

FLUIDSYSTEME IN DER KRUSTE:
MODELLRECHNUNGEN ZUR ENTSTEHUNG
IMPERMEABLER BARRIEREN

Dissertation zur Erlangung des Doktorgrads am
Fachbereich Geowissenschaften der Freien Universität Berlin,

vorgelegt von:

*Volker Rath*¹

26. Juni 2000

¹Institut für Geologie, Geophysik und Geoinformatik, Freie Universität Berlin, Malteserstr. 74-100, D-12249 Berlin

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	1
Zusammenfassung	5
1 Zur Fragestellung dieser Arbeit	9
2 Grundlagen und Numerik der Modellrechnungen	21
2.1 Grundgleichungen	21
2.2 P-T-Eigenschaften des Systems	24
2.3 Numerische Lösung	32
2.3.1 Diskretisierung I: Finite Elemente	34
2.3.2 Diskretisierung II: Zeitschritt	36
2.3.3 Diskretisierung III: Nichtlineare Iteration	40
2.3.4 Lineare Gleichungssysteme	41
2.3.5 <i>Upwind</i> -Verfahren	45
2.3.6 Konzentrierte vs. konsistente Massenmatrix	51
2.4 Verifizierung des Verfahrens und numerische Tests	53
2.5 Quarzlösung	56
2.5.1 Numerik der Quarzdeposition	63
2.5.2 Quarzlöslichkeit	64
2.5.3 ϕ - \mathbf{K} -Relationen	66
2.5.4 Validierung des gekoppelten Gesamtverfahrens	69
2.5.5 Folgerungen	73
3 Modellrechnungen	75
3.1 <i>One-Pass</i> -Modelle	79
3.1.1 Homogene Modelle: Die Rolle der Randbedingungen	80
3.1.2 Homogene Modelle: Instabile Entwicklung	80

3.1.3	Inhomogene Modelle: Schichten und Zufallsmodelle	91
3.1.4	Folgerungen	107
3.2	Freie Konvektion	109
3.2.1	Freie Konvektion: Ein einfaches Beispiel?	110
3.2.2	Freie Konvektion in der Diagenese: SiO_2 vs. CaCO_3	112
3.2.3	Freie Konvektion in geneigten Schichten	121
3.2.4	Konvektion im Krustenmaßstab: Zufallsmodelle	125
3.2.5	Folgerungen	130
4	Was bedeuten die Ergebnisse der Krustengeophysik?	133
4.1	Die elektrische Leitfähigkeit der Kruste	134
4.1.1	Leitungsträger	137
4.1.2	Temperaturverhalten	140
4.1.3	Verteilungsgeometrie	141
4.1.4	Grenzflächenphänomene	144
4.2	Der Beitrag der Krustenseismik	147
4.3	Diskussion und Folgerungen	151
	Literatur	156
	Werdegang	185
	Danksagung	186

1. Gutachter : Prof. Dr. Volker Haak

2. Gutachter : Prof. Dr. Serge A. Shapiro

Disputation : 21. Oktober 1999

Zusammenfassung

Ausgangspunkt dieser Arbeit war die Hypothese fluidreicher Zonen im mittleren bis unteren Krustenbereich ($z > 10$ km), die von vielen Autoren auf Basis petrologischer und geophysikalischer Argumente formuliert wurde. Ihr muß trotz im einzelnen konkurrierender Annahmen immer noch eine hohe Wahrscheinlichkeit zugestanden werden [Marquis and Hyndman, 1992]. Es ist es jedoch schwer, die Existenzbedingungen solcher Systeme unter den geforderten Bedingungen zu quantifizieren. Oberflächenmessungen liefern zwar Indizien für ihre Existenz (Kap. 4), die so gewonnenen Daten sind aber kaum für quantitative Aussagen geeignet. Dies liegt an einer Reihe besonderer Schwierigkeiten, die teils in der begrenzten Auflösung der beteiligten Methoden geochemisch-petrologischer wie geophysikalischer Art begründet sind, teils mit den sehr komplizierten Prozessen zusammenhängen, die unseres Wissens in diesen Krustentiefen ablaufen. Auch nach dem Abschluß der Kontinentalen Tiefbohrung (KTB) hat sich die Situation nur wenig verbessert, da die dort gewonnenen Erkenntnisse über die vorherrschenden Leitungsmechanismen eher auf eine Entkoppelung der geophysikalischen und hydrodynamischen Eigenschaften hindeuten und eine Extrapolation auf Verhältnisse in größeren Tiefen problematisch machen.

