

Kapitel 3

Fluidsysteme in der Kruste: Modellrechnungen zur Rolle der Quarzumverteilung

Wie schon in der Einleitung dieser Arbeit erwähnt, behandeln die im Folgenden vorgestellten Simulationen zwei Hauptformen der Bewegung von Fluiden in der tiefen Kruste: Modelle erzwungener Konvektion, die sich auch unter dem Titel *One-Pass*-Bewegung zusammenfassen lassen, und solche freier Konvektion im eigentlichen Sinne. Beide Bewegungsformen führen zu besonderen physikalischen Phänomenen – und spezifischen Problemen – ,die im Weiteren erläutert werden sollen. Obwohl die anfängliche Fragestellung dieser Arbeit bei krustalen Dimensionen lag, werden mehrfach Modelltypen einbezogen, die sich durch andere Orte im Parameterraum auszeichnen, insofern sie interessante Aspekte des Basismechanismus verdeutlichen oder anderweitig geologisch relevant sind.

Die betrachteten Problemkomplexe umfassen zunächst *One-Pass*-Modelle im Sinne von Kap. 1 die hier der Einfachheit halber als eine erzwungene Konvektion in einem eindimensionalen Modell behandelt werden. Dies erlaubt eine schnelle Untersuchung der Entwicklung in Abhängigkeit von unterschiedlichen Bedingungen in der Kruste. Untersuchungsziel ist hier vor allem die Ermittlung charakteristischer Zeitskalen, die es ermöglichen, die Relevanz des Prozesses für eine Krustenentwässerung abzuschätzen. Die in einem weiteren Abschnitt untersuchten freien Konvektionsbewegungen sind nicht nur mehrfach zur Erklärung intrakrustaler Barrieren herangezogen worden [Etheridge et al., 1983], sondern werden auch zumindest für einen Teil der diagenetischen Veränderungen in Sedimentstrukturen verantwortlich gemacht. Aus diesem Grunde wird den freien Konvektionsmodellen ein breiterer Raum zugestanden.

Zentral für die hier untersuchten Versiegelungsvorgänge ist die Wahl der Zeitskala. Mit Hilfe von dimensionsanalytischen Argumenten [z.B. de St. Q. Isaacson and de St. Q. Isaacson, 1975, Bear and Bachmat, 1991, Ligget, 1994] kann zumindestens eine Einschätzung der Größenordnungen gewonnen werden. Eine Basis der Betrachtungen ist das zeitliche Verhalten des Druckes, dessen Gradient die Fluidbewegung bewirkt. Die Druckgleichung ist – wie schon oben erwähnt – als Diffusionsgleichung aufzufassen, die durch wenige Umformungen auf eine kanonische Form mit einer geeignet definierten Diffusionskonstanten gebracht werden kann. Sie beschreibt dann die Abweichung des Druckes vom hydrostatischen Druck (im einfachsten Fall $\rho g \Delta z$). Wie man aus dem Folgenden entnehmen kann, ist die charakteristische Zeitkonstante L^2/K , wobei K die dimensionslose Diffusionskonstante und L eine räumliche Skalengröße darstellt. Zu diesem Zweck wird die zu Grunde liegende Gleichung zunächst dimensionslos gemacht [Walder and Nur, 1984]. Die Differentialgleichung für den Druck (Gl. 2.4, S. 22) kann unter Annahme isotroper Permeabilität und nicht zu großer räumlicher Änderung von Dichte und Viskosität zuerst vereinfacht werden zu:

$\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$	$1 - 30 \cdot 10^3 \text{m}$
\hat{K}	$10^{-16} - 10^{-22} \text{m}^2$
$\hat{\rho}$	$1000 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
$\hat{\mu}$	10^{-4}Pa s
$\hat{\phi}$	$0.03, 0.001$
\hat{g}	$9.81 \frac{\text{kg m}}{\text{s}^2}$
$\hat{\alpha}$	10^{-4}K^{-1}
$\hat{\beta}$	10^{-11}Pa^{-1}
\hat{t}	$\frac{\hat{z}^2 \hat{\mu} \hat{\beta}_f \hat{\phi}}{\hat{K}}$
\hat{P}	$\hat{g}(\hat{\rho}_s - \hat{\rho}_f) \hat{z}$

Tabelle 3.1: Normierungsfaktoren für die Untersuchung der Druckentwicklung

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} = \frac{K\rho}{\mu} \nabla^2 P + \rho Q_f \quad (3.1)$$

Der Einfachheit halber soll hier mit der Variable P der Differenzdruck $P_{diff} = P_f - P_{hyd}$ bezeichnet werden. Diese Gleichung kann durch eine Normierung der beteiligten Größen f durch geeignete \hat{f} auf eine dimensionslose Form gebracht werden.

$$\hat{\nabla}^2 \hat{P} = \frac{1}{c} \cdot \left(d \frac{\partial \hat{P}}{\partial \hat{t}} - e \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} + f \hat{Q} \right) \quad (3.2)$$

mit:

$$c = \frac{\hat{K} \hat{\rho} \hat{P}}{\hat{\mu} \hat{z}^2} \quad d = \frac{\hat{\rho} \hat{\beta}_f \hat{\phi} \hat{P}}{\hat{t}} \quad e = \frac{\hat{\rho} \hat{\alpha}_f \hat{\phi} \hat{T}}{\hat{t}} \quad f = \frac{\hat{\rho} \hat{Q}}{\hat{t}} \quad (3.3)$$

Für die mit einem Dach versehenen Größen und Materialeigenschaften können entsprechende Mittelwerte eingesetzt werden (Tab. 3.1). Gleichung 3.2 kann durch die Wahl geeigneter Normierungen von \hat{t} und \hat{P} vereinfacht werden, indem $\frac{d}{c} = 1$ gesetzt wird. Daraus ergibt sich die Normierung für t :

$$\hat{t} = \frac{\hat{z}^2 \hat{\mu} \hat{\beta}_f \hat{\phi}}{\hat{K}} \quad (3.4)$$

wobei $\hat{z} = L$ hier die vertikale Ausdehnung des Reservoirs darstellen soll. Vernachlässigt man die beiden letzten Terme auf der rechten Seite ($e = f = 0$) (Einfluß der thermischen Ausdehnung und Quellterme), kann das Verhalten von \hat{P} in der vereinfachten Gleichung durch eine exponentielle Abnahme mit der Zeitkonstanten $t_{scal}^P = \hat{t} \approx 10^{-14} \frac{\hat{\phi} \hat{z}^2}{\hat{K}}$ charakterisiert werden. Diese Beziehung ist in Abb. 3.1 für Permeabilitäten zwischen 10^{-22} und 10^{-16}m^2 ausgewertet worden. Die effektive Diffusionskonstante dieser Gleichung ist d/c .

Wie im letzten Kapitel schon ausgeführt, können mit dem hier vorliegenden Algorithmus nur Systeme behandelt werden, deren räumliche Ausdehnung L größer ist als die Äquilibrationslänge l_e , die in vielen in der Kruste vorliegenden Situationen deutlich unter 0.1 km liegt. Bei einer Permeabilität von 10^{-21}m^2 – sie liegt an der unteren Grenze der für die Kruste als Ganzes geschätzten Werte [siehe Brace, 1984, Clauser and Huenges, 1995] – ergibt sich für eine Mächtigkeit von 10 km ein Ergebnis von nur $10^5 - 10^6$ Jahren. Damit könnte eine Zone von nahezu lithostatischem Druck nicht für geologisch relevante Zeiträume existieren. Im Bezugsrahmen der hier behandelten Fragestellung bedeutet dies, daß nur derartige Situationen relevant sind, die in diesen Zeiträumen merkbare Änderungen der

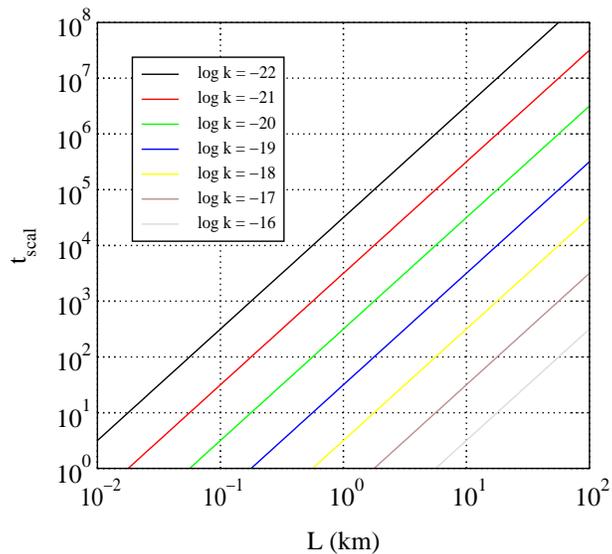


Abbildung 3.1: Zeitskala für den dieser des Druckausgleichs für verschiedene Systemdimensionen L und Permeabilitäten.

Porosität verursachen. Wie man im Weiteren sehen wird, sind dadurch der sinnvollen Modellierung enge Grenzen gesetzt.

Eine weitere zeitliche Bedingung ist – besonders im Falle der im nächsten Abschnitt behandelten *one-pass*-Bewegungen – durch den Charakter der Quellterme gegeben. Dabei sind sowohl der Energie-, wie auch der Fluideintrag in Betracht zu ziehen. Auch hier sind vergleichsweise leicht Grenzwerte anzugeben. In erster Näherung kann die konduktive Abkühlung als Diffusionsprozeß durch die dimensionslose Fourierzahl $Fo = \frac{\hat{x}^2}{2\kappa}$ charakterisiert werden. Setzt man $Fo = 1$, so ergibt sich eine Zeitkonstante $t_0 \approx \frac{L^2}{2\kappa}$. Dies entspricht bei einer Kugelgeometrie einer Reduktion der Anomalie auf $\approx 1/10$ des Anfangswerts [Kappelmeyer and Haenel, 1974]. Die Wärmeleitfähigkeit $\kappa = \frac{\lambda_s}{\rho_s c_s}$ ist unter Krustenbedingungen relativ konstant (bis auf einen Faktor von ≈ 2), so daß die Größenordnung leicht geschätzt werden kann: Für typische Plutone mit $L \approx 10^4$ m ergeben sich Zeiträume von mehreren 10^5 a. Umgekehrt erfordert ein regionalmetamorphes Ereignis mit $t_0 > 10^7$ a ein $L > 30$ km und somit einen krustalen Maßstab. Obwohl diese Abschätzung für extrem abweichende Geometrien wie z. B. horizontale *sills* [Cathles et al., 1997] sicher falsch ist, gibt sie in vielen Fällen doch die Größenordnung richtig an.

Die Fluidquellen sind in unserem Fall im wesentlichen die Fluide, die mit der Versenkung und/oder der damit verbundenen Erwärmung metamorph freigesetzt werden. Dabei wird vorausgesetzt, daß freies meteorisches Porenwasser in der Oberkruste im wesentlichen durch Kompaktion entfernt wurde. Es ist mehrfach argumentiert worden [Etheridge et al., 1983, 1984, Murrell, 1986, Hyndman, 1988, Thompson and Connolly, 1990], daß für die Entwicklung des Flüssigkeitsdrucks in der Kruste die prograden metamorphen Prozesse eine entscheidende Rolle spielen: Werden Sedimente durch Prozesse wie Subduktion oder einfach fortgesetzte Auflagerung von weiteren Sedimenten in die tiefe Kruste eingebracht, so enthalten sie auch nach dem Verschwinden des größten Teils des Porenraums noch gebundenes Wasser in einer Reihe von Silikatverbindungen. Mit steigendem Druck und steigender Temperatur wird dieser Anteil an gebundenen Fluiden (≈ 5 wt%) freigesetzt und stellt unter den Bedingungen der Unterkruste ca. 12 vol% des Gesteinsvolumens dar [Walther and Orville, 1982].

Die metamorphe Freisetzung von Wasser folgt der gleichen Zeitskala wie die Temperatur, da sie durch sie bedingt ist. Der konkrete Prozeß dieser Freisetzung ist außerordentlich schwierig zu erfassen, da dieser Phasenübergang mit relevanten Änderungen von Porosität, Permeabilität und Matrixvolumen einhergeht. Die Komplexitäten dieses Prozesses ist im Detail in den Arbeiten von Connolly [Connolly, 1997a,b] und Wong et al. [Ko et al., 1997, Wong et al., 1997] analysiert worden. Im hier betrachteten

Zusammenhang, wo der Versiegelungsprozeß isoliert betrachtet wird, soll für eine erste Abschätzung eine konstante Entwässerung in auszeichnen von der Temperatur angenommen werden. Eine solche Annahme hat eine gewisse Rechtfertigung, da die inhomogene Zusammensetzung der Krustengesteine und der Charakter vieler Minerale als Angehörige von Mischreihen zu einer Verschmierung des Übergangs über einen weiten Bereich im örtlichen wie im thermodynamischen Sinn führt [Fyfe et al., 1978].

Dieser Umstand ermöglicht eine einfache Umformung der oben gegebenen dimensionslosen Gl. 3.2. Der Effekt einer Temperaturänderung selber und der Quellterm lassen sich zusammenfassen zu:

$$\hat{\nabla}^2 \hat{P} = \frac{\partial \hat{P}}{\partial \hat{t}} - \left(\hat{e} + \hat{g} \frac{\partial \hat{A}}{\partial \hat{T}} \right) \cdot \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} \quad (3.5)$$

Die beiden vor der dimensionslosen Temperaturänderung stehenden Konstanten lassen sich mit den oben schon angegebenen Werten (Tab. 3.1) und einer Abschätzung der Temperaturableitung der Produktion auswerten.

Der erste Term vor der Temperaturableitung in Gl. 3.5 ist der reine Effekt einer temperaturbedingten Änderung des Fluidvolumens und seine Rolle kann durch $\hat{\alpha}_f \hat{\phi} \cdot \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}}$ abgeschätzt werden. Mit $\hat{\alpha} \approx 3 \cdot 10^{-4}$ und $\hat{\phi} \approx 10^{-3}$ kann dies dahingehend interpretiert werden, daß eine Änderung von etwa 10^{-2} K/a nötig ist, um sichtbare Effekte zu produzieren. Typische zeitliche Änderungen der Temperatur lassen sich bei geringer Permeabilität und dem infolgedessen vernachlässigbaren konvektiven Anteil des Wärmetransports aus konduktiven Modellrechnungen für typische tektonische Situationen abschätzen. Da Änderungen des Auflastdruckes und die dadurch bewirkten Kompaktionsprozesse in obigem Modell nicht berücksichtigt werden, sind die folgenden Betrachtungen bedeutungsvoll für quasi-isobare Aufheizungsmodelle (Unterlagerung oder Intrusion): Veröffentlichte Modellrechnungen [Wells, 1980, England and Thompson, 1984, Thompson and England, 1984] ergeben im regionalen Bereich Aufheizraten von $10 - 200 \cdot 10^{-7}$ K/a mit einem mittleren Wert bei 10^{-5} K/a. Damit liegen sie deutlich unter dem für eine merkliche Rolle der thermischen Ausdehnung erforderlichen Wert. Relevante Beiträge durch diesen Mechanismus sind daher nur lokal, z. B. im Zusammenhang mit den Kontaktaureolen intrusiver Prozesse zu erwarten [vgl. Norton and Knapp, 1977, Dutrow and Norton, 1995, Cathles et al., 1997].

Der Anteil der metamorphen Fluidproduktion läßt sich grob folgendermaßen angeben: Metamorphe Gesteine enthalten zum Zeitpunkt der abgeschlossenen Diagenese immer noch ≈ 12 vol% Wasser [Fyfe et al., 1978], welches in Mineralen gebunden ist und durch weitere Druckerhöhung und/oder Erwärmung freigesetzt werden kann. Fyfe et al. [1978] geben für metamorphisierende Krusteneinheiten pelitischer oder mafitischer Zusammensetzung summarische Kurven der Fluidfreisetzung entlang verschiedener Geothermen an. Aus diesen Kurven läßt sich die Änderung des freigesetzten Fluidvolumens mit der Temperatur entnehmen. Eine simple Abschätzung ergibt eine Produktion von $4 \cdot 10^{-14}$ kg/(m³s), wobei eine Fluidmasse von ≈ 120 kg/m³ und eine Periode von 100 Ma eingesetzt wurde, die als typisch für regionalmetamorphe Ereignisse angesehen werden kann. Ähnliche Werte werden auch von Walther and Orville [1982] oder Connolly [1997b] angegeben. Aus den von Fyfe et al. [1978] angegebenen Entwässerungsszenarien ergibt sich für die oben genannten Erwärmungsraten und Werte von $\partial A/\partial T$ von $\approx 2 \cdot 10^{-4}$ 1/K ($2.3 \cdot 10^{-4} - 1.6 \cdot 10^{-4}$) nahezu der gleiche Wert von $6 \cdot 10^{-14}$ kg/(m³s). Umrechnung und Berücksichtigung der Skalierung ergibt eine mittlere äquivalente Produktionsrate von ungefähr $6 \cdot 10^{-17} - 1.2 \cdot 10^{-16}$ s⁻¹ während der Dauer der Aufheizung. Integriert man diese Produktion über ein 10 km mächtiges Gesteinspaket, so erhält man eine Flächenproduktionsrate von $4 \cdot 10^{-10}$ kg/(m²s).

Zur Deutung dieser Werte kann auch auf die bereits veröffentlichten Modellrechnungen von Walder and Nur [1984] verwiesen werden: Sie kommen aus eindimensionalen Betrachtungen zu dem Ergebnis, daß es selbst unter günstigen Bedingungen (geringe Permeabilität, $k = 5 \cdot 10^{-20}$ m²) für einen ganzen Bereich von geometrischen und dynamischen Parametern nur dann zu wesentlichen Abweichungen von hydrostatischen Druckverhältnissen kommt, wenn die Rate der irreversiblen Porositätsänderung $\frac{\partial \phi}{\partial t} \geq 10^{-16}$ s⁻¹ ist. Mit anderen Worten: Es sind daher durchaus Produktionsraten zu erwarten, die nahe bei dem zur Produktion eines lithostatischen Druckprofils notwendigen Wert liegen. Die

Dauer der Produktion ist jedoch von derjenigen des auslösenden Prozesses oder von der zur Verfügung stehenden Gesamtmenge begrenzt. Bei den folgenden Modellrechnungen wurde daher die Simulation nicht über einen Zeitraum von 10^8 a ausgedehnt und die möglicherweise noch zu erwartenden Effekte längerer Wirkungszeiten als nicht relevant betrachtet. Als signifikante Effekte im engeren Sinn sollen mehr oder weniger willkürlich solche angesehen werden, die in weniger als 10^7 a entstehen.

3.1 One-Pass-Modelle

Die in diesem Kapitel vorgestellten eindimensionalen Modelle sind einerseits motiviert durch die Fragestellung der möglichen Rolle der Quarzumverteilung im Prozeß der Krustenentwässerung, wie sie in den letzten Abschnitten diskutiert wurden. Andererseits ermöglicht die Einfachheit des Grundmodells, die große Zahl von Einflußgrößen quantitativ zu untersuchen, die das Verhalten des Gesamtsystems auch unter anderen Umständen bestimmen.

In allen hier gezeigten Modellen wird die Fluidbewegung erzwungen durch eine vorgegebene Druckdifferenz zwischen unterem und oberem Rand (siehe Abb. 3.2). Die Physik eines solchen Systems ist festgelegt durch die Grenzen des lithostatischen und hydrostatischen Druckes: Herrscht im System ein hydrostatischer Druckgradient $\rho_f g$, findet keine vertikale Fluidbewegung statt. Andererseits kann der lithostatische Druck auf Dauer nicht wesentlich überschritten werden, da sonst eine Reißbildung auftritt und ein nachfolgender Druckausgleich stattfindet. Der für eine Fluidbewegung nötige Gradient wird in den meisten der im folgenden gezeigten Modellen durch Dirichlet'sche Randbedingungen $P = \text{const.}$ realisiert. Dadurch wird für nicht-hydrostatische Verhältnisse ein Fluß durch die Ränder induziert. Pate stand bei den hier untersuchten Modellen die Vorstellung einer geringpermeablen Deckschicht, durch die eine quasi lithostatische, fluidproduzierende Schicht entwässert wird. Das generelle Schema dieses Modells ist in Abb. 3.2 dargestellt. Die angenommenen Werte für die Permeabilität ($10^{-16} < k < 10^{-19} \text{ m}^2$) und die Gradienten von Druck und Temperatur fallen in das Feld möglicher bzw. wahrscheinlicher Werte für die mittlere/untere Kruste. Alle Modelle wurden mit der gleichen Diskretisierung von 100 Elementen in vertikaler Richtung berechnet.

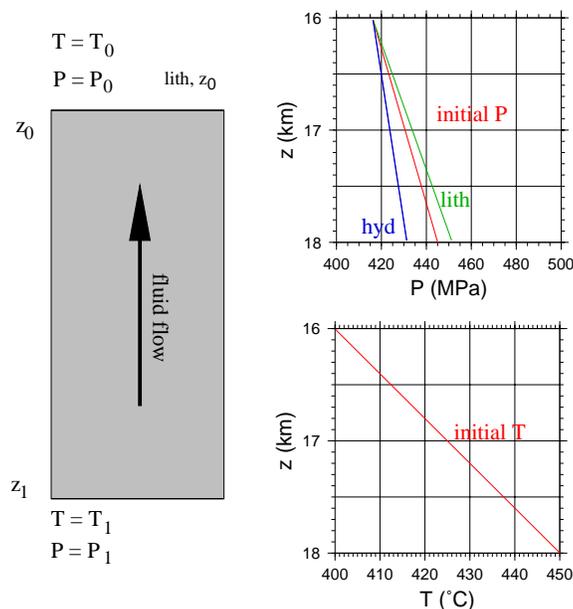


Abbildung 3.2: Modellstruktur für die eindimensionalen Betrachtungen der folgenden Abbildungen. Die Fluidbewegung wird hier durch die festgehaltene Druckdifferenz (Dirichlet'sche Randbedingungen) zwischen dem Druck an der Oberkante $z = z_0$ und der unteren Begrenzung ($z = z_1$). D. h. es gilt $z_0 < z < z_1$, $T_0 < T < T_1$ und $P_0 < P < P_1$. Der sich so ergebende Gradient muß größer sein als der hydrostatische Wert, der die Gleichgewichtsbedingung repräsentiert.

3.1.1 Homogene Modelle: Die Rolle der Randbedingungen

In Abb. 3.3 ist der prinzipielle Verlauf der Entwicklung von Permeabilität, Temperatur und Druck in Abhängigkeit von der Tiefe dargestellt. Scharparameter ist dabei die Zeit. Dargestellt ist hier ein Tiefenintervall von 2 km mit einem initialen Temperaturgradienten von 25 deg/km. γ wurde mit 3 angesetzt. Der zeitliche Verlauf in verschiedenen Tiefen ist in Abb. 3.3(a) zu sehen. Wie unmittelbar zu erkennen ist, zeigen P und k einen monotonen Verlauf, der durch die Temperaturstörung nahe $10^5 a$ nicht beeinflusst wird. In dieser Konfiguration ist die Änderung der Permeabilität in erster Linie ein Effekt des entstehenden großen Druckgradienten. Auf Grund der Dirichlet'schen Randbedingungen weist hier auch die Temperatur eine starke Änderung auf. Diese Konstellation führt zur Herausbildung einer schmalen Zone äußerst geringer Permeabilität am oberen Rand des Modells. Diese ist daher nicht einer Änderung der physikalisch-chemischen Bedingungen geschuldet, sondern lediglich ein Produkt der aufgezwungenen Randbedingungen, die in der Natur schwerlich realisiert sind. Es ist daher nicht trivial, die Wirkung von Parametervariation und Randbedingungen voneinander zu trennen. Verifiziert wird dies durch das folgende, in Abb. 3.3(b) dargestellte Beispiel.

Da die Löslichkeit und ihre Ableitungen von Druck und Temperatur abhängen, ist die Tiefenlage der untersuchten Struktur wichtig. Für ein gegebenes Intervall von $\Delta z = 2$ km ist auch der die Fluidbewegung treibende Druckunterschied tiefenabhängig. Die Wirkung dieses Faktums läßt sich in Abb. 3.5 verfolgen. Hier sind die Ergebnisse für verschiedene Tiefen zwischen 10 und 20 km dargestellt. Die mit einem geringen aufgeprägten Druckgradienten von $1.1 \cdot \nabla P_{hyd}$ und einem $\gamma = 3$ durchgeführten Rechnungen machen deutlich, daß mit steigender Temperatur nicht nur die Löslichkeit, sondern auch ihre Temperatur- und Druckableitung steigt. Größere Tiefen begünstigen daher den hier untersuchten Mechanismus. Abb. 3.6 zeigt die Auswirkung verschiedener Porenraummodelle, insofern sie durch verschiedene Exponenten der Porositäts-Permeabilitäts-Beziehung realisiert werden können. Das Anfangsniveau von Permeabilität/Porosität spielt in erster Linie bei der Frage eine Rolle, ob und in welchem Grade eine advective Mitführung der Temperatur stattfindet (Abb. 3.7).

3.1.2 Homogene Modelle: Instabile Entwicklung

Mit der zunehmenden Ausscheidung von Mineralien – durch welchen Mechanismus auch immer – nimmt die Porosität und damit auch die Permeabilität ab. Das Intervall der Porosität durch Ausscheidung von Quarz kann nach Wood and Hewett [1982] entlang einer Stromlinie s als:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{\rho_f}{\rho_s} \cdot \left[\underbrace{\vec{v} \frac{\partial C}{\partial s}}_{\text{Advektion}} + \underbrace{\nabla \cdot (\mathcal{D} \cdot \nabla C)}_{\text{Diffusion}} \right] \quad (3.6)$$

ausgedrückt werden.

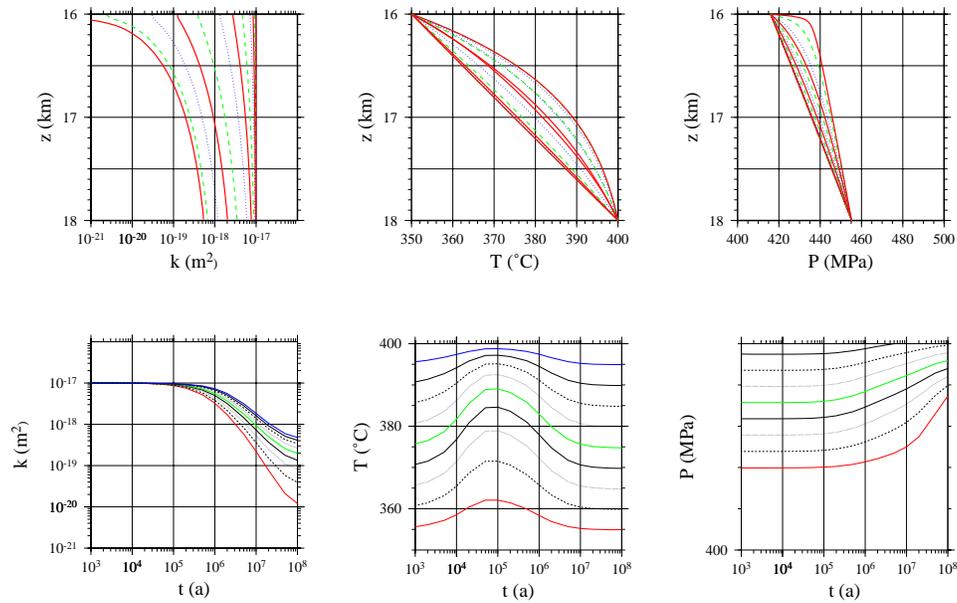
Die Entwicklung der Porosität kann im einfachsten Fall leicht analytisch abgeschätzt werden [Lichtner, 1985]. Ausgehend von einem Potenzgesetz der Form

$$\frac{K}{K_0} = \frac{\phi}{\phi_0}^\gamma \quad (3.7)$$

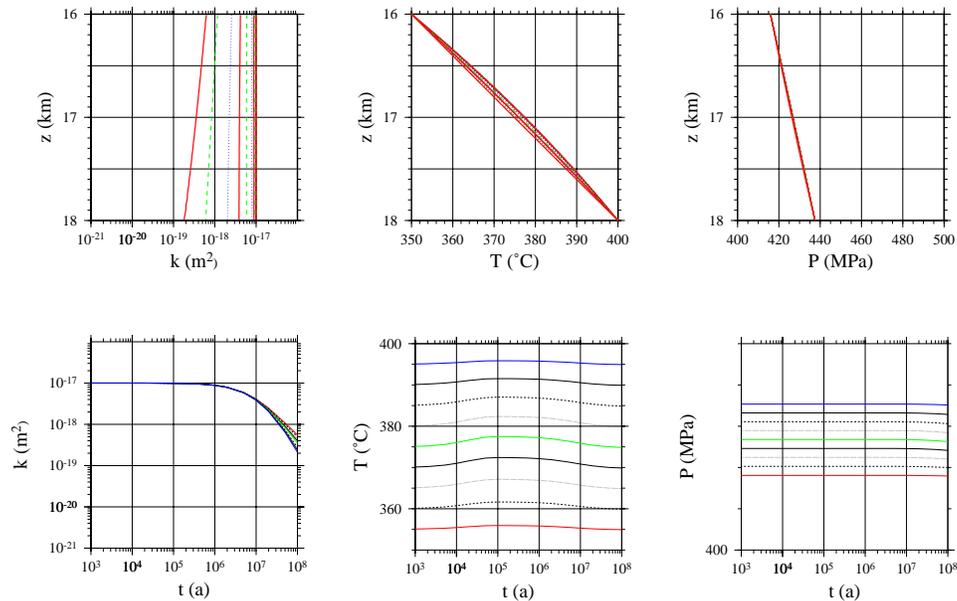
kann Gleichung 3.6 in eine Differentialgleichung für die Porositäts- oder Permeabilitätsentwicklung umgeschrieben werden, welche durch Variablentrennung und direkte Integration gelöst werden kann:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = a \phi^\gamma \quad (3.8)$$

Es ergeben sich die entsprechenden Lösungen:



(a) Oben: Räumliche Verteilung von Permeabilität, Temperatur und Druck zu verschiedenen Zeitpunkten der Entwicklung. In dieser Simulation wurde ein Druckgradient $\nabla P \approx 2\nabla P_{hyd}$ angenommen. Wie man leicht erkennen kann, wird die Temperatur zunächst mitgeführt, so daß wegen der festgehaltenen Temperaturen und Drücke an der oberen Modellbegrenzung eine niedrigerpermeable Schicht entsteht. Dies führt dann zu einem stationären Zustand, der durch eine Grenzschicht mit extrem hohem Druckgradienten und einen hydrostatischen Gradienten im Rest des Systems gekennzeichnet ist. Unten: Zeitliche Entwicklung der gleichen Größen in verschiedenen Tiefen zwischen 16.2 und 17.8 km .



