiert werden [siehe *Schuberth et al.* 2012]. Wie in den früheren Arbeiten kommt dabei ein Modell der Mantelmineralogie zum Einsatz. In diesem Zusammenhang haben wir 2017 eine neue Open-Source-Software namens *MMA-EoS* präsentiert, die zur Bestimmung von Phasengleichgewichten der Mineralzusammensetzung basierend auf Gibbs-Energieminimierung und zur Berechnung zugehöriger physikalischer Eigenschaften verwendet werden kann [z.B. Elastizitätsmodule, Dichte, Wärmekapazität, etc.; *Chust et al.* 2017]. Um die Analyse von MCMs zu beschleunigen und um die Vorbereitung und Durchführung der seismischen Simulationen für die resultierenden Strukturen zu vereinfachen, habe ich darüber hinaus in den letzten Jahren ein einfach zu bedienendes Software-Paket implementiert. Eine Routineaufgabe in meiner Forschungsgruppe, die mit diesen Codes unkompliziert und zeitsparend erledigt werden kann, ist das tomographische Filtern der geodynamischen Modelle. Meine Forschung hat gezeigt, dass tomographisch-geodynamische Modellvergleiche eine Schlüsselkomponente bei der Erforschung des gegenwärtigen Zustands und der Entwicklung des Erdmantels sind. Ein weiterer wichtiger Aspekt, der lange nicht berücksichtigt wurde, sind die Auswirkungen seismischer Datenunsicherheiten, die wir in *Simmons et al.* [2019] behandeln konnten. Im Folgenden werden die wichtigsten Ergebnisse und Erkenntnisse der in dieser Arbeit zusammengefassten Studien näher erläutert. Dies schließt sowohl die seismischen Vorwärts-Modellierungsstudien, die es zum Ziel hatten, die Hypothese einer hohen CMB-Temperatur und damit verbundenem hohen Wärmefluss weiter zu testen, als auch verschiedene Anwendungen des tomographischen Filterns von MCMs ein:

1. In *Schuberth et al.* [2012] haben wir die oben erwähnte neuartige Herangehensweise erstmals eingeführt, die komplementär zu tomographischen Inversionen ist und Untersuchungen des tiefen Erdmantels anhand quantitativer Bewertungen geodynamischer Modelle im direkten Vergleich mit seismischen Beobachtungen ermöglicht. Bei diesem Ansatz werden vollsynthetische seismische Wellenformen mithilfe einer Spektrale-Elemente-Methode für 3-D seismische Strukturen berechnet, welche ausgehend von Mantelzirkulationsmodellen erzeugt wurden. Sie basiert ausschließlich auf Vorwärts-Modellierung und umgeht somit das Problem des begrenzten seismischen Auflösungsvermögens. Gleichzeitig wird eine vollständige und physikalisch korrekte Behandlung der seismischen Wellengleichung ohne zusätzliche Approximationen gewährleistet. Dieser Forschungsansatz erlaubt es: 1) über geodynamisch-tomographische Modellvergleiche hinauszugehen (letzttere leiden nicht nur an einem begrenzten Auflösungsvermögen, sondern auch an der Nichteindeutigkeit der tomographischen Inversionen), 2) *P*- und *S*-Wellen gleichzeitig und konsistent zu analysieren, 3) die Einschränkungen, die mit der konventionellen Strahlentheorie (Hochfrequenzapproximation) verbunden sind zu vermeiden und 4) synthetische Seismogramme vollkommen unabhängig von seismischen Beobachtungen zu erzeugen. Die Simulation der 3D-Wellenausbreitung in rein thermisch getriebenen MCMs ergab, dass – für sowohl *P*- als auch *S*-Wellen – die Standardabweichungen der langperiodischen Laufzeitvariationen gut mit denen der beobachteten Laufzeitresiduen übereinstimmen (siehe Abb. 1b). Hervorzuheben ist, dass die synthetischen Daten sowohl die jeweils unterschiedlichen Trends mit der maximalen Strahlentiefe (konstante Werte für *P*-Wellen und ansteigende Werte für *S*-Wellen) als auch deren Größe reproduzieren konnten.

Die Erkenntnis, dass thermisch getriebene Mantelkonvektion mit den verfügbaren seismischen Beobachtungen vereinbar ist, scheint im Widerspruch zur erwarteten Existenz chemischer Heterogenitäten zu stehen, die sich aus der Subduktion von ausdifferenzierter ozeanischer Kruste und Lithosphäre ergibt. Hierbei muss jedoch beachtet werden, dass die Studie von *Schuberth et al.* [2012] die Möglichkeit chemischer Heterogenität, insbesondere auf kleinen Längenskalen, nicht ausschließt. Die damals verfügbaren HPC-Ressourcen ermöglichten die genaue Berechnung von seismischen Wellenfeldern bis zu einer kür-

zesten Periode von 10 s (d.h. 0,1 Hz), und die Seismogramme wurden bei 15 s dominanter Periode bandpassgefiltert bevor die Raumwellen-Laufzeiten durch Kreuzkorrelation gemessen wurden. Aufgrund der großen Ausdehnung der Fresnelzone am Strahlumkehrpunkt bei diesen Perioden werden derartige Messungen effektiv durch Strukturen mit Längenskalen von einigen hundert Kilometern und mehr beeinflusst. Kleinere Strukturen können sich potenziell aufgrund von Wellenfeldeffekten "verstecken" (z.B. durch sog. Wellenfrontheilung). Mit anderen Worten, Beugungseffekte spielen bei diesen Perioden eine wichtige Rolle und müssen angemessen berücksichtigt werden. Der sich daraus ergebende Rückschluss, dass chemische Heterogenitäten eher auf kleinen anstatt auf großen Längenskalen im Mantel vorhanden sein könnten, weist diesen daher eine eher passive Rolle für die Strömung im System zu.

2. In *Davies et al.* [2012] haben wir die Arbeit von *Schuberth et al.* [2009a] um die Untersuchung thermochemischer MCMs erweitert. Dabei haben wir im Besonderen getestet, ob die Existenz einer chemisch andersartigen und dichten Schicht im untersten Mantel ebenfalls in Einklang mit seismologischen Beobachtungen und tomographischen Modellen ist, wiederum unter Annahme eines starken Kernwärmeflusses. Die untersuchten thermochemischen MCMs hatten identische Eingangsparameter zu den Modellen von *Schuberth et al.* [2009b] mit Ausnahme der zu Beginn der Simulationen vorgegebenen dichten Schicht oberhalb der CMB. Diese Studie hat gezeigt, dass thermochemische MCMs mit realistischen CMB-Temperaturen sehr große Temperaturschwankungen im untersten Mantel und damit Scherwellengeschwindigkeitsschwankungen aufweisen, die im Vergleich zur Tomographie im Mittel um den Faktor 2 bzw. 3 zu groß sind (für entweder eine Basalt- oder Eisenanreicherung in der dichten Schicht). Diese Studie bestätigte somit die Auffassung, dass die Dynamik des Mantels von thermischen Einflüssen dominiert wird und dass Variationen der chemischen Zusammensetzung wahrscheinlich eine eher untergeordnete Rolle für die großskalige Strömung spielen.
3. In *Schuberth et al.* [2015] haben wir die auf seismischen Wellenformen basierende Analyse von MCMs in eine neue Richtung weiterentwickelt und um die Quantifizierung von Beugungseffekten in den synthetischen 3-D-Mantelstrukturen erweitert. Frequenzabhängige Wellenfeldeffekte hängen von der Wellenlänge der seismischen Welle und der Stärke der Geschwindigkeitsanomalien ab [z.B., *Wielandt* 1987; *Hung et al.* 2001; *Malcolm & Trampert* 2011]. Ein großer Vorteil unseres Vorwärts-Modellierungsansatzes ist, dass seismische Modelle, die ausgehend von Mantelzirkulationsmodellen erzeugt wurden, realistische Verteilungen der Längenskalen (d.h. Spektren) und Magnituden der Heterogenitäten aufweisen, vorausgesetzt, die Simulationen wurden bei erdähnlicher Stärke der Konvektion durchgeführt (d.h. mit entsprechender Gesamtviskosität und ausreichend hoher numerischer Auflösung). Die Ergebnisse der Studie zeigen, dass auch bei rein elastischen Strukturen (d.h. ohne intrinsische dissipative seismische Dämpfung) die Laufzeiten seismischer Wellen beträchtliche Dispersion aufweisen, die kompatibel in ihrer Stärke mit den verfügbaren Multi-Frequenz-Beobachtungen sind [z.B., *Sigloch et al.* 2008; *Zaroli et al.* 2010; *Hosseini & Sigloch* 2015]. Die Untersuchung von Wellenfeldeffekten in hypothetischen Erdmodellen und der Vergleich mit für die Erde gemessenen Multifrequenz-Datensätzen eröffnet somit einen vielversprechenden neuen Weg, die charakteristischen Längenskalen der seismischen Heterogenität im Mantel zu bestimmen. Darüber hinaus ermöglichen es solche quantitativen Analysen der beugungsinduzierten Dispersion zukünftig die Stärke der seismischen Heterogenität und folglich auch die Größe der Auftriebskräfte im Mantel konkret anzugeben.
4. Die Studie von *Nerlich et al.* [2016] beschreibt ein Beispiel einer Anwendung des tomographischen Filters und geodynamisch-tomographischer Modellvergleiche. In dieser Studie haben wir das ausgeprägte Geoid-Tief im Indischen Ozean südlich von Indien untersucht. Dies ist ein auffälliges Geoid-Signal, das auf eine regionale, anomale Manteldichtestruktur hinweisen könnte. Alternativ könnten rasche Schwankungen der Plattenkonvergenzraten zwischen Indien und Südostasien, insbesondere in der späten Kreidezeit/Paläozän eine mögliche Erklärung darstellen. Beide Beobachtungen hängen mit der Subduktionsgeschichte der Neotethys zusammen, für die unterschiedliche Szenarien vorgeschlagen worden sind. Im Rahmen der Untersuchungen wurden drei alternative Plattenrekonstruktionen durch Assimilierung der mit ihnen einhergehenden zeitabhängigen Oberflächengeschwindigkeitsfelder in globalen hochauflösenden MCMs analysiert. Die erhaltenen Temperaturfelder wurden wiederum in die entsprechenden seismischen Mantelstrukturen und Dichteverteilung umgerechnet und das damit verbundene Geoid-Signal berechnet. Unsere Analyse ergab, dass sich ein Geoid-Tief ähnlich dem beobachteten entwickelt, wenn ein länger

bestehendes Backarc-Becken südlich des Paläoplatenrandes von Eurasien angenommen wird. Der quantitative Vergleich zur seismischen Tomographie unterstützt dieses Modell. Im Gegensatz dazu konnten Rekonstruktionen, die eine einzige nach Norden einfallende Subduktionszone entlang des Randes von Eurasien oder Modelle, die eine vorübergehende südwärts abtauchende intraozeanische Subduktionszone annehmen, das Geoid-Tief und die seismischen Beobachtungen nicht ausreichend reproduzieren.