Fluidsysteme können unter den Bedingungen der tiefen Kruste nur dann als solche über geologisch lange Zeiten erhalten bleiben, wenn zumindest lokal der Poreninnendruck dem lithostatischen Druck entspricht. Die hohe Mobilität fluider Phasen macht die Transporteigenschaften des Systems Gestein-Fluid – insbesondere die Permeabilität – zu einem entscheidenden Faktor für Struktur und Lebensdauer derartiger Systeme. Statische Abschätzungen führen schnell zu dem Ergebnis, daß geologische Materialien über geologische Zeiträume ($10^6 - 10^9$ a) hinweg keine derartigen Systeme aufrechterhalten können. Die hierzu erforderlichen Permeabilitäten von $\ll 10^{-23} \text{ m}^2$ liegen weit unter denen, die für Strukturen der charakteristischen Ausdehnung $> 10 \text{ km}$ angenommen werden [Clauser and Neugebauer, 1991]. Eine einfache Modellvorstellung ist das von Etheridge et al. [1983] propagierte Modell der intrakrustalen Barriere, welche eine potentiell fluidreiche Unter/Mittelkruste hydrodynamisch isolieren kann. Die von Etheridge et al. [1983, 1984] geäußerte spekulative Annahme einer Beteiligung von konvektiven Fluidbewegungen bei der Genese dieser Versiegelung führte auf die Fragestellung: Kann die Umverteilung von gelöstem Material durch advective Vorgänge die Permeabilitätsstruktur der Kruste beeinflussen?

Theorie und numerische Verfahren

In Kap. 2 dieser Arbeit wurde ein Modellierungsverfahren entwickelt, welches auf der gekoppelten Berechnung von Fluidbewegung, Wärmetransport und Porositätsentwicklung auf Basis einer advektionsdominierten Umverteilung von SiO_2 beruht. Methodisch beruht diese Methode auf der Beobachtung, daß sich die Transportgleichung für Quarz (oder ähnliche Stoffe) unter der Voraussetzung von lokalen chemischen Gleichgewichtsbedingungen als Zwangsbedingung für die Ausscheidung und Lösung deuten läßt [Phillips, 1976]. Dieser Prozeß wird durch die Temperatur- und Druckabhängigkeit des Lösungsprozesses gesteuert.

Die zu diesem Zweck entwickelte Numerik kann durch folgende Stichworte charakterisiert werden (Kap. 2):

- räumliche Diskretisierung aller Differentialgleichungen durch Finite Elemente (z. Zt. bilineare Lagrange-Elemente)
- zeitliche Diskretisierung durch Finite Differenzen in Form des θ -Schemas mit adaptiver Schritt-kontrolle
- nichtlineare Kopplung durch generelle druck- und temperaturabhängige Fluid- und Matriceigen-schaften $g_{f,m} = g_{f,m}(P_{f,m}, T)$
- Kopplung durch sequentielle Iteration
- Picarditeration für die Nichtlinearität
- SUPG-Schema für große Peclet- und Courantzahlen
- direkte oder iterative Lösungsverfahren (präkonditionierte Krylov-Verfahren) für die symme-trischen und unsymmetrischen linearen Gleichungssysteme
- Behandlung der Konzentration nach dem Verfahren von Wood and Hewett [1982] und Phillips [1991]
- Veränderung von Porosität und Permeabilität durch Ausscheidungs- und Lösungsvorgänge

Hierbei sind vor allem die letzten beiden, die Behandlung der Transportgleichung betreffenden Punkte wichtig. Bei dem verwendeten Verfahren handelt es sich um eine Lösung unter Vernachlässigung der Reaktionskinetik (Äquilibrationlänge \ll Systemdimension). Diese einfache Berechnungsmethode und das Vorhandensein von geochemischen Basisdaten über einen weiten Druck- und Temperaturbereich ermöglicht es, eine ganze Reihe Fragen zu untersuchen, die im Zusammenhang einer Selbstversiegelung durch Quarz relevant sind.

Modellrechnungen

In Kap. 3 dieser Arbeit wurden vor allem zwei Modelltypen untersucht, die potentiell für eine Selbst-versiegelung der Kruste relevant sein können. Dies sind eine – möglicherweise kanalisierte, durch vorgegebene Druckunterschiede erzwungene Bewegung der Fluide durch die Kruste (Abschn. 3.1) und die freie Konvektion im engeren Sinne (Abschn. 3.2). Diese beiden Bewegungstypen unterscheiden sich in ihren Voraussetzungen und den bestimmenden physikalischen Größen.