(b) In diesem analogen Modell wurde ein wesentlich geringerer treibender Druckgradient von $\approx 10\%$ des hydrostatischen Werts angenommen. Dies Bild entspricht weit eher der aus der vertikalen temperaturbedingten Zunahme des Löslichkeitsgradienten zu erwartenden Verteilung.

Abbildung 3.3: Beispiel eines Modellierungsergebnisses für ein Modell des in Abb. 3.2 erläuterten Typs. In diesem und allen folgenden Darstellungen dieses Typs entsprechen in den Tiefenverteilungen die roten hervorgehobenen Linien den vollen Dekaden, wobei der längste Simulationszeitraum 10⁸ a ist wenn dies nicht besonders angegeben ist. In den darunter gezeigten Zeitreihen sind Variablenwerte in verschiedenen Tiefen zwischen 16.2 und 17.8 km zu sehen.

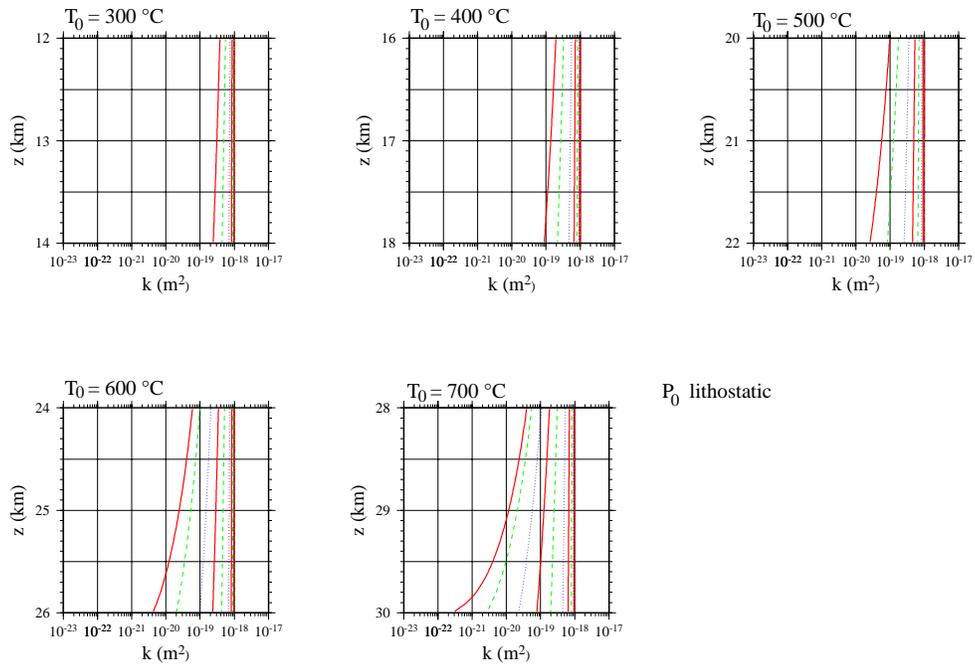


Abbildung 3.5: Einfluß der Tiefe auf das zeitliches Verhalten der Porosität und Permeabilität. Hier wird in der Hauptsache der mit der Temperatur steigende Löslichkeitsgradient deutlich. Die Temperaturangaben beziehen sich auf die Modelloberkante.

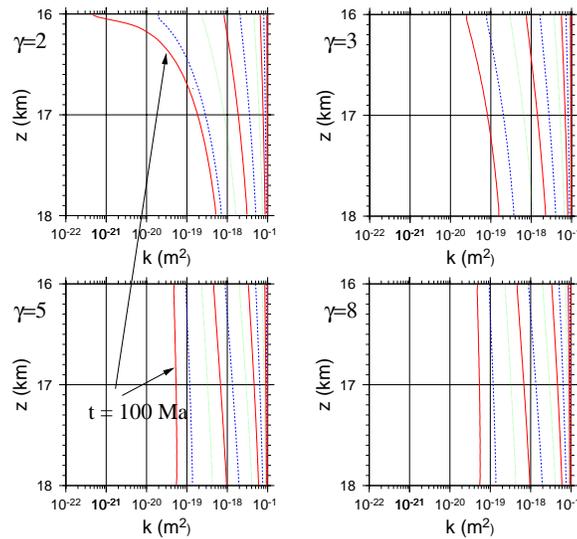


Abbildung 3.6: Einfluß des Exponenten γ der $\phi - k$ -Relation (vgl. Abschn. 2.5.3).

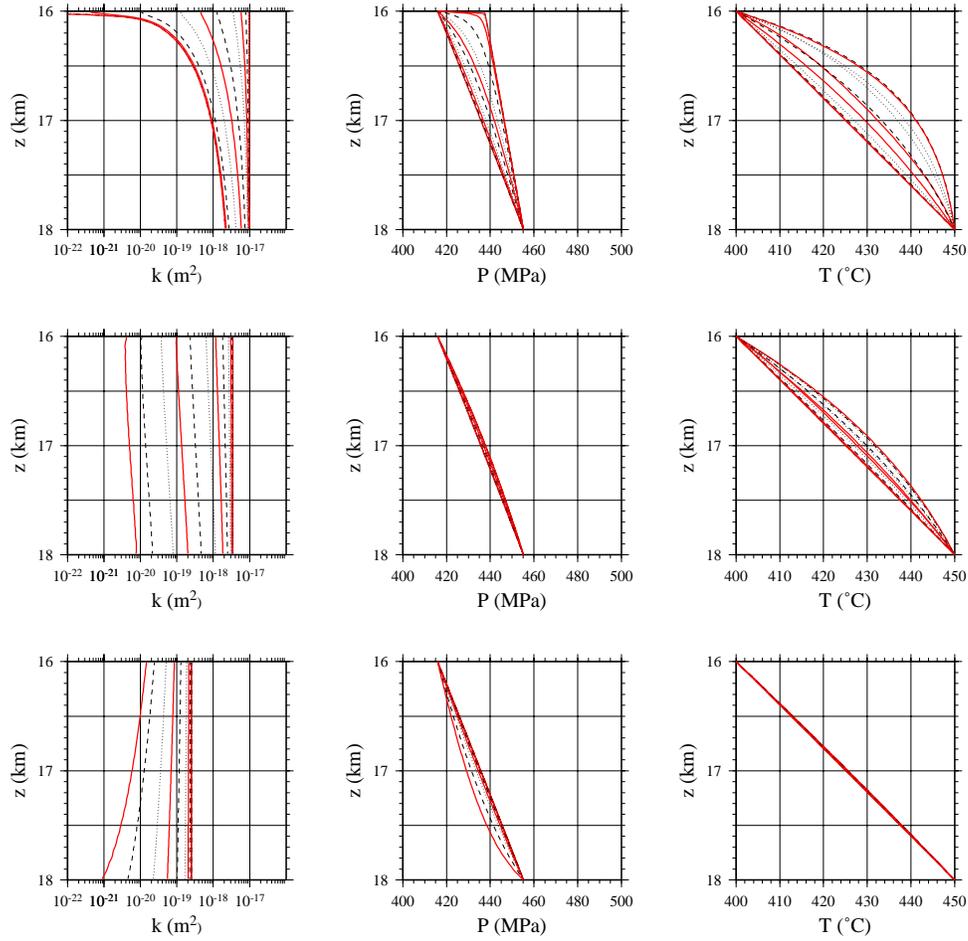


Abbildung 3.7: Einfluß des Anfangsniveaus auf das zeitliche Verhalten der Permeabilität. Dargestellt sind jeweils Permeabilität, Druck und Temperatur. Permeabilitäten $> 10^{-17} \text{m}^2$ (oben) führen zu Profilen, die durch die Temperaturadvektion und Randbedingungen dominiert sind.

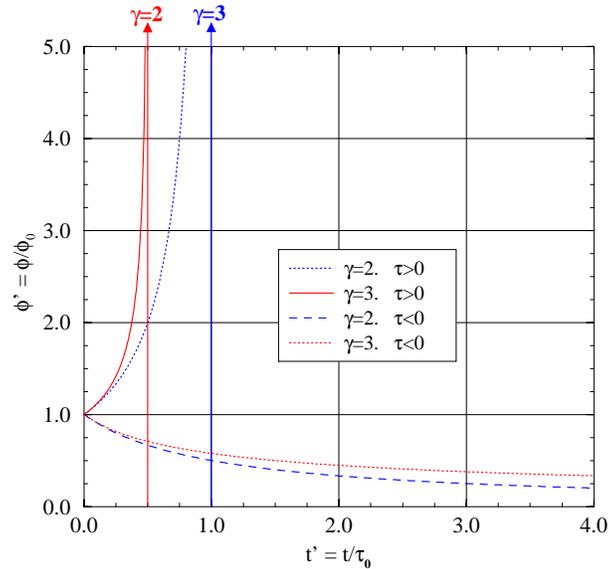


Abbildung 3.8: Zeitliches Verhalten der Porosität und Permeabilität bei fortschreitender Lösung/Ausscheidung nach Lichtner [1985]. Zu sehen ist der Effekt 'prograder' bzw. 'retrograder' Löslichkeit auf die Porositätsentwicklung. Ist $\tau_0 < 0$ so findet eine langsame Reduktion der Porosität statt. Der Verlauf für $\gamma = 2, 3$ ist in der unteren Bildhälfte zu erkennen. Ist $\nabla_s C$ in Flußrichtung positiv, besteht eine positive Rückkopplung, welche zu einer Instabilität führt [Phillips, 1991]. Die singulären Stellen bei $t = \tau_0$ ($\gamma = 2$) und $t = \frac{1}{2}\tau_0$ ($\gamma = 3$) sind durch die entsprechenden Pfeile gekennzeichnet.

$$\phi(t) = \begin{cases} \phi_0 \cdot e^{-\frac{t}{\tau_0}} & \gamma = 1 \\ \phi_0 \cdot \left[1 - (\gamma - 1) \frac{t}{\tau_0}\right]^{-\frac{1}{\gamma-1}} & \gamma > 1 \end{cases} \quad (3.9)$$

Abb. 3.8 zeigt die von Lichtner [1985] gegebenen Lösungen für $\phi(t)$ und $K(t)$, skaliert durch die charakteristische Zeit τ_0 :

$$\tau_0 - 1 = \frac{v_0 \rho_f}{\phi_0 \rho_s} \cdot \nabla_s C \quad (3.10)$$

wobei $\nabla_s C$ den Gradienten von C entlang des Weges s darstellt. Obwohl diese analytische Lösung sehr vereinfacht ist, kann sie zur Schätzung der zeitlichen Größenordnung der Effekte dienen.

Hier ist eine entscheidende Beobachtung zu machen: ist τ_0 positiv, d. h. die Stofflösung überwiegt, so haben die Lösungen (mit $\gamma > 1$) eine Singularität. Wie in der Darstellung 3.8 zu erkennen ist, wächst in diesem Falle die Porosität und demzufolge die Permeabilität im Bereich $t \approx \frac{\tau}{\gamma-1}$ über alle Grenzen.

Eine numerische Simulation einer vergleichbaren Modellstruktur ist in Abb. 3.9 zu sehen. Im Gegensatz zur Darstellung in 3.8 ist hier jedoch die Permeabilität aufgetragen. Die Zeitskala ist logarithmisch gewählt. Im Gegensatz zur oben genannten analytischen Lösung ist jedoch die Verteilung nach kurzer Zeit nicht mehr homogen und der Druckgradient (ursprünglich $\approx 2 \cdot \nabla P_{hyd}$) nicht konstant, so daß sich für verschiedene Tiefen verschiedene τ_0 und damit eine unterschiedliche Lage der Singularitätsstellen ergeben. Diese räumliche Differenzierung führt tatsächlich zu einer reduzierten Änderung der Permeabilität mit der Zeit, so daß die Gesamtentwicklung deutlich milder verläuft, als man nach den analytischen Lösungen erwarten könnte. Dies kann leicht an den wesentlich geringeren Änderungen in den tiefer liegenden Bereichen verifiziert werden. Im Extremfall kann dieser Effekt sogar zu einer Inversion des Verhaltens – eine geringfügige Reduktion der Porosität – durch nahezu isothermale Bedingungen bei hohem Druckgradienten kommen. Mit den genannten Werten und charakteristischen

Geschwindigkeiten von 0.5 m/a ergibt sich für die analytische Lösung ein τ_0 von mehr als 10^5 a – durchaus vergleichbar mit den hier vorgestellten Resultaten.

Im stabilen Fall der Ausscheidung ist ebenfalls eine Abweichung vom analytisch vorhergesagten Verhalten zu beobachten. Bei vermuteten Exponenten $\gamma < 3$ kann man mit einer Reduktion der Permeabilität um den Faktor 10 in der Zeit 2τ ausgehen, der Faktor 100 wird bei $10\tau_0$ erreicht. Tatsächlich wird jedoch die hierdurch bedingte Versiegelung der globalen Fließwege in fast allen Bereichen einer ursprünglich homogenen Zone zu bedeutend geringeren Veränderungen führen.

Die Umverteilung eines Minerals mit vorwiegend prograder Löslichkeit, wie sie in den eindimensionalen Simulationen von Abb. 3.9 und 3.10 vorgestellt wurde, weist insbesondere im Multidimensionalen einige bemerkenswerte Eigenschaften auf:

- Man betrachte zunächst den in der Kruste quasi normalen Fall, der dadurch charakterisiert ist, daß die beteiligte Lösung *gegen* einen Temperaturgradienten fließt. Hier nimmt die Löslichkeit entlang des Weges ab, und Quarz wird deponiert. Die Porosität nimmt ab, und damit auch die Advektion von gelöstem Stoff. Es handelt sich also um einen Prozeß mit negativer Rückkopplung, der auf lange Sicht seine Existenzbedingungen vernichtet. Praktisch bedeutet dies eine Homogenisierung in Hinsicht auf die Porosität.
- Es ist jedoch auch der andere Fall möglich (z. B. Freie Konvektion: Kap. 3.2): in Flußrichtung nimmt die Löslichkeit zu, es kommt zu einer erhöhten Lösung von Material. Die Rückkopplung ist daher positiv, und das Resultat ist eine völlig inhomogene Verteilung der Permeabilität und der Fließwege.

Dieser zweite Effekt, der im Englischen treffend als *worm-holing* bezeichnet wird, ist vielfach in unterschiedlichen Zusammenhängen untersucht worden [um nur einige zu nennen: Phillips, 1976, Békri et al., 1995, Aharonov et al., 1995, 1997b]. Er stellt häufig ein Problem für die numerische Modellierung derartiger Prozesse dar: die sich erhöhende Permeabilität reduziert die mögliche Länge der Zeitschritte derart, daß sich das Langzeitverhalten nicht effizient untersuchen läßt. Auch bei vielen der in dieser Arbeit gezeigten Modelle ist dies der Fall.

Die Bedeutung des Charakters der Rückkopplung illustrieren die im folgenden beschriebenen – wegen der Druckrandbedingungen sicher nicht realistischen – Simulationsrechnungen: Für diese Modellreihe wurden zunächst zufällige Verteilungen der Porosität (üblicherweise normalverteilt) auf einem regelmäßigen Gitter mit 36×36 Elementen generiert. Um eine gewisse Signifikanz der Modellierung zu gewährleisten, wurden diese Werte durch die mehrfache Anwendung eines räumlichen Hanning-Filters geglättet, so daß ihre Korrelationslänge in die Größenordnung von mehreren Elementdimensionen fällt. Die in den Abb. 3.11(a) und 3.11(b) gezeigten Permeabilitätsverteilungen beruhen auf einer log-normalen Verteilung um einen Basiswert $\phi_0 = 0.03$ entsprechend einem k von 10^{-17} m², wobei ein Permeabilitätsexponent γ von 3 angenommen wurde. Das Strömungsfeld wurde durch eine vertikale Druckdifferenz von 50 MPa erzeugt. Die beiden oben beschriebenen Situationen können durch die Annahme eines positiven oder negativen Temperaturunterschieds zwischen Ober- und Unterkante realisiert werden. Die entsprechenden Randwerte bei sämtlichen gezeigten Modellen waren 400 und 500 °C. Im Fall negativer Rückkopplung werden nach 20 Ma Verhältnisse erreicht, die einer fast völlig impermeablen Matrix entsprechen. Minimale Permeabilitäten ($< 10^{-20}$ m²) werden vor allem in der Nähe der Unterkante erreicht. Der entgegengesetzte Fall ist gekennzeichnet durch eine Entwicklung von rückschreitenden Kanälen hoher Permeabilität, die vor allem in den Zeitschritten ab 16 Ma auftreten (Abb. 3.12). Das Temperaturfeld ist zu späten Zeitpunkten deutlich advektiv verformt und lateral nicht mehr homogen.

Es ist jedoch unter Normalbedingungen kaum zu erwarten, daß die Permeabilität derartig schnell sinkt, daß konstante geodynamische Ursachen über geologisch lange Zeiten ($> 10^6$ a) nötig sind. Die meisten thermischen und hydrodynamischen Erscheinungen der Kruste haben Zeitskalen, welche zu kurz sind. Magmatische Intrusionen, welche immerhin sehr heftige Veränderungen des Temperaturfeldes bewirken, haben (bei Ausdehnungen von mehreren Kilometern) konduktive Abkühlungszeiten, die nur geringfügig größer sind als der angegebene Wert. Die konduktive Abkühlung einer gebe-

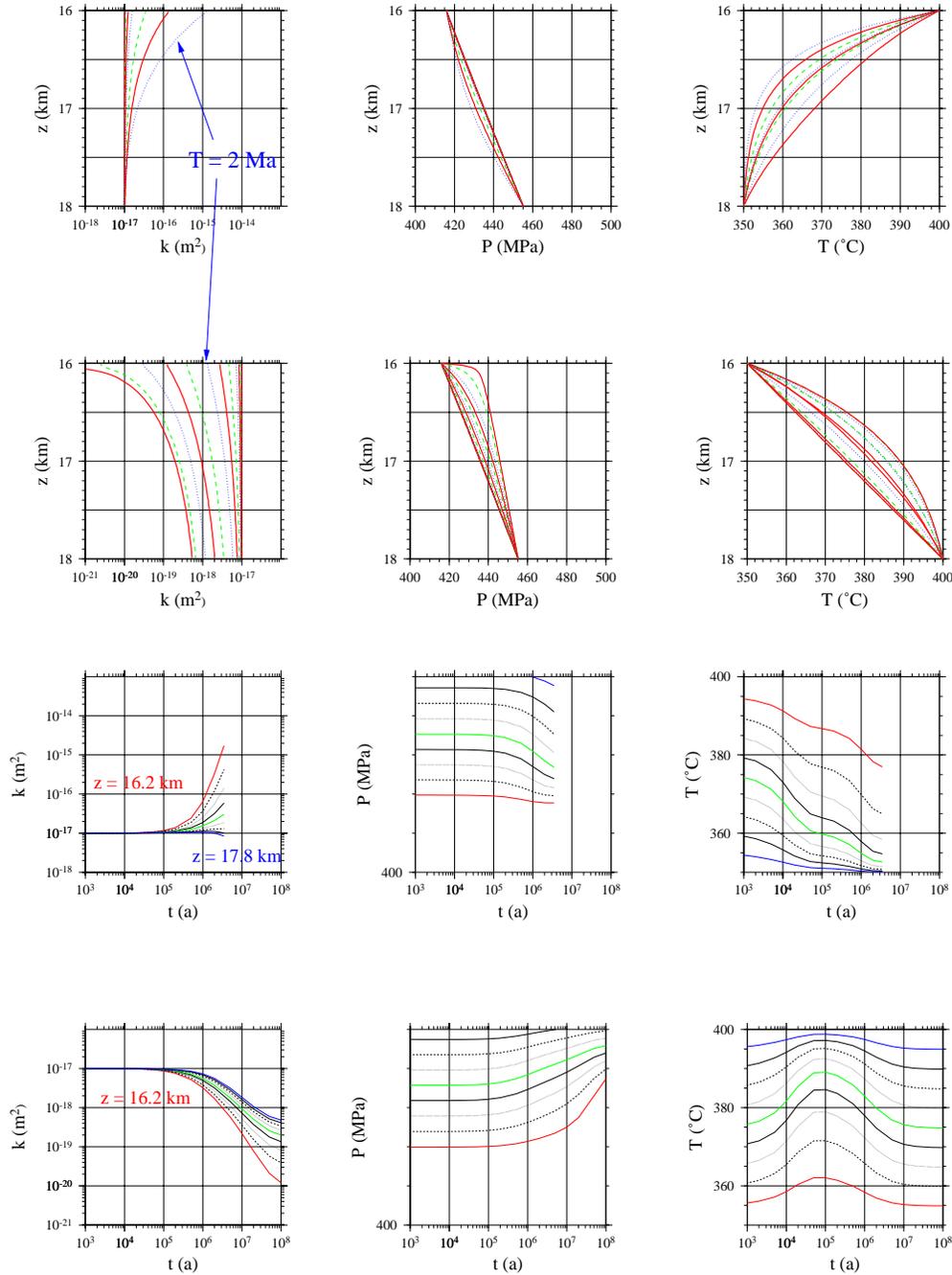


Abbildung 3.9: Zeitliches Verhalten der Permeabilität bei fortschreitender Lösung/Ausscheidung. Oben ist die Tiefenverteilung von Permeabilität, Druck und Temperatur in Abhängigkeit von der Zeit gezeigt. Die vollen Dekaden sind jeweils hervorgehoben, während die dazwischen liegenden Kurven jeweils den Faktoren 2 und 5 entsprechen. Unten ist das zeitliche Verhalten der Permeabilität in einem eindimensionalen, anfangs homogenen Modell mit $k_0 = 10^{-17} m^2$ zu sehen. Hier sind durch die unterschiedlichen Farben Tiefen kodiert. Wegen der Instabilität wurde natürlich das in den übrigen Darstellungen gewählte Zeitlimit von $100 Ma$ nicht erreicht.

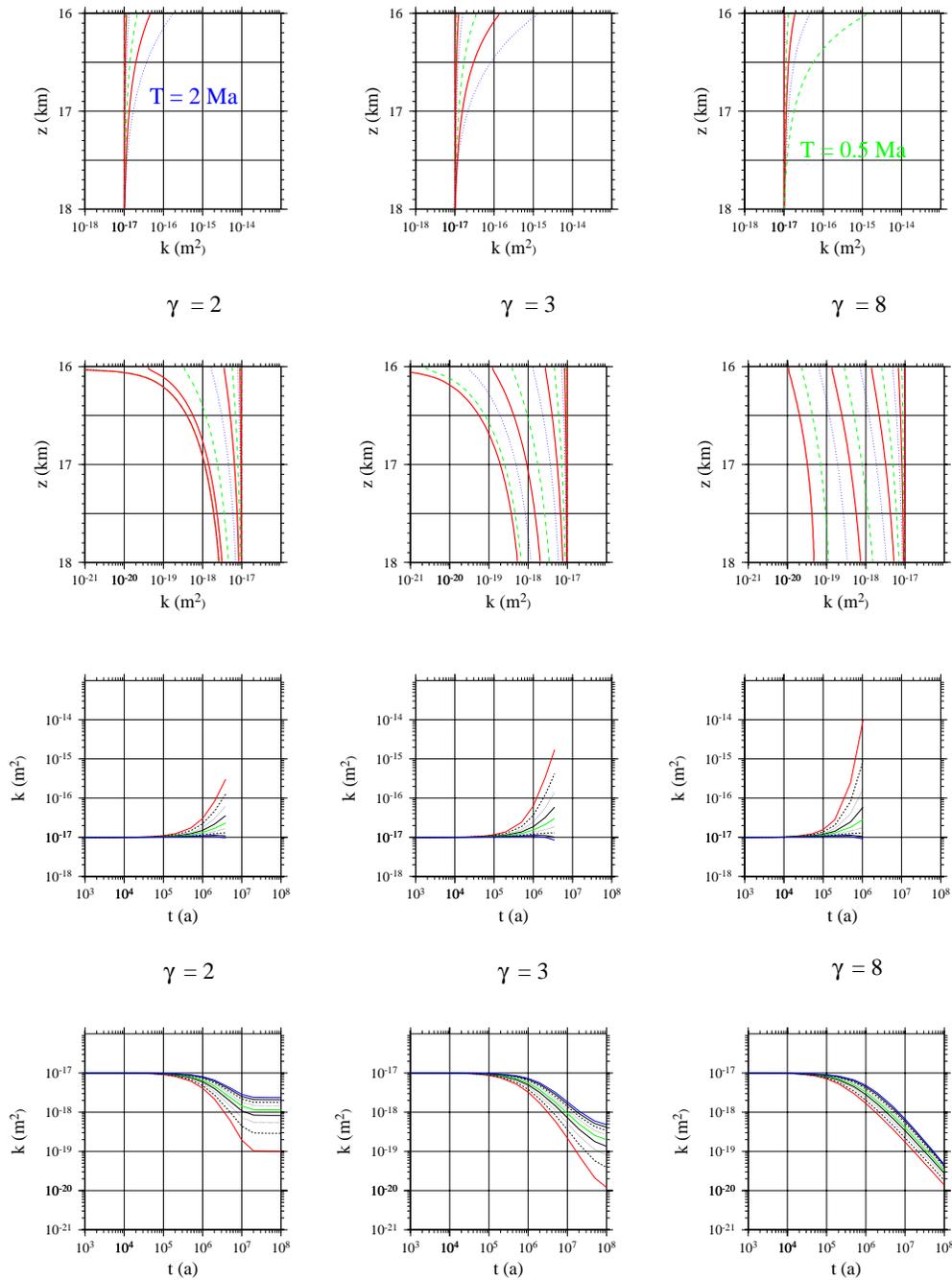
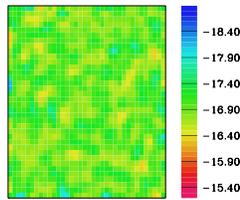
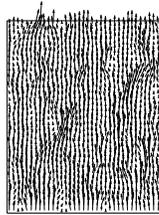
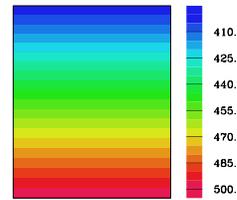
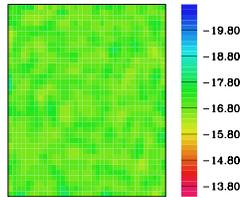
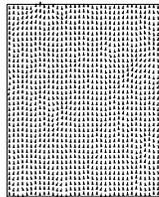
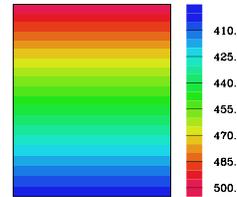


Abbildung 3.10: Verhalten der Permeabilität bei fortschreitender Lösung/Ausscheidung. Zu sehen ist ebenfalls das zeitliche Verhalten der Permeabilität in einem eindimensionalen, anfangs homogenen Modell mit $k_0 = 10^{-17} \text{ m}^2$, jedoch für verschiedene Porositäts-Permeabilitäts-Relationen ($\gamma = 2, 3, 8$). Man sieht dabei zunächst, daß sich – entsprechend der Theorie – mit steigenden Exponenten die Instabilitätsregion zu kürzeren Zeiten hin verschiebt, jedoch eine räumlich stärkere Differenzierung herausbildet.

feedback negative

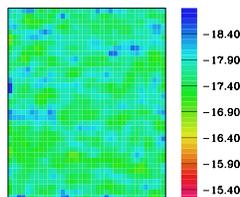
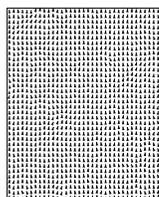
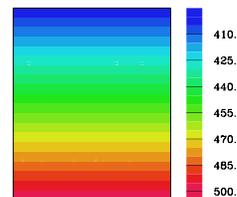
time: 0.0 a
k [m²]time: 0.0 a
→ velocity: 0.20E-09 m/stime: 0.0 a
T [C]

feedback positive

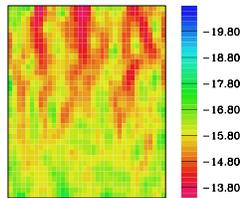
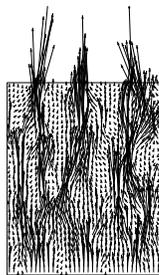
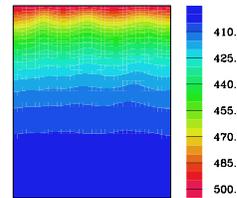
time: 0.0 a
k [m²]time: 0.0 a
→ velocity: 0.10E-08 m/stime: 0.0 a
T [C]

(a) Startbedingungen für die Simulation. In dieser und der folgenden Graphiken ist links die Permeabilität k in m^2 dargestellt. In der nächsten mittleren Graphik folgt die Darcy-Geschwindigkeit $\mathbf{q} = \phi \mathbf{v}$, die einem Massenfluß pro Flächeneinheit entspricht. Rechts ist die dazugehörige Temperaturverteilung wiedergegeben.

feedback negative

time: 0.20E+08 a
k [m²]time: 0.20E+08 a
→ velocity: 0.20E-09 m/stime: 0.20E+08 a
T [C]

feedback positive

time: 0.20E+08 a
k [m²]time: 0.20E+08 a
→ velocity: 0.10E-08 m/stime: 0.20E+08 a
T [C]

(b) Ergebnis der Simulation nach 20 Ma. Zu beachten sind die gegenüber Abb. 3.11(a) veränderten Skalen (Faktor 5 in der Geschwindigkeit und mehr als 2 Dekaden in der Permeabilität). Deutlich ist die rückschreitende Bildung von Kanälen hoher Permeabilität zu erkennen.