5. In *Koelemeijer et al.* [2018] haben wir uns der Frage zugewandt, welche Ursache der in globalen Tomographie-Modellen im unteren Mantel gefundene Anstieg des Verhältnisses von v_s - zu v_p -Geschwindigkeitsvariationen mit der Tiefe und die negative Korrelation zwischen Scherwellen- und Bulk-Sound-Geschwindigkeitsvariationen hat. Diese Studie wurde zum einen durch unsere Bemühungen motiviert, Daten zu den Eigenschwingungen der Erde in die Bewertung der MCMs mit einzubeziehen. Zum anderen wurde sie dadurch motiviert, dass in den Studien von *Schuberth et al.* [2009a] und *Davies et al.* [2012] zwar die Effekte des eingeschränkten tomographischen Auflösungsvermögens berücksichtigt wurden, beide Studien die MCMs und Tomographie-Modelle jedoch nur in Bezug auf Scherwellengeschwindigkeiten verglichen hatten. Das Verhältnis von v_s - zu v_p -Variationen und die negative Korrelation zwischen v_s - und v_c -Variationen waren zuvor oft als Hinweis auf großräumige Heterogenität in der chemischen Zusammensetzung des Mantels interpretiert worden. In dieser Arbeit wurde deswegen untersucht, inwieweit das Auftreten von Post-Perovskit (pPv) im unteren Mantel eine alternative Erklärung für die beobachteten großen v_s/v_p -Verhältnisse und negative v_s-v_c Korrelation darstellen könnte. Dazu wurden synthetische Tomographien, die ausgehend von sowohl thermischen als auch thermochemischen Modelle der globalen 3D-Mantelkonvektion generiert wurden, mit dem Tomographie-Modell SP12RTS [*Koelemeijer et al.* 2016] mit Blick auf deren statistische Eigenschaften verglichen. Wie in früheren Arbeiten haben wir das begrenzte Auflösungsvermögen durch tomographisches Filtern berücksichtigt, wobei hier der Auflösungsoperator von SP12RTS für v_s und v_p zur Anwendung kam. Obwohl der tomographische Filter die synthetischen Tomographien erheblich beeinträchtigt, zeigten unsere Auswertungen, dass der Einfluss von pPv auf das v_s/v_p -Verhältnis und die v_s-v_c -Korrelation in den gefilterten Modellen sichtbar bleibt. Laterale Variationen im pPv-Vorkommen haben einen dominanten Einfluss auf die genannten Parameter, die daher keine geeigneten Maße darstellen, um Aussagen über das Vorhandensein von großflächigen chemischen Variationen im untersten Mantel zu treffen. Um den Rückgang des v_s/v_p -Verhältnisses in SP12RTS nahe der CMB zu erklären, favorisieren unsere Ergebnisse eine pPv-reiche CMB-Region (d.h. vollständige globale pPv-Abdeckung in den untersten ca. 200 km), was wiederum Auswirkungen auf Überlegungen zum Stabilitätsfeld von pPv im Erdmantel hat.
6. In *Simmons et al.* [2019] wurden die Auflösungs- und die Kovarianzmatrix von LLNL-G3D-JPS, einem globalen kombinierten P - und S -Wellen Tomographie-Modell, berechnet und auf das MCM von *Nerlich et al.* [2016] angewendet. Oft sind diese Operatoren für große tomographische Inversionen aufgrund der damit verbundenen riesigen Rechenanforderungen nicht verfügbar. Dennoch gibt es viele Anwendungsmöglichkeiten dieser Matrizen im gesamten Spektrum der Geowissenschaften, unter anderem im Zusammenhang mit der Überwachung von Nukleartests. Das Modell LLNL-G3D-JPS besteht aus mehr als einer Million freier Parameter, was Matrizen mit über einer Billion Elementen zur Folge hat. Angesichts der Größe des mathematischen Problems und generell begrenzter Rechenleistung haben wir eine selbstentwickelte Methode verwendet, um Impulsantworten an jedem Gitterpunkt des Erdmodells und dünn besetzte, aber repräsentative Auflösungs- und Kovarianzmatrizen zu berechnen. Die so erhaltenen Matrizen können verschiedentlich eingesetzt werden, und einige Anwendungsbeispiele für reale Probleme wurden in dieser Studie vorgestellt. Mithilfe der Kovarianzmatrix haben wir die Unsicherheiten in den Laufzeiten tausender P -Wellen berechnet, die von bestimmten Punkten rund um den Globus aus abgestrahlt werden (oder zu ihnen kommen). Darüber hinaus wurden Karten der Fehler in den Laufzeitdaten zur Veranschaulichung der Variabilität der streckenspezifischen Laufzeitunsicherheiten konstruiert. Die Auflösungsmatrix wiederum wurde als tomographischer Filter auf eine geodynamisch erzeugte Version der Erdstruktur (also aus einem MCM heraus generiert) angewandt, um Bilder zu erhalten, die denen die man durch die verzerrende „Linse“ der seismischen Tomographie erhält entsprechen.

7. In *Schuberth & Bigalke* [2021] haben wir noch spezifischer untersucht, wie eine physikalisch konsistente Verbindung zwischen geophysikalischen Hypothesen zur Manteldynamik und theoretischen Vorhersagen entsprechender Erdbeobachtungen hergestellt werden kann. Ziel war es, die Robustheit der Ergebnisse von *Schuberth et al.* [2012] im Hinblick auf Unsicherheiten in den verschiedenen Eingangsparametern zu überprüfen. Insbesondere war es wichtig, den Einfluss von Unsicherheiten in der mineralogischen Umrechnung von Temperaturen in seismische Geschwindigkeiten zu verstehen. Wie in *Schuberth et al.* [2012] haben wir dafür das hypothetische Temperaturfeld eines MCMs quantitativ mit seismischen Aufzeichnungen verknüpft, indem eine Reihe von globalen 3D seismischen Wellenfeldsimulationen für verschiedene Realisierungen der seismischen Mantelstruktur durchgeführt wurden (denen das gleiche MCM-Temperaturfeld zugrunde lag). Die so berechneten synthetischen Laufzeitresiduen bilden die Effekte der verschiedenen Nichtlinearitäten in Bezug auf die ursprünglichen Temperaturen korrekt ab. Der Fokus lag auf der Untersuchung der Auswirkungen der Anelastizität von Mineralen auf die Temperatur-Geschwindigkeits-Umrechnung und die vorhergesagten Laufzeitvariationen, vor dem Hintergrund großer Unsicherheiten in den dazugehörigen Parametern. Aufgrund der Unterschiede im Frequenzgehalt zwischen Labormessungen (MHz bis GHz) und der Erde (mHz bis Hz), müssen die in den mineralogischen Modellen angegebenen seismischen Geschwindigkeiten angepasst werden, d.h. es muss für Dispersion durch anelastische Effekte korrigiert werden. Die anelastische Korrektur erhöht die Temperatursensitivität seismischer Geschwindigkeiten, insbesondere bei hohen Temperaturen. Das Ausmaß dieser Sensitivitätssteigerung hängt ab von der absoluten Temperatur, von der Frequenz der Welle, von der Frequenzabhängigkeit der seismischen Dämpfung (α) und von der Aktivierungsenthalpie des Dämpfungsprozesses (E^*). Vor allem die beiden letztgenannten sind für Mantelminerale nicht genau bekannt, und unsere Ergebnisse zeigen, dass Variationen der Aktivierungsenthalpie die größten Unterschiede in der Temperatursensitivität im Vergleich mit dem rein elastischen Fall hervorrufen. Unter Annahme plausibler Maximalwerte für α und E^* zeigte sich, dass die Temperaturableitung der Scherwellengeschwindigkeit in Regionen mit erhöhten Temperaturen um mehr als 100 Prozent im oberen Teil des unteren Mantels und um bis zu 70 Prozent nahe der CMB zunimmt. Die Standardabweichung der seismischen Laufzeitresiduen war jedoch aufgrund der multiplen Nichtlinearitäten im betrachteten physikalischen System nur um ca. 30 Prozent größer als im anharmonischen (elastischen) Fall. Neben der nicht linearen Beziehung zwischen Temperaturen und anharmonischen seismischen Geschwindigkeiten und der Nichtlinearität von Wellenfeldeffekten, hat vor allem die hochgradig nicht lineare Anelastizitätskorrektur einen starken Einfluss auf die theoretisch vorhergesagten Daten. Die Ergebnisse der Studie in *Schuberth & Bigalke* [2021] haben gezeigt, dass die Auswirkungen der anelastischen Korrektur für niedrige Temperaturen, und damit für Regionen mit schnellen seismischen Geschwindigkeiten, weitgehend vernachlässigbar sind, während die anelastische Korrektur für sehr heiße Regionen zu einer Zunahme der relativen Geschwindigkeitsvariationen im unteren Mantel um fast den Faktor 2 gegenüber dem anharmonischen Fall führen kann. Unsere Simulationen demonstrieren, dass es aufgrund der Schiefe der Temperaturverteilung im Mantel und der Tatsache, dass Wellenfrontheilung bei langsamen seismischen Anomalien besonders wichtig ist, nicht möglich ist, mit einfachen linearen Skalierungen und strahlentheoretischen Approximationen seismische Laufzeitresiduen mit ausreichender Genauigkeit zu berechnen. Vielmehr wird aus unserer Studie deutlich, dass alle Nichtlinearitäten in jedem Schritt der Vorwärts-Modellierungskette korrekt berücksichtigt werden müssen, um physikalisch konsistente seismische Vorhersagen und faire Vergleiche mit den realen Daten zu erhalten.

1.3 ABSCHLIEßENDE BEMERKUNGEN UND AUSBLICK

Der in *Schuberth et al.* [2012], *Schuberth et al.* [2015] und *Schuberth & Bigalke* [2021] vorgestellte geodynamisch-seismische Vorwärts-Modellierungsansatz birgt großes Potenzial, neue Erkenntnisse über die Struktur und Dynamik des tiefen Erdinneren zu gewinnen. Durch meine Forschung konnte ich zeigen, dass mit aktuellen Modellierungstechniken und Rechenressourcen systematische Untersuchungen der Laufzeitdispersion in hypothetischen Mantelstrukturen und der Effekte von Unsicherheiten in den verschiedenen Eingangsparametern auf globaler Skala möglich sind. Dadurch können in Zukunft robustere Schlussfolgerungen aus Vergleichen zwischen vorhergesagten und beobachteten Daten gezogen werden. In Ergänzung zu tomographischen Inversionen ist dieser Ansatz äußerst vielversprechend, um die Auftriebskräfte und deren Verteilung im Mantel besser eingrenzen zu können, gerade auf den Längenskalen, die bisher durch die Tomographie nicht auflösbar sind.

Offene Fragen, die wir derzeit in meiner Arbeitsgruppe bearbeiten, konzentrieren sich auf ein besseres Verständnis des Einflusses von Mineralphasenübergängen auf seismische Strukturen und die damit einhergehenden Beobachtungen [Papanagnou et al. 2022] sowie auf die Frage, wie die Tomographie am besten in geodynamische Inversionsmodelle einfließen kann. Zu den Verbesserungen, die meine Forschungsgruppe derzeit am beschriebenen Vorwärts-Modellierungsansatz vornimmt, gehört der Übergang von proprietärer zu Open-Source-Software (Python). In den letzten Jahren haben wir dies bereits für die automatisierte Messung von Kreuzkorrelationslaufzeitvariationen in Zusammenarbeit mit Christophe Zaroli und Sophie Lambotte (EOST, Université de Strasbourg) umgesetzt. Darüber hinaus arbeiten wir an rechenzeittechnisch günstigeren Methoden (z.B. YSPEC, Al-Attar & Woodhouse [2008]; AxiSEM3D Leng et al. [2016]) zur Berechnung von Wellenformen für 1-D-Profile sowie die geodynamisch erzeugten 3-D seismischen Mantelmodelle. Neben den numerischen Wellenausbreitungssimulationen, mit denen es möglich war, den Frequenzbereich von ca. 3 mHz bis 0,1 Hz (d.h. Perioden von 10 bis ca. 300 Sekunden) abzudecken, haben wir eine Reihe von Projekten gestartet, um den Frequenzbereich auf das gesamte teleseismische Spektrum auszudehnen. Für den hochfrequenten Teil können routinemäßig strahlentheoretische Berechnungen für die MCMs durchgeführt werden. Um das niederfrequenten Band abzudecken berechnen wir die Spektren der Eigenschwingungen der Erde und die daraus ableitbaren „splitting“-Koeffizienten. Um Eigenfrequenzspektren in lateral heterogenen und rotierenden Erdmodellen zu berechnen, wird ein Code verwendet, der die Kopplung und Interaktion der einzelnen Eigenschwingungen berücksichtigt. Dieses in Al-Attar et al. [2012] beschriebene Programm nutzt einen iterativen direkten Lösungsansatz, der eine recheneffiziente Methode zur Durchführung von großangelegten „full coupling“-Berechnungen bietet. Mit diesen Verbesserungen wird die Auswertung und das Testen dynamischer Strömungsmodelle und der zugrundeliegenden Eingangsparameter gegen seismische Beobachtungen zukünftig den gesamten teleseismischen Frequenzbereich abdecken.

Darüber hinaus habe ich mit meiner Arbeitsgruppe begonnen, die Effekte realistischer Krusten- und Lithosphärenstruktur auf die Wellenfeldcharakteristik von synthetischen seismischen Mantelstrukturen zu untersuchen. Darauf aufbauend müssen bestimmte Strategien entwickelt und erkundet werden, um mögliche Schwierigkeiten bei der Bewertung von hypothetischen Mantelmodellen zu berücksichtigen. Eine besondere Herausforderung ist in diesem Zusammenhang der „Nachhall“ (Resonanz aufgrund von Vielfachreflexion) in den Krustenschichten, der frequenzabhängige seismische Laufzeitmessungen beeinflussen kann. Krustenkorrekturen stellen in der Regel ein erhebliches Problem in tomographischen Studien dar, da die Struktur selbst im flachsten Teil der Erde nicht vollkommen bekannt ist [z.B. Ferreira et al. 2010; Lekić et al. 2010]. Besondere Sorgfalt ist erforderlich, um die Wellenformverzerrung durch den Nachhall in der Kruste korrekt bei der Berechnung der Referenzwellenform für Kreuzkorrelationsmessungen zu imitieren. [z.B., Yang & Shen 2006; Ritsema et al. 2009; Zaroli et al. 2010; Dubois et al. 2019]. Wir planen, dieses Problem mithilfe weiterer Untersuchungen an den vielversprechenden Differentialfrequenz-Laufzeitmessungen anzugehen, die, wie in Schuberth et al. [2015] gezeigt, durch flachliegende Strukturen weniger beeinflusst zu sein scheinen als ihre Einzelfrequenzband-Gegenstücke.