Bei den untersuchten **one-pass-Bewegungen** lassen sich prinzipiell zwei Regimes unterscheiden. Die Versiegelung, die auf einem Transport bei sinkenden Temperaturen beruht, ist ein negativ rückgekop-pelter Prozeß: Er führt zur Beseitigung seiner eigenen Ursachen. Im Gegensatz dazu ist der Fall einer Erhöhung der Permeabilität selbstbeschleunigend und führt zu den spezifischen Phänomenen, die als *reaktive infiltration instability* bekannt sind [Steeffel and Lasaga, 1990, Ortoleva, 1994c]. Da in den Zonen erhöhter Permeabilität die beteiligten Prozesse am intensivsten ablaufen, wird das Gesamtge-schehen dort bestimmt. Auch die Herausbildung steiler räumlicher Druckgradienten kann für einen gewissen Zeitraum eine lokale Selbstverstärkung bewirken, die jedoch bald durch die entgegenwirkende globale Abdichtung unterbunden wird.

Eine simple, eindimensionale, durch Druck- und Temperaturabhängigkeit der Löslichkeit gesteuerte Quarzumverteilung im krustalen Maßstab kann unter bestimmtem Bedingungen zu signifikanten Än-derungen des physikalischen Verhaltens eines solche Systems führen. Derartige Bewegungen werden im wesentlichen durch die Differenz von litho- und hydrostatischem Druck angetrieben. Dies impli-ziert, daß sie – im Gegensatz zu den später behandelten Konvektionsbewegungen – im wesentlichen von hohen zu niedrigen Temperaturen verlaufen. Voraussetzung für eine merkliche Wirkung sind ho-he Transportraten und/oder ausreichende Wirkungszeiten. In Bezug auf eine mögliche Rolle bei der Entstehung intrakrustaler Barrieren ist das Ergebnis nicht eindeutig: Unter realistischen Bedingun-gen liegen die für eine deutliche Änderung der Permeabilität nötigen Zeiträume nahe bei den für die

Kruste typischen Entwässerungszeiträumen (10^7 a) so daß unter günstigen Annahmen ein Einfluß zu erwarten ist.

Die Ausscheidung von SiO_2 ist nicht nur durch die Temperaturänderung determiniert, sondern in starkem Maße durch die räumlichen Eigenschaften des Druckabfalls vom lithostatischen auf den hydrostatischen Wert. Der schnellere Druckausgleich in den Bereichen hoher Durchlässigkeit führt dazu, das an vorhandenen lokalen Zonen verringerter Permeabilität ein großer Teil der Druckdifferenz abfällt. Nahezu der gesamte antreibende Druckgradient kann u. U. an vorgegebenen Barrierezonen konzentriert werden, so daß extrem hohe Werte möglich sind. Hinreichend kurze Versiegelungszeiten – d. h. deutlich $< 10^6$ a – lassen sich jedoch nur durch unrealistisch große und andauernde Fluidzufuhr erreichen. Mit dem Aufbau der dann zu erwartenden superlithostatischen Gradienten geht jedoch der Aufbau eines Drucküberschusses einher, der schnell die Festigkeit der Gesteinsmatrix übersteigen kann und so zu sprunghaften Vergrößerungen der Permeabilität führt. Die vielfache, pulsartige Fluidbewegung, wie sie beispielsweise von Nur and Walder [1992] gefordert wurde, ist mit diesem Befund konsistent.

Bei multidimensionalen Modellen kann durch eine Kanalisierung der Fluidproduktion großer Bereiche durch enge Entwässerungszonen eine Abdichtung leichter erfolgen. Die so erzielten Verschlusszeiten können hier – in Abhängigkeit von einer vorgegebenen Hintergrundpermeabilität – mehr als eine Größenordnung geringer sein. Eine etwaige horizontal ausgerichtete maximale Streßkomponente ermöglicht einen lateralen Druckabbau durch ebenso gerichtete Rißbildung, so daß der oben erwähnte Zyklus von Abdichtung und Rißbildung weniger wichtig erscheint.

Freie Konvektion ist in ihrer klassischen Form ein stationärer Prozeß, der bei gegebenen Bedingungen (Rayleighzahl) unabhängig von spezifischen Energiequellen lange quasi als Gleichgewichtsprozeß fort dauern kann. Transiente oder oszillierende Bewegungsmuster – gemessen an der thermischen Relaxation kristalliner Strukturen – sind möglich, spielen jedoch für den eigentlichen Umverteilungsprozeß keine Rolle. Im Zusammenhang dieser Arbeit sind praktisch nur die stationären Bewegungsmuster relevant.