Abbildung 3.11: Vergleich einer erzwungenen Konvektion mit positiver und negativer Rückkopplung.

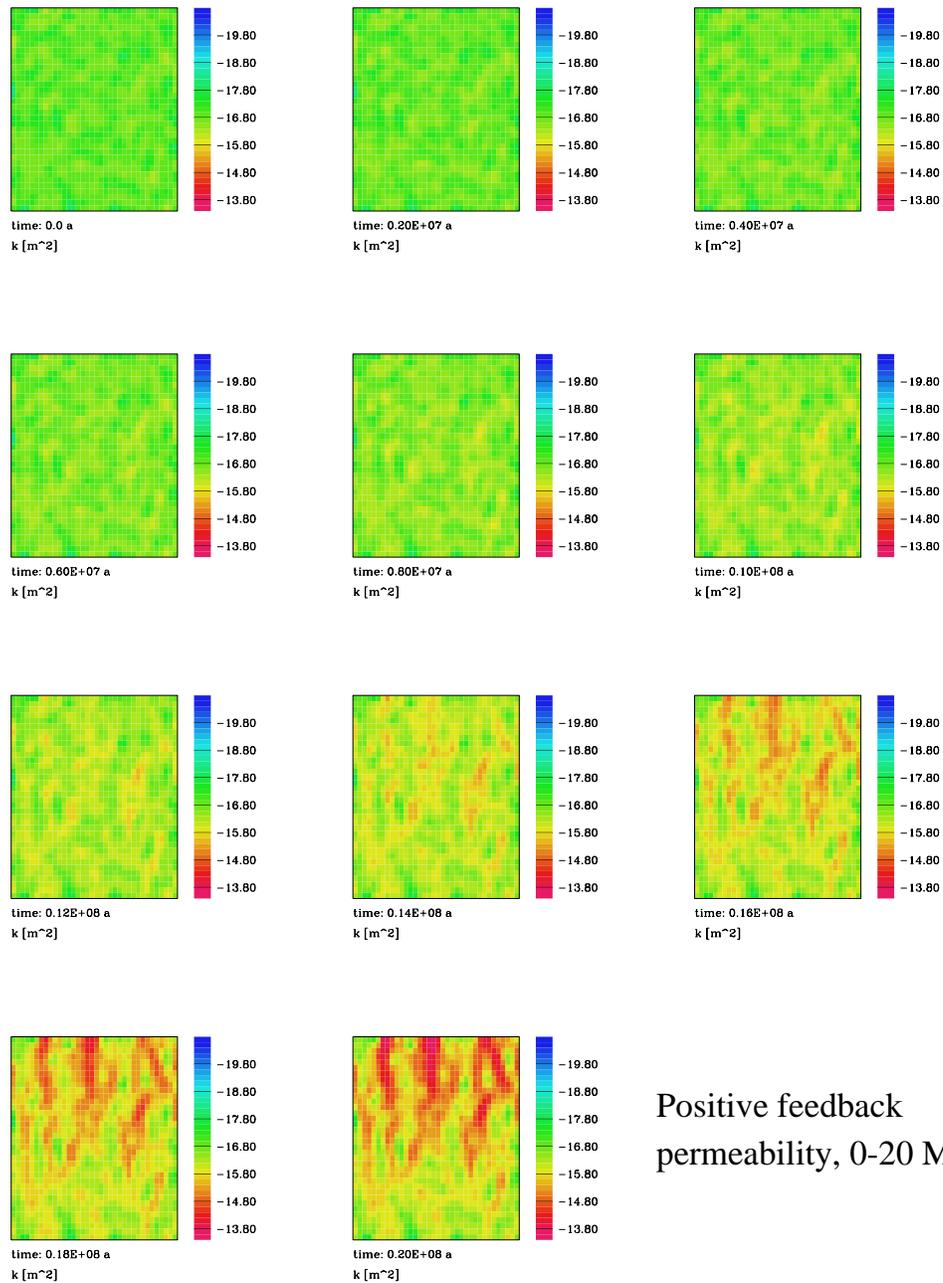


Abbildung 3.12: Rückschreitende Bildung von Kanälen hoher Permeabilität bei einer erzwungene Konvektion mit positiver Rückkopplung.

nen Struktur stellt eine obere Grenze für die mögliche Lebensdauer eines Konvektionssystems dar, da eine konvektive Zirkulation die Abkühlung nur noch beschleunigen kann (bis wenige 1000 a, [Cathles, 1990]). Die hohe Permeabilität ist hierbei auch wegen den nötigen hohen Transportraten von Bedeutung.

Wie die später gezeigten Modellrechnungen belegen, ist eine heftige Konvektion durchaus in der Lage, in verhältnismäßig kurzen Zeiten ($< 10^6$ a) die Porosität nachhaltig zu verändern. Voraussetzung sind hier Geschwindigkeiten in der Größenordnung von m/a, die lange genug aufrecht erhalten werden. Hierin besteht das wesentliche Problem: Eine Konvektion in der benötigten Größenordnung bleibt nur erhalten, wenn neben einer beachtlichen Permeabilität der Temperaturgradient erhalten bleibt. Sogar für große Strukturen ($20 \times 20 \times 20$ km) ist jedoch die Relaxationszeit nur etwa in der gleichen Größenordnung [Rybach, 1981] wie diejenige, die notwendig ist um substantielle Porositätsänderungen zu bewirken. Es müssen daher zumindest multiple Intrusionen stattfinden.

Schon die hier beschriebenen Zusammenhänge legen nahe, im Gegensatz zu den oben schon genannten Autoren [Wood and Hewett, 1982, 1984, Davis et al., 1985, Wood and Hewett, 1984, Hewett, 1986] auch die Rolle des Druckes in Betracht zu ziehen. Wie oben schon erwähnt, führt im Bereich spröder Verformung das hydraulische Aufbrechen zu hohen Druckgradienten und hohen Fluidgeschwindigkeiten in der Anfangsphase. Mit steigender Tiefe machen steigende Löslichkeitsgradienten sowie die wachsende Differenz zwischen lithostatischem und hydrostatischem Druck die Quarzausscheidung zu einem weitaus effektiveren Mechanismus.

3.1.3 Inhomogene Modelle: Schichten und Zufallsmodelle

Superhydrostatische Druckgradienten, wie sie im letzten Abschnitt angesprochen wurden, können sich nur durch das Vorhandensein von Wasserstauern erhalten oder gar herausbilden. In diesem Abschnitt werden daher zunächst einige Modelle vorgestellt, die die Entwicklung einer eingelagerten Schicht aufzeigen, um dann in einem weiteren Schritt zu Zufallsmodellen überzugehen.

Schichtmodelle

In den hier gezeigten Simulationen wurde zunächst der homogene Halbraum durch ein geschichtetes Modell ersetzt. Genauer gesagt, es wurde eine Schicht reduzierter Permeabilität eingeführt. Zum Vergleich ist in Abb. 3.13 der Effekt einer inversen Konfiguration zu sehen. Die Abbildungen zeigen jeweils im Vergleich für verschiedene Parametervariationen die Entwicklung von Permeabilität, neben Temperatur und Druck, deren Gradient für die Permeabilitätsänderungen verantwortlich ist. Dabei sind eine Reihe von Beobachtungen zu machen:

- In dieser Konfiguration findet ein intensiver Ausscheidungs- und damit praktisch nur in der vorgegebenen niedrigpermeablen Zone statt. Wie leicht durch einen Vergleich zur Druckentwicklung zu erkennen ist, beruht dies fast ausschließlich auf der Herausbildung des hohen Gradienten in der Barriere. In den Bereichen ober- und unterhalb dieser Zone herrscht ein nahezu hydrostatischer Druckgradient, allerdings auf einem von der gewählten Randbedingung bestimmten Niveau.
- Dies wird zusätzlich begünstigt durch den nichtlinearen Charakter der ϕ - \mathbf{K} -Relationen (hier: $\gamma = 3$). Gleiche Ausscheidungsmengen bewirken bei geringen Permeabilitäten größere Änderungen der Permeabilität.
- Die Temperatur wird in der Anfangsphase mittransportiert, gleicht sich jedoch mit der Herausbildung der Druckverteilung zu einem nahezu konstanten Gradienten aus. Der überwiegende Teil des Versiegelungsprozesses findet unter stationären Temperaturbedingungen statt.
- Überschreitet die Mächtigkeit der Barriere einen bestimmten Wert, so entwickelt sich eine innere Struktur in Abhängigkeit von der konvexen oder konkaven Herausbildung des Druck- oder Tem-

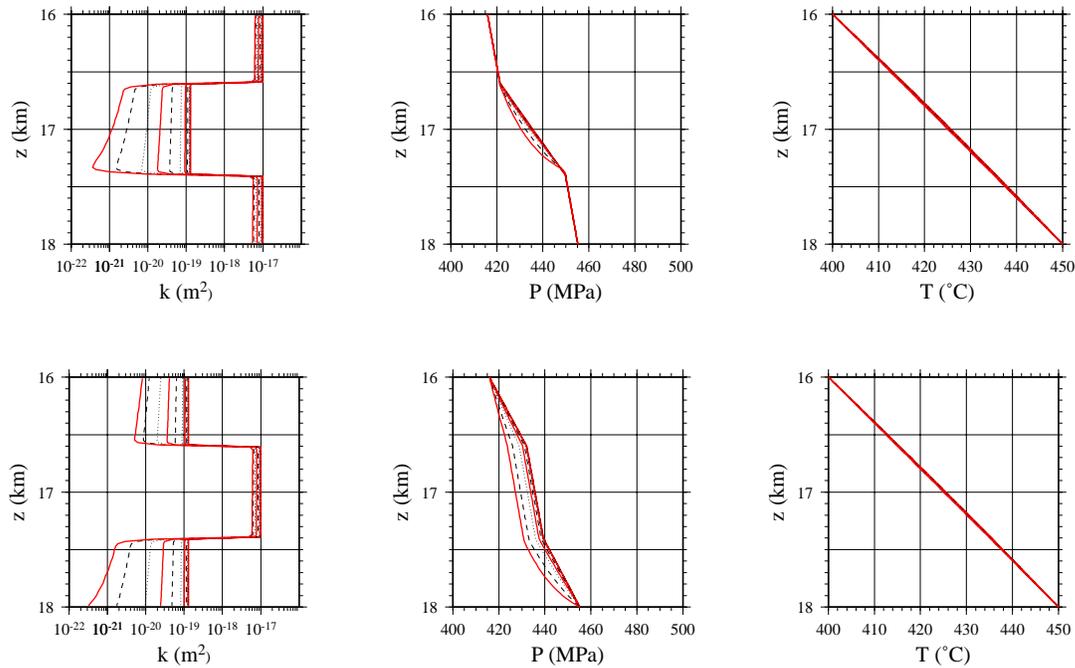


Abbildung 3.13: Wirkung einer Permeabilitätsschichtung. Zum Vergleich sind hier ein Wasserstauer mit $\approx 10^{-19} \text{ m}^2$ in einer Hintergrundpermeabilität von $\approx 10^{-17} \text{ m}^2$, sowie eine inverse Konfiguration dargestellt. Es bestätigt sich, daß die wesentlichen Änderungen an den Druck gebunden sind. Hier, wie in den folgenden Abb. wurde jeweils ein Simulationszeitraum vom 100 Ma zu Grunde gelegt, wobei die vollen Dekaden jeweils rot dargestellt sind.

peraturprofilen. Beide Effekte können je nach Flußrate in einem Konkurrenzverhältnis stehen. Beispiele hierfür sind in den Abb. 3.15 bis 3.18 gegeben. Die Fluidgeschwindigkeit wiederum hängt von der Anfangspermeabilität und dem Druckgradienten. (Abb. 3.15 und 3.16) oder mittelbar vom Porenraummodell (Abb. 3.17 oder 3.18) ab. Auch hier wird die entscheidende Rolle des Drucks deutlich.

- In den hier erwähnten Darstellungen wurde ein Zeitraum von 100 Ma simuliert. Legt man den oben willkürlich festgelegten Zeitraum von 10 Ma zu Grunde, stellt man fest, daß zwar Zeiten $< 1 \text{ Ma}$ ausreichen, um außerhalb der Barriere selbst quasi-hydrostatische Verhältnisse herzustellen, jedoch nach 10 Ma erst eine Reduktion der Permeabilität um einen Faktor von etwa 100 erfolgt ist. Die für eine Signifikanz notwendige Systemdimension sollte daher krustaler Größenordnung sein ($> 10 \text{ km}$).

Die im letzten Abschnitt skizzierte Tendenz, aufgrund der entstehenden großen Druckgradienten selbstverstärkend dünne Schichten erniedrigter Permeabilität hervorzubringen, legt nahe, Zufallsverteilungen der Permeabilität zu untersuchen. Die Generierung derartiger Modelle birgt seine eigenen Probleme. Die Permeabilität wird wegen der großen Variation und der charakteristischen Abhängigkeit nicht selbst als Zufallsvariable erzeugt, sondern die Porosität. Dabei wird eine Normalverteilung $\mathcal{N}(\phi_0, \sigma_\phi)$ angenommen, die zu einem zunächst unkorrelierten ein- oder zweidimensionalen Feld führt. Eine räumliche Korrelation wird hier einfach durch die Anwendung einer (mehrfachen) anisotropen Glättung (Hanning-Fenster) produziert, obwohl quantitativere geostatistische Simulationsverfahren möglich sind [Bellin and Rubin, 1996, Deutsch and Journel, 1998]. Da es jedoch hier nicht um die Reproduktion eines bestimmten statistischen Verhaltens geht, sondern um die Demonstration einiger prinzipieller Effekte, wurde der einfachsten Methode der Vorzug gegeben.

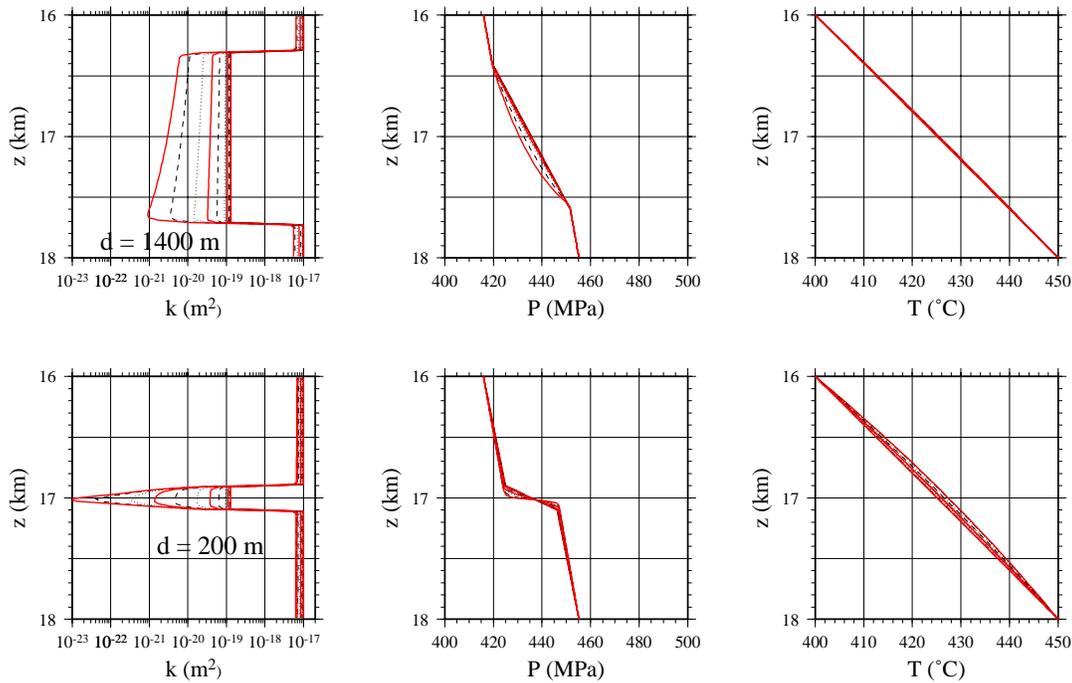


Abbildung 3.14: Wirkung einer Variation der Mächtigkeit. Zum Vergleich sind hier niedrigpermeable Schichten verschiedener Dicke dargestellt, die zu späten Zeiten und ab einer gewissen Mächtigkeit interne Struktur entwickeln.

In Abb. 3.19 sind drei verschiedene Realisationen eines solchen Zufallsmodells dargestellt. Sie beruhen auf einer Basisporosität ϕ_0 von 0.02 und einer Standardabweichung von 0.015. Die Verteilung der Permeabilität ergibt sich durch die Fixierung von $k_0 = 10^{-17} \text{ m}^2$ bei ϕ_0 . Bei gleichem aufgeprägten Druckgradienten ($f_P = 2$) ergeben alle drei einen im wesentlichen ungestörten Temperaturverlauf. Es sind hier drei Zeitpunkte ($t = 10^4, 10^6, 10^8 \text{ a}$) ausgewählt. Schon bei 10000 a wird ein erkennbarer Anteil des Druckabfalls an den niedrigpermeablen Zonen bewirkt. Dieser Effekt ist bis zu einem gewissen Grade selbstverstärkend, da der erhöhte Druckgradient verstärkte Ausscheidung bewirkt. Nach längerer Zeit entstehen so zwei Zonen von nahezu hydrostatischem Gradienten, die durch eine Zone getrennt sind, wo der Gradient weit jenseits des hydrostatischen liegt. Wie man an den drei gezeigten Realisationen des Zufallsmodells leicht erkennt, entsteht im Bereich der geringsten Permeabilität eine erste Stufe im Druck, die sich auf Grund der Druckabhängigkeit immer weiter aufbaut, bis der superhydrostatische Anteil des Druckabfalls an einer Stelle konzentriert ist, und der Vorgang selber – ähnlich wie in den oben (Abb. 3.3) gezeigten Zeitreihen für die homogenen Modelle – wegen der immer geringeren Fluidbewegungen zum Stillstand kommt. Die Lage dieser Zone ist jedoch von der zufälligen Anfangsverteilung abhängig. Nach 10 Ma ist die Permeabilität um mehrere Größenordnungen reduziert. In der hier gewählten Konfiguration ist die ursprüngliche Temperaturverteilung kaum gestört, so daß der sich herausbildende Druckgradient als vorrangiger Wirkfaktor angesehen werden muß. Es muß hier darauf hingewiesen werden, daß es bei Annahme einer derartig einfachen Vertikalverteilung der physikalischen Eigenschaften fast unmöglich ist, mehr als eine relevante Barriere zu erzeugen.

Kann dieser Mechanismus, der hier in einem verhältnismäßig kleinen Bereich wirkte, auch in der Kruste als ganzes eine Rolle spielen? Die in den Abbildungen (3.20 und 3.21) gezeigten Beispiele unterscheiden sich von den vorherigen durch ihre Dimension: Die vertikale Ausdehnung ist hier auf 20 km erhöht worden. Die Druck- und Temperaturverhältnisse entsprechen einer Tiefenlage der Oberkante von 4 km. Dieser auf den ersten Blick willkürlichen Struktur liegt die Vorstellung zugrunde, daß im hier untersuchten Zusammenhang Prozesse im Kristallin interessieren, welches von Sedimenten geringer Mächtigkeit abgedeckt ist. Die sich dort abspielenden Prozesse sollen hier keine Rolle spie-

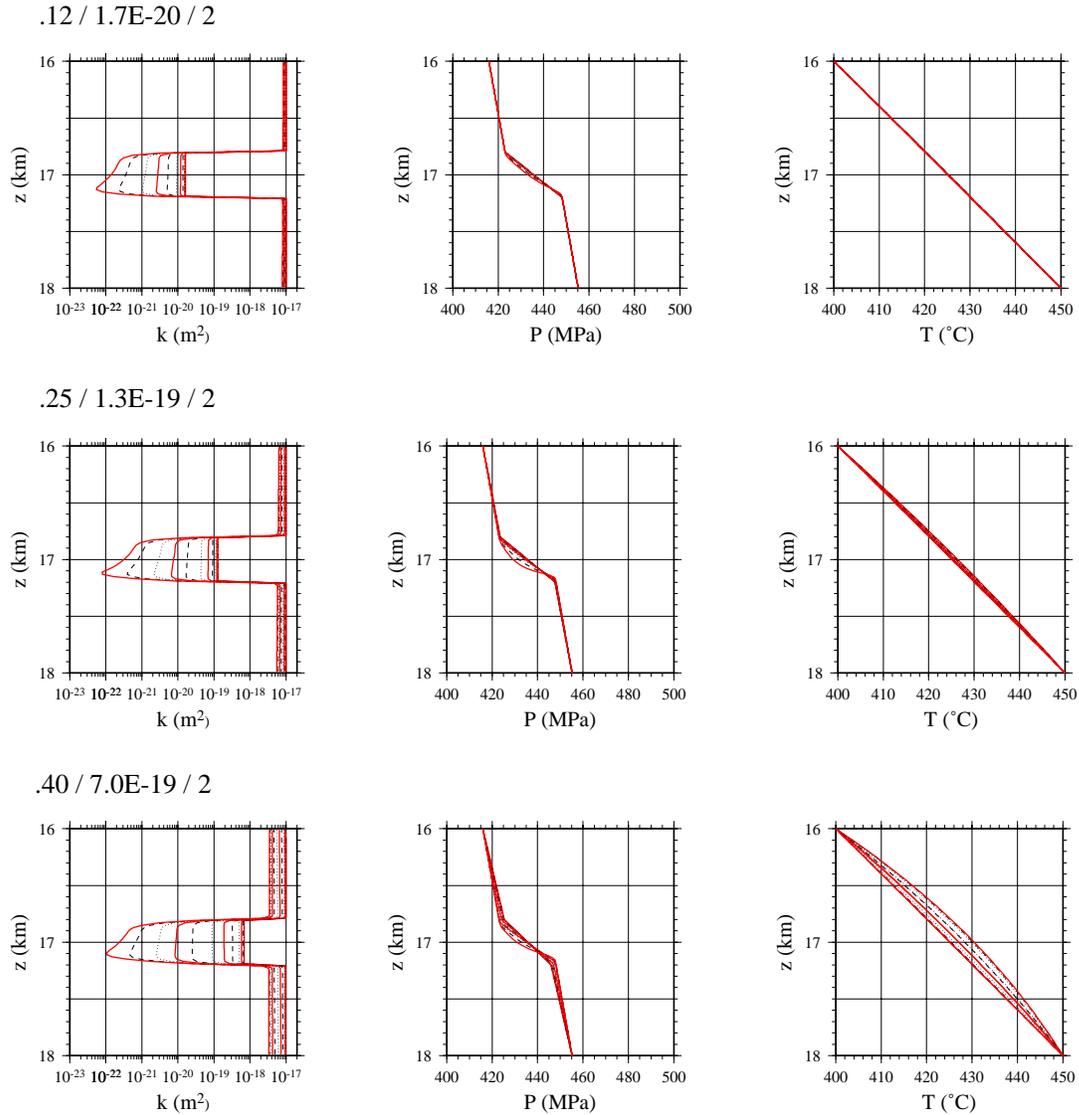


Abbildung 3.15: Wirkung der Ausgangspermeabilität. In dieser Graphik läßt sich die Konkurrenz von Druck- und Temperatureffekt ablesen. Der treibende Druckgradient ist hier konstant $2 \cdot \nabla P_{hyd}$ gesetzt. Die beiden oberen Zeilen sind durch das Druckgefälle dominiert, welches mit steigender Permeabilität ($.017$ bis $0.7 \cdot 10^{-18} \text{m}^2$) zunächst zu einer Verstärkung des Flusses und somit zu einer Erhöhung der Ausscheidung führt. Übersteigt die Betrachtungen einen gewissen Wert, wird die Temperatur mitgeführt, so daß ein konkaves Temperaturprofil entsteht. Der erhöhte Gradient an der Oberkante der Barriere wirkt dem Druckeffekt entgegen. Porositäten und die dazugehörigen Permeabilitäten sind jeweils unterhalb der Spalten angegeben.

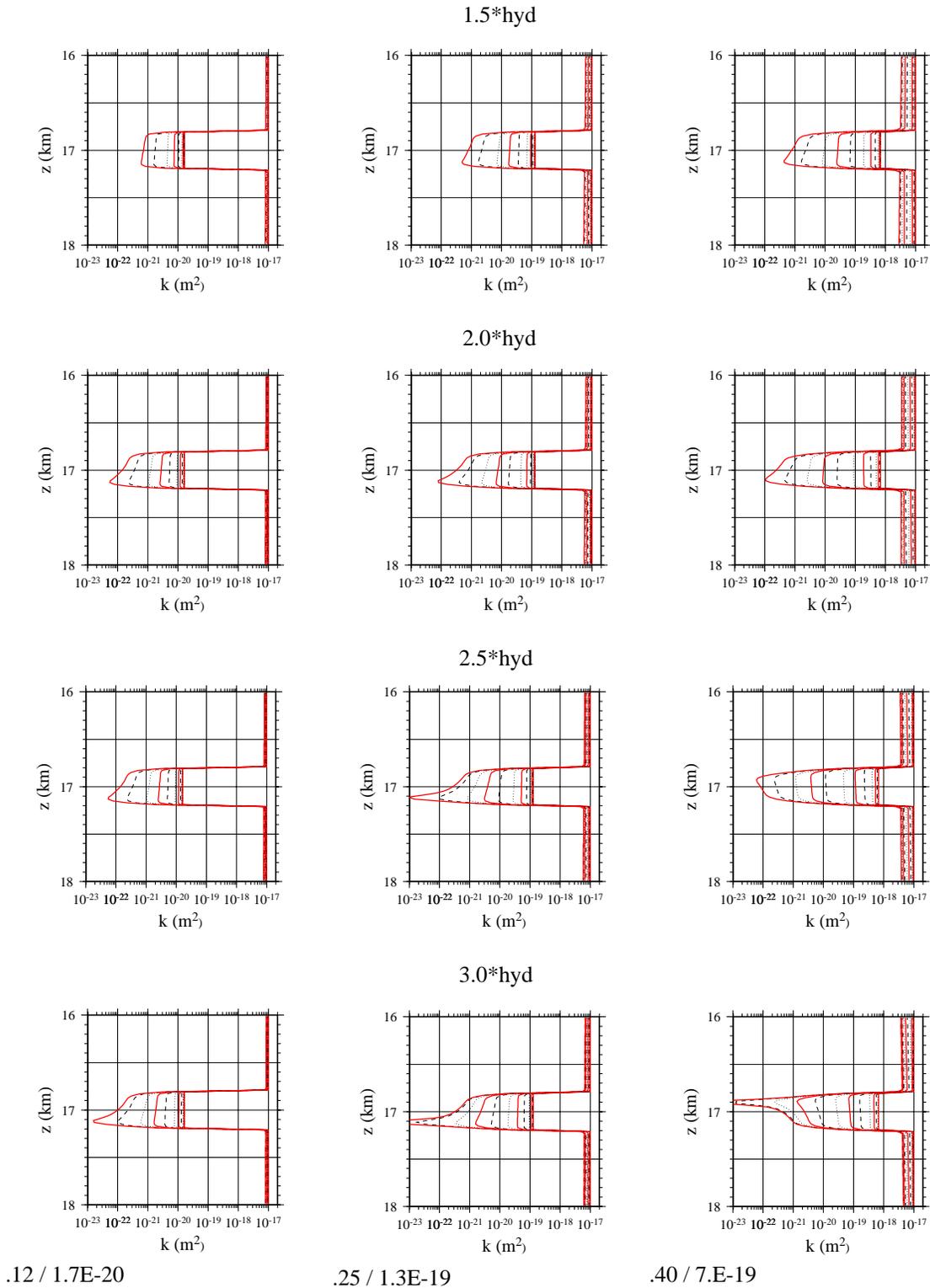


Abbildung 3.16: Wirkung der Ausgangspermeabilität. In dieser Versuchsreihe wurde horizontal die Anfangspermeabilität der Barriere zwischen $.017$ und $0.7 \cdot 10^{-18} \text{ m}^2$ variiert, während die verschiedenen Zeilen steigenden Druckgradienten von 1.1 bis $3 \cdot \nabla P_{hyd}$ (jeweils unterhalb der Zeile gekennzeichnet) entsprechen. Der in Abb. 3.15 beschriebene Effekt wirkt sich hier bei den hohen Druckgradienten bis hin zu einem inversen Verhalten aus: Die minimale Permeabilität wird so an der Oberkante erreicht.