Ein weiteres wichtiges Thema in meiner Forschungsgruppe ist derzeit die weitere Untersuchung der Auswirkungen von Datenfehlern auf tomographische Modelle. Heutzutage verlagert sich der Fokus in der seismischen Tomographie auf die Bereitstellung formaler Kriterien zur Quantifizierung der Bildauflösung und Modellunsicherheit, und es ist derzeit von großer Bedeutung, die Auswirkungen dieser Parameter auf geodynamische Anwendungen zu verstehen. Geodynamische Inversionen zum Beispiel, die darauf abzielen, die vergangene Entwicklung des Erdmantels zu retrodizieren, d.h. auf Basis der gegenwärtigen Beobachtung zurück in die geologische Vergangenheit „vorherzusagen“, erfordern aus Tomographien abgeleitete Abschätzungen seines gegenwärtigen thermodynamischen Zustands, und sie würden stark von der Kenntnis der zugehörigen Fehlerbalken profitieren. Robustere Schlussfolgerungen wären möglich, wenn eine ganze Bandbreite an Simulationen anstelle einer einzelnen Modellrealisierung berechnet werden könnte. Das SOLA-Backus-Gilbert-Tomographieschema hat in dieser Hinsicht in jüngster Zeit Aufmerksamkeit erregt, da es Informationen sowohl zur Auflösung als auch zur Modellunsicherheit liefert und auf große seismische Inversionsprobleme auf globaler Skala angewendet werden kann. Die Pseudoinverse (verallgemeinerte Inverse) des tomographischen Systems kann in diesem Verfahren explizit und effizient berechnet werden, was es ermöglicht, die Datenunsicherheit in den Modellraum zu projizieren. In Freissler et al. [2020] haben wir kürzlich gezeigt, dass diese „Generalized-Inverse-Projection“ auch zum tomographischen Filtern von geodynamischen Modellen verwendet werden kann, was unter anderem den Vorteil mit sich bringt, dass die MCMs dabei nicht mehr auf das jeweilige tomographische Gitter reparametrisiert werden müssen. Bisher ist jedoch unklar, wie die tomographischen Modellunsicherheiten in Simulationen der Mantelkonvektion praktisch ausgenutzt werden können. Offene Fragen sind beispielsweise, wie die tomographi-

schen Kovarianzinformationen in geodynamische Inversionen integriert werden können, da nur eine begrenzte Anzahl von Retrodiktionen rechentechnisch durchführbar ist, und ob eine höhere tomographische Auflösung einer geringeren Unsicherheit vorzuziehen ist.

In einem der laufenden Promotionsprojekte in meiner Gruppe arbeiten wir derzeit an diesen Fragen auf der Grundlage eines synthetischen „Closed-Loop-Retrodiktionsexperiments“. Ausgehend von einem Vorwärts-Mantelzirkulationsmodell, das als bekannte 'wahre' Mantelstruktur angesehen wird, berechnen wir synthetische seismische Daten, die anschließend unter Verwendung des verallgemeinerten inversen Operators einer kürzlich publizierten SOLA-Tomographie in den (tomographischen) Modellraum zurückprojiziert werden. Dies wird viele Male wiederholt, wobei unterschiedliche Realisierungen von „Rauschen“ (d.h. Datenfehlern) zu den seismischen Daten hinzugefügt werden. Schließlich dienen das „tomographisch gefilterte“ Modell und die zugehörige Kovarianz als Grundlage für ein Ensemble von geodynamischen Retrodiktionen mit der Adjungierten-Methode. Dieses theoretische Experiment wird es uns –im Lichte realistischer seismischer Datenunsicherheiten– ermöglichen, Unterschiede zwischen dem 'wahren' Modell und den Retrodiktions-Modellen zu quantifizieren und die Entwicklung ihrer Genauigkeit als Funktion der Zeit zurück in die geologische Vergangenheit zu verfolgen. Die systematische Quantifizierung der Unsicherheiten, von den seismischen Aufzeichnungen bis hin zu geologisch bewertbaren Vorhersagen, wird wichtige Erkenntnisse über die Ausbreitung und Entwicklung von Fehlern in geodynamischen Retrodiktionen liefern. Dies wiederum ist entscheidend, um belastbare Schlussfolgerungen über die Korrektheit geodynamischer Modellparameter zu ziehen und wird sich auf zukünftige geodynamische Simulationen und die Art und Weise auswirken, wie die nächste Generation datengetriebener Erdmodelle erzeugt werden wird. Diese Modelle stellen eine wichtige Quelle quantitativer Informationen dar, die in anderen geowissenschaftlichen Disziplinen als Grundvoraussetzung verschiedenster Modellierungen benötigt werden.

1.4 ERKLÄRUNG ÜBER DEN EIGENEN BEITRAG ZU DEN PUBLIKATIONEN

1. Eigener Beitrag zu *Schuberth et al.* [2012]: Entwicklung der ursprünglichen Idee und Konzeption der Studie, Definition der wissenschaftlichen Fragestellung; Aufsetzen der numerischen Simulationen und damit zusammenhängend die Entwicklung und Implementierung einer Software die es ermöglicht, Mantelzirkulationsmodelle (in dieser Studie eines aus [*Schuberth et al.* 2009b]) im 3-D seismischen Wellenausbreitungscode *SPECFEM3D_GLOBE* zu verwenden und für diese Art von Modellen synthetische Wellenformen zu berechnen; Durchführung der *SPECFEM3D_GLOBE* Simulationen für MCMs auf verschiedenen HPC Plattformen; Anpassen von Matlab Routinen zum Post-Prozessieren um sie auf synthetische Daten anwenden zu können; Durchführung automatisierter Messungen von *P*- und *S*-Wellen-Laufzeitresiduen an den synthetischen Wellenformen; Durchführung der gesamten Analyse, Qualitätskontrolle und Visualisierung der Resultate; Federführung bei der Interpretation der Resultate; Konzeption der Visualisierung der Ergebnisse und Erzeugung von Abbildungen für die Publikation; Verfassen der Erstversion und Redigieren des Manuskriptes.
2. Eigener Beitrag zu *Davies et al.* [2012]: Mitwirkung an der Entwicklung der ursprünglichen Idee und der Konzeption der Studie sowie an der Definition der wissenschaftlichen Fragestellung; Hilfestellung bei der Durchführung der numerischen Simulationen der Mantelzirkulation; Beratung des Erstautors in Fragen der Nachbearbeitung der MCM-Temperaturfelder mithilfe thermodynamischer mineralogischer Modelle; Tomographisches „Filtern“ der MCMs; Mitwirkung bei der Analyse, Qualitätskontrolle and Interpretation der Resultate; Verfassen von Textteilen und Redigieren des Manuskriptes.
3. Eigener Beitrag zu *Schuberth et al.* [2015]: Entwicklung der ursprünglichen Idee und Konzeption der Studie, Definition der wissenschaftlichen Fragestellung; Durchführung von *SPECFEM3D_GLOBE* Simulationen für MCMs auf verschiedenen HPC Plattformen; Konzeption und Betreuung von Studentenprojekten, die damit befasst waren, die *Matlab* Nachbearbeitungs-Routinen in *Python* zu übersetzen (das „Post-Prozessieren“ der synthetischen Wellenformen konnte dadurch dann direkt auf den HPC Plattformen durchgeführt werden); Durchführung automatisierter Messungen von *P*- und *S*-Wellen-Laufzeitresiduen an synthetischen Wellenformen auf HPC Systemen; Durchführung der Analyse, Qualitätskontrolle und Visualisierung der Resultate; Federführung bei der Interpretation der Resultate; Konzeption und Erzeugung von Abbildungen für die Publikation; Verfassen der Erstversion und Redigieren des Manuskriptes.
4. Eigener Beitrag zu *Nerlich et al.* [2016]: Hilfestellung bei der Durchführung der numerischen Simulationen der Mantelzirkulation; Post-Prozessieren der Temperaturfelder der MCMs mithilfe thermodynamischer mineralogischer Modelle; Tomographisches Filtern der MCMs; Mitwirkung bei der Analyse, Qualitätskontrolle and Interpretation der Resultate; Verfassen von Textteilen und Redigieren des Manuskripts.
5. Eigener Beitrag zu *Koelemeijer et al.* [2018]: Maßgebliche Mitwirkung bei der Entwicklung der ursprünglichen Idee, Konzeption und wissenschaftlichen Fragestellung der Studie; Post-Prozessieren der Temperaturfelder der MCMs (hier die aus *Davies et al.* [2012]) mithilfe thermodynamischer mineralogischer Modelle; Tomographisches Filtern der MCMs; Mitwirkung bei der Analyse, Qualitätskontrolle and Interpretation der Resultate; Verfassen von Textteilen und Redigieren des Manuskriptes.
6. Eigener Beitrag zu *Simmons et al.* [2019]: Mitwirkung bei der Entwicklung der ursprünglichen Idee, Konzeption und wissenschaftlichen Fragestellung der Studie; Entwicklung und Implementierung einer Open-Source-Software in *Python*, um das tomographische Filtern der MCMs (oder anderer geodynamischer Modelle) mit dem Resolution-Operator des tomographischen Modells LLNL-G3D-JPS durchzuführen (das MCM war hier aus *Nerlich et al.* [2016]); Tomographisches Filtern der MCMs; Mitwirkung bei der Analyse, Qualitätskontrolle and Interpretation der Resultate; Erzeugung von Abbildungen für die Publikation; Verfassen von Textteilen und Redigieren des Manuskriptes.
7. Eigener Beitrag zu *Schuberth & Bigalke* [2021]: Entwicklung der ursprünglichen Idee und Konzeption der Studie, Definition der wissenschaftlichen Fragestellung; Konzeption und Betreuung der Masterarbeit von Tobias Bigalke, die in Teilen der Publikation mit einfluss; Durchführung eines Teils der *SPECFEM3D_GLOBE* Simulationen für MCMs auf verschiedenen High-Performance Computing (HPC) Plattformen; Federführung bei der Analyse, Qualitätskontrolle und Visualisierung der Resultate; Federführung bei der Interpretation der Resultate; Konzeption der Visualisierung der Ergebnisse; Erzeugung der meisten Abbildungen für die Publikation; Verfassen des überwiegenden Teils der Erstversion (weitere Teile des Papers basieren auf der erwähnten Mastersarbeit) und Redigieren des gesamten Manuskriptes.

2 SUMMARY OF RESEARCH ACHIEVEMENTS

2.1 BACKGROUND AND SCIENTIFIC OBJECTIVES

The convection of solid mantle rock by creep flow ultimately is responsible for plate tectonic motions. Precise knowledge of the distribution and magnitude of the forces within the mantle and in particular at the base of the tectonic plates is a key ingredient in modelling lithosphere dynamics and the geologic processes constantly reshaping Earth's surface. For example, knowledge of the stress state around faults is a prerequisite for modelling earthquake rupture dynamics [e.g., Day 1982]. Mantle flow also affects the convection in the core and thus the geodynamo through providing thermal and geometrical boundary conditions (i.e., lateral heat flow variations and topography on the core-mantle boundary [CMB], respectively). Fluid dynamic studies of the mantle are thus essential to our understanding of how the entire planet works, but many models of mantle dynamics are still largely qualitative in nature to date.

In order to obtain quantitative estimates of the basal forces acting on the plates, we need to improve our knowledge of the structure and dynamics of the mantle. The flow of mantle material is driven by buoyancy forces that are induced by variations in temperature and chemical composition. Today, one of the most pressing challenges in geodynamics is the interpretation of seismic observations in terms of dynamics and composition of the mantle and to constrain buoyancy in terms of length-scales and magnitude.

This problem can be approached in two different ways:

1. Seismic tomography can be used to produce 3-D images of mantle structure through inversion of seismic data. These images contain valuable information on material properties at depth and can – in principle – provide constraints on the thermodynamic state of Earth's mantle.
2. Alternatively, numerical forward-models of mantle convection can be computed based on some hypotheses, which then need to be assessed by predicting synthetic secondary data and comparing them to direct observations of the Earth system, most notably the wealth of available seismic data, but also gravity/geoid observations as well as estimates of (time dependent) dynamic topography and true polar wander.