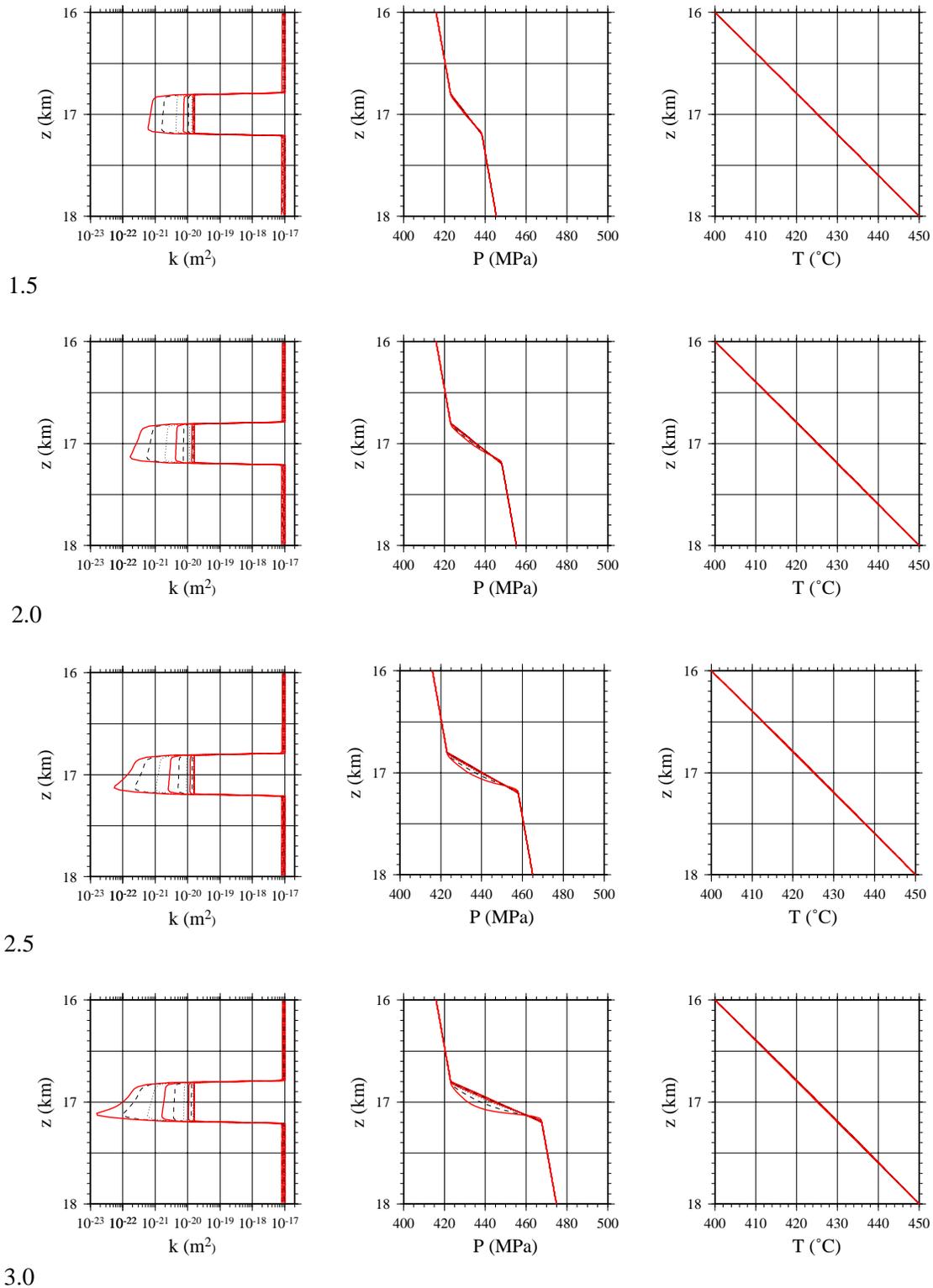


Abbildung 3.17: Verhalten für den Exponenten $\gamma = 3$ (Risse). Vertikal variiert der Druckgradient ähnlich wie in Abb. 3.16.

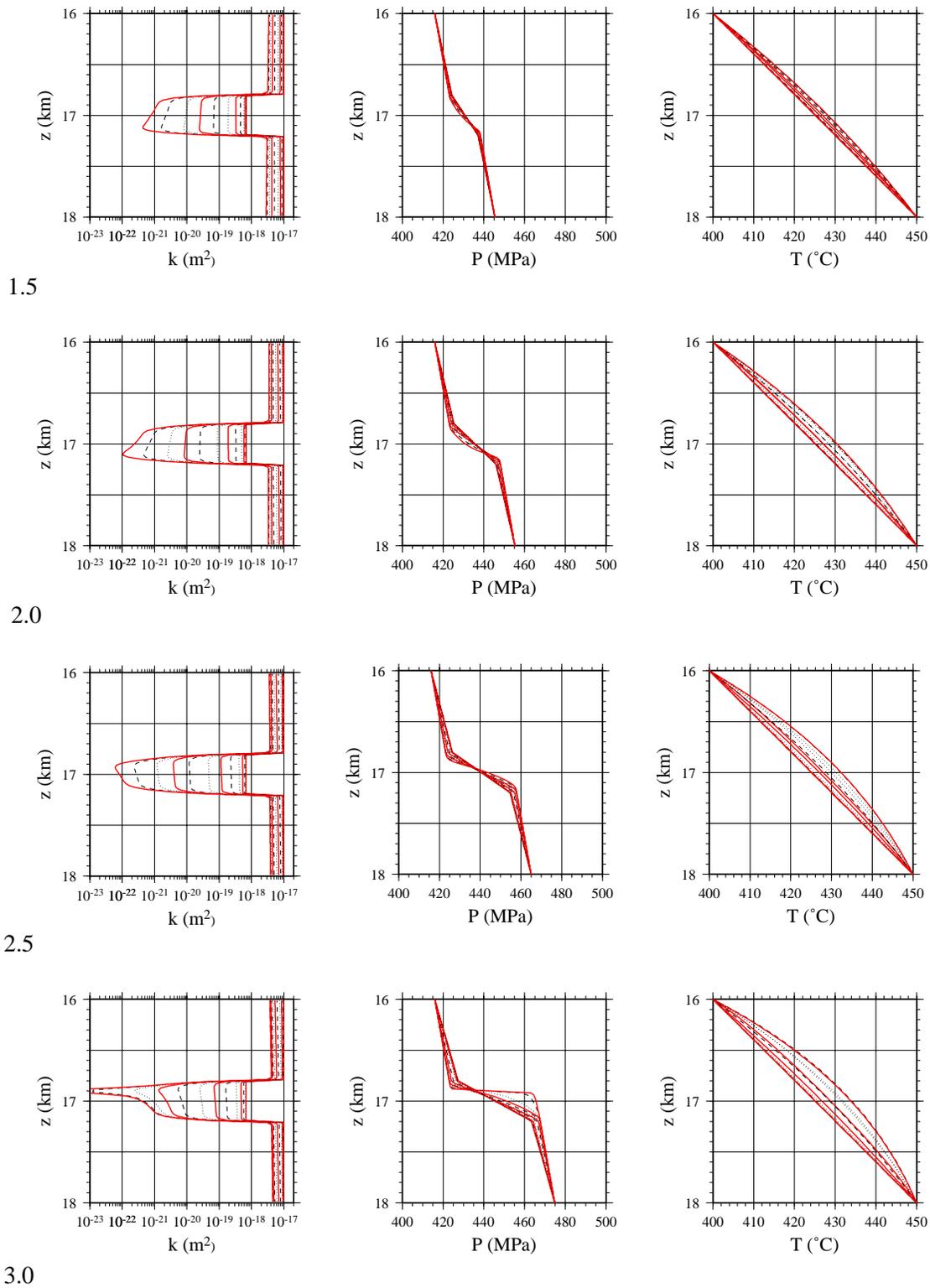


Abbildung 3.18: Verhalten für den Exponenten $\gamma = 8$. Im Unterschied zu einer Rißgeometrie überwiegt der Temperatureffekt (vgl. Abb. 3.17). Auch in dieser Darstellung variiert vertikal der Druckgradient (Abb. 3.16).

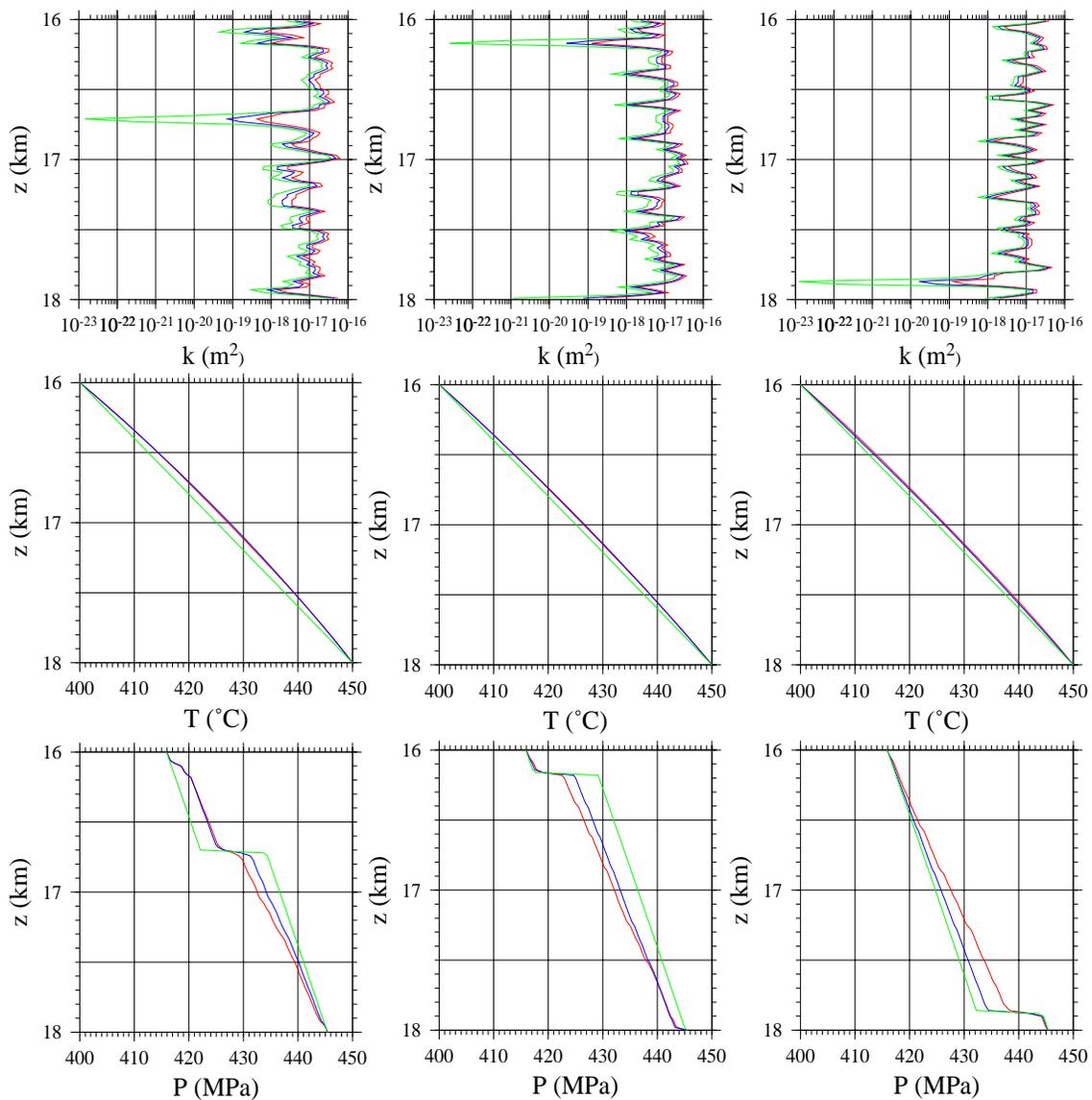


Abbildung 3.19: Drei Realisierungen einer Zufallsverteilung der Porosität. Die Permeabilität wurde bei allen nach dem kubischen Zusammenhang ($\gamma = 3$, Risse) berechnet. Die dargestellten Kurven entsprechen den Zeitpunkten $t = 10^4, 10^6, 10^8$ a. Das Temperaturprofil ist nur unwesentlich gestört. Dies weist auf die entscheidende Rolle des Drucks hin.

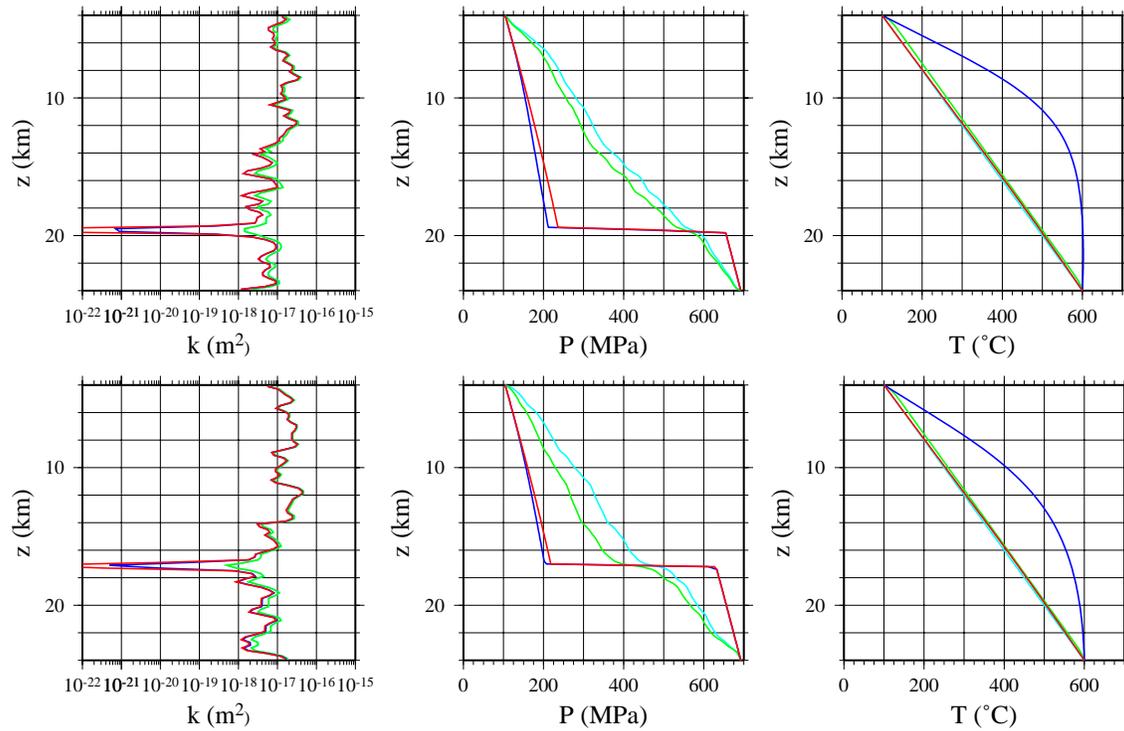


Abbildung 3.20: Zufallsverteilungen der Porosität in Krustendimension. Die quasi lithostatisch angesetzte treibende Druckdifferenz fällt jeweils an den Minima der Permeabilität ab. Hier entsteht auf einem Bereich von weniger als 1 km ein extrem hoher Gradient. In der Praxis ist es fraglich, ob eine Gesteinsmatrix diesen Porendrucküberschuß von > 200 MPa aushalten könnte.

len. Wesentlich in diesem Modell ist allerdings die Annahme hydrostatischer Verhältnisse an diesem Modellrand. In der Tiefe wird ein lithostatischer Druck (basierend auf einer Durchschnittsdichte von 3000 kg/m^3) angesetzt. Somit steht im Vergleich zu den vorherigen Modellierungen eine beträchtlich höhere Druckdifferenz zur Verfügung. Die Permeabilität unterscheidet sich in der oberen und unteren Modellhälfte durch eine Verschiebung des Basisniveaus der Porosität um eine Standardabweichung nach oben oder unten. Dies führt wegen des leicht erhöhten Druckgradienten zu einer erhöhten Wahrscheinlichkeit für die Herausbildung einer Barriere im unteren Modellteil.

Das in Abb. 3.20 dargestellte Ergebnis für zwei Realisationen zeigt – wie zu erwarten – den gleichen Effekt wie in den vorhergegangenen Modelle, nämlich eine zufällig entstandene Barriere, die nach verhältnismäßig kurzen Zeiten zu extremen Druckgradienten führt. Der wesentliche Unterschied liegt darin, daß hier die Druckdifferenz zwischen litho- und hydrostatischem Druck, die auch hier nur an einer oder an sehr wenigen Barrieren abfällt, sehr hoch ist. Dies ist einfach ein Effekt der großen Vertikalausdehnung des Systems. Die Gesteinsmatrix – und besonders in einer Tiefenlage, die auf Grund der hohen Temperatur ($> 300^\circ\text{C}$) plastisches Deformationsverhalten kennt – kann mit Sicherheit eine solche Druckdifferenz erhalten. Die Situation ist in Abb. 3.22 verdeutlicht. Ein System, welches als ganzes ein lithostatisches Druckniveau aufweist, wird sich je nach interner Permeabilität auf ein hydrostatisches Porendruckprofil ausgleichen. Dies führt oberhalb des durch $P_{hyd} \approx P_{lith}$ bzw. $P_{eff} = P_{lith} - P_{hyd} \approx 0$ ausgezeichneten Punktes zu einem negativen effektiven Druck, der schnell zu einem hydraulischen Aufbrechen des Gesteins und der Bildung neuer Fluidwege führt. Unterhalb des Gleichgewichtspunktes wird das System nur durch die Festigkeit – oder in großen Tiefen eher Viskosität der Gesteinsmatrix – aufrechterhalten. Dort existierende offene Strukturen (Risse) werden sich daher mit erhöhter Wahrscheinlichkeit schließen. Quantitativ wird für die meisten Gesteine im Sprödbereich von einer Reißfestigkeit zwischen 10 und 100 MPa ausgegangen [Kuznir and Park, 1986]. Dieser Wert fällt mit der Temperatur stark ab, so daß im hier untersuchten Bereich eine Annahme von 10 MPa konservativ erscheint. Dies ermöglicht eine Abschätzung der Stabilität eines solchen, durch eine Barrierschicht isolierten Fluidsystems.

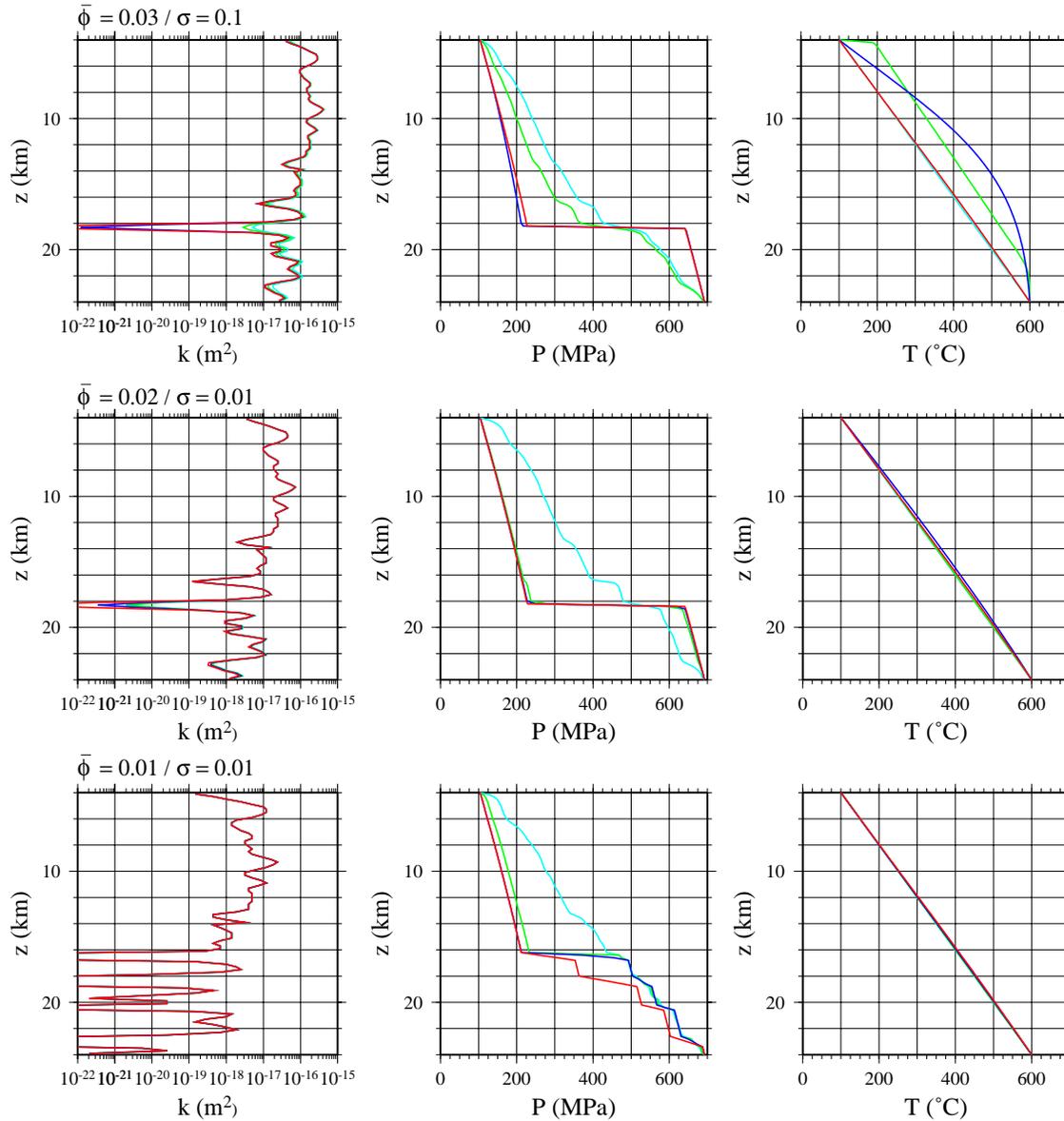


Abbildung 3.21: Permeabilitätsentwicklung für drei verschiedenen Basisverteilungen: Oben: $\phi_{bas} = 0.03$, $k_{bas} = 10^{-16} \text{ m}^2$. Mitte: $\phi_{bas} = 0.02$, $k_{bas} = 10^{-17} \text{ m}^2$. Unten: $\phi_{bas} = 0.01$, $k_{bas} = 10^{-18} \text{ m}^2$.

ρ_f	600 – 1200 $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
ρ_s	3000 $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$
g	9.81 $\frac{\text{kgm}}{\text{s}^2}$
Mittelkruste (Maximalwert)	
$(\sigma_1 - \sigma_3)_{max}$	100 – 400 MPa
Unterkruste	
$(\sigma_1 - \sigma_3)_{max}$	< 10 MPa

Tabelle 3.2: Parameterwerte zur Stabilität von Fluidsystemen. Erläuterungen im Text.

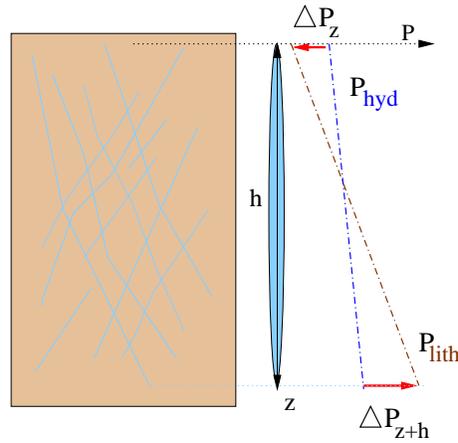


Abbildung 3.22: Prinzipskizze eines lithostatischen Fluidsystems. Das System ist hier durch einzelne Risse symbolisiert. Für den hier behandelten Argumentationsstrang ist die eigentliche Porenstruktur unerheblich, da nur dem System als Ganzes eine finite Permeabilität zugeordnet wird. Idealisiert wird dieses System durch einen vertikalen Ri der Lnge h .

Als zugegebenermaen stark vereinfachtes Beispiel soll hier ein senkrechter Spalt der Lnge h innerhalb einer nahezu impermeablen Matrix dienen (vgl. Abb. 3.22). Es wird davon ausgegangen, da der Spalt durch den Matrixdruck geschlossen werden kann, wenn $P_{eff}(z+h) \leq H_k$, und da der Ri fortschreitet, falls $P_{eff}(z) \geq H_t$. H_t und H_k stellen dabei die tensile und kompressive Festigkeit dar. Der Spalt ist daher dann stabil, wenn die hydrostatische Druckverteilung diesen Bedingungen gengt. An den Rispitzen gilt:

$$\begin{aligned}
 P_{eff}(z+h) &= P_s(z+h) - P_f(z+h) \\
 &= g\Delta\rho \cdot (h-l_0) \\
 &\geq H_t \\
 P_{eff}(z) &= P_s(z) - P_f(z) \\
 &= g(\rho_s - \rho_f) \cdot (-h-l_0) \\
 &\geq H_k
 \end{aligned}$$

l_0 ist hier definiert durch $P_{eff}(l_0) = 0$, und die Dichten sind als Mittelwerte ber die entsprechenden Intervalle zu verstehen. Nimmt man sie der Einfachheit halber als konstant an, ergibt sich die Stabilittsbedingung:

$$\|h \cdot g(\rho_s - \rho_f)\| \leq \|H_k - H_t\| \implies h \leq \frac{\|H_k - H_t\|}{\|(\rho_s - \rho_f) \cdot g\|} \quad (3.11)$$

Das Schicksal eines solchen Systems kann also durch eine charakteristische Lnge h beschrieben werden.

Die hier vorgestellten Simulationen knnten Anla geben, der Versiegelung durch Quarzausscheidung eine signifikante Rolle zuzugestehen. Dies ist jedoch nicht so. Wie oben schon bemerkt, wurde die Fluidbewegung in den Modellen durch einen an der Ober- und Unterkante des Modells festgehaltenen Druck realisiert. Diese Randbedingung kann nur durch einen Flu durch diesen Rand erzwungen werden. Ist dies eine realistische Annahme? Geht man – wie in der Einleitung zu diesem Kapitel – von einer 10 km mchtigen, kontinuierlich erwrmten Krustenschicht aus, ergibt sich die pro m^2 freigesetzte Fluidmasse zu $\approx 1.2 \cdot 10^6$ kg. Verteilt auf einen charakteristischen Zeitraum von $10^6 - 10^8$ a ($3.2 \cdot 10^{12} - 10^{14}$ s) ergibt sich eine Produktionsrate von $0.4 \cdot 10^{-7} - 10^{-9}$ kg/sm². Mit diesen Werten

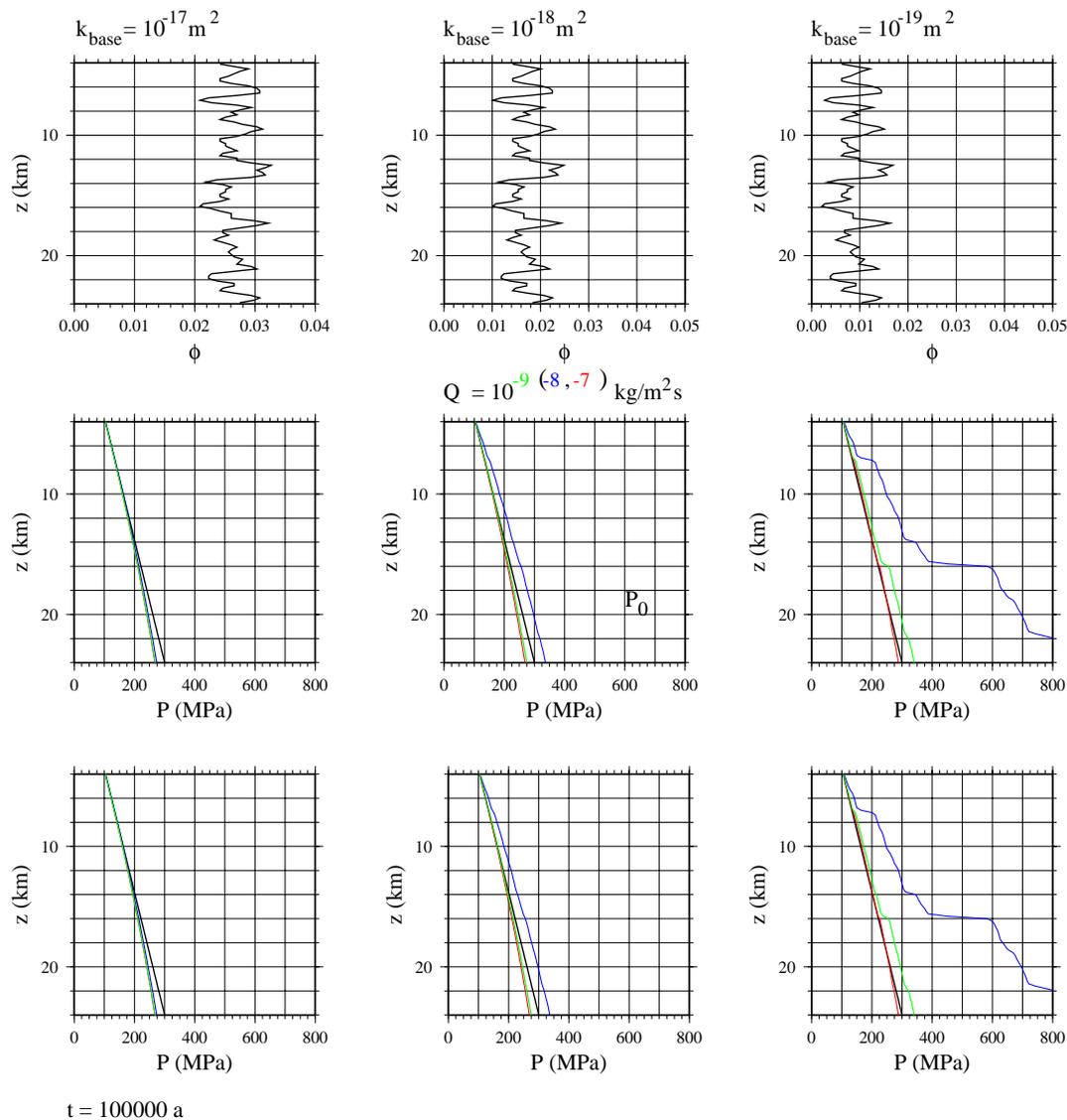


Abbildung 3.23: Porositäts- und Druckentwicklung für Basisverteilungen von $\phi_{bas} = 0.032$, $k_{bas} = 10^{-17} \text{ m}^2$ und $\phi_{bas} = 0.016$, $k_{bas} = 10^{-18} \text{ m}^2$, jeweils mit Produktionsraten von $10^{-7} - 10^{-9} \text{ kg/sm}^2$. Diese Werte entsprechen der zu Beginn dieses Kapitels beschriebenen Abschätzung der Entwässerung eines 10 km mächtigen Gesteinspakets in Zeiträumen zwischen 1 und 100 Ma. Die unterste Reihe von Abbildungen berücksichtigt eine Quarzausscheidung. Zweierlei wird hier deutlich: Bei den verwendeten Produktionsraten ist bei Basispermeabilitäten $< 10^{-18} \text{ m}^2$ auch ohne eine Versiegelung mit einer Drucksteigerung zu rechnen, die in geologisch kurzen Zeiten zu superlithostatischen Bedingungen führt. Die Versiegelung selber hat nur bei geringen Permeabilitäten und relativ hohen Produktionsraten einen nennenswerten Einfluß.

wurden die in Abb. 3.23 gezeigten beispielhaften Simulationen durchgeführt. Die Ergebnisse lassen sich derart zusammenfassen, daß eine Versiegelung nur bei geringen Permeabilitäten und relativ hohen Produktionsraten einen nennenswerten Einfluß haben kann.

Der Übergang zu multidimensionalen Simulationsbereichen bringt eine weitere Komplikation mit sich: Selbst in sedimentären Strukturen ist es nicht ohne Weiteres anzunehmen, daß Heterogenitäten nur in vertikaler Richtung existieren. Die Variation der Sedimentationsbedingungen, Kompaktion, Diagenese und nicht zuletzt die Tektonik tun das Ihrige dazu, laterale Heterogenitäten hervorzurufen. Die wenigen gut belegten Untersuchungen zur Porositäts- und damit Permeabilitätsverteilung entsprechender Strukturen [z. B. Higley et al., 1997] zeigen zwar elongierte Strukturen mit einer stark erhöhten ho-

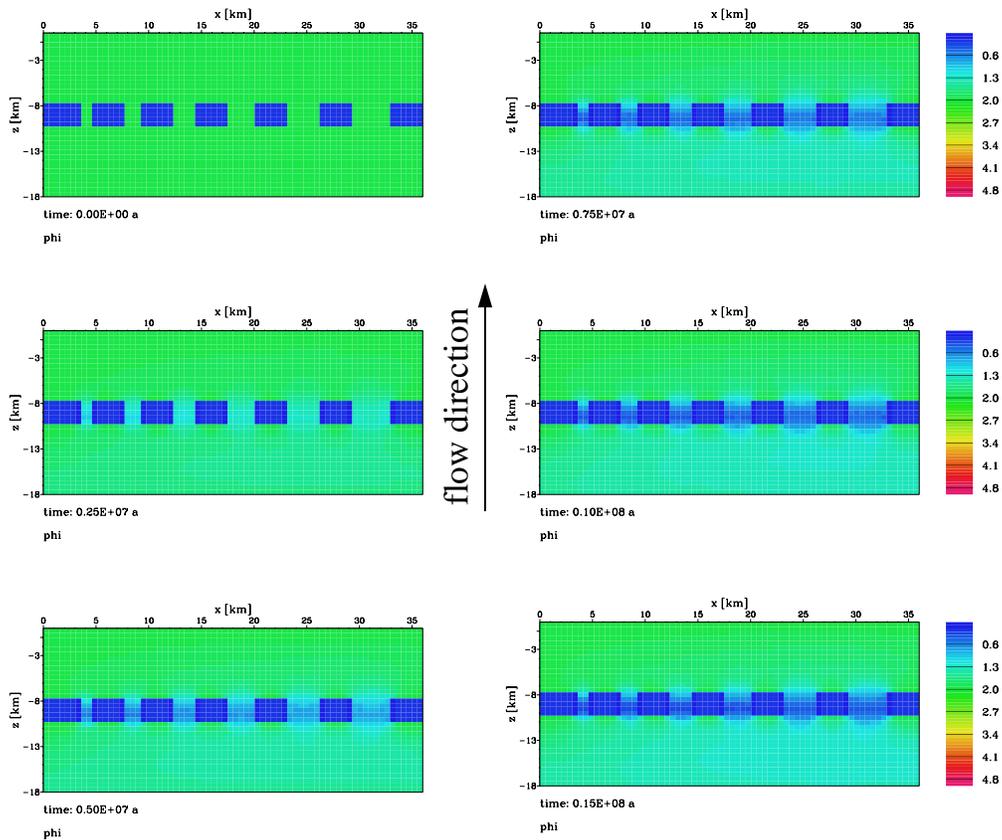


Abbildung 3.24: Demonstration des *channeling*-Effekts. In eine Barriere von 10^{-22} m^2 wurden mehrere Störungzonen variabler Dicke angebracht. Dargestellt ist hier die Porosität zu verschiedenen Zeitpunkten. Es ist eine konzentrierte und deutlich frühere Entwicklung der Versiegelung in den engeren Zonen bemerkbar. Bei den breiteren Zonen ist die Ausscheidung räumlich diffuser.

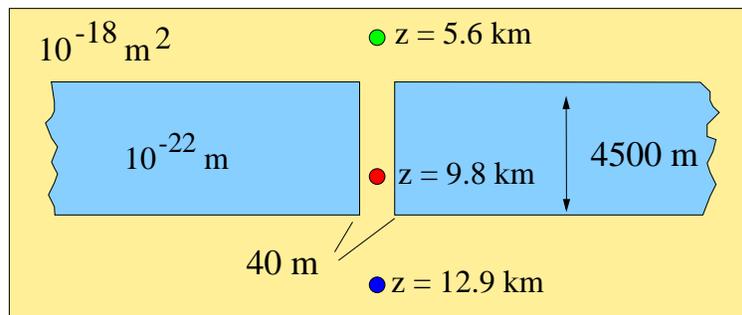


Abbildung 3.25: Prinzipskizze zur Modellierung des *Channeling*-Effekts in einer engen Zone erhöhter Permeabilität $d = 40 \text{ m}$. Die farbigen Punkte entsprechen den in Abb. 3.26 gezeigten Kurven.

horizontalen Korrelation, jedoch kaum wirkliche Schichten. Fluide können daher nach oben abgeführt werden, indem sie einen komplizierteren Weg mit allerdings oft beträchtlichen horizontalen Komponenten nehmen. Dies gilt sicher auch für kristalline Strukturen, die oft eine lange und vielphasige Entwicklungsgeschichte aufweisen.

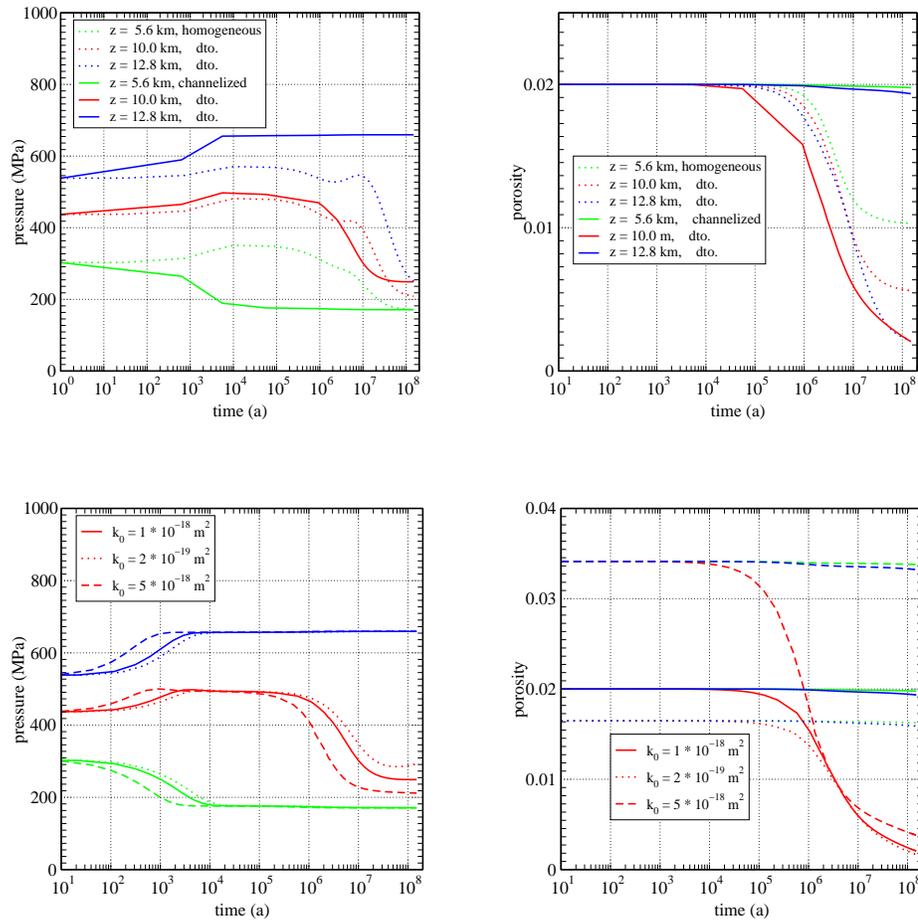


Abbildung 3.26: Channeling-Effekt in einer engen Zone erhöhter Permeabilität ($d = 40$ m). Die durchgezogenen Linien in entsprechen verschiedenen Tiefen im Zentrum der Zone, wie sie in Abb. 3.25 skizziert sind. Zum Vergleich sind in gleicher Farbcodierung die Werte in einem homogenen Modell gleicher Basispermeabilität ($z = 7 - 13$ km) als gestrichelte Linien wiedergegeben. Unten sind für unterschiedliche Basispermeabilitäten k_0 die Entwicklung von P und ϕ aufgetragen. Die Druckänderungen bei kurzen Zeiten sind durch den Druckausgleichsprozess (vgl. Abb. 3.1) bedingt und haben per se nichts mit dem Ausscheidungsvorgang zu tun. Dieser macht sich in allen Fällen erst zu Zeitpunkten $> 10^5$ a bemerkbar.

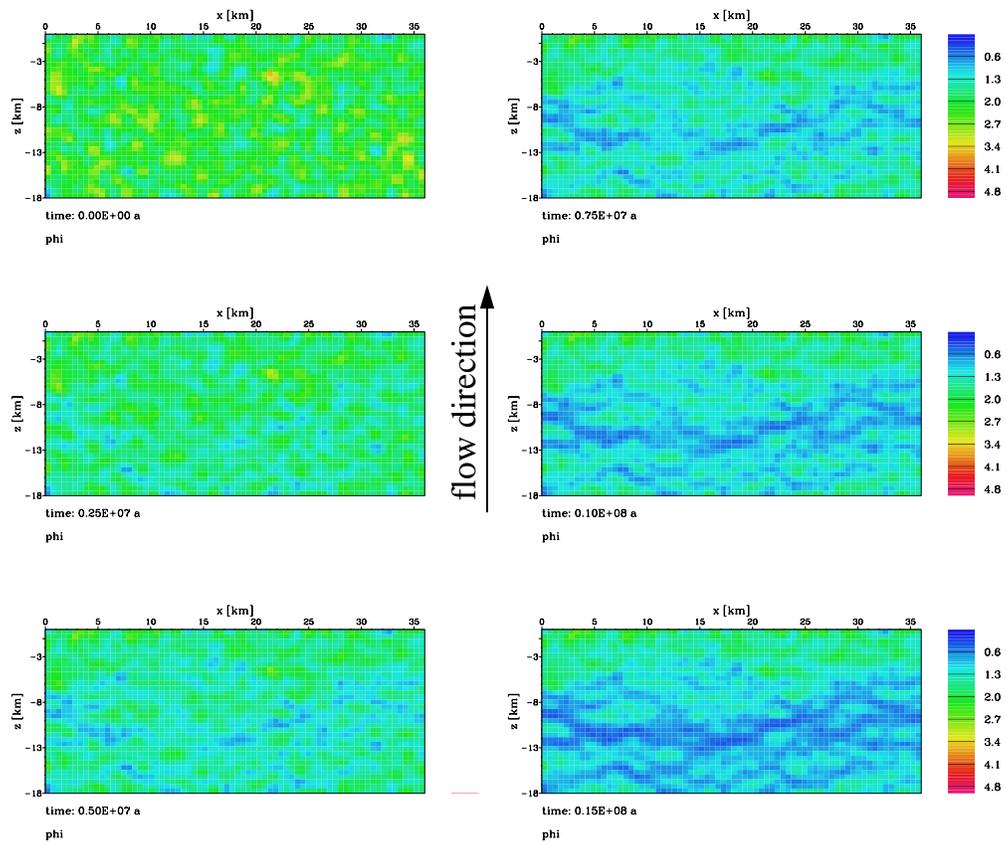


Abbildung 3.27: Porositätsentwicklung in einem vertikal durchströmten Zufallsmodell. Der Mittelwert der ursprünglichen Porosität ist 0.02, Rißgeometrie einer Permeabilität von 10^{-18}m^2 . Die Varianz der Porosität wurde mit 0.01 angesetzt. Auffällig ist hierbei die Herausbildung von deutlich horizontal korrelierten Strukturen.

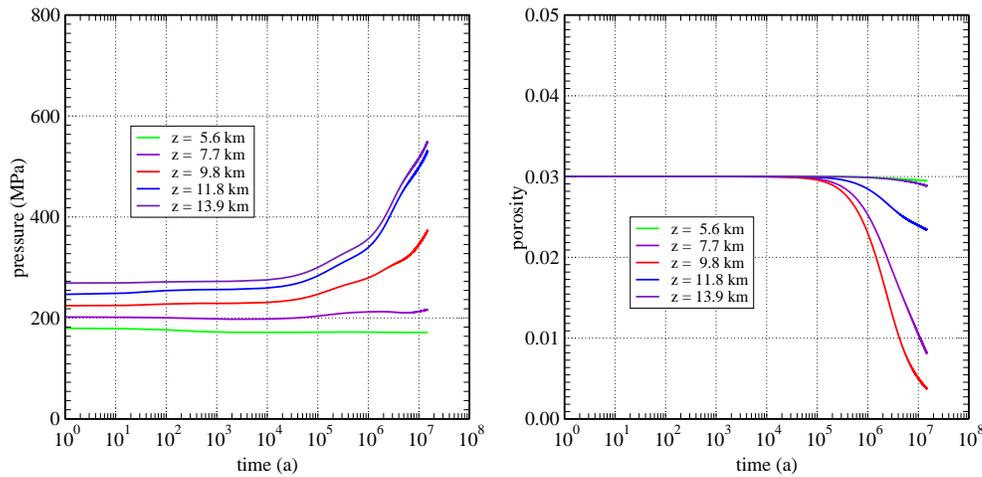


Abbildung 3.28: *Channeling*-Effekt in einer engen Zone erhöhter Permeabilität ($d = 40$ m, vgl. 3.25). Die Linien entsprechen verschiedenen Tiefen im Zentrum dieser Zone. Für die hier gewählte Produktionsrate von 10^{-9} kg/sm² – Temperaturen einem Entwässerungszeitraum von ≈ 100 Ma – beginnt der Druckaufbau unterhalb der Barriere gleichzeitig mit der Ausscheidung zwischen 10^4 und 10^5 a. Wird keine Änderung der Porosität angesetzt, kann der Fluidüberschuß abgeführt werden. Im Gegensatz zu den oben (Abb. 3.26) gezeigten Modellierungen kommt es zu keinem Temperatureffekt.

Hier kommt ein weiterer Mechanismus zum tragen, der ebenfalls eine lokale Intensivierung der Ausscheidung bewirkt. Die bevorzugten Wege der Lösung nehmen räumlich oft nur einen kleinen Anteil ein. Die Fluidbewegungen werden hier aber verstärkt, so daß auch hier Verhältnisse entstehen, die deutlich von den Bedingungen der homogenen Modelle abweichen. Exemplarisch ist dies in Abb. 3.24 abzulesen. Hier ist in einen homogen permeablen Hintergrund eine Barrierschicht eingebettet, die vertikale Zonen verschiedener horizontaler Ausdehnung enthält. Der vertikale Druckgradient wird durch lithostatische Bedingungen am unteren und oberen Rand realisiert. Die Dimensionen von 18×36 km sollen, mit Blick auf die folgenden Modelle, einer realen Modellkruste entsprechen. Abb. 3.25 verdeutlicht das zeitliche Verhalten in einer noch wesentlich engeren Zone erhöhter Porosität. Wie man leicht erkennen kann, ist die Ausscheidung im unteren Bereich ($z = 11$ und 12 km) in der Anfangsphase deutlich intensiviert. An sämtlichen anderen Punkten ist die Wirksamkeit des Mechanismus geringer als im homogenen Fall gleicher Basispermeabilität. Der Prozeß kann quantitativ um etwa eine Größenordnung beschleunigt werden. Nimmt man eine Zufallsverteilung der Porosität an, so ergibt sich ein Bild, das beide bisher behandelten Aspekte umfaßt. Zunächst sorgt der *channeling*-Effekt für eine Versiegelung der primären Fluidwege, wird aber dann ersetzt durch einen selbstverstärkenden Druckeffekt, der eine lateral ziemlich einheitliche Barriere hervorbringt. Dies ist in Abb. 3.27 deutlich zu erkennen. Eine derartig klare Herausbildung einer oder weniger Barrieren, wie sie in den eindimensionalen Modellen zu sehen ist, kommt hier verständlicherweise nicht vor. Damit müssen die Ergebnisse der eindimensionalen Modellrechnungen in Bezug auf die Zeitdauer einer Versiegelung in Frage gestellt werden.

Zieht man die negativen Ergebnisse der eindimensionalen Untersuchungen in Betracht, die auf realistischen Produktionsraten beruhen (Abb. 3.23), so stellt sich unmittelbar die Frage, ob die Kanalisierung hier die entscheidende Rolle spielen kann. Zur Beantwortung dieser Frage wurde das in Abb. 3.25 untersuchte Modell derart variiert, daß bei hydrostatischen Anfangsbedingungen flächenhaft eine Fluidzuführung angesetzt wurde, die den Werten in Abb. 3.25 ausgeführt. In Abb. 3.28 ist die zeitliche Entwicklung der Porosität und des Druckes an ausgewählten Punkten in und in unmittelbarer Umgebung der schmalen Störungszone aufgetragen.

Auch die Frage der Stabilität von ausgedehnten Fluidsystemen muß in mehrdimensionalen Modellen neu gestellt werden. Es ist wohlbekannt, daß unter nichtlithostatischen Spannungsbeziehungen die Bedingung für die Rißbildung erweitert werden muß. Die Spannungsverhältnisse sind nach den globalen Untersuchungen von Zoback [1992] und der darauf aufbauenden inzwischen ergänzten Datenbasis

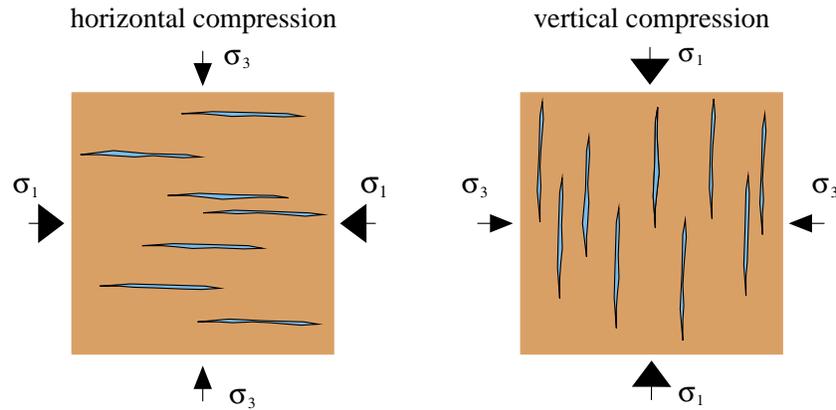


Abbildung 3.29: Spannungsbedingte Ausrichtung von Rissen in der Kruste. Rechts: Hier gilt $\sigma_3 < \sigma_2 < \sigma_1$ d. h. Risse können sich nur in Richtung σ_3 öffnen. Sie ordnen sich daher in horizontaler Richtung an. Links: In allen anderen Fällen ist σ_3 nicht die geringste Hauptspannung: die Strukturen sind vertikal ausgerichtet.

in der Kruste häufig, wenn nicht überwiegend, kompressiv. Es muß daher davon ausgegangen werden, daß horizontal ausgerichtete Rißsysteme in der Kruste vorwiegen, so daß unter diesen Umständen die Möglichkeit besteht, durch eine laterale Änderung der Rißdichte die Spannung abzubauen. Dies ist von verschiedenen Autoren [z. B. Bailey, 1990] bemerkt worden.

3.1.4 Folgerungen

Die wesentliche Frage für einen relevanten Beitrag der Quarzumverteilung im Flusses der Krustenentwässerung ist: Ist dieser Prozeß schnell genug, um eine Krustenentwässerung signifikant zu verlangsamen oder aufzuhalten? Wie schon in der Einleitung erwähnt, liegen die Ausgleichskonstanten des Druckes für die relevanten Permeabilitäten ($10^{-16} < k < 10^{-19} \text{ m}^2$) unter 1 Ma. Wie die Untersuchungen der letzten Abschnitte zeigen, liegt der Zeitbereich intensiver Ausscheidung für mittlere Permeabilitäten unterhalb von 10^{-18} m^2 schon jenseits geologisch relevanter Zeiten. Nur durch die Annahme bestimmter Bedingungen – insbesondere eine extreme Kanalisierung – kann die Versiegelung schnell genug erfolgen, so daß eine Krustenentwässerung signifikant beeinflusst wird. In allen Fällen wird der selbstbehindernde Effekt insofern deutlich, als die Permeabilität für große Zeiten einem – räumlich unterschiedlichen – Grenzwert zustrebt. Auch bei vergleichsweise hohen Durchlässigkeiten und dementsprechend frühen Zeiten ist der Grenzwert nicht gering genug, um mehr als eine Verlangsamung der Entwässerung zu bewirken. Ein größerer Effekt kann nur dann zustande kommen, wenn die Fluidquelle – d. h. hier speziell der Flusses der prograden Metamorphose – selbst lang genug andauert.

Es ist jedoch anzunehmen, daß in der Realität andersartige Prozesse, wie z. B. Deformation in vergleichbaren oder kürzeren Zeiten ablaufen und so mit dem hier untersuchten Mechanismus interagieren können. Das quantitative Verhältnis ihrer Wirkungen wird sowohl von der Tiefenlage und der realisierten Temperatur, als auch dem Mineralbestand abhängen, da die hier in erster Linie interessanten rheologischen Eigenschaften außerordentlich variabel sind und in den Bereichen der mittleren Kruste ($T > 300^\circ\text{C}$) vermutlich eine drastische Veränderung erfahren [um nur wenige zu nennen: Meissner, 1980, Kuznir and Park, 1986, Ranalli, 1987, Carter and Tsenn, 1987] und die effektive Viskosität exponentiell abnimmt. Abschätzungen der Kompaktionsparameter auf Basis der von McKenzie [1984] im Zusammenhang der Schmelzsegregation oder auch Sedimentkompaktion [McKenzie, 1987] gegebenen Gleichungen ergeben, daß ein weiter Bereich zwischen deformationsdominiertem Verhalten, wie es für die Unterkruste angenommen wird, und Spröbruchdeformation möglich ist. Dabei wird plastisches Verhalten sowohl durch hohe Temperatur und besonders die Anwesenheit von Wasser begünstigt [z. B. Ranalli and Murphy, 1987, Carter and Tsenn, 1987].

Neben den Deformationseigenschaften sind auch die Prozesse der Metamorphose selbst mit oft drasti-

schen Veränderungen der physikalischen Eigenschaften verbunden. Die Studien von Connolly [Connolly, 1997a, Connolly and Thompson, 1989] und Ko et al. [Ko et al., 1997, Wong et al., 1997] haben gezeigt, daß es sich hierbei nicht immer um einen Flusses der Permeabilitätserhöhung handelt, wie oft angenommen wurde [um nur den bekanntesten Protagonisten zu erwähnen: Fyfe, 1973b,a], sondern ein empfindliches Gleichgewicht darstellt, daß auch in trockenen Edukten enden kann. Läßt man retrograde Prozesse zu – wie z. B. eine Serpentinisierung [Macdonald and Fyfe, 1985, Rutter and Brodie, 1985, Rath and Haak, 1986, Sanders, 1991a] – so kann hier ein effektiver Abdichtungsmechanismus vorliegen [Rutter and Brodie, 1985]. Während der Phasen retrograder Veränderungen spielen vermutlich ebenfalls Volumenprozesse eine Rolle: Betrachtet man beispielsweise die von Macdonald and Fyfe [1985] angegebenen Serpentinisierungsreaktionen, so weisen Ausgangsprodukte (Gestein + Fluid) ein geringeres Volumen aufweisen als das Endprodukt. Gleichzeitig nimmt das Volumen der festen Bestandteile um ein Beträchtliches zu. Dies hat eine Umgestaltung des vorhandenen Porenraums zur Folge: Einerseits wird Porosität vernichtet (und damit auch die Permeabilität verringert), andererseits führt die Gesamtabnahme des Volumens zu internen Spannungszuständen, die zu intensiven Rißbildungen (und damit zu einer Erhöhung der Permeabilität) führen können. Deformationen durch reaktive Volumenänderungen sind in vielen Störungszonen bekannt [Norrell et al., 1989, Behrmann, 1984, McCaig, 1987]. Wie sich die Permeabilität tatsächlich entwickelt, ist schwer abzuschätzen, geschweige denn jemals *in situ* gemessen worden. Die genannten Autoren weisen auf die hohe Rißdichte in serpentinierten Gesteinen hin. Diese Risse führen wiederum dazu, daß Fluid zugeführt wird und die Reaktion fortschreiten kann. Die Reaktion bewirkt so lokal eine Fluiddruckabnahme bei gleichzeitiger Verringerung der Porosität. Untersuchungen an wasserführenden Störungsflächen in ultrabasischen Gesteinen [Rutter and Brodie, 1985] zeigen, daß das Eindringen des Wassers durch Hydrationsreaktionen zu äußerst geringen Permeabilitäten ($< 10^{-23} m^2$) führt. Die von den vorher genannten Autoren [Macdonald and Fyfe, 1985] angegebenen Permeabilitäten für serpentinierten Peridotit sind ebenfalls gering ($10^{-23} - 10^{-24} m^2$).

3.2 Freie Konvektion

Wie schon in der Einleitung erwähnt, hat die freie Konvektion im Zusammenhang eines Krustenversiegelungsprozesses den Vorteil, daß sie, einmal in Gang gesetzt, bei gleichbleibenden Bedingungen stationär vonstatten geht. Dies steht im Gegensatz zu den im letzten Abschnitt untersuchten *one-pass*-Bewegungen, die eine Fluidquelle in der Tiefe voraussetzen und mit ihr entstehen und verschwinden. Es liegt daher nah, sie zur Erklärung langfristiger Massenumverteilungsprozesse heranzuziehen.

Unter einer freien Konvektion sollen hier eine Fluidbewegung verstanden werden, die durch temperaturbedingte Auftriebskräfte hervorgerufen wird [Nield and Bejan, 1992], obwohl auch Dichteänderungen durch veränderten Lösungsgehalt ähnliche Phänomene bewirken. Konvektionsbewegungen haben schon lange das Interesse der Wissenschaftler verschiedenster Disziplinen hervorgerufen. Dies liegt vor allem darin begründet, daß bei der Untersuchung dieses Phänomens erstmals da Phänomen einer physikalischen Instabilität untersucht wurde [Rayleigh, 1916]. Für poröse Medien wurden die Grundlagen in den klassischen Arbeiten von Horton and Rogers [1945] und Lapwood [1948] [vgl. auch Elder, 1965, 1967] gelegt. Praktisch ist der dort untersuchte Fall der Erhitzung von unten sowohl theoretisch und numerisch am besten untersucht [Ribando and Torrance, 1976, Strauss and Schubert, 1977, Nield and Bejan, 1992], als auch im Rahmen geowissenschaftlicher Fragestellungen [Bjørlykke, 1993, 1994, Palm, 1990] bei weitem der wichtigste. Er wird hier daher besonders intensiv behandelt werden.

Bei der Untersuchung der freien Konvektion ist die Verwendung der Dimensionsanalyse nützlich [z.B. Nield and Bejan, 1992, Ligget, 1994]. Die stationären Differentialgleichungen für P und T (Gl. 2.4 und 2.8) können im zweidimensionalen Fall durch geeignete Normierungen in ein dimensionsloses Gleichungssystem in den Variablen \hat{T} , \hat{P} und $\hat{\mathbf{v}}$ umgeformt werden:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \hat{\mathbf{v}} &= 0 \\ \nabla \hat{P} - \text{Ra} \hat{T} \mathbf{e}_z &= -\hat{\mathbf{v}} \\ \nabla^2 \hat{T} - \hat{\mathbf{v}} \cdot \nabla \hat{T} &= \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Dabei ist \mathbf{e}_z ein vertikaler Einheitsvektor. Bei der Ableitung wurden Quellterme und Anisotropien vernachlässigt, sowie alle Parameter räumlich konstant angesetzt und gegebenenfalls der Beitrag des Poreninhaltes vernachlässigt. Es wurde jedoch verständlicherweise eine lineare Temperaturabhängigkeit der Fluidichte mit dem Koeffizienten α angenommen, die jedoch nur im Auftriebsterm berücksichtigt wurde. Diese Vereinfachungen werden oft in ihrer Gesamtheit als [Boussinesq-Näherung, vgl. Furbish, 1997, Cherkaoui and Wilcock, 1999] bezeichnet. Alle Material- und Systemparameter des Systems sind dann in der Rayleighzahl

$$\text{Ra} = \frac{k \rho_f^2 g \alpha_f c_f \Delta T H}{\lambda \mu_f}$$

zusammengefaßt (s. Tab. 3.3).