The first approach suffers from a number of inherent limitations that so far have rendered a conclusive inference of the buoyancy distribution in the mantle impossible. The fundamental problems are: 1) that it is a major challenge to constrain both length-scales and magnitude of deep Earth seismic heterogeneity with sufficient resolution and accuracy and 2) that interpretations of tomographic images are hampered due to trade-offs between thermal and chemical effects. Despite the great progress and success of seismic tomography in the last three decades, it is still not possible to image the three-dimensional structure of the mantle at sufficiently high resolution to cover the full range of dynamically inherent length-scales on a global scale [Ritsema *et al.* 2011; Trampert *et al.* 2013; Fichtner *et al.* 2018]. Dynamically relevant length-scales inherent to the convecting mantle are, for example, the thickness of subducting oceanic lithosphere (on the order of 90–100 km) or the diameter of upwelling plumes. The latter in particular are hard to image seismically [Maguire *et al.* 2016; Stockmann *et al.* 2019]. Finite-frequency as well as full-waveform inversions (e.g., based on the adjoint method) have in the last years been performed to push the resolution limits and to provide tomographic images at unprecedented detail [e.g., French & Romanowicz 2014; Bozdağ *et al.* 2016; Zaroli *et al.* 2014; Fichtner *et al.* 2018; Lei *et al.* 2020]. However, it still proves difficult to improve on the resolution limits that are dictated through the inhomogeneous data coverage. A second problem is the non-uniqueness of tomographic solutions and the necessity to regularise the inversions. Tomographic models are thus always a blurred and 'damped' (i.e., low-fidelity) version of the true Earth structure [e.g., Ritsema *et al.* 2007; Simmons *et al.* 2019]. In particular the magnitude of the seismic heterogeneity is extremely difficult to constrain. A good quantitative understanding of the damping effects and related amplitude reductions in tomographic models is important, as the focus in geodynamic studies is shifting away from forward simulations towards inversions called 'retrodictions'. While the former start from an unknown initial condition at some time in the geologic past, the latter use the adjoint method to iteratively optimise for the initial condition based on an, assumed known, 'terminal' state of the mantle [e.g. Colli *et al.* 2018]. The present-day thermodynamic state of the mantle in such applications is estimated from one of the existing tomographic models together with information from mineral physics. Estimates of the terminal state, however, are only meaningful, if the magnitudes of the seismic heterogeneities are correctly transformed into buoyancy variations; that is, if the amplitude reduction introduced through the regularization can somehow be accounted, and at best, corrected for.

The alternative approach (number 2 above) to constraining buoyancy in the mantle is based on forward modelling, and certain hypotheses on the dynamics of mantle flow are taken as a starting point. The underlying equations of fluid dynamics can be solved on a routine basis on modern high-performance computing (HPC) systems. Most important, the input parameters, such as material properties and the energy input (radioactive heating and heat flux from the core), determine the vigour of convection and thus control the inherent length scales and strength of temperature anomalies, density variations and seismic heterogeneity. The problem of improving our understanding of mantle dynamics thus translates into the task of better constraining the input parameters and the minimum required complexity of the constitutive law (e.g., temperature dependence, Newtonian vs. non-Newtonian rheologies, etc.). Once a set of input parameters plus rheology is chosen (i.e., a geodynamic hypothesis), a unique solution to the mantle convection equations can be computed, given that initial and boundary conditions are applied [Serrin 1959]. Through the assimilation of plate motion history models as surface boundary conditions, a geologically informed prediction of the present day flow velocities and temperature field in the mantle is obtained. In this forward-modelling approach, temperature variations are thus not a free parameter, but fully determined by the dynamics of the system. Both length-scales and magnitude of these lateral temperature variations are in fact largely independent of the (unknown) initial condition and are thus an important prediction of these so-called mantle circulation models (MCMs). The influence of the initial condition in fact reduces with the length of the assimilated plate motions [Colli *et al.* 2015], and modern plate reconstructions cover the last 400 Ma; that is, at least two times the mantle overturn time.

A classical way of assessing forward mantle flow models are qualitative comparisons of their spectral characteristics with tomographic images [e.g., Becker & Boschi 2002; Nakagawa & Tackley 2010; Bull *et al.* 2009]. This has been widely applied in geodynamic-seismic model comparisons, but care must be taken as the spectral characteristics of mantle flow models are largely controlled by the surface boundary conditions; that is, the plate tectonic reconstructions. This means that spectral correlations may not so much provide insight into the actual dynamics of the system, but rather are indicative of the accuracy of the plate motion history employed in the simulations. Furthermore, comparison of model spectra are only meaningful, if geodynamic modelling results are represented in terms of seismic velocities using mineralogical models that appropriately represent the complexity of phase assemblages [Schuberth *et al.* 2009b].

In a series of studies, I have developed a theoretical forward modelling framework targeted at investigating the deep mantle with an emphasis on thoroughly testing geodynamic models against observations on the basis of quantitative measures. With the help of thermodynamic mineralogical models [e.g. Connolly 2005; Stixrude & Lithgow-Bertelloni 2005, 2022; Ricard *et al.* 2005], various types of geophysical predictions can be produced from the output of geodynamic simulations (e.g., seismic velocity and density structure of the mantle). In earlier studies, I tested such predictions against tomographic models [Schuberth *et al.* 2009b,a] as well as against the geoid and estimates of the rate of true polar wander [Schaber *et al.* 2009]. In Schuberth *et al.* [2009a], we modified the geodynamic models to reflect the limited resolution and long-wavelength nature of tomographic images of shear wave velocity. This way, we were able to account for the effects of uneven data coverage and damping in tomographic inversions, which warrants a consistent quantitative comparison to the tomographic model. This so-called ‘tomographic filtering’ [Ritsema *et al.* 2007] of hypothetical mantle structures is nowadays a standard processing step in geodynamic-tomographic model comparisons. Models filtered in this way provide valuable information on how heterogeneities are smeared and damped (i.e. modified in amplitude) given the available seismic data and underlying inversion strategy.

One specific question that was addressed with the aforementioned joint forward-modelling approach is the origin of the two large regions of strongly reduced seismic velocities in the lowermost mantle (i.e., the African and Pacific large low velocity provinces [LLVPs]). These two LLVPs have received considerable attention in seismological and geodynamic studies. They are commonly interpreted as large-scale piles of chemically distinct material, as they have sharp vertical boundaries and show anti-correlated variations in shear and bulk sound velocity as well as evidence for an increased intrinsic density [van der Hilst & Karason 1999; Masters *et al.* 2000; Ishii & Tromp 2001; Wen *et al.* 2001; Ni *et al.* 2002; Ritsema & van Heijst 2002; Trampert *et al.* 2004; Wang & Wen 2004; To *et al.* 2005; Mosca *et al.* 2012]. The bulk sound velocity is a purely theoretically defined seismic velocity that only depends on the bulk modulus and density (the physically relevant compressional wave velocity v_p additionally depends on the shear modulus). The presence of chemical heterogeneities is expected from the subduction of oceanic crust together with the depleted lithosphere [e.g., Allègre & Turcotte 1986; Agranier *et al.* 2005], and the accumulation of oceanic crustal material or iron enrichment of material in contact with the core have been proposed as viable explanations for the chemical piles.

However, a large number of studies from geodynamics, seismology and mineral physics point towards a high CMB temperature and a large temperature drop across D'', with associated high heat flow [e.g., *Glatzmaier & Roberts 1995; Kuang & Bloxham 1997; Boehler 2000; Buffett 2002; Gubbins et al. 2004; Nimmo et al. 2004; Alfè et al. 2007; Lay 2008; Fiquet et al. 2010*]. A large temperature gradient in the bottom thermal boundary layer, on the order of 1000–1500 K, and the resulting large lateral temperature variations in the lowermost mantle may provide an alternative explanation for the seismic heterogeneity in the lowermost mantle, especially the large reductions in shear-wave velocity. Already in my PhD work, I explored the implications of such a large temperature contrast between the core and the mantle on seismic observables. This started with testing a particular scenario of mantle flow that is based on the hypothesis of a high CMB temperature (and correspondingly high core heat flux) in combination with isochemical whole mantle flow, a three-layer viscosity profile and a pyrolite chemical composition. This set-up in fact represents a simple, yet sufficiently realistic model of the mantle general circulation (i.e., complexity is reduced to a minimum).

In *Schuberth et al. [2009b]* we have shown that strong reductions in shear wave velocity, typical for the African superplume, can be reconciled with isochemical whole mantle flow and a pyrolite composition in the presence of strong core heating, including the strong gradients in shear wave velocity (i.e., sharp sides). The high plume excess temperatures in the lowermost mantle that arise from the large thermal gradient across D'' are capable of explaining the magnitude of the shear wave velocity reduction within the LLVPs. As shown in Figure 1a, the magnitude of variations in shear wave velocity in the tomographically filtered isochemical MCM with strong core heating [see *Schuberth et al. 2009a*] agrees well with those of the tomographic model S20RTS [*Ritsema et al. 2004*]. This work has shown that thermal models of mantle flow seem to be compatible on statistical grounds with the tomographic models. Together with the study of *Schaber et al. [2009]*, which focused on geoid observations and the rate of true polar wander, this points to the possibility that chemical heterogeneity in the lower mantle might be less important for its dynamics than widely considered.

2.2 OVERVIEW OF THE SUBSUMED PUBLICATIONS

The focus of my research lies on better understanding the structure and dynamics of Earth's mantle. The overall goal is to be able to put tighter constraints on mantle buoyancy variations through providing a quantitative and physically consistent link between geophysical hypotheses and Earth observations. This is achieved by building an integrated multidisciplinary numerical modelling framework for the generation and comprehensive assessment of hypothetical Earth models that combines simulation and post-processing tools from geodynamics, mineral physics and seismology.

As part of this effort, I have over the past years developed a novel approach combining geodynamic and seismic large-scale HPC applications: Fully synthetic seismic waveforms are computed using a spectral element method for 3-D structures derived from the temperature field of MCMs [see *Schuberth et al. 2012*]. As in the earlier work, this involves a mineralogical model and a few years ago, we presented a new open-source software called *MMA-EoS* that can be used for calculating equilibrium mineral phase assemblages based on Gibbs energy minimization and subsequent computation of physical properties [e.g., elastic moduli, density, heat capacity, etc.; *Chust et al. 2017*]. To streamline the analysis of MCMs, and to simplify the setup and execution of the seismic simulations for the resulting structures, I have implemented an easy-to-use software framework over the last couple of years. Another routine task in my research group that can also be done in a straight-forward manner with these codes is the tomographic filtering of the geodynamic models. My research demonstrates that tomographic-geodynamic model comparisons are a key component in studies of the present-day state and evolution of Earth's mantle. An important aspect that had previously not been taken into account are the effects of seismic data uncertainties, which we were able to address in *Simmons et al. [2019]*. In the following, the main results and findings of my research projects including the seismic forward-modelling studies with the aim to further test the hypothesis of a high CMB temperature as well as different applications of tomographic filtering of MCMs are presented in more detail:

1. In *Schuberth et al. [2012]*, we have introduced an approach for studying the deep mantle that is complementary to tomographic inversions and which allows for a quantitative assessment of geodynamic models directly against seismic observations. It is based solely on forward modelling and thus avoids the problem of limited resolution, while warranting a physically correct treatment of the seismic wave equation without additional theoretical approximations. In this approach, fully synthetic seismic waveforms are computed using a spectral element method for 3-D seismic structures derived from mantle circulation models. This

approach allowed us 1) to go beyond comparing geodynamic predictions to tomographic models (which, as mentioned above, suffer from limited resolution and non-uniqueness of the tomographic solutions), 2) to analyze P - and S -wave information at the same time and in the same manner, 3) to avoid the limitations associated with the conventional infinite-frequency ray-approximation, and 4) to generate synthetic seismograms independent of seismic observations.

Simulating 3-D wave propagation in MCMs revealed that – for both P - and S -waves – the standard deviations of long-period traveltimes in purely thermal models agree well with those of the observed traveltimes residuals (see Fig. 1b). Most important, the synthetic data reproduced both their different trends with ray turning depth (i.e, constant for P -waves and increasing for S -waves) as well as their magnitude.