Setzt man in Gl. 3.12 $\frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{t}} \equiv 0$, so ergibt Variablentrennung die bekannten stationären Lösungen in Form regelmäßiger Zellen. Die Fundamentalmode ergibt sich aus der Bedingung $\text{Ra} = 4\pi^2$. Dieser Wert der Rayleighzahl wird als Ra_{krit} bezeichnet. Unterhalb dieses kritischen Werts existiert nur die triviale rein konduktive Lösung $\hat{\mathbf{v}} = 0$, während im konvektiven Bereich eine Vielzahl von Moden j möglich sind, die durch die $\text{Ra}_j = 4\pi^2 j^2$ bestimmt sind. Alle diese zeitunabhängigen Moden sind Lösungen der gekoppelten Differentialgleichungen, physikalisch jedoch nicht gleichwertig. Numerische Experimente haben gezeigt, daß bei stark überkritischen Verhältnissen ($\text{Ra} > 390$ in der oben beschriebenen Konfiguration) die zeitunabhängigen Lösungen bei stetiger Veränderung von Ra physikalisch nicht immer stabil sind. Dies bedeutet, daß neben Bereichen stationärer Konvektion und oszillierender (periodischer) Bewegung auch Zonen chaotischer Natur auftreten, die in den Übergangsbereichen

ρ_f	Fluiddichte
μ_f	dynamische Viskosität des Fluids
c_f	spez. Wärmekapazität des Fluids
α_f	thermischer Ausdehnungskoeffizient des Fluids
λ	effektive Wärmeleitfähigkeit des porösen Mediums
k	Permeabilität
H	vertikale Ausdehnung des Systems
ΔT	Temperaturdifferenz

Tabelle 3.3: Tabelle der Materialeigenschaften und Systemparameter für die Berechnung der Rayleighzahl.

zwischen den Moden [Cherkaoui and Wilcock, 1999, vgl. Abb. 3.30]. Diese Übergänge können auch metastabil insofern sein, als bei einer Überschreitung dieses Bereichs in genügend kleinen Schritten eine Mode bis weit in den Bereich der anderen stabil existieren kann [Cherkaoui and Wilcock, 1999, vgl. Abb. 3.30]. Eine weitere Komplikation ergibt sich aus der Annahme einer horizontal unendlich ausgedehnten Struktur, die der oben angerissenen linearen Theorie zu Grunde liegt. In diesem Fall läßt sich eine charakteristische Wellenlänge der Konvektionszellen angeben, die im angeführten Fall bei 1.35 liegt [Cherkaoui and Wilcock, 1999]. Wird eine andere Geometrie durch die Berandung des Gebiets aufgezungen, ergeben sich zusätzliche Bifurkationen.

Aufbauend auf die frühen Resultate von Horton and Rogers [1945], Lapwood [1948] sind in der folgenden Zeit viele unterschiedliche Konfigurationen untersucht worden (andere Geometrien, Randbedingungen, anisotrope Matriceigenschaften, nichtlineare Fluideigenschaften [vgl. Donaldson, 1962, Elder, 1967, Ribando and Torrance, 1976, Strauss and Schubert, 1977, Nield and Bejan, 1992]. Geht man über die einfachsten Geometrien und physikalischen Grundannahmen hinaus, sind numerische Lösungen nötig und die sinnvolle Definition einer entsprechenden Rayleighzahl ist schwierig.

Eine mögliche Rolle der Umverteilung von Quarz oder Kalzit durch einen Zyklus von Lösung, Transport und Ausscheidung ist in der Literatur im Zusammenhang mit der Diagenese von (vergleichsweise hochpermeablem) Sandstein mehrfach diskutiert worden [Wood and Hewett, 1982, Rabinowicz et al., 1985, Land et al., 1987, Land and Fisher, 1987, Palm, 1990, Land, 1991, Bjørlykke, 1994, Raffensperger, 1995a, Raffensperger and Garven, 1995]. Ein entscheidender Unterschied zu den im letzten Abschnitt untersuchten *one-pass*-Bewegungen ist die völlig andere Rolle des Drucks. Freie Konvektion ist nur dann möglich, wenn sich das Vertikalprofil des Drucks nur wenig vom hydrostatischen Gleichgewicht unterscheidet. Dies liegt in den geringen Änderungen der Fluiddichte mit der Temperatur begründet, die eine freie Konvektion antreibt. Dieser Unterschied führt zu einem physikalisch völlig anderen Verhalten.

In diesem Abschnitt sollen einige im Zusammenhang der freien Konvektion auftretenden Aspekte erläutert werden, die von Relevanz für die potentielle Genese von hydraulischen Barrieren sind. Dies soll am Beispiel einer stark vereinfachten Modellsimulation geschehen, welches die grundsätzlichen Probleme betont. Es steht stellvertretend für eine größere Anzahl von Modellen diese Typs, die sich durch variable physikalische Parameter und geometrische Dimensionen unterscheiden, jedoch grundsätzlich ähnliches Verhalten zeigen. Im letzten Unterabschnitt werden einige Modelle krustalen Maßstabs vorgestellt.

3.2.1 Freie Konvektion: Ein einfaches Beispiel?

Das in Abb. 3.31 gezeigte einfachste Modell entspricht in seinen physikalischen Parametern dem von verschiedenen Autoren [Raffensperger, 1995c, Wood and Hewett, 1982]. Wegen der hier im Vordergrund stehenden Problematik wurden allerdings die Druck- und Temperaturbedingungen denen der

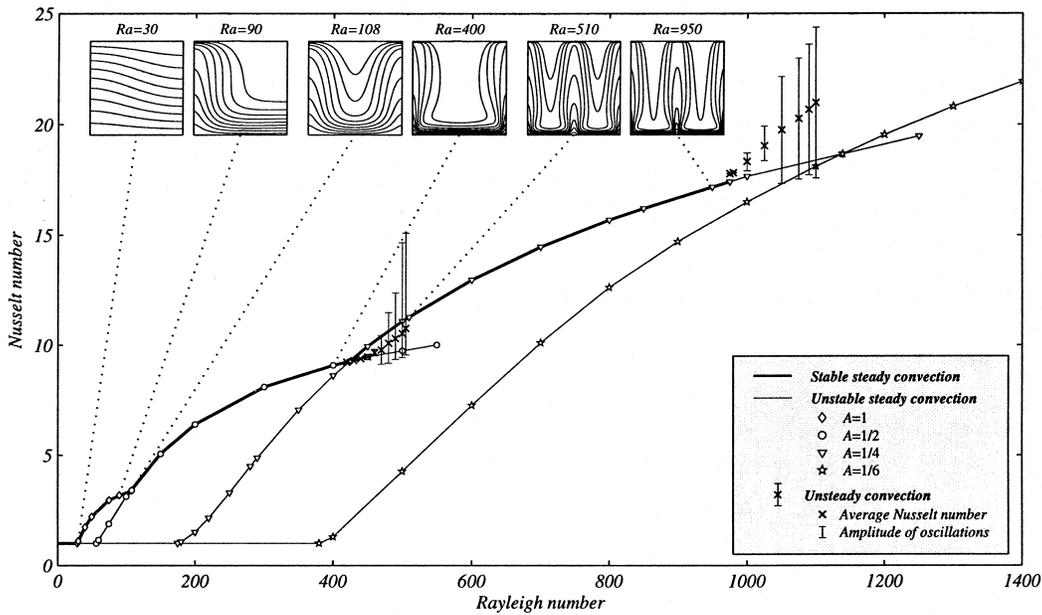


Abbildung 3.30: Typen einer freien Konvektionsbewegung in einem quadratischen Gebiet [Cherkaoui and Wilcock, 1999]. In dieser Darstellung ist die Nusseltzahl $Nu_h = \int_0^1 \frac{\partial \hat{T}}{\partial \hat{z}} \Big|_{\hat{z}=0} d\hat{x}$ – ein dimensionsloses Maß des Energieflusses – in diesem Fall durch die obere Begrenzungsfläche des Modelle – in Abhängigkeit von der Rayleighzahl dargestellt. Abweichungen dieser Zahl von 1. Vorgegeben sind hier eine feste Temperatur (Dirichlet'sche Randbedingungen) an der Ober- und Unterkante, sowie hydrostatische Druckbedingungen an der oberen Berandung. Es wurde die Boussinesq-Näherung angenommen (s. Text). Wie an den schematischen Darstellungen (oben) klar wird, nimmt die Zahl der auftretenden Konvektionszellen mit steigender Rayleighzahl zu. Wichtig ist jedoch, das in den Bifurkationsbereichen (bei $Ra = 400$ und 950) mit oszillierendem, ja sogar instabilem Verhalten zu rechnen ist. Eine Variation der Rayleighzahl kann im Rahmen der verwendeten Näherung beispielsweise durch eine entsprechende Änderung der Permeabilität realisiert werden. Wird ein vollständigeres Modell verwendet – wie beispielsweise in dieser Untersuchung – sind die verschiedenen Möglichkeiten der Änderung nicht äquivalent.

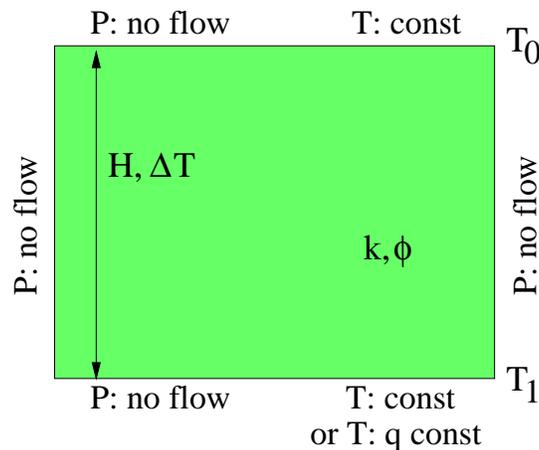


Abbildung 3.31: Modellstruktur für die freie Konvektionsbewegung der folgenden Abbildungen. Vorgegeben sind hier eine feste Temperaturdifferenz (Dirichlet'sche Randbedingungen), sowie *no-flow*-Bedingungen (Neumann'sche Randbedingungen) an allen Rändern.

mittleren Kruste angepaßt. Aus diesem Grunde ist im Vergleich zu den zitierten Veröffentlichungen mit einer heftigeren Konvektion zu rechnen (reduzierte Viskosität). Die Herausbildung einer doppelten Konvektionszelle – im Gegensatz zu einer einzigen, wie sie bei nur geringfügig überschrittener Rayleighzahl und einem Aspektverhältnis von ≈ 1.3 zu erwarten wäre, die die gewählte Anfangsbedingung für die gezeigten Simulationen darstellt, ist eine Folge dieser Bedingungen. Auch die betrachteten Ausscheidungsraten sind dementsprechend höher. In diesem Falle wurde die der Exponent $\gamma = 3$ (Rißpermeabilität) gewählt.

Variiert man in diesem Modell zunächst Permeabilität/Porosität mit dem Ziel einer variablen Rayleighzahl über mehrere Größenordnungen, so stellt man fest, daß jenseits der ersten beiden Moden oszillierende Bereiche erreicht werden, die bei weiterer Erhöhung in nahezu chaotische Verhältnisse übergehen. Für eine Koppelung mit der Quarzumverteilung sind jedoch nur die stationären, und unter diesen nur die ersten beiden Zirkulationsformen relevant. Dies liegt nicht nur in der schon bald überschrittenen maximal vertretbaren Äquibrationslänge, sondern auch daran, daß nur in diesen Fällen kommen Veränderungen der Porosität zustande kommen. Oszilliert das Feld – die Perioden sind hier deutlich kleiner als die für relevante Porositätsveränderungen nötige Zeit – oder zeigt das Strömungsfeld gar chaotische Eigenschaften, ist der erzielte Effekt minimal. Wird die Temperatur zu stark advektiv dominiert, d. h. ein gedachtes Fluidpaket in seiner Bewegung fast isotherm, ist lediglich die – geringe – Druckänderung entlang des Wegs wirksam. Die hier gewählte Konfiguration zeigt jedoch ähnlich wie die unizelluläre Variante deutliche Effekte.

Betrachtet man die gezeigten Ergebnissen, so wird deutlich, daß selbst derartig einfache Systeme eine komplexe Entwicklungsgeschichte aufweisen. Tatsächlich erleben freie Konvektionssystem im Gegensatz zu den im letzten Abschnitt behandelten Systemen erzwungener Konvektion eine quasi autonome Entwicklung. Während jene im Großen und Ganzen durch die aufgeprägte Fluidbewegung dominiert sind, erlaubt die freie Konvektion eine weitaus größeren Spielraum der der Bewegungsformen.

Dies wird deutlich in den folgenden Abbildungen. Die Entwicklung beginnt mit einer doppelten Konvektionszelle in einem homogenen Gebiet. Zunächst bildet sich – wir zu erwarten und in Übereinstimmung mit den in den oben genannten Publikationen gegebenen Skizzen – eine zentrale hochpermeable Zone heraus ($t = 100$ ka). In diesem Bereich bewegt sich das Fluid in Richtung steigender Temperaturen. Anstatt jedoch in Fortsetzung dieses Auswaschungsprozesses zu immer höheren Porositäten zu gelangen, erreicht die Zone erhöhter Permeabilität den Punkt, an dem die kritische Rayleighzahl für diese Subsystem überschritten wird. Es bildet sich in qualitativer Übereinstimmung mit der linearisierten Theorie zunächst eine (bei 200 – 300 ka), später sogar eine doppelte lokale Zelle heraus. Das Bewegungsmuster kehrt sich um, und die Permeabilität wird in einigen Gebieten fast ganz auf den Ursprungswert zurückgeführt. Die Verteilung ist jedoch wegen der unizellulären Episode leicht asymmetrisch. Dies bildet den Ausgangspunkt für eine weitere, nun deutlich asymmetrische Entwicklung. Ähnliche Ergebnisse sind von Raffensperger [1995c] auf Basis eines wesentlich aufwendigeren Ansatzes (reaktiver gekoppelter Fluid-, Energie- und Stofftransport Raffensperger [1995a], Raffensperger and Garven [1995], Raffensperger [1995b], Raffensperger [1996]) präsentiert worden.

3.2.2 Freie Konvektion in der Diagenese: SiO_2 vs. CaCO_3

SiO_2 und CaCO_3 sind quantitativ und qualitativ bei weitem die wichtigsten Bestandteile der Porozementation. Dabei werden quarzreiche Zemente als charakteristisch für den Temperaturbereich $> 100^\circ\text{C}$ angesehen Bjørlykke and Egeberg [1993]. Beide Stoffe stellen potentiell einen Bestandteil der Versiegelungsstrukturen (*seals*) dar, die oft unabhängig von der Lithologie in Sedimentbecken auftreten und Bereiche von hydrostatischem und nahezu lithostatischem Niveau trennen [Ortoleva et al., 1987, Powley, 1990, Ortoleva, 1994a, Ortoleva et al., 1995]. Diese *seals* trennen jedoch nicht nur vertikal hydrologisch unterschiedliche Zonen, sondern es existieren viele Hinweise, das auch vertikale Strukturen bestehen, welche die einzelnen Zellen (*fluid compartments*) voneinander isolieren [z. B. die Beiträge in Ortoleva, 1994b]. Sowohl bei der Zementation unter normalen Bedingungen der Diagenese, als auch bei der Herausbildung der *fluid compartments* wird eine Beteiligung konvektiver Fluidbewegung nicht ausgeschlossen. Diese wird vor allem deshalb gefordert, weil bestimmten sedimentäre Einheiten be-

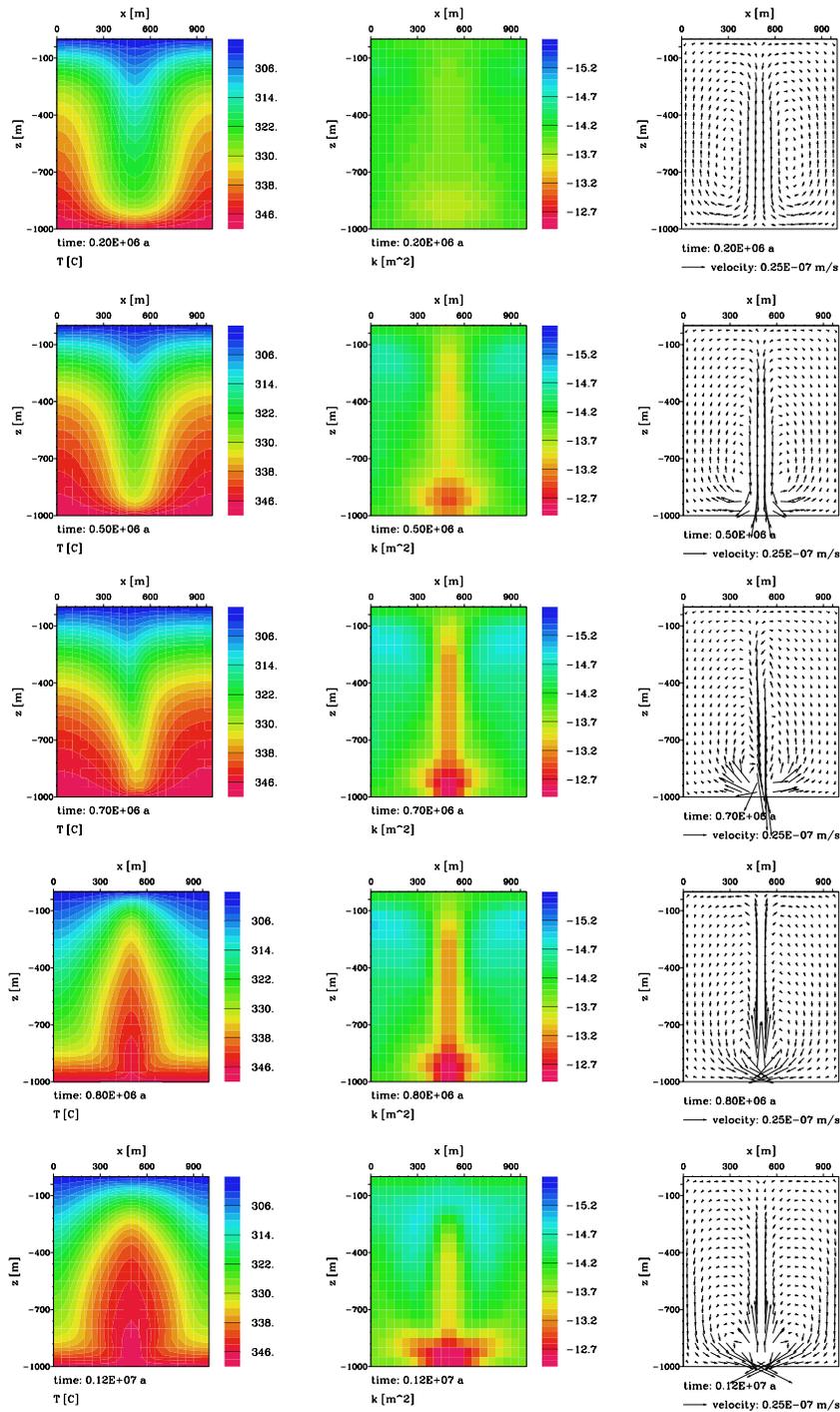


Abbildung 3.32: Einfluß der Quarzumverteilung auf eine freie Konvektionsbewegung. Dargestellt ist eine Folge von Modellierungsergebnissen für 200, 500, 700, 800 und 1200 ka.

trächtliche Massenverluste oder -gewinne zugeschrieben werden müssen [weit mehr als 10 %, McBride, 1989].

Diese Hypothese ist kontrovers. Wie schon oben erwähnt, erfordert die Existenz von Konvektionszellen physikalische Bedingungen, die durch die Überschreitung der kritischen Rayleighzahl \mathcal{R}_{krit} charakterisiert sind. Dabei ist neben Permeabilität und Temperaturgradient insbesondere die vertikale Ausdehnung der Struktur wichtig. Wie Bjørlykke [1994, 1993] zeigt, genügen schon vergleichsweise dünne niedrigpermeable Schichten, um eine zelluläre Konvektion in einem mächtigen Sedimentpaket effektiv zu verhindern. Die folgenden Modellrechnungen haben daher nicht den Anspruch, eine Erklärung existierender Strukturen zu geben, sondern einige Aspekte von generellem Interesse aufzuhehlen.

Die im letzten Abschnitt gezeigten Ergebnisse beruhen auf einer vergleichsweise einfachen, mit Temperatur und Druck monoton ansteigenden Löslichkeitsfunktion. Bei der Behandlung der Genese von sekundärer Porosität durch freie Konvektion haben Rabinowicz et al. [1985] darauf hingewiesen, das unter bestimmten, allerdings sehr eng gefaßten Bedingungen auch die Lösung von Kalzit durch den hier verwendeten Ansatz modelliert werden kann. Im Gegensatz zu SiO_2 jeglicher Form, weist Kalzit jedoch in geologisch relevanten Bereichen eine retrograde Löslichkeit auf (Abb. 3.33). Die im Folgenden gezeigten Modelle sollen als Beispiel für die Wirkung komplizierterer Löslichkeitsfunktionen dienen.

Für die Gleichgewichtslöslichkeit von amorphem SiO_2 und Kalzit in einer wässrigen NaCl -Lösung (etwa dem Ozeanwasser entsprechende Ionenstärke $I = 0.75$, vgl. Gl. 4.4, Kap. 2) geben Rabinowicz et al. [1985] empirische Formeln an: Bei SiO_2 kommen die Autoren zu einem Ausdruck für den Bereich $25 \leq T \leq 250^\circ\text{C}$ und $10^5 \leq P \cdot 10^7 \text{Pa}$:

$$\begin{aligned} c_{\text{SiO}_2} = & 4.396 \cdot 10^{-2} + 2.115 \cdot 10^{-3}T \\ & + 1.154 \cdot 10^{-5}T^2 \\ & - (1.915 \cdot 10^{-5} - 1.103 \cdot 10^{-6}T \\ & + 3.012 \cdot 10^{-9}T^2 - 3.073 \cdot 10^{-11}T^3) \cdot P \end{aligned}$$

Hierbei sind T in $^\circ\text{C}$ und P in bar einzusetzen, um Die Konzentration C in g/kg zu erhalten. Ebenso wurde für Kalzit eine Formel entwickelt, die allerdings einen etwas engeren Geltungsbereich aufweist ($T \leq 200^\circ\text{C}$) und zudem durch die Annahme eines gegebenen Partialdrucks von CO_2 eingeschränkt ist [Rabinowicz et al., 1985]. Dieser Ansatz hat die Form:

$$c_{\text{CaCO}_3} = a_1 - a_2T^{1/2} + a_3T - a_4T^{3/2} \quad (3.13)$$

mit:

$$\begin{aligned} a_1 &= 0.1574 + 1.2764 \cdot 10^{-4}P - 1.3220 \cdot 10^{-7}P^2 \\ a_2 &= 1.1623 \cdot 10^{-2} + 3.4298 \cdot 10^{-5}P - 6.4665 \cdot 10^{-8}P^2 \\ a_3 &= 1.1438 \cdot 10^{-3} + 3.0651 \cdot 10^{-6}P - 9.4921 \cdot 10^{-9}P^2 \\ a_4 &= 5.2409 \cdot 10^{-5} + 7.1337 \cdot 10^{-8}P - 4.6408 \cdot 10^{-10}P^2 \end{aligned}$$

Der Zentralbereich der diagenetischen Veränderungen im Temperaturbereich $T \leq 200^\circ\text{C}$ kann durch dieses Modell gut abgedeckt werden. Die Verteilung der Löslichkeit in der P - T -Ebene ist in Abb. 3.33 dargestellt. Es ist leicht zu sehen, daß der Betrag der Löslichkeit bei SiO_2 deutlich größer ist. Interessanter ist jedoch das die Ableitung $\frac{\partial C}{\partial P}$ für CaCO_3 einen Vorzeichenwechsel aufweist.

Das für diese Untersuchung zugrundegelegte Modell entspricht bis auf die Annahme Dirichlet'scher Randbedingungen für den Druck ($P_0 = 0.3 \text{MPa}$) an der Oberfläche im Prinzip dem in Abb. 3.31

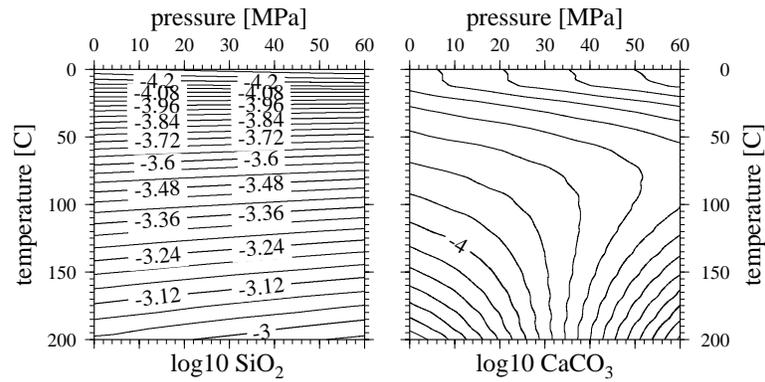


Abbildung 3.33: Löslichkeiten von SiO_2 (links) und CaCO_3 (rechts) nach Rabinowicz et al. [1985](3.13 und 3.13). Die absolute Löslichkeit von Quarz ist etwa um eine Größenordnung höher als diejenige von Kalzit.

dargestellten. Im Gegensatz zu den bisherigen freien Konvektionsmodellen ist daher ein Austausch von Lösung mit der Umgebung möglich. Ein solcher Ansatz führt wegen der reduzierten kritischen Rayleighzahl zu einer im Durchschnitt intensiveren Konvektion und wegen der Möglichkeit der Zu- oder Abfuhr von gelöstem Material zu deutlicheren Effekten als der bisher verwendete. Die Randbedingungen für die Temperatur wurden mit $T_0 = 80^\circ\text{C}$ und $T_1 = 160^\circ\text{C}$ einer verhältnismäßig tiefen Struktur nachempfunden, was sich auch in der für einen Sandstein geringen Anfangsporosität von 3 % und der genannten Druckrandbedingung niederschlägt.

In den Abb. 3.34, 3.35, 3.36 und 3.37 ist die Entwicklung für gezeigt. Das stationäre Strömungs- und Temperaturbild der Anfangsbedingungen ist zunächst qualitativ noch erhalten, während sich die Permeabilität mindestens für die Quarzausscheidung schon deutlich verändert hat. Typische Maximalraten der Porositätsänderung liegen bei $10^{-13} - 10^{-14} \text{ s}^{-1}$. In den späteren Zuständen sieht man die Konsequenzen der Entwicklung: Während sich für Kalzit (Abb. 3.37) die Entwicklung quasi linear fortgesetzt hat, deutet sich im unteren Teil des Modells für Quarz eine neue, kleinräumigere Konvektionszelle an. Fluidgeschwindigkeiten und Temperaturen sind schon deutlich asymmetrisch. Diese Entwicklung setzt sich fort, bis die zunehmende Asymmetrie von Fluidbewegung und Ausscheidungsmuster wiederum zu einer Änderung des globalen Strömungsfeldes führt. Die Permeabilitätsstruktur im Falle Kalzit bleibt noch lange symmetrisch. Die Situation nach 5 Ma ist in Abb. 3.38 dargestellt. Wie oben schon gezeigt, führt die weitere Entwicklung im Falle von SiO_2 zu einer 'Wanderung' der hochpermeablen Zone, die zu späteren Zeitpunkten durch die unrealistischen Randbedingungen an den Modellseiten bestimmt wird.

Wesentlich komplizierter wird die Entwicklung durch das teilweise retrograde Lösungsverhalten des Kalzits bei geringen Drücken. Schon ein Verlegung des Modellbereichs in etwas größere Tiefen ($\Delta T = 40^\circ\text{C}$, $\Delta P = 10 \text{ MPa}$) führt zu dramatisch anderen Entwicklungen. Zunächst fällt auf das die Zirkulation bei höheren Temperaturen heftiger verläuft: Dies ist in erster Linie ein Effekt der in diesem Bereich drastisch abnehmenden Viskosität des Fluids (vgl. 2.2). Während sich das Zirkulationsbild der Anfangsbedingungen sich nach 1 Ma noch erhalten hat, ergibt sich nach 4.8 Ma ein völlig unterschiedliches Bild: Bei höheren Drücken/Temperaturen ergibt sich eine Permeabilitätsverteilung, die dem oben gezeigten Fall von Quarz analog ist. Im anderen Fall ist das Ergebnis nahezu invers.

Eine solche Entwicklung des hier modellierten, sicherlich zu vereinfachten Fluidsystems müßte in der Realität vielfältige geochemische und petrologische Wirkungen haben. Lokal kommt es schon in solch einfachen Ausgangsstrukturen zu mehrfachen Episoden der Umkehr der Fluidbewegung und den damit verbundenen Prozessen.

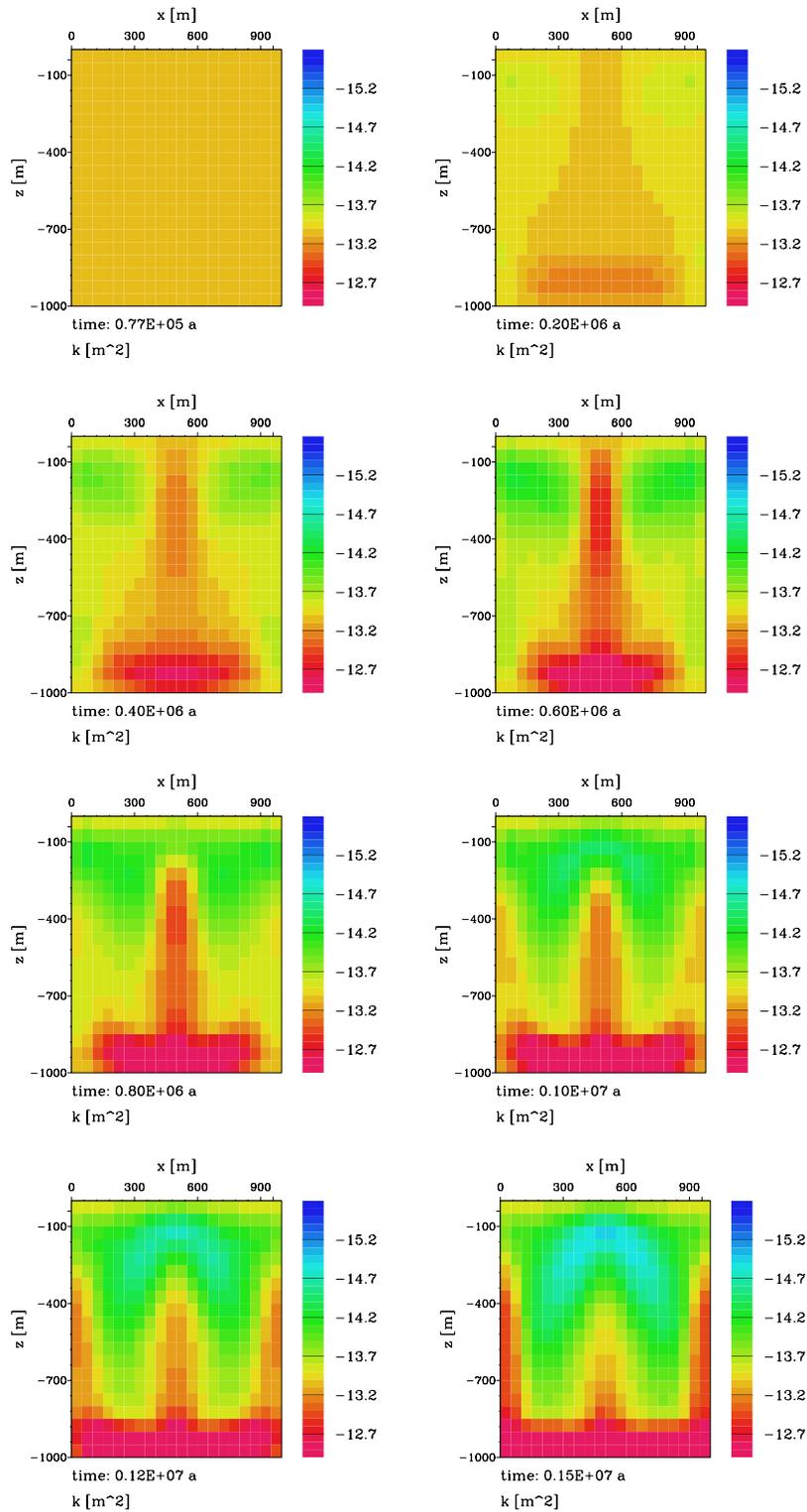


Abbildung 3.34: Entwicklung der Permeabilität einer homogenen Struktur durch Einwirkung einer doppelten Konvektionszelle (SiO_2). Deutlich ist die Dominanz der hochpermeablen Zonen zu erkennen. Da hier, wie auch in den Darstellungen im letzten Abschnitt, *no-flow*-Randbedingungen gesetzt sind, konzentrieren sich die durchlässigen Strukturen an den Rändern. Dies ist schon mehrfach in der Literatur erwähnt worden [z. B. Raffensberger, 1996]. Klar zu erkennen ist die Umkehrung der Flußrichtung.

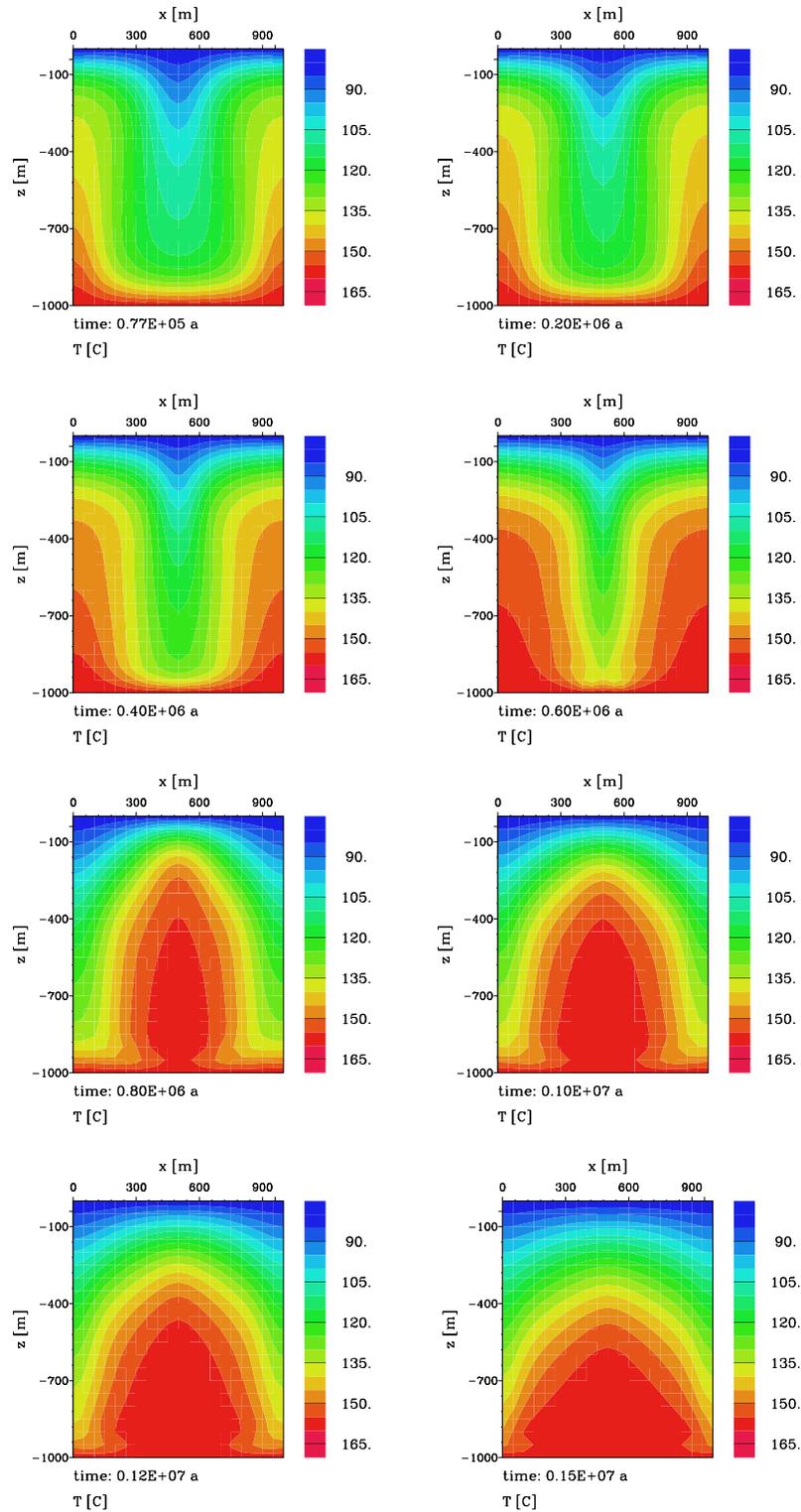


Abbildung 3.35: Entwicklung der Temperaturverteilung für das Modell aus 3.34

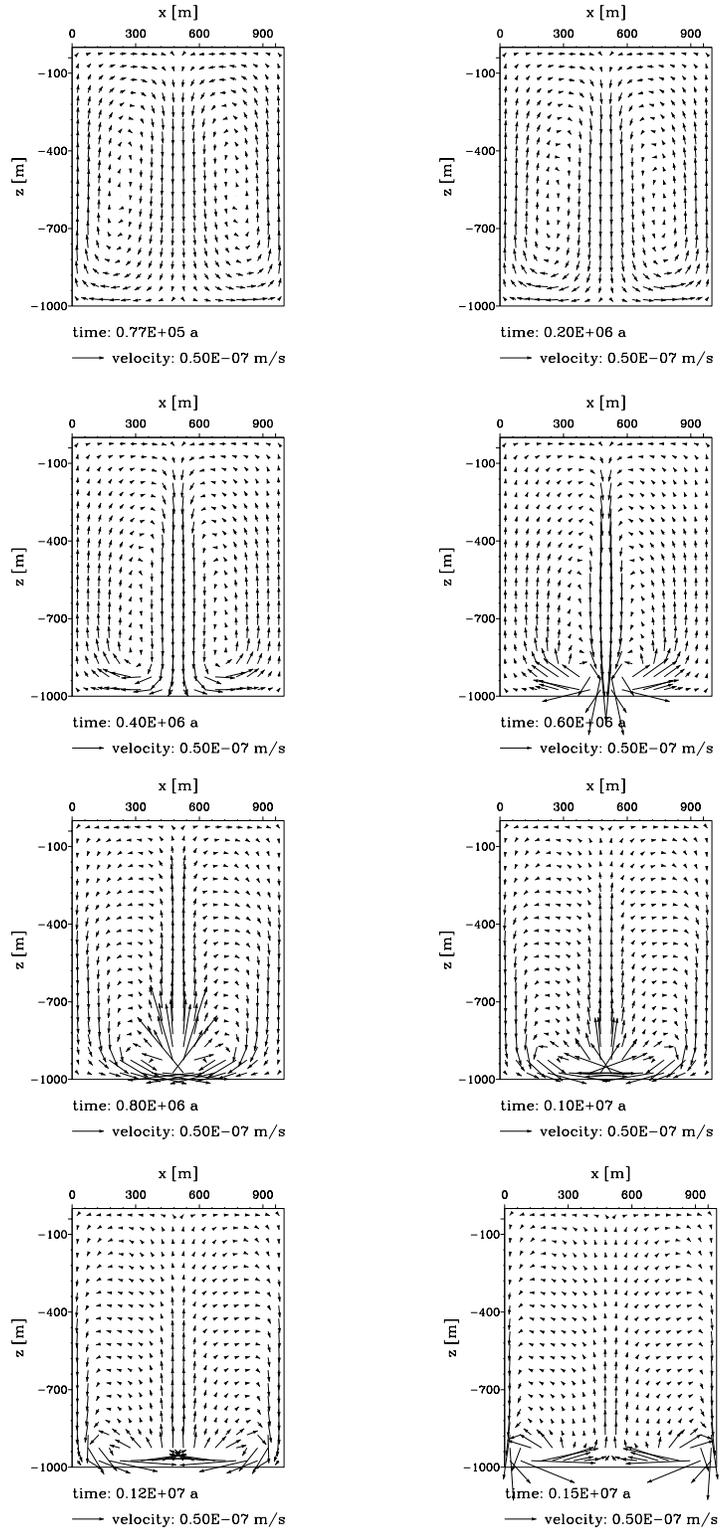


Abbildung 3.36: Flußgeschwindigkeiten für das Modell aus 3.34

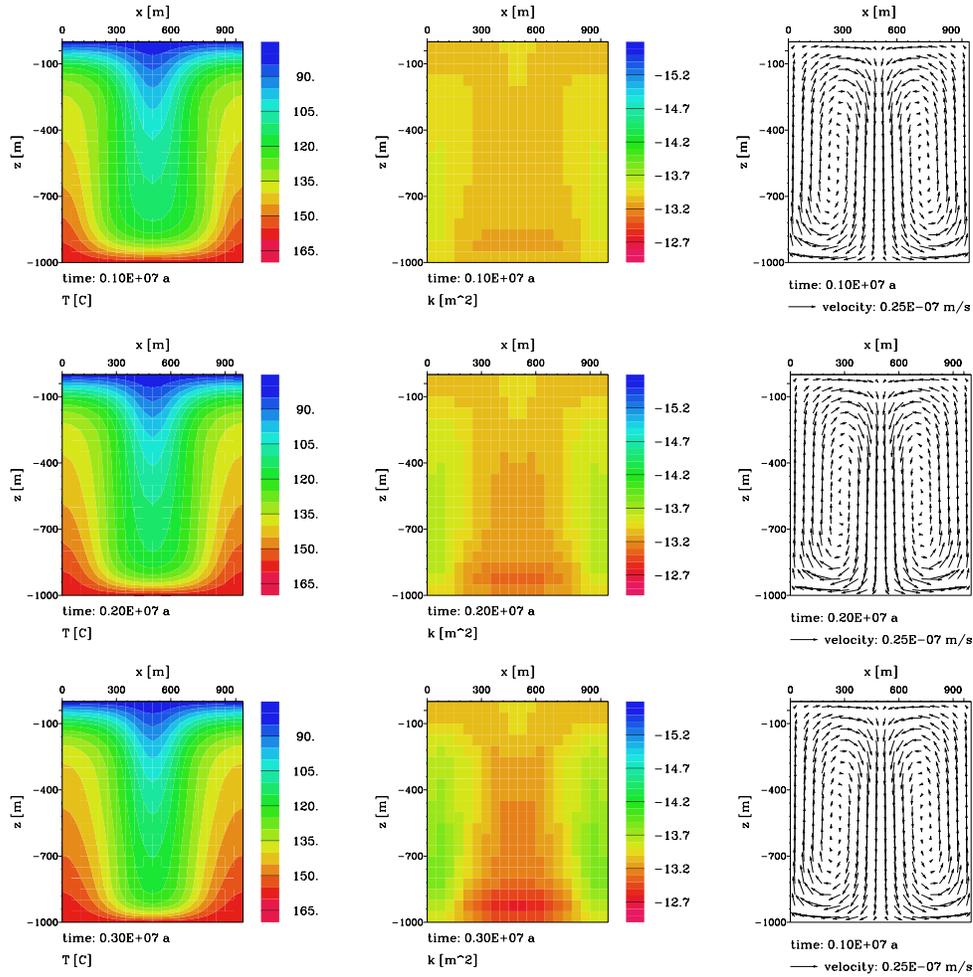


Abbildung 3.37: Zum Vergleich zu Abb. 3.34: Permeabilitätsentwicklung durch Umverteilung von CaCO_3 unter den gleichen Bedingungen. Zunächst ist hier die deutlich längere Zeitskala zu bemerken: Es wird unter gleichen Bedingungen weit weniger Kalzit bewegt. Erst nach mehreren Ma bilden sich Strukturen heraus, die dem oben gezeigten entsprechen. Die Entwicklung ist insgesamt diffuser als im Fall von Quarz.

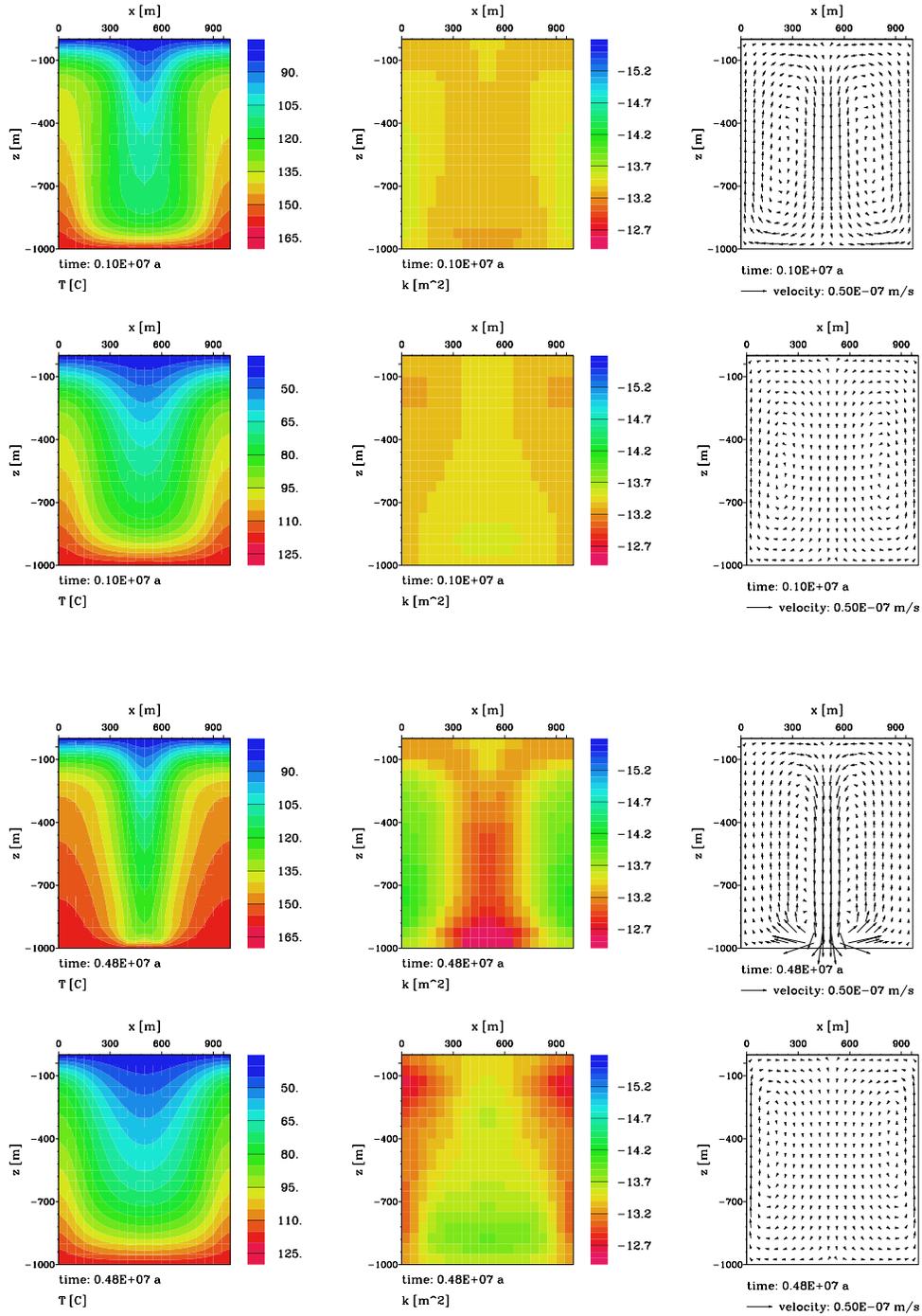


Abbildung 3.38: Bedeutung des retrograde Lösungsverhalten des Kalzits bei geringen Drücken für die Permeabilitätsentwicklung. Oben: $t = 1 \text{ Ma}$. Unten: $t = 6 \text{ Ma}$.

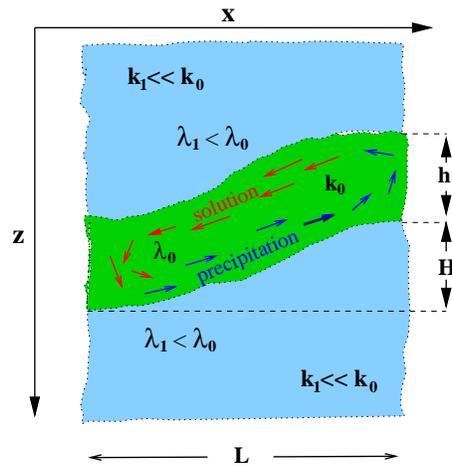


Abbildung 3.39: Prinzipskizze der Ausgangssituation für die folgenden Modellrechnungen. Physikalisch ist das Modell durch eine permeable Schicht (Index 0) mit einer Permeabilität k_0 und einer Wärmeleitfähigkeit λ_0 gekennzeichnet, die von impermeablen Schichten (Index 1) begrenzt wird. Mit anderen Worten: es gilt $k_0 \gg k_1$, so daß sich der Konvektionsvorgang im wesentlichen in der Schicht 0 abspielt. Die Mächtigkeit beträgt ≈ 400 m.

3.2.3 Freie Konvektion in geneigten Schichten

Freie Konvektion ist bekanntlich gebunden an die Überschreitung der kritischen Rayleighzahl \mathcal{R}_{krit} des untersuchten Systems. Im idealen Fall findet unterhalb dieses Wertes, der je nach angesetzten physikalischen Parameterwerten und gewählten Randbedingungen zwischen 20 und 40 liegt, keine Konvektionsbewegung statt. Ist $\nabla T \nparallel g$, ist die jedoch die Fluidverteilung in keinem Fall stabil, d. h. es findet immer Konvektion statt. Ihr quantitatives Ausmaß ist allerdings beliebig klein. Die Bedeutung liegt jedoch darin, daß auch in unterkritischen Situationen über lange Zeit hinweg relevante Flußraten bestehen können. Insbesondere erscheint dies wichtig durch die geometrischen Erfordernisse, die im Idealfall der horizontalen Schicht äußerst restriktiv sind.

Ein wichtiger, in vielen Publikationen behandelter Spezialfall ist die Konvektion in geneigten Schichten. Hier soll ein Modell für eine sanft gefaltete Schicht [Wood and Hewett, 1982, Davis et al., 1985, Hewett, 1986] gezeigt werden, welches durch eine sin-förmige Zone hoher Permeabilität $k_0 = 10^{-13} \text{ m}^2$ mit einer Mächtigkeit von $\approx 400 \text{ m}$ realisiert wird. Eine Besonderheit dieser Konfiguration besteht darin, daß die stationäre Konvektionsrichtung vom Kontrast der thermischen Leitfähigkeiten λ_0 und λ_1 abhängt (Abb. 3.39). In den folgenden Abbildungen werden jeweils beide Fälle gezeigt. Startmodell ist, wie bei allen Modellen zur freien Konvektion, eine stationäre Verteilung von Fluß und Temperatur (Abb. 3.40).

Das Ergebnis einer Zirkulation über 4 Ma für beide Fälle ist in Abb. 3.42 zu sehen. Die durch die unterschiedliche Fließrichtung bedingten Unterschiede in der Permeabilitätsstruktur sind deutlich zu erkennen. Qualitativ stimmt die Verteilung von Geschwindigkeiten, Temperatur und Permeabilität mit den analytischen Ergebnissen von Davis et al. [Davis et al., 1985, Hewett, 1986] überein. Diese sind allerdings unter einer Reihe von Voraussetzungen gültig, die u. A. auch einen konstanten Löslichkeitsgradienten und eine geringe Faltenamplitude ($H/L \ll 1$) beinhalten, so daß ein direkter und vor allem quantitativer Vergleich nicht sinnvoll erscheint. Die innerhalb der permeablen Struktur entstandenen Kontraste sind etwa gleich groß ($k_{min}/k_{max} \approx 0.4$, vgl. Abb. 3.41), jedoch die geometrische Verteilung vollkommen verschieden. Die entstehenden Zonen erhöhter Permeabilität, die künftige Transportwege prejudizieren dienen, sind im Fall B an die Faltenflanken gebunden, während im Fall A die Antiklinen anomal hohe Porositäten aufweisen. Gleichzeitig erhöht sich hier die Porosität der Schicht mit der Tiefe. Ein noch komplizierteres Zirkulationsmuster entsteht, wenn eine Faltenasymmetrie eingeführt wird. In dem hier gezeigten Modell wurde durch eine lineare horizontale Gitterdeformation eine Struktur generiert, die im rechten Teil eine wesentlich größere Neigung aufweist. Abb. 3.42(b) zeigt die Verhältnisse nach 4 Ma.

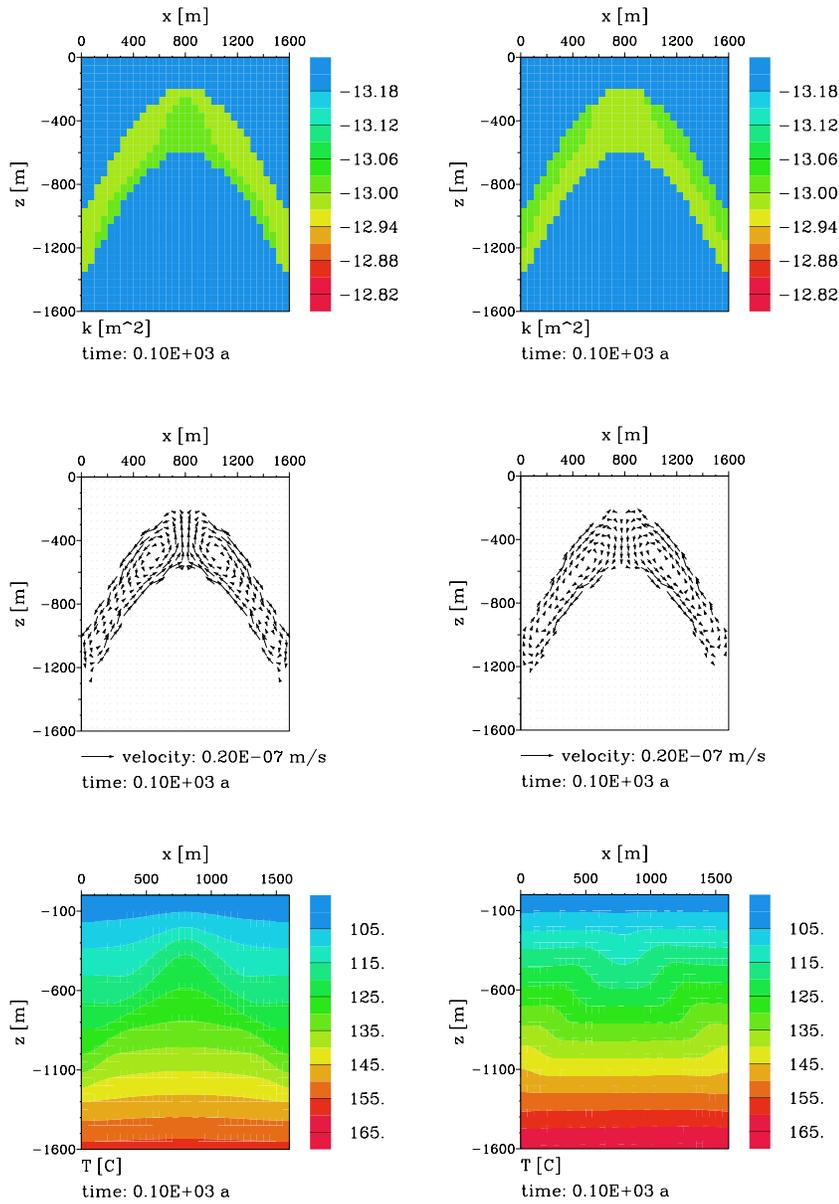


Abbildung 3.40: Simulationen einer gefalteten Schicht ($t = 10$ ka). Wie schon im Text erläutert, besteht der Unterschied der beiden Seiten in einem inversen Kontrast der Wärmeleitfähigkeit. Diese scheinbar harmlose Differenz in den physikalischen Eigenschaften zu einem völlig anderen Verhalten der Konvektionszellen. Links wurde $\lambda_0 > \lambda_1$ angesetzt (Fall A), rechts ist das Verhältnis umgekehrt (Fall B). Die absoluten Werte sind 2.5 und $2 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$.

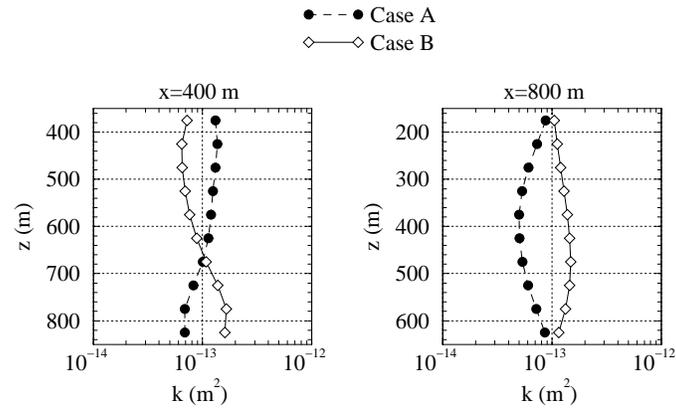
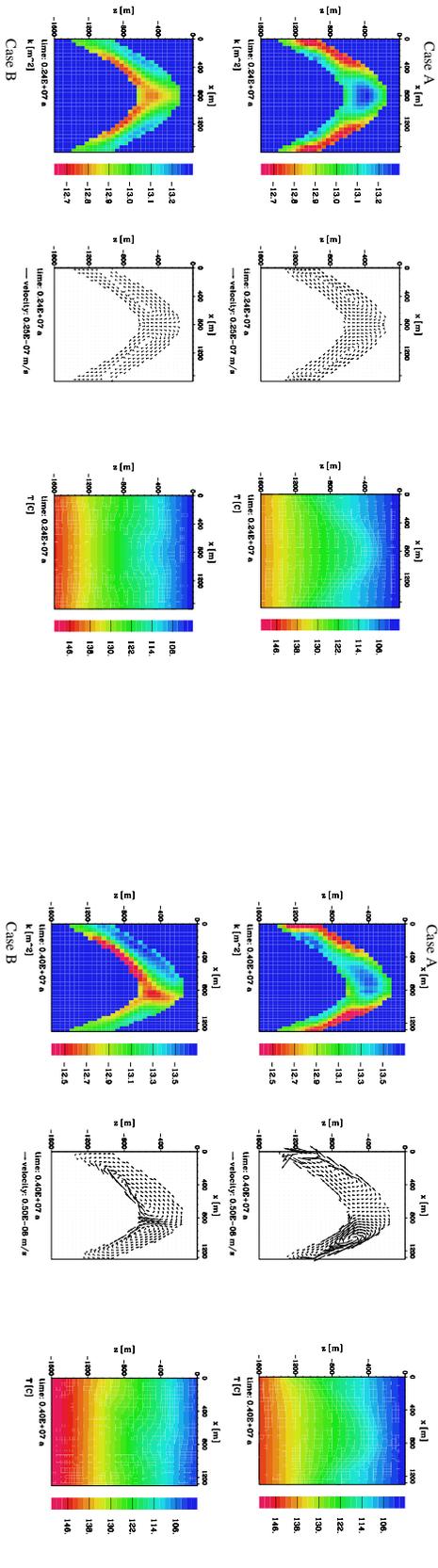


Abbildung 3.41: Vertikale Permeabilitätsprofile bei ≈ 400 und 800 m des oben gezeigten Modells, entsprechend Flanke und Scheitel der Falte. Die Abweichungen vom Startwert sind invers zueinander, und erreichen zu diesem Zeitpunkt ($t = 2.5$ Ma) eine Maximalamplitude von 0.4 Dekaden (einem Faktor von 2.5 entsprechend) auf. Die Vertikalausdehnung des Reservoirs ist jeweils 500 m bei einer Faltenamplitude von 400 m.