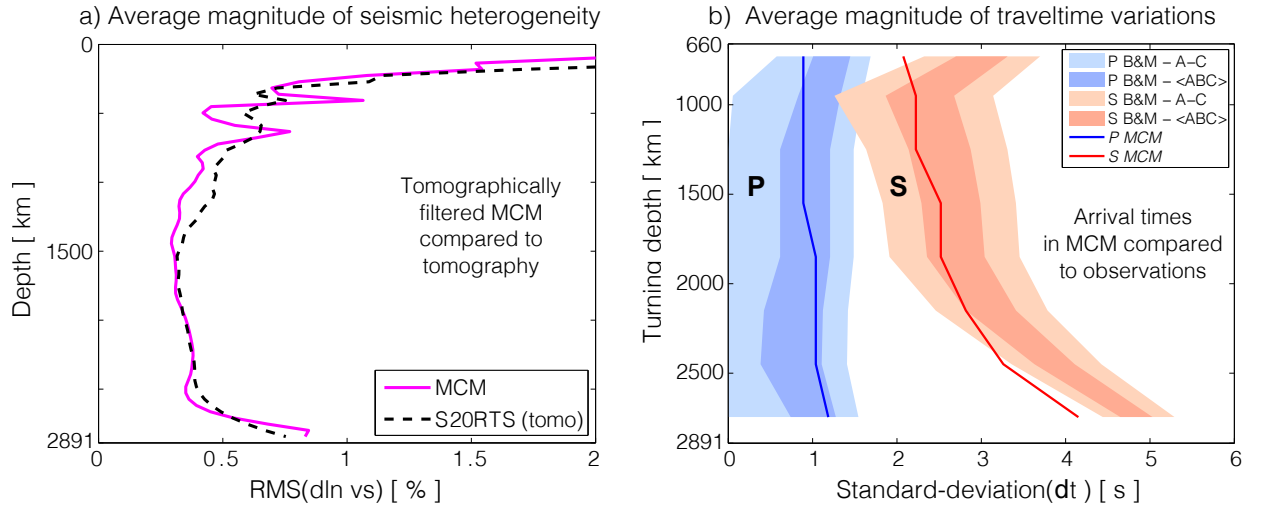


Figure 1: Illustration of quantitative assessments of synthetic Earth models and underlying assumptions. a) Comparison of the average strength of shear wave velocity heterogeneity between (magenta) a tomographically filtered MCM with high core heat flow and (black dashed) tomographic model S20RTS [Ritsema et al. 2004]. b) Comparison of the standard deviations of P - and S -wave traveltime residuals (plotted as a function of ray-turning depth) between (blue and red lines) the predicted data from the MCM and (shaded areas) the long-period observations of Bolton & Masters [2001]. This is a summary figure taken from Schuberth & Bigalke [2021], where a) is modified from Schuberth et al. [2009a] and b) is from Schuberth et al. [2012].

The finding of a predominance of thermal variations in driving mantle flow seems at odds with the potential presence of chemical heterogeneities expected from the subduction of differentiated oceanic crust and lithosphere. Note, however, that the study of Schuberth et al. [2012] does not rule out the possibility of chemical heterogeneity, in particular on short length-scales. The HPC resources available at the time allowed for the calculation of accurate seismic wavefields down to a shortest period of 10 s (i.e., 0.1 Hz), and seismograms were bandpass-filtered at 15 s dominant period prior to measuring body-wave traveltimes by cross-correlation. Owing to the large width of the Fresnel zone at the ray turning depth, measurements of arrival times at these periods are effectively influenced by structures with length-scales of a few hundred kilometres and larger. Any structure smaller than this could potentially “hide” due to wavefield effects (e.g., wavefront healing). In other words, diffraction effects are important at these periods and need to be taken into account properly. The notion of chemical heterogeneity on small rather than large scales would presumably imply a more passive role of the compositionally distinct material.

2. In Davies et al. [2012], we built the work of Schuberth et al. [2009a] by investigating thermochemical MCMs. Specifically, we tested whether the presence of a chemically distinct dense layer at the base of the mantle can also be reconciled with seismological observations in case of strong core heating. We investigated thermochemical MCMs with identical input parameters to the models of Schuberth et al. [2009b] except of a dense initial layer at the base of the mantle. This exercise explicitly demonstrated that thermochemical MCMs with realistic CMB temperatures exhibit very large temperature variations in the lowermost mantle and thus predict shear wave velocity variations that are too large compared to tomography. We found that the predicted strength of S -wave velocity variations is – on average – too large for both a basaltic as well as an iron enriched dense layer by a factor of 2 and 3, respectively. This

study strengthened the notion that the dynamics of the mantle are dominated by thermal effects and that variations in chemical composition likely play a minor role in driving large-scale mantle flow.

3. In *Schuberth et al. [2015]*, we extended the wave-propagation-based analysis of MCMs into a new direction and quantified diffraction effects in the synthetic 3-D mantle structures. Frequency-dependent wavefield effects depend on the wavelength and the size as well as magnitude of structural anomalies [e.g., *Wielandt 1987; Hung et al. 2001; Malcolm & Trampert 2011*]. An important advantage of our forward-modelling approach is that seismic models derived from mantle flow calculations feature realistic distributions of length-scales (i.e., spectra) and magnitudes of heterogeneity given that simulations are performed at earth-like convective vigour; that is, at sufficiently high numerical resolution. The results of *Schuberth et al. [2015]* showed that – even in case of purely elastic structures (i.e., no intrinsic dissipative attenuation) – the traveltimes of seismic waves show considerable dispersion compatible in strength to that seen in the multifrequency observations available nowadays [e.g., *Sigloch et al. 2008; Zanolli et al. 2010; Hosseini & Sigloch 2015*]. Thus, comparing wavefield effects in hypothetical Earth models to these multifrequency datasets is a promising new route to investigate length scales of seismic heterogeneity in the mantle. Moreover, quantitative analyses of diffraction-induced dispersion will in future add constraints on the strength of seismic heterogeneity and consequently the magnitude of buoyancy forces.

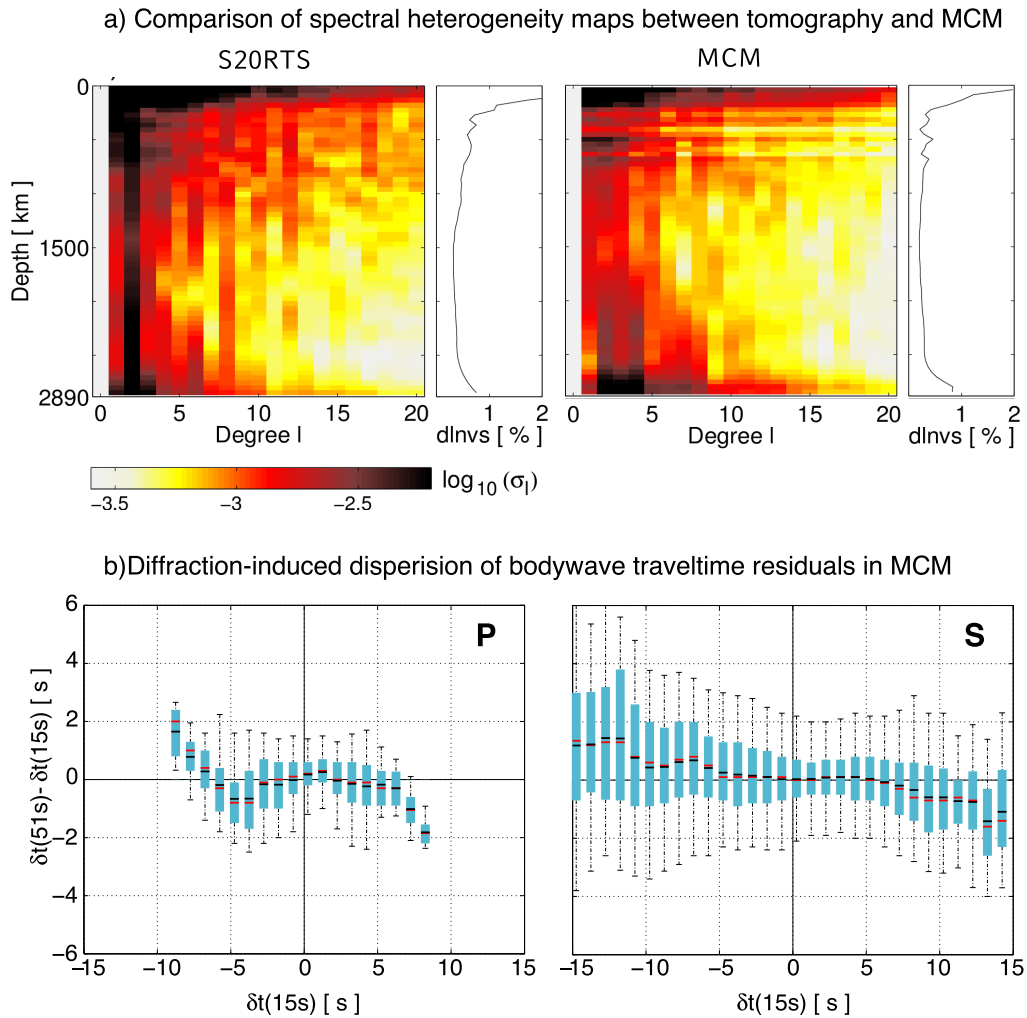


Figure 2: a) Comparison of spectral characteristics between a tomographically filtered MCM and tomographic model S20RTS [from *Schuberth et al. 2009a*]. Note that a wide range of length scales is not shown for the MCM, which has a much higher grid resolution beyond spherical harmonics degree 20. b) The structural length scales inherent to the MCM give rise to substantial body wave traveltime dispersion [from *Schuberth et al. 2015*]. This signal can be exploited in future in order to constrain length scales of mantle structures that are still unresolvable by tomography.

4. The study of *Nerlich et al.* [2016] describes an application of tomographic filtering and geodynamic-tomographic model comparisons. Here, we investigated the distinct geoid low in the Indian Ocean south of India. This is a striking feature pointing to a regionally anomalous mantle density structure. Equally prominent are rapid plate convergence rate variations between India and Southeast Asia, particularly in Late Cretaceous/Paleocene times. Both observations are linked to the central Neo-Tethys Ocean subduction history, for which competing scenarios had been proposed. We evaluated three alternative plate reconstructions by assimilating their associated time-dependent velocity fields in global high-resolution MCMs, which allowed us to predict the resulting seismic mantle heterogeneity and geoid signal. Our analysis revealed that a geoid low similar to the one observed develops naturally when a long-lived back-arc basin south of Eurasia's paleomargin is assumed. A quantitative comparison to seismic tomography further supported this model. In contrast, reconstructions assuming a single northward dipping subduction zone along Eurasia's margin or models incorporating a temporary southward dipping intraoceanic subduction zone could not sufficiently reproduce geoid and seismic observations.
5. In *Koelemeijer et al.* [2018], we took a closer look at the increase in the ratio of shear-wave velocity (v_s) to compressional-wave velocity (v_p) variations with depth and the negative correlation between shear-wave and bulk-sound velocity (v_c) variations found consistently in lower mantle tomography models. This study was motivated on the one hand by the efforts to include normal mode splitting data in the assessment of the MCMs. On the other hand, it was motivated by the fact that in the studies of *Schuberth et al.* [2009a] and *Davies et al.* [2012], the effects of limited tomographic resolution were taken into account, but both studies compared MCMs and tomography only in terms of shear wave velocities. The ratio of shear- to compressional-wave velocity variations and the negative correlation between shear-wave and bulk-sound velocity variations had earlier on been interpreted to be indicative of large-scale chemical variations. In this collaborative work, we explored another explanation, namely the lower mantle post-perovskite (pPv) phase, which would not require chemical heterogeneity. We investigated to what extent the presence of pPv explains the observed high v_s-v_p ratios and negative v_s-v_c correlation globally. We compared the statistical properties of tomography model SP12RTS [*Koelemeijer et al.* 2016], with the statistics of synthetic tomography models, derived from both thermal and thermochemical models of 3-D global mantle convection. As in earlier work, we accounted for the limited tomographic resolution, using here the resolution operator of SP12RTS for both v_s and v_p structures. Although the tomographic filtering significantly affects the synthetic images, we demonstrated that the effect of pPv remains evident in the ratios and correlations of seismic velocities. We found that lateral variations in the presence of pPv have a dominant influence on the v_s-v_p ratio and v_s-v_c correlation, which are thus unsuitable measures to constrain the presence of large-scale chemical variations in the lowermost mantle. To explain the decrease in the v_s-v_p ratio of SP12RTS close to the CMB, our results favour a pPv-bearing CMB region (i.e., complete global pPv coverage), which has implications for the stability field of pPv in the Earth's mantle.
6. In *Simmons et al.* [2019], the resolution and covariance matrices of LLNL-G3D-JPS, a global joint P - and S -wave seismic tomography model were constructed and applied to the MCM of *Nerlich et al.* [2016]. Often, these quantities are unknown for large tomographic inversions owing to the associated excessive computational requirements. Still, there are many potential applications of these matrices in the broad solid Earth research community as well as more focused scientific groups including the nuclear explosion monitoring research community. The global model LLNL-G3D-JPS consists of >1 million free parameters, creating matrices with >1 trillion elements. Given the scale of the problem and computational limitations, we used a custom method to calculate impulse responses at every node in the earth model and produced sparse, yet representative, resolution and covariance matrices that can be practically used for several real applications. These matrices were applied to real problems as example use cases. Utilizing the covariance matrix, we computed traveltime uncertainties for thousands of P waves emanating from (or coming to) specified points around the globe and constructed maps of the traveltime error to illustrate the variability of path-specific traveltime uncertainty. Utilizing the resolution matrix as a tomographic filter, we converted geodynamically derived renditions of Earth structure to images that may be visible through the often-distorted lens of seismic tomography.