Wie man sieht, sind die hier in vergleichsweise kurzen Zeiten erreichten Veränderungen der Porosität/Permeabilität durchaus signifikant und könnten an Paläosystemen unter günstigen, vor allem über punktuelle Werte hinausgehenden Aufschlußbedingungen durchaus verifiziert werden. In der hier einbezogenen Literatur konnten allerdings keine für eine solche Untersuchung geeignete Daten gefunden werden.



(a) Symmetrische Falte nach 2,4 Ma. Die maximale Porositätsdifferenz ist ,25%. Bei dieser Modellrechnung wurde ein Exponent $\gamma = 5$ benutzt.

(b) Asymmetrische Falte nach 4 Ma. Von der ursprünglichen Porositätsverteilung ist nach dieser – geologisch kurzen – Zeit nur noch wenig erhalten. Die zunächst einheitlichen Porositäten von 3% für den Aquifer haben sich zu einem Bereich von 0,2 - 4% aufgespreizt.

Abbildung 3.42: Permeabilitätsstruktur (links), Fluidzirkulation (mitte) und Temperaturverteilung (rechts) jeweils für beide Zirkulationsrichtungen. Die Porositätsverteilung ist deutlich unterschiedlich: In einem Fall bildet sich eine Zone stark verminderter Durchlässigkeit in den Antiklinalen heraus, während im anderen Fall sonst die Permeabilität dort erhöht wird. Die Porositätsverhältnisse an den Flanken sind invers zueinander.

3.2.4 Konvektion im Krustenmaßstab: Zufallsmodelle

Konvektionszellen in krustalem Maßstab sind unwahrscheinlich. Die in die kritische Raleighzahl

$$\text{Ra} = \frac{k\rho_f^2 g \alpha_f c_f \Delta T H}{\lambda \mu_f}$$

eingehenden physikalischen Parameter lassen nur die Permeabilität k und das durch das geothermische Regime bestimmte Temperaturdifferenz ΔT . Bei realistischen Annahmen über einen mittleren Temperaturgradienten – ganz zu Schweigen von dem bei quarzreichen Lithologien schnell erreicht Übergang zu duktiler Deformation bis hin zur partiellen Schmelze – bleibt k als kritischer Parameter übrig. Der kritische Wert (bei isothermale oberem Rand von 300 °C) wird nahe 10^{-16} m^2 erreicht – im obersten Bereich der von Clauser and Huenges [1995] gegebenen Werte. Darüberhinaus ist es schwer zu glauben, daß eine hydrodynamisch derartig einförmige mächtige Krustenstruktur vorliegt. Daher wurden für diese Modellreihe ähnlich wie im eindimensionalen (vgl. Abschn. 3.1.3) Zufallsmodelle untersucht. Ein erstes, zunächst nicht erwartetes Ergebnis dieser Untersuchungen ist die große Stabilität der Zirkulationssysteme in Bezug auf die Zufallsstörungen von Porosität/Permeabilität. Dies ist beispielhaft dokumentiert in Abb. 3.45.

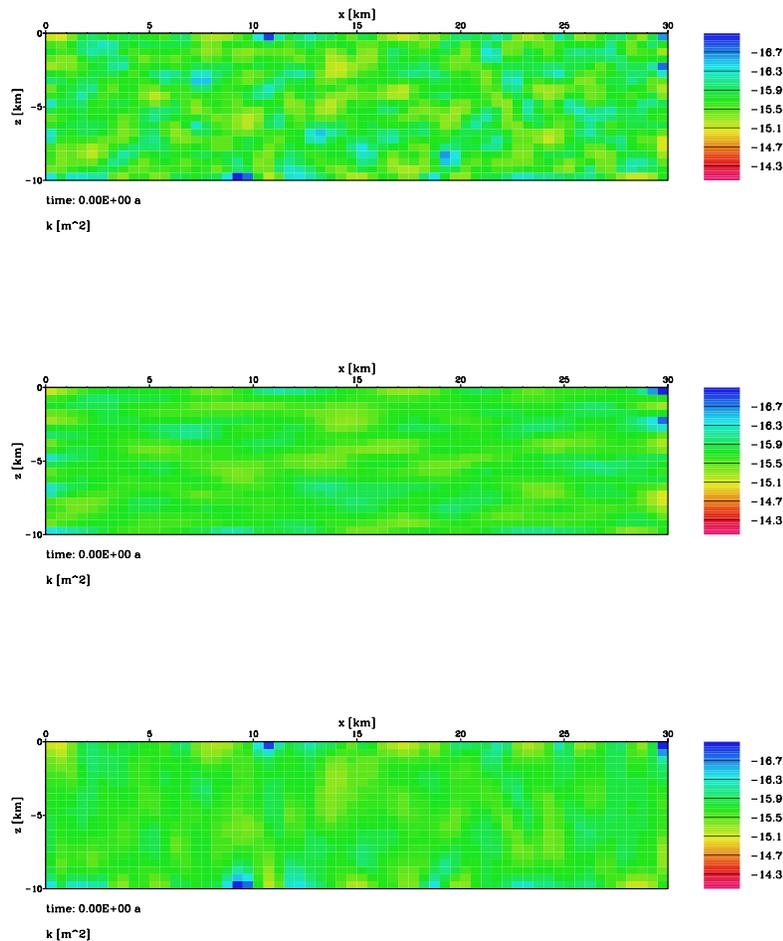


Abbildung 3.43: Startmodelle für die in diesem Abschnitt behandelten Modelle.

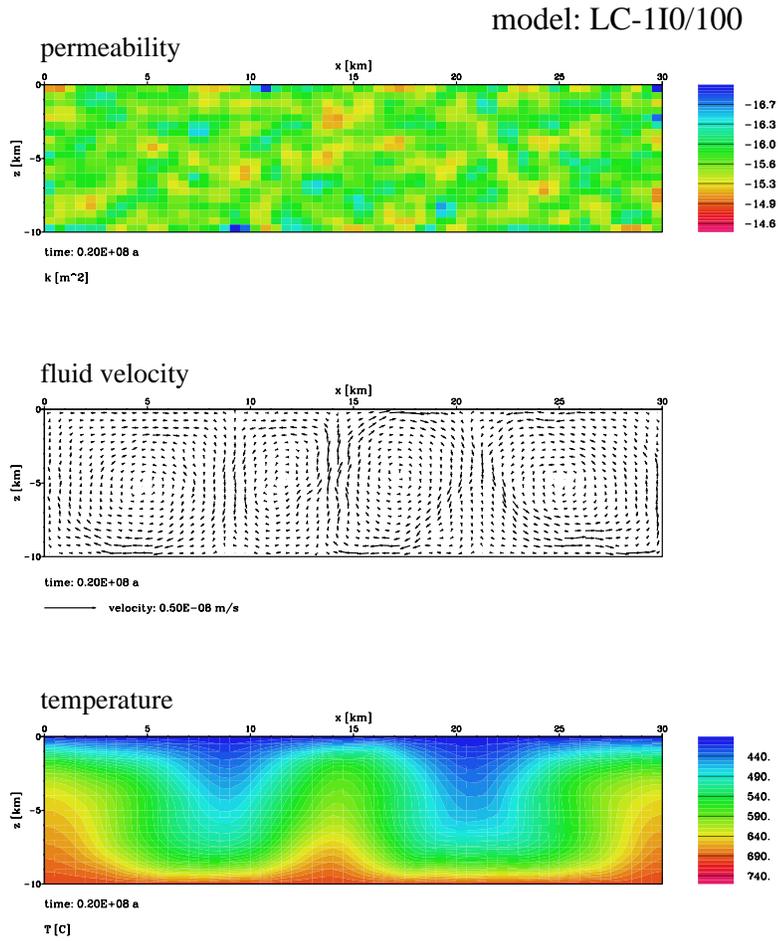
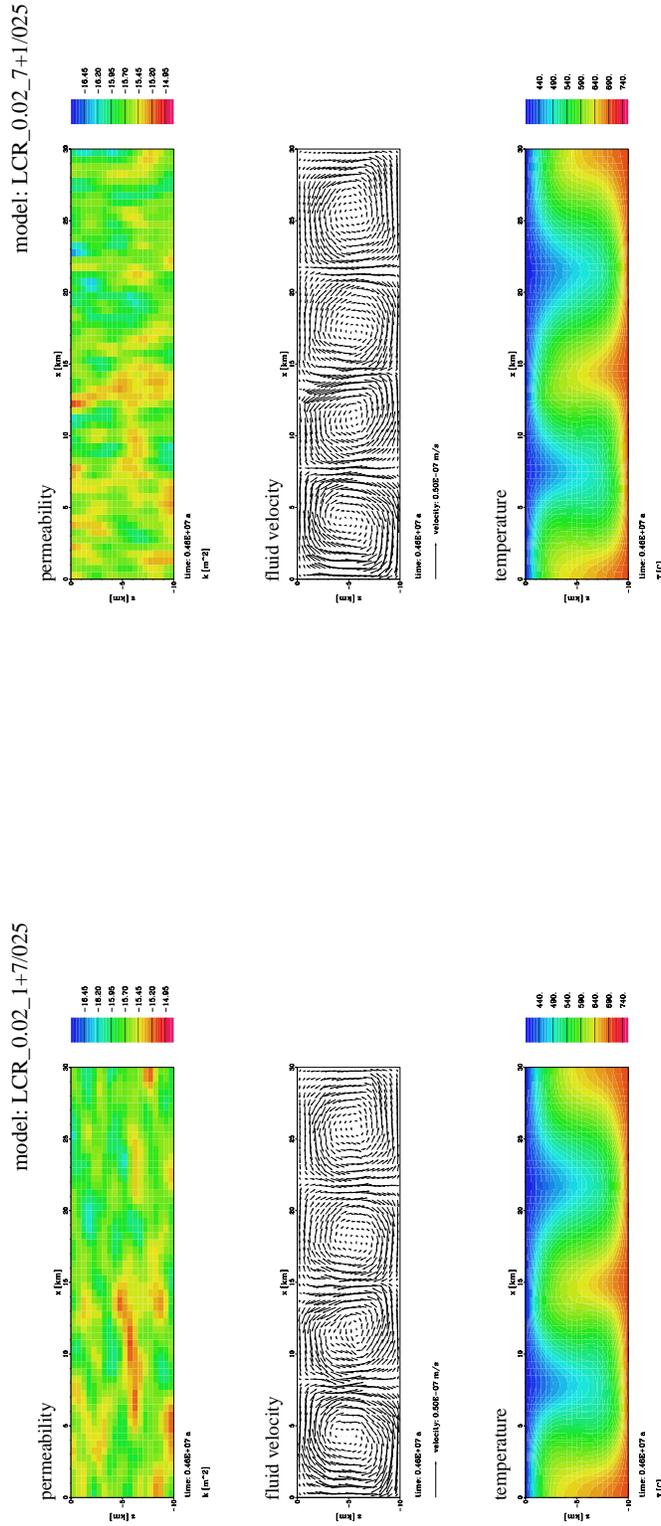


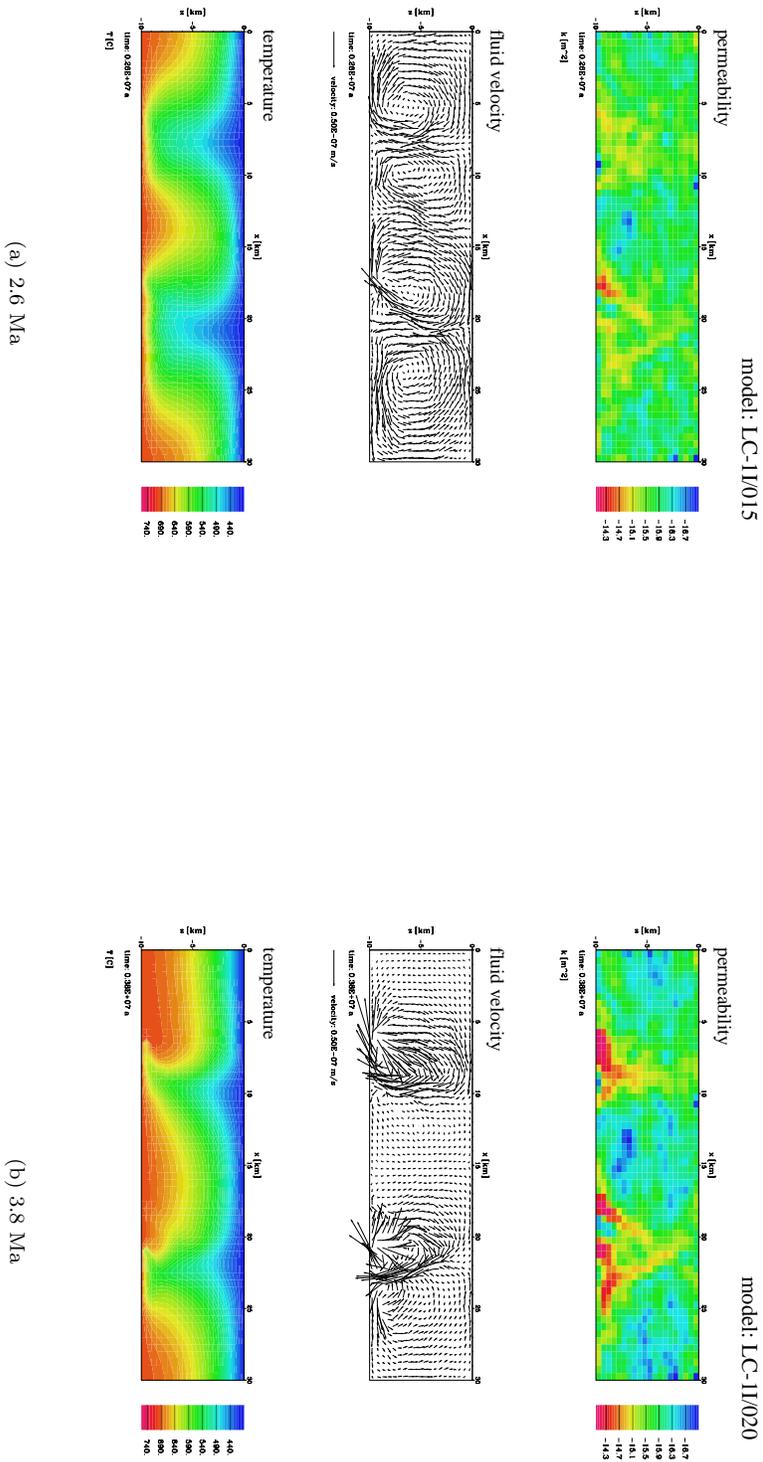
Abbildung 3.44: Stationäre Konvektion in einer 10 km dicken Krustenschicht, die in ihren Parametern etwa einer Tiefe der Oberkante von 15 km und etwa 400 deg entspricht. Die mittlere Porosität 0.03 und Permeabilität ($2 \cdot 10^{-16}$ liegt im oberen Bereich der in für die Kruste geschätzten Werte. Es ergibt sich eine leicht verzerrte trizelluläre Konvektion.



(a) Horizontale Glättung

(b) Vertikale Glättung

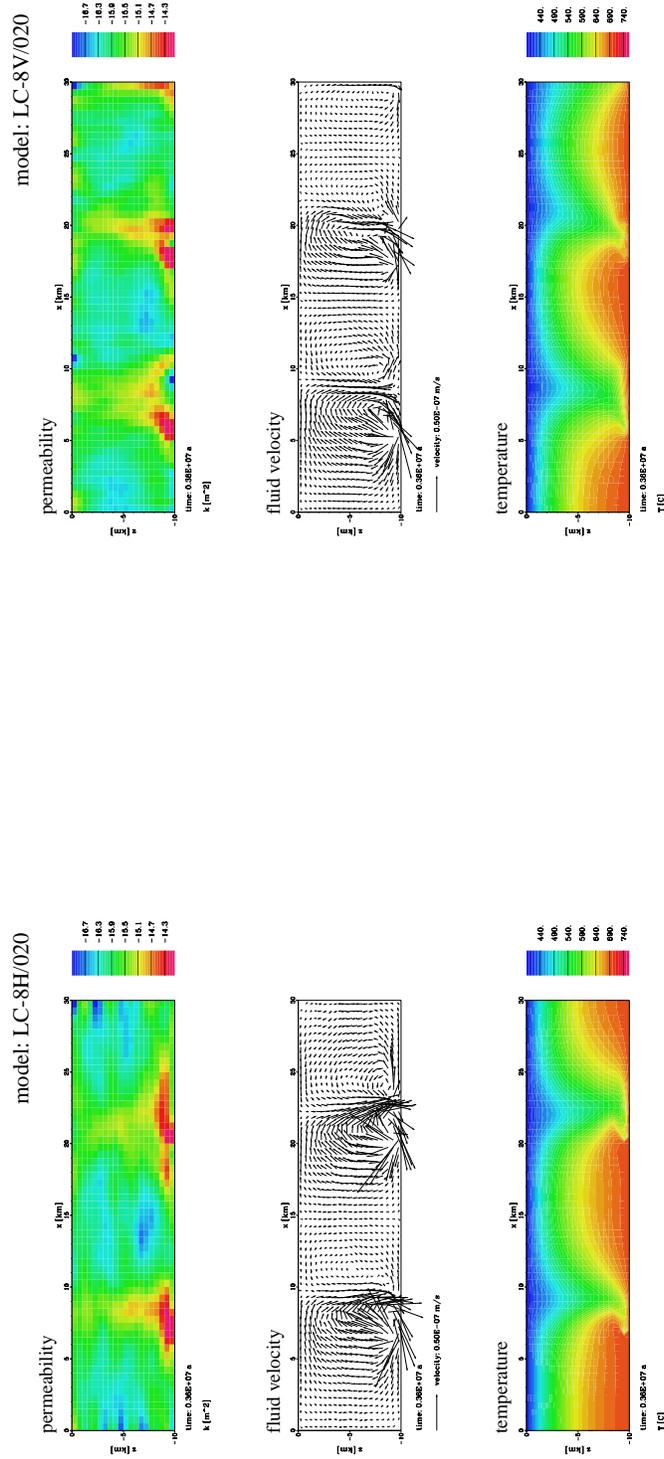
Abbildung 3-45: Stationäre Konvektion in Zufallsmedien. Hier wurde eine normale Porositätsverteilung mit dem Mittelwert 0.02 und einer Varianz von 0.01 angenommen. Ähnlich wie in den anderen Abschnitten wurde durch Glättung eine anisotrope Korrelation erzeugt. Überraschend ist die Stabilität der Zirkulationsformen bei derartigen Inhomogenitäten.



(a) 2.6 Ma

(b) 3.8 Ma

Abbildung 3.46: Schicksal der in Abb. 3.44 vorgestellten Struktur nach ca. 2.6 und 3.8 Ma. Deutlich ist die Herausbildung der hochpermeablen Kanäle in der unteren Modellhälfte, sowie die sanfte Abnahme der Permeabilität im überwiegenden Teil des Modells. Ergebnis der Entwicklung ist dort das fast vollständige Verschwinden permeabler Strukturen, die sich am unteren Modellrand drängen.



(a) Horizontale Glättung

(b) Vertikale Glättung

Abbildung 3.47: Gleiche Darstellung wie in Abb. 3.46 für stark anisotrope Verhältnisse. Die Porositätsverteilungen wurden hier jeweils mehrfach (8) horizontal oder vertikal geglättet, um unterschiedliche Korrelationslängen zu erreichen.

Die Modellrechnungen dieses Typs zeigen generell die Herausbildung einer oder mehrerer hochpermeabler Zonen, die meist eine sehr geringe Mächtigkeit aufweisen und unrealistisch hohen Porositäten > 0.1 erreichen. Das hier in räumlich sehr kleinen Zonen bestehende Massendefizit wird im überwiegenden Teil des Modells durch eine reduzierte Durchlässigkeit ausgeglichen. Die Extremzonen konzentrieren sich an den Rändern – insbesondere dem unteren. Dies ist eine Beobachtung, die durchaus mit den in der Literatur veröffentlichten vergleichbaren Arbeiten [z. B. Steefel and Lasaga, 1994] vereinbaren lassen. Es handelt sich dabei um keinen numerischen Effekt der Ränder, wie man zunächst vermuten könnte, sondern ist der Tatsache geschuldet, daß:

- wegen der heftigen Zirkulation der Temperaturgradient selten vertikal ist,
- vor allem am unteren Rand die Fluidbewegung in horizontale Richtung – und damit in die Richtung starker Gradienten der Löslichkeit – gezwungen wird,
- und der Löslichkeitsgradienten bei den hohen Temperaturen deutlich größer ist als im oberen Teil des Modells.

Die Selbstverstärkung des Lösungsprozesses tut das Übrige. In Abb. 3.48 wurde der Rand des Modells durch einen graduellen Übergang zu geringerer Permeabilität ersetzt. Es ist zu erkennen, daß das prinzipielle Ergebnis erhalten bleibt, wenn sich auch jetzt die Zone erhöhter Permeabilität in einigen Bereichen geringfügig nach unten – d. h. über den alten Modellrand hinaus verlagern kann. Eine rein numerischer Effekt kann daher ausgeschlossen werden.

Bei längeren Simulationen deutet sich oft eine zumindest anteilig oszillierende Entwicklung der Porosität an. Die gilt z. B. für das in Abb. 3.47 gezeigte Modell, welches einen Porositätszyklus mit einer Periode bei 1 Ma zeigt. Dieser Effekt ist jedoch nicht weiter untersucht worden.

Bei derartig extremen Ergebnissen muß die Frage gestellt werden, was an einem solchen Verhalten realistisch ist. Die Annahme des Gleichgewichts der Lösung mit der Matrix, und damit die vollständige Ausscheidung/Lösung ist eine Maximalannahme. Sie impliziert den Transport als begrenzenden Faktor des Lösungsprozesses. Dies ist generell nicht so: insbesondere bei hohen Fluidgeschwindigkeiten – und in den Bereichen quasi instabiler Wachstums der hochpermeablen Zonen kann diese beträchtlich wachsen – gerät man mitunter aus dem Geltungsbereich dieser Voraussetzung hinaus. Wichtiger ist jedoch die Einschränkung, die in der nicht deformierbaren Matrix liegt. Bei den hohen Temperaturen dieser Simulation ist die Rheologie der Kruste sicher nicht mehr als spröde anzusehen. In den hier betrachteten Zeiträumen in der Größenordnung von 3 Ma kann ein solches Fluidsystem kaum bestehen bleiben. Die Entwicklung wird daher in der Realität nicht zu derartig extremen Ergebnissen führen, jedoch einen merklichen Massenverlust in diesen Bereichen hervorrufen. Dies quantitativ zu untersuchen liegt jedoch jenseits dieser Arbeit.

3.2.5 Folgerungen

Wie aus den zuletzt gezeigten Modellen hervorgeht, ist es prinzipiell möglich, durch Konvektionsbewegungen Barrieren geringer Permeabilität zu erzeugen. Dabei sind jedoch einige wichtige Aspekte zu beachten.

Freie Konvektion setzt im Gegensatz zu den im letzten Kapitel behandelten *one-pass*-Bewegungen quasi hydrostatische Druckgradienten voraus und ist daher weit stärker durch die Temperaturverteilung und ihre Entwicklung gekennzeichnet. Diese muß jedoch keinesfalls durch Vertikalgradienten geprägt sein, besonders wenn heftige Zirkulation vorherrscht (z. B. Abschn. 3.2.1).

Die Veränderung von Porosität und Permeabilität, die mit der Zirkulation einhergeht, macht die bei moderaten Rayleighzahlen (< 100) vorherrschende stationäre Konvektion letztlich instationär. Ein derartiges System durchläuft meist eine ganze Reihe von Zuständen, die jeweils durch andere Rayleighzahlen und Zirkulationsmuster gekennzeichnet sind. Kurze intermittierende Perioden von instabilen

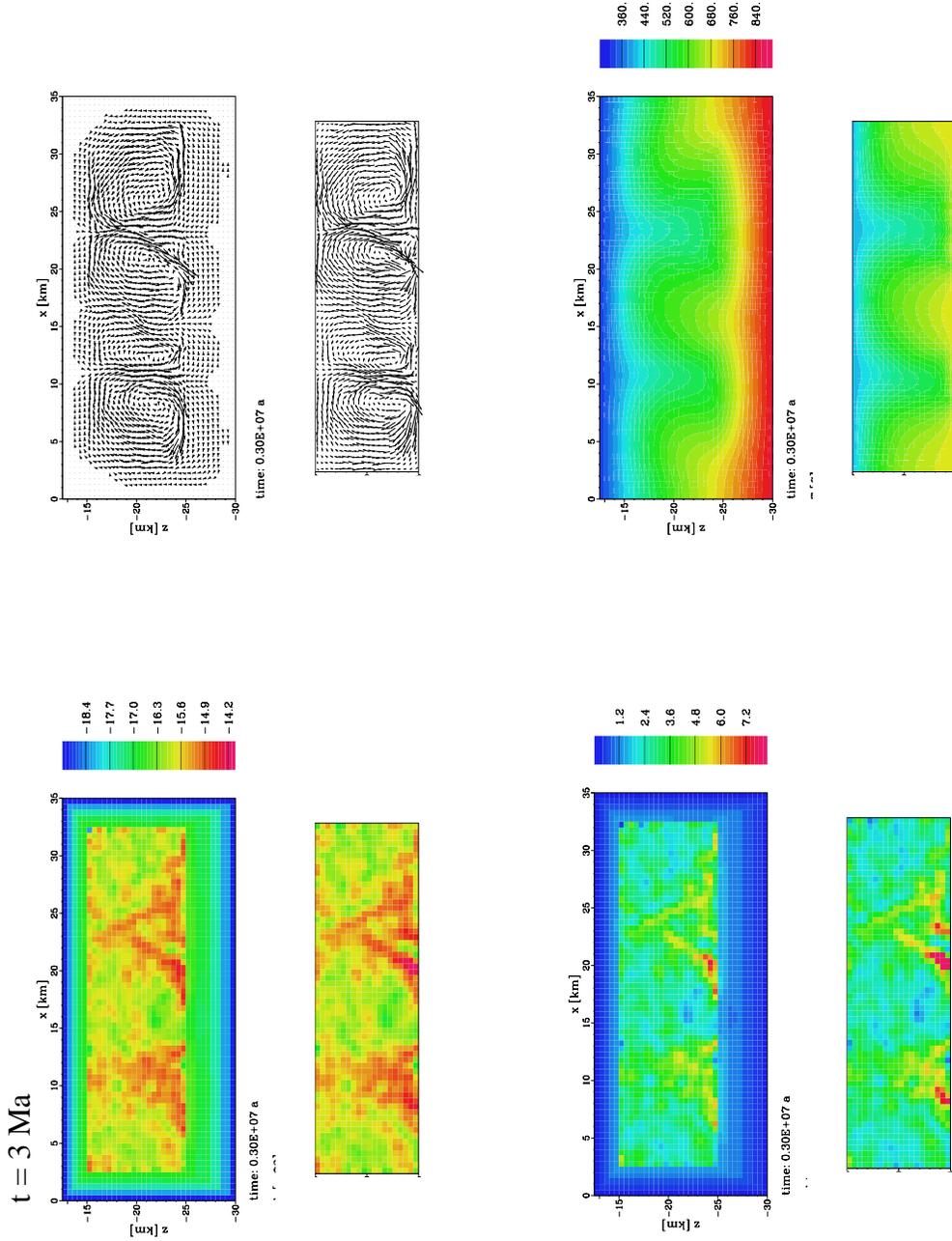


Abbildung 3.48: In diesem Modell wurde eine Realisierung der oben gezeigten isotropen Modelle mit einem Rand ergänzt, der sanft zu einer geringen Permeabilität abfällt. Die Herausbildung der am ehemaligen unteren Rand sichtbaren Hochpermeabilitätszone ist hier ebenso deutlich wie in den durch direkte Randbedingungen gekennzeichneten Rändern.

Bewegungsformen können u. U. asymmetrische Verteilungen hervorrufen (Abschn. 3.2.1). Die wesentlichen Zirkulationsformen erweisen sich jedoch als sehr stabil beispielsweise gegenüber Zufallsstörungen verschiedenster Amplitude Korrelationslängen (Abschn. 3.2.4).

Freie Konvektion ist ein zirkulärer Prozeß und umfaßt sowohl den Fall positiver wie negativer Rückkopplung, wie sie im letzten Kapitel (Abschn. 3.1.2) untersucht wurden. Demgemäß führt sie immer zu besonders ausgeprägten lokalisierten Zonen hoher Permeabilität, im Gegensatz zu relativ diffusen Abdichtungsbereichen. Die stärksten Änderungen der Permeabilität erfolgen, wenn Temperaturgradient und Fluidbewegung (anti)parallel verlaufen. Dies ist oft der Fall, wenn Randbedingungen oder vorgegebene Barrieren eine derartige Zirkulation erzwingen. Dies ermöglicht eine große Bandbreite möglicher Verteilungsformen, die von fast geschichteten bis hin zu vertikalen Barrieren reichen. Insbesondere findet eine Herausbildung hochpermeabler Bereiche an den Modellrändern statt [vgl. dazu Steefel and Lasaga, 1994], wobei sich oft der untere Rand auszeichnet. Dies beruht vermutlich darauf, daß sowohl die Fluidviskosität wie auch die Löslichkeit stark Temperatur- und druckabhängig ist. Fluidbewegung und Lösung sind daher hier besonders intensiv und führen bei positiver Rückkopplung zu unrealistisch hohen Porositäten. Insgesamt kann so durchaus eine Horizontalgliederung entstehen, ohne daß dies zwingend der Fall ist.

Praktisch konkurriert die Umverteilung durch freie Konvektion, die durch Zeitkonstanten von 10^5 bis 10^7 a geprägt ist, mit einer Reihe von Prozessen (insbesondere der Deformation), die die oben beschriebenen Wirkungen einschränken oder gar zunichte machen können.