7. In *Schuberth & Bigalke* [2021], we investigated deeper into providing a physically consistent link between geophysical hypotheses on mantle dynamics and potential surface observables. The goal was to check the robustness of the results of *Schuberth et al.* [2012] shown in Figure 1b with respect to uncertainties in the various input parameters involved. In particular, it is especially important to understand the influence of uncertainties in the mineralogical mapping from temperatures to seismic velocities. As in *Schuberth et al.* [2012], we linked the hypothetical temperature field to seismic recordings in a quantitative way and ran a number of global 3-D seismic wavefield simulations for various seismic realizations of mantle structure derived from one specific MCM. The synthetic traveltime residuals computed this way correctly capture the various non-linearities in the relation to the underlying temperatures. Specifically, we investigated the effects of the poorly constrained parameters related to mineral anelasticity on the temperature-velocity conversion and the predicted traveltime residuals. Owing to the differences in seismic frequency content between laboratory measurements (MHz to GHz) and the Earth (mHz to Hz), the seismic velocities given in the mineralogical models need to be adjusted; that is, corrected for dispersion due to anelastic effects. The anelastic correction increases the temperature sensitivity of seismic velocities, particularly at high temperatures. The magnitude of this increase in sensitivity depends on absolute temperature, the frequency of the wave, the frequency dependence of attenuation (α) and the activation enthalpy of the attenuating process (E^*). Especially the latter two are poorly known for mantle minerals, and our results show that variations in activation enthalpy produce the largest differences in temperature sensitivity with respect to the purely elastic case. Assuming maximum values plausible for α and E^* , we found that the temperature derivative of shear-wave velocity increases by more than 100 percent at the top, and up to 70 percent at the bottom of the lower mantle in regions of elevated temperatures. The standard deviation of the seismic traveltime residuals, however, was found to be larger only by about 30 percent compared to the anharmonic (elastic) case in consequence of the multiple non-linearity of the physical situation at hand. In addition to the non-linear relation between temperatures and anharmonic seismic velocities and the non-linearity of wave field effects, the highly non-linear anelasticity correction has a strong influence on final predictions.

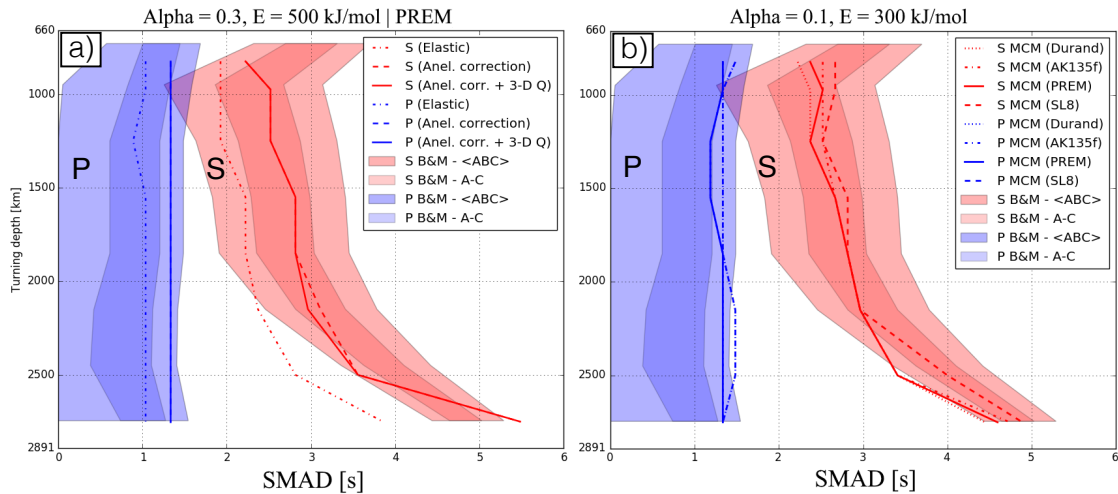


Figure 3: Same as Figure 1b: (a) for the extreme case with $\alpha=0.3$ and $E^*=500$ kJ/mol compared to the elastic case (solid and dash-dotted lines, respectively; PREM values were used for the reference 1-D Q -profile); and (b) for different reference 1-D Q -profiles with fixed values for α and E^* of 0.1 and 300 kJ/mol, respectively. Note that the standard deviations change only slightly for S -waves in case that 3-D attenuation is included in the wave propagation simulations (curves labelled "Anel. corr. + 3-D Q " in a). From *Schuberth & Bigalke* [2021].

The results in *Schuberth & Bigalke* [2021] showed that the effects of the anelastic correction are largely negligible for cold temperatures and thus for regions with fast seismic velocities, while for very hot regions, the anelastic correction can result in an increase of the relative velocity perturbations in the lower mantle by almost a factor of two compared to the anharmonic case. Our simulations demonstrate that owing to the skewed distributions of temperatures in the mantle and the fact that wavefront healing is particularly important for slow seismic anomalies, it is impossible to compute seismic traveltime residuals accurately enough by simple linear scaling and ray-theoretical calculations. Rather, it becomes clear from our study that it is vital that all non-linearities are correctly modelled in each step of the forward-modelling chain in order to obtain physically consistent seismic predictions and fair comparisons to the real data.

2.3 CONCLUSIONS AND OUTLOOK

The geodynamic-seismic forward-modelling approach presented in *Schuberth et al.* [2012], *Schuberth et al.* [2015] and *Schuberth & Bigalke* [2021] bears great potential for providing new insight into deep mantle structure and dynamics. In particular, through my research, I have shown that with current modelling techniques and computational resources it is possible to perform systematic investigations of traveltime dispersion in hypothetical mantle structure as well as of the effects of uncertainties in the various input parameters on a global scale. This allows for more robust conclusions to be drawn from comparisons between predicted and observed data. In complementing tomographic inversions, this approach is very promising for better understanding the buoyancy distribution in the mantle, especially at length-scales so far unresolvable by tomography.

Open questions that we currently address in my group are focused on better understanding the influence of mineral phase transitions on seismic structure in the transition zone and associated surface observations [*Papanagnou et al.* 2022] as well as on how to best incorporate the information provided by tomography into geodynamic inverse models. Improvements currently introduced by my research group into the joint forward modelling approach include the transition from proprietary to open-source-based (Python) software. Over the last years, we have already done so for the automated measurement of cross-correlation traveltime delays in collaboration with Christophe Zaroli and Sophie Lambotte from EOST (Université de Strasbourg). Further, we work towards using computationally cheaper methods (e.g., *YSPEC*, *Al-Attar & Woodhouse* [2008]; *AxiSEM3D* *Leng et al.* [2016]) for the calculation of waveforms for 1-D average profiles as well as the geodynamically derived 3-D seismic mantle models. In addition to the numerical wave propagation simulations, with which it has been possible to cover the frequency range of about 3 mHz to 0.1 Hz (i.e. periods of 10 to roughly 300 seconds), we started a number of projects to extend the frequency range to cover the full teleseismic spectrum. For the high-frequency part, ray-theoretical calculations can be performed on a routine basis for the MCMs, and Earth's free oscillation spectra and normal mode splitting function coefficients can be computed to cover the low-frequency band. To compute eigenfrequency spectra in laterally heterogeneous and rotating Earth models, a code based on normal mode coupling theory is used. In particular, this program makes use of the iterative direct solution method introduced by *Al-Attar et al.* [2012], which provides a computationally efficient method for performing large scale "full coupling" calculations. With these improvements, the assessment of dynamic flow models and underlying input parameters against seismic observations will in future cover the full teleseismic frequency range.

Furthermore, together with my group I have started to investigate the effects of realistic crustal as well as lithosphere structure on the wavefield characteristics of synthetic seismic mantle structures. Based on this, particular strategies need to be developed and explored to account for potential difficulties that may bias the evaluation of hypothetical mantle models. One specific challenge is related to reverberations in the crustal layer that may affect frequency-dependent traveltime measurements. Crustal corrections generally pose considerable problems in tomographic studies, as the structure in the shallowest part of the Earth is not perfectly known [e.g., *Ferreira et al.* 2010; *Lekić et al.* 2010]. In particular, special care needs to be taken to mimic the waveform distortion due to crustal reverberations when computing the reference waveform for cross-correlation measurements [e.g., *Yang & Shen* 2006; *Ritsema et al.* 2009; *Zaroli et al.* 2010]. We plan to address this problem with further investigations of the promising differential-frequency traveltime residuals, which, as shown in *Schuberth et al.* [2015], seem to be less influenced by shallow structure than their single-frequency counterparts.

Another important topic in my research group at the moment is the further investigation of the effects of data errors on tomographic models. Nowadays, the focus in seismic tomography is shifting towards providing formal means to quantify image resolution and model uncertainty, and it is currently of great importance to understand the impact of these parameters on geodynamic applications. Geodynamic inversions, for example, that aim at 'retrodicting' the past evolution of Earth's mantle require tomographic estimates of its present-day thermodynamic state, and they would benefit greatly from knowledge of the associated error bars. More robust inferences could be drawn from running a suite of simulations instead of a single model realization. The SOLA Backus–Gilbert tomographic scheme has recently gained attention in this respect, as it provides information on both resolution and model uncertainty and can be applied to large seismic inverse problems on the global scale. The generalized inverse operator can explicitly and efficiently be calculated in this method, which makes it possible to project the data uncertainty to the model space. In *Freissler et al.* [2020], we recently demonstrated that this 'Generalized-Inverse-Projection' can also be used for the tomographic filtering of geodynamic models, which bears the advantage that the MCMs do not have to be reparametrized onto

the tomographic grid. However, so far it is unclear how to make practical use of the tomographic model uncertainty in simulations of mantle convection. The open questions are, for example, how to incorporate the tomographic covariance information in geodynamic inversions, given that only a limited set of retrodictions is computationally feasible, and whether higher tomographic resolution is to be preferred over lower uncertainty. In one of the ongoing PhD projects within my group, we are currently working on these questions based on a synthetic closed-loop retrodiction experiment. Starting from a forward mantle circulation model that is considered as known 'true' mantle structure, we predict synthetic seismic data that is subsequently projected back to the (tomographic) model space using the generalized inverse operator of a recent SOLA tomography. This will be repeated many times with varying realizations of 'noise' (i.e. data errors) added to the seismic data. Finally, the tomographically filtered model and the associated covariance will serve as the basis for an ensemble of adjoint geodynamic retrodictions. This theoretical experiment will allow us to quantify—in the light of realistic seismic data noise—differences of initial 'true' and retrodicted models and to track the evolution of associated precision and accuracy back in time into the geologic past. The systematic uncertainty quantification, from the seismic recordings to geologically assessable predictions, will provide important understanding on the propagation and evolution of errors in geodynamic retrodictions, which is crucial to draw robust conclusions on the adequateness of geodynamic model parameters. This will impact future geodynamic simulations and the way the next generation of data-driven Earth models will be constructed that provide quantitative information to other geoscience disciplines.

2.4 DECLARATION OF OWN CONTRIBUTION TO THE PUBLICATIONS

1. Contribution to *Schuberth et al. [2012]*: Initial idea and conception of the study; definition of scientific objectives; setup of numerical simulations including development and implementation of software to make mantle circulation models (in this study taken from [*Schuberth et al. 2009b*]) usable in the 3-D seismic wave propagation code *SPECFEM3D_GLOBE* and to compute synthetic waveforms for such kind of models; running *SPECFEM3D_GLOBE* simulations for MCMs on different HPC infrastructures; adaption of Matlab post-processing routines to be applicable to synthetic data; running automatic measurements of *P*- and *S*-wave traveltime residuals from synthetic waveforms; entire analysis, quality control and visualization of results; main contributor to the interpretation of results; conception and generation of figures for publication; writing of initial manuscript and editing.
2. Contribution to *Davies et al. [2012]*: Contributed to the initial idea and conception of the study and the definition of scientific objectives; aided in setup of numerical simulations of mantle circulation; advised the main author on question regarding the post-processing of the temperature field of the MCMs with thermodynamic mineralogical models; contributed to the analysis, quality control and interpretation of results; contributed to and edited the manuscript.
3. Contribution to *Schuberth et al. [2015]*: Initial idea and conception of the study; definition of scientific objectives; running *SPECFEM3D_GLOBE* simulations for MCMs on different HPC infrastructures; setup and supervision of student projects to translate the Matlab post-processing routines to *Python* so that the post-processing of synthetic waveforms can directly be done on the HPC facilities; running automatic measurements of *P*- and *S*-wave traveltime residuals from synthetic waveforms on HPC systems with newly developed *Python* code; development of novel analysis and visualization methods; entire analysis, quality control and visualization of results; main contributor to the interpretation of results; conception and generation of figures for the publication; writing of initial manuscript and editing.
4. Contribution to *Nerlich et al. [2016]*: Aided in setup of numerical simulations of mantle circulation; performed post-processing of the temperature field of the MCMs with thermodynamic mineralogical models; performed tomographic filtering of MCMs; contributed to the analysis, quality control and interpretation of results; contributed to and edited the manuscript.
5. Contribution to *Koelemeijer et al. [2018]*: Contributed to the idea, conception and scientific objectives of the study; performed post-processing of the temperature field of the MCMs (taken here from *Davies et al. [2012]*) with thermodynamic mineralogical models; performed tomographic filtering of MCMs; contributed to the analysis, quality control and interpretation of results; contributed to and edited the manuscript.
6. Contribution to *Simmons et al. [2019]*: Contributed to the idea, conception and scientific objectives of the study; developed and implemented an open-source *Python* software to perform the tomographic filtering of MCMs (or other geodynamic models) with the resolution operator of tomographic model LLNL-G3D-JPS (MCM taken here from *Nerlich et al. [2016]*); performed tomographic filtering of MCM; contributed to the analysis, quality control, visualization and interpretation of results; generated part of the figures for publication; contributed to and edited the manuscript.
7. Contribution to *Schuberth & Bigalke [2021]*: Initial idea and conception of the study; definition of scientific objectives; setup and supervision of the Master's thesis project of Tobias Bigalke, which was incorporated in parts of the paper; performed part of the *SPECFEM3D_GLOBE* simulations on HPC facilities; main contributor to the analysis, quality control, visualization and interpretation of results; created majority of figures for the publication; writing of initial manuscript (a part of the second half of the text is based on the Master's Thesis of Tobias Bigalke) and editing.

DANKSAGUNG

Zusätzlich zu den Danksagungen in den einzelnen Papern, die diese Arbeit umfasst, möchte ich folgenden Kollegen, Freunden und meiner Familie meinen ganz besonderen Dank aussprechen:

Zuallererst danke ich meinen Mentoren Peter Bunge, Anke Friedrich und Heiner Igel für Ihren Rat und Hinweise während der Vorbereitung meiner Habilitation. Ganz besonders möchte ich Peter danken für seine beständige Unterstützung, anregende Diskussionen und für die positive und inspirierende Arbeitsatmosphäre im Institut. Ebenso danke ich Jens Oeser, Marcus Mohr und dem gesamten IT-Team für Aufbau und Betrieb eines hervorragenden, stabilen und zuverlässigen Computersystems und für das Bereitstellen erstklassiger IT-Services.

Darüber hinaus möchte ich mich speziell bei meinen Projektpartnern Lorenzo Colli, Rhodri Davies, Paula Koelemeijer, Rainer Nerlich, Guust Nolet, Jeroen Ritsema, Nathan Simmons, Christophe Zaroli und allen an den Publikationen beteiligten Co-Autoren für die gelungene Zusammenarbeit bedanken. Es war eine Freude mit ihnen an den verschiedenen spannenden Themen zu forschen.

Des Weiteren danke ich allen früheren und jetzigen Mitgliedern der Geodynamik-Arbeitsgruppe an der LMU für interessante und anregende Diskussionen, kritische Nachfragen und hilfreiche Vorschläge. Meinen besonderen Dank möchte ich dabei meinen früheren Bachelor- und Masterstudierenden aussprechen, die auf die eine oder andere Weise an den Forschungsprojekten beteiligt waren: Eldar Baykiev, Tobias Bigalke, Laura Ellenbeck, Claudia Gräber, Roman Freißler, Isabel Papanagnou und Gabriel Robl.

Abschließend möchte ich meiner Familie von ganzem Herzen dafür danken, dass sie diese Arbeit mit ermöglicht hat: meinen Eltern, Regina und Erwin, die mich seit jeher in allem unterstützt, bekräftigt und ermutigt haben, meinem Bruder Christian, der immer die nötige Portion gute Laune beisteuert und meinen beiden Kinder, Lukas und Louisa, die ein steter Quell von Freude und Glück sind. Zu guter Letzt möchte ich die fortwährende Unterstützung und den Rückhalt meiner Frau Cornelia hervorheben, die schon seit vielen Jahren im Hintergrund mit dafür verantwortlich ist, dass diese Forschungsarbeit möglich war. Mein tiefster Dank dafür!

ACKNOWLEDGEMENTS

Beyond the acknowledgements in each of the papers that form part of this work, I wish to express my specific gratitude to the following colleagues, friends and my family:

Foremost, I want to thank my mentors Peter Bunge, Anke Friedrich and Heiner Igel for their guidance and advice during the preparation of this thesis. I am in particular grateful to Peter for his continuing support, stimulating discussions and for maintaining a positive and inspiring environment in the institute. Likewise, I thank Jens Oeser, Marcus Mohr and the entire IT-team at LMU Geophysics for installing and operating an excellent, stable and reliable computer system and for running first-class IT-services.

Also, I wish to specifically thank my project partners Lorenzo Colli, Rhodri Davies, Paula Koelemeijer, Rainer Nerlich, Guust Nolet, Jeroen Ritsema, Nathan Simmons, Christophe Zaroli and all co-authors involved in the publications for the fruitful collaborations. I am happy to have been able to work together with them on the various exciting research topics.

Furthermore, I thank all former and current members of the Geodynamics group at LMU for interesting discussions, critical questions and helpful suggestions. In particular, I thank all former Bachelor and Masters students who were in one way or the other involved in the research projects: Eldar Baykiev, Tobias Bigalke, Laura Ellenbeck, Claudia Gräber, Roman Freißler, Isabel Papanagnou and Gabriel Robl.

Finally, I am very grateful to my whole family for being around and for also making this work possible: to my parents, Regina and Erwin, for their long-standing endorsement and encouragement, to my brother Christian for a lot of fun and for always adding an extra portion of good mood, and to my kids, Lukas and Louisa, who are a constant source of joy and happiness. And last but not least: I am indebted and highly grateful to my wife Cornelia for her continuing support and backing behind the scenes over many years. This research would not have been possible without her contribution. Thank you very much!

LITERATURVERZEICHNIS/REFERENCES

- Agranier, A., J. Blicherttoft, D. Graham, V. Debaille, P. Schiano, and F. Albarede (2005), The spectra of isotopic heterogeneities along the mid-Atlantic Ridge, *Earth Planet. Sci. Lett.*, *238*(1–2), 96–109, doi:10.1016/j.epsl.2005.07.011.
- Al-Attar, D., and J. H. Woodhouse (2008), Calculation of seismic displacement fields in self-gravitating earth models – applications of minors vectors and symplectic structure, *Geophys. J. Int.*, *175*(3), 1176–1208, doi:10.1111/j.1365-246X.2008.03961.x.
- Al-Attar, D., J. H. Woodhouse, and A. Deuss (2012), Calculation of normal mode spectra in laterally heterogeneous earth models using an iterative direct solution method, *Geophys. J. Int.*, *189*(2), 1038–1046, doi:10.1111/j.1365-246X.2012.05406.x.
- Alfè, D., M. J. Gillan, and G. D. Price (2007), Temperature and composition of the Earth's core, *Contemp. Phys.*, *48*(2), 63–80, doi:10.1080/00107510701529653.
- Allègre, C. J., and D. L. Turcotte (1986), Implications of a two-component marble-cake mantle, *Nature*, *323*(6084), 123–127, doi:10.1038/323123a0.
- Becker, T. W., and L. Boschi (2002), A comparison of tomographic and geodynamic mantle models, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, *3*(1), 1003, doi:10.1029/2001GC000168.
- Boehler, R. (2000), High-pressure experiments and the phase diagram of lower mantle and core materials, *Rev. Geophys.*, *38*(2), 221–245.
- Bolton, H., and G. Masters (2001), Travel times of *P* and *S* from the global digital seismic networks: Implications for the relative variation of *P* and *S* velocity in the mantle, *J. Geophys. Res.*, *106*(B7), 13,527–13,540.
- Bozdağ, E., D. Peter, M. Lefebvre, D. Komatitsch, J. Tromp, J. Hill, N. Podhorszki, and D. Pugmire (2016), Global adjoint tomography: First-generation model, *Geophys. J. Int.*, *207*(3), 1739–1766, doi:10.1093/gji/ggw356.
- Buffett, B. A. (2002), Estimates of heat flow in the deep mantle based on the power requirements for the geodynamo, *Geophys. Res. Lett.*, *29*(12), 1566, doi:10.1029/2001GL014649.
- Bull, A., A. McNamara, and J. Ritsema (2009), Synthetic tomography of plume clusters and thermochemical piles, *Earth Planet. Sci. Lett.*, *278*(3–4), 152–162, doi:10.1016/j.epsl.2008.11.018.
- Chust, T. C., G. Steinle-Neumann, D. Dolejš, B. S. A. Schuberth, and H.-P. Bunge (2017), MMA-EoS: A Computational Framework for Mineralogical Thermodynamics, *J. Geophys. Res.*, *122*(12), 9881–9920, doi:10.1002/2017JB014501.
- Colli, L., H.-P. Bunge, and B. S. A. Schuberth (2015), On retrodictions of global mantle flow with assimilated surface velocities, *Geophys. Res. Lett.*, *42*(20), 8341–8348, doi:10.1002/2015gl066001.
- Colli, L., S. Ghelichkhan, H.-P. Bunge, and J. Oeser (2018), Retrodictions of Mid Paleogene mantle flow and dynamic topography in the Atlantic region from compressible high resolution adjoint mantle convection models: Sensitivity to deep mantle viscosity and tomographic input model, *Gondwana Res.*, *53*, 252–272, doi:10.1016/j.gr.2017.04.027.
- Connolly, J. (2005), Computation of phase equilibria by linear programming: A tool for geodynamic modeling and its application to subduction zone decarbonation, *Earth Planet. Sci. Lett.*, *236*(1–2), 524–541.
- Davies, D. R., S. Goes, J. Davies, B. Schuberth, H.-P. Bunge, and J. Ritsema (2012), Reconciling dynamic and seismic models of Earth's lower mantle: The dominant role of thermal heterogeneity, *Earth Planet. Sci. Lett.*, *353*–354(0), 253–269, doi:10.1016/j.epsl.2012.08.016.
- Day, S. M. (1982), Three-dimensional simulation of spontaneous rupture: The effect of nonuniform prestress, *Bull. Seismol. Soc. Am.*, *72*(6A), 1881–1902, doi:10.1016/0148-9062(83)90099-2.
- Dubois, F., S. Lambotte, C. Zaroli, and L. Rivera (2019), Global finite-frequency *S*-wave delay-times: How much crust matters, *Geophys. J. Int.*, *218*(3), 1665–1684, doi:10.1093/gji/ggz222.
- Ferreira, A. M. G., J. H. Woodhouse, K. Visser, and J. Trampert (2010), On the robustness of global radially anisotropic surface wave tomography, *J. Geophys. Res.*, *115*(B4), B04,313, doi:10.1029/2009jb006716.
- Fichtner, A., et al. (2018), The Collaborative Seismic Earth Model: Generation 1, *Geophys. Res. Lett.*, *45*(9), 4007–4016, doi:10.1029/2018gl077338.
- Fiquet, G., A. L. Auzende, J. Siebert, A. Corgne, H. Bureau, H. Ozawa, and G. Garbarino (2010), Melting of Peridotite to 140 Gigapascals, *Science*, *329*(5998), 1516–1518, doi:10.1126/science.1192448.
- Freissler, R., C. Zaroli, S. Lambotte, and B. S. A. Schuberth (2020), Tomographic filtering via the generalized inverse: A way to account for seismic data uncertainty, *Geophys. J. Int.*, *223*, 254–269, doi:10.1093/gji/ggaa231.
- French, S. W., and B. A. Romanowicz (2014), Whole-mantle radially anisotropic shear velocity structure from seismic-element waveform tomography, *Geophys. J. Int.*, *199*(3), 1303–1327, doi:10.1093/gji/ggu334.
- Glatzmaier, G. A., and P. H. Roberts (1995), A 3-Dimensional Self-Consistent Computer-Simulation Of A Geomagnetic-Field Reversal, *Nature*, *377*(6546), 203–209, doi:10.1038/377203a0.
- Gubbins, D., D. Alfè, G. Masters, G. D. Price, and M. Gillan (2004), Gross thermodynamics of two-component core convection, *Geophys. J. Int.*, *157*(3), 1407–1414, doi:10.1111/j.1365-246X.2004.02219.x.
- Hosseini, K., and K. Sigloch (2015), Multifrequency measurements of core-diffracted *P*-waves (Pd_{diff}) for global waveform tomography, *Geophys. J. Int.*, *203*(1), 506–521, doi:10.1093/gji/ggv298.
- Hung, S.-H., F. A. Dahlen, and G. Nolet (2001), Wavefront healing: A banana-doughnut perspective, *Geophys. J. Int.*, *146*(2), 289–312, doi:10.1046/j.1365-246X.2001.01466.x.
- Ishii, M., and J. Tromp (2001), Even-degree lateral variations in the Earth's mantle constrained by free oscillations and the free-air gravity anomaly, *Geophys. J. Int.*, *145*(1), 77–96, doi:10.1111/j.1365-246X.2001.00385.x.
- Koelemeijer, P., J. Ritsema, A. Deuss, and H.-J. van Heijst (2016), SP12RTS: A degree-12 model of shear- and compressional-wave velocity for Earth's mantle, *Geophys. J. Int.*, *204*(2), 1024–1039, doi:10.1093/gji/ggv481.
- Koelemeijer, P., B. Schuberth, D. Davies, A. Deuss, and J. Ritsema (2018), Constraints on the presence of post-perovskite in Earth's lowermost mantle from tomographic-geodynamic model comparisons, *Earth Planet. Sci. Lett.*, *494*, 226–238, doi:10.1016/j.epsl.2018.04.056.
- Kuang, W. L., and J. Bloxham (1997), An Earth-like numerical dynamo model, *Nature*, *389*(6649), 371–374, doi:10.1038/38712.
- Lay, T. (2008), Sharpness of the D' discontinuity beneath the Cocos Plate: Implications for the perovskite to post-perovskite phase transition, *Geophys. Res. Lett.*, *35*, L03,304, doi:10.1029/2007GL032465.
- Lei, W., et al. (2020), Global adjoint tomography—model GLAD-M25, *Geophys. J. Int.*, *223*(1), 1–21, doi:10.1093/gji/ggaa253.
- Lekić, V., M. Panning, and B. Romanowicz (2010), A simple method for improving crustal corrections in waveform tomography, *Geophys. J. Int.*, *182*(1), 265–278, doi:10.1111/j.1365-246X.2010.04602.x.
- Leng, K., T. Nissen-Meyer, and M. van Driel (2016), Efficient global wave propagation adapted to 3-D structural complexity: A pseudospectral/spectral-element approach, *Geophys. J. Int.*, *207*(3), 1700–1721, doi:10.1093/gji/ggw363.
- Maguire, R., J. Ritsema, P. E. van Keken, A. Fichtner, and S. Goes (2016), *P*- and *S*-wave delays caused by thermal plumes, *Geophys. J. Int.*, *206*(2), 1169–1178, doi:10.1093/gji/ggw187.
- Malcolm, A. E., and J. Trampert (2011), Tomographic errors from wave front healing: More than just a fast bias, *Geophys. J. Int.*, *185*(1), 385–402, doi:10.1111/j.1365-246X.2011.04945.x.
- Masters, G., G. Laske, H. Bolton, and A. M. Dziewonski (2000), Earth's Deep Interior – Mineral Physics and Tomography From the Atomic to the Global Scale, chap. The Relative Behavior of Shear Velocity, Bulk Sound Speed, and Compressional Velocity in the Mantle: Implications for Chemical and Thermal Structure, pp. 63–87, American Geophysical Union, Washington D.C.
- Mosca, I., L. Cobden, A. Deuss, J. Ritsema, and J. Trampert (2012), Seismic and mineralogical structures of the lower mantle from probabilistic tomography, *J. Geophys. Res.*, *117*(B6), doi:10.1029/2011jb008851.
- Nakagawa, T., and P. J. Tackley (2010), Influence of initial CMB temperature and other parameters on the thermal evolution of Earth's core resulting from thermochemical spherical mantle convection, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, *11*(6), Q06,001, doi:10.1029/2010GC003031.
- Nerlich, R., L. Colli, S. Ghelichkhan, B. Schuberth, and H.-P. Bunge (2016), Constraining central Neo-Tethys Ocean reconstructions with mantle convection models, *Geophys. Res. Lett.*, *43*(18), 9595–9603, doi:10.1002/2016gl070524.
- Ni, S. D., E. Tan, M. Gurnis, and D. V. Helmberger (2002), Sharp sides to the African superplume, *Science*, *296*, 1850–1852, doi:10.1126/science.1070698.
- Nimmo, F., G. D. Price, J. Brodholt, and D. Gubbins (2004), The influence of potassium on core and geodynamo evolution, *Geophys. J. Int.*, *156*(2), 363–376, doi:10.1111/j.1365-246X.2003.02157.x.
- Papanagnou, I., B. S. A. Schuberth, and C. Thomas (2022), Geodynamic predictions of seismic structure and discontinuity topography of the mantle transition zone, *Geophys. J. Int.*, p. ggac478, doi:10.1093/gji/ggac478.
- Ricard, Y., E. Mattern, and J. Matas (2005), Synthetic Tomographic Images of Slabs from Mineral Physics, in *Earth's Deep Mantle: Structure, Composition, and Evolution*, edited by R. D. van der Hilst, J. Matas, and J. Trampert, pp. 283–300, American Geophysical Union (AGU), doi:10.1029/160GM17.
- Ritsema, J., and H. J. van Heijst (2002), Constraints on the correla-

- tion of P- and S-wave velocity heterogeneity in the mantle from P, PP, PPP and PKPab traveltimes, *Geophys. J. Int.*, 149(2), 482–489, doi:10.1046/j.1365-246X.2002.01631.x.
- Ritsema, J., H. J. van Heijst, and J. H. Woodhouse (2004), Global transition zone tomography, *J. Geophys. Res.*, 109(B2), B02302, doi:10.1029/2003JB002610.
- Ritsema, J., A. K. McNamara, and A. L. Bull (2007), Tomographic filtering of geodynamic models: Implications for model interpretation and large-scale mantle structure, *J. Geophys. Res.*, 112(B1), B01303, doi:10.1029/2006JB004566.
- Ritsema, J., W. Xu, L. Stixrude, and C. Lithgow-Bertelloni (2009), Estimates of the transition zone temperature in a mechanically mixed upper mantle, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 277(1–2), 244–252, doi:10.1016/j.epsl.2008.10.024.
- Ritsema, J., A. Deuss, H. J. van Heijst, and J. H. Woodhouse (2011), S4ORTS: A degree-40 shear-velocity model for the mantle from new Rayleigh wave dispersion, teleseismic traveltime and normal-mode splitting function measurements, *Geophys. J. Int.*, 184(3), 1223–1236, doi:10.1111/j.1365-246X.2010.04884.x.
- Schaber, K., H.-P. Bunge, B. S. A. Schuberth, R. Malservisi, and A. Horbach (2009), Stability of the rotation axis in high-resolution mantle circulation models: Weak polar wander despite strong core heating, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 10, Q11W04, doi:10.1029/2009GC002541.
- Schuberth, B. S. A., and T. Bigalke (2021), From Mantle Convection to Seismic Observations: Quantifying the Uncertainties Related to Anelasticity, in *Geophysical Monograph Series*, edited by H. Marquardt, M. Ballmer, S. Cottaar, and J. Konter, first ed., pp. 97–119, Wiley, doi:10.1002/9781119528609.ch4.
- Schuberth, B. S. A., H.-P. Bunge, and J. Ritsema (2009a), Tomographic filtering of high-resolution mantle circulation models: Can seismic heterogeneity be explained by temperature alone?, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 10(5), Q05W03, doi:10.1029/2009GC002401.
- Schuberth, B. S. A., H.-P. Bunge, G. Steinle-Neumann, C. Moder, and J. Oeser (2009b), Thermal versus elastic heterogeneity in high-resolution mantle circulation models with pyrolyte composition: High plume excess temperatures in the lowermost mantle, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 10(1), Q01W01, doi:10.1029/2008GC002235.
- Schuberth, B. S. A., C. Zaroli, and G. Nolet (2012), Synthetic seismograms for a synthetic Earth: Long-period P- and S-wave traveltime variations can be explained by temperature alone, *Geophys. J. Int.*, 188(3), 1393–1412, doi:10.1111/j.1365-246X.2011.05333.x.
- Schuberth, B. S. A., C. Zaroli, and G. Nolet (2015), Traveltime dispersion in an isotropic elastic mantle: Strong lower-mantle signal in differential-frequency residuals, *Geophys. J. Int.*, 203(3), 2099–2118, doi:10.1093/gji/ggv389.
- Serrin, J. (1959), Mathematical Principles of Classical Fluid Mechanics, in *Fluid Dynamics I / Strömungsmechanik I, Encyclopedia of Physics / Handbuch Der Physik*, vol. 3/8/1, edited by C. Truesdell, pp. 125–263, Springer Berlin Heidelberg.
- Sigloch, K., N. McQuarrie, and G. Nolet (2008), Two-stage subduction history under North America inferred from multiple-frequency tomography, *Nat. Geosci.*, 1(7), 458–462, doi:10.1038/ngeo231.
- Simmons, N. A., B. S. A. Schuberth, S. C. Myers, and D. R. Knapp (2019), Resolution and Covariance of the LLNL-G3D-JPS Global Seismic Tomography Model: Applications to Travel time Uncertainty and Tomographic Filtering of Geodynamic Models, *Geophys. J. Int.*, 217(3), 1543–1557, doi:10.1093/gji/ggz102.
- Stixrude, L., and C. Lithgow-Bertelloni (2005), Thermodynamics of mantle minerals - I. Physical properties, *Geophys. J. Int.*, 162(2), 610–632, doi:10.1111/j.1365-246X.2005.02642.x.
- Stixrude, L., and C. Lithgow-Bertelloni (2022), Thermal expansivity, heat capacity and bulk modulus of the mantle, *Geophys. J. Int.*, 228(2), 1119–1149, doi:10.1093/gji/ggab394.
- Stockmann, F., L. Cobden, F. Deschamps, A. Fichtner, and C. Thomas (2019), Investigating the seismic structure and visibility of dynamic plume models with seismic array methods, *Geophys. J. Int.*, 219(Supplement 1), S167–S194, doi:10.1093/gji/ggz334.
- To, A., A., B. Romanowicz, Y. Capdeville, and N. Takeuchi (2005), 3D effects of sharp boundaries at the borders of the African and Pacific Superplumes: Observation and modeling, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 233(1–2), 137–153, doi:10.1016/j.epsl.2005.01.037.
- Trampert, J., F. Deschamps, J. Resovsky, and D. Yuen (2004), Probabilistic tomography maps chemical heterogeneities throughout the lower mantle, *Science*, 306(5697), 853–856, doi:10.1126/science.1101996.
- Trampert, J., A. Fichtner, and J. Ritsema (2013), Resolution tests revisited: The power of random numbers, *Geophys. J. Int.*, 192(2), 676–680, doi:10.1093/gji/ggs057.
- van der Hilst, R. D., and H. Karason (1999), Compositional heterogeneity in the bottom 1000 kilometers of Earth's mantle: Toward a hybrid convection model, *Science*, 283(5409), 1885–1888, doi:10.1126/science.283.5409.1885.
- Wang, Y., and L. Wen (2004), Mapping the geometry and geographic distribution of a very low velocity province at the base of the Earth's mantle, *J. Geophys. Res.*, 109(B10), B10305, doi:10.1029/2003JB002674.
- Wen, L. X., P. G. Silver, D. James, and R. Kuehnel (2001), Seismic evidence for a thermo-chemical boundary at the base of the Earth's mantle, *Earth Planet. Sci. Lett.*, 189, 141–153, doi:10.1016/S0012-821X(01)00365-X.
- Wielandt, E. (1987), On the validity of the ray approximation for interpreting delay times, in *Seismic Tomography, Seismology and Exploration Geophysics*, vol. 5, edited by G. Nolet, pp. 85–98, Springer Netherlands, doi:10.1007/978-94-009-3899-1_4.
- Yang, T., and Y. Shen (2006), Frequency-Dependent Crustal Correction for Finite-Frequency Seismic Tomography, *Bull. Seismol. Soc. Am.*, 96(6), 2441–2448, doi:10.1785/0120060038.
- Zaroli, C., E. Debayle, and M. Sambridge (2010), Frequency-dependent effects on global S-wave traveltimes: Wavefront-healing, scattering and attenuation, *Geophys. J. Int.*, 182(2), 1025–1042, doi:10.1111/j.1365-246X.2010.04667.x.
- Zaroli, C., J.-J. L  v  que, B. S. A. Schuberth, Z. Duputel, and G. Nolet (2014), Global S-wave tomography using receiver pairs: An alternative to get rid of earthquake mislocation, *Geophys. J. Int.*, 199(2), 1043–1057, doi:10.1093/gji/ggu312.