Trotz der überraschend hohen Permeabilität der Kruste als Ganzes ist Konvektion in diesem Maßstab eher unwahrscheinlich. Da konvektive Bewegungen in relevantem Umfang nur jenseits der kritischen Rayleighzahl vorkommt, ist ihre Möglichkeit an die vorkommenden physikalischen Parameter gebunden. Die hier geforderten Permeabilitäten und Wärmeflüsse/Temperaturdifferenzen sind in der Natur nur selten verwirklicht. Die Heterogenität der Kruste erschwert die Bildung lateral ausgedehnter Zellen, macht sie jedoch nicht unmöglich. Konvektion in diesem Sinne ist ein zirkulärer Prozeß, der im Zusammenhang mit den hier betrachteten gradientengesteuerten Lösungsprozessen zur Herausbildung zusätzlicher Heterogenitäten führt und keinesfalls zu einer uniformen horizontalen Versiegelung. Die Mineralausscheidung findet in den Zonen statt, wo die höchsten Temperaturgradienten vorliegen und die Fluidgeschwindigkeit eine große (anti)parallele Komponente aufweist. Diese Bereiche sind im Allgemeinen aber nicht subhorizontal angeordnet, sondern können je nach Zirkulationstyp sehr unterschiedlich sein. Wenn relevant, führen Zirkulationsformen dieser Art meist zu einer lateralen Abfolge begrenzter Zonen erhöhter Porosität und dazwischen liegenden, diffuseren Abdichtungszonen, und könnten so zur Bildung von *fluid compartments* beitragen. Die Herausbildung einer horizontalen Zonierung ist jedoch möglich (wie z. B. in Abb. 3.46) und kann unter günstigen Umständen – hohe Temperaturen und eine große Vertikalausdehnung des Modells – in wenigen Ma erfolgen.

Konvektion impliziert neben Fluidbewegungen in Richtung abnehmender Temperatur (d.h. Ausscheidung) auch solche in entgegengesetzter Richtung. Während erstere Richtung dem Typ einer stabilen, sich letztendlich selbst behindernden Bewegung entspricht, ist der entgegengesetzte Vorgang selbstbeschleunigend und führt zu ausgeprägten lokalen Strukturen. Mit impermeablen Zonen entstehen so immer auch hochpermeable Strukturen. Diese dominieren im Allgemeinen das Gesamtverhalten des Systems, da dort die heftigsten Bewegungen geschehen. Die Instabilität in diesen Zonen, die durch Fluß in Richtung zunehmender Temperatur ausgezeichnet sind, kann selbst bei Annahme eines geschlossenen Systems zu extremen Porositäten führen. Derartige Zonen sind in der Realität kaum die Regel. Eine Kompaktion des Systems kann der Instabilität entgegenwirken, die insbesondere unter Bedingungen auftritt, wo Wasser und damit auch der gelöste Quarz das System verlassen können. Unter derartigen Bedingungen können beträchtliche Massenverluste stattfinden.

Die vorausgesagten Veränderungen der Porosität oder die ebenfalls möglichen Massenverluste erreichen unter derartigen Umständen signifikante Werte und könnten im Prinzip in einfachen Fällen an Paläosystemen verifiziert werden. In der vorliegenden Literatur konnten allerdings keine für eine solche Untersuchung geeigneten Daten gefunden werden. Die Porosität eines gegebenen Raumbereichs durchläuft schon in einfachen Fällen eine komplizierte Entwicklung mit möglicherweise mehreren Extremal- und Wendepunkten, so daß auch hierdurch ihr Nachweis erschwert wird.

Ausblick

Die Interpretation der in dieser Arbeit gezeigten Modellrechnungen muß berücksichtigen, daß das zugrundeliegende mathematische Modell im Raum der möglichen Phänomene nur einen kleinen Ausschnitt beschreibt. Die wichtigste Einschränkung liegt sicher in den unrealistisch einfachen chemischen Verhältnissen, die im hier vorgestellten Modell angenommen werden. Im Rahmen des vorhandenen Algorithmus können zwar ohne prinzipielle Schwierigkeiten weitere Stoffe (z. B. Kalzit, Anhydrit) und ihre kombinierte Wirkung [Rabinowicz et al., 1985, Lee and Bethke, 1994] untersucht werden. Diese Ergänzungen, die sicher noch das Potential interessanter Ergebnisse in sich bergen, sind jedoch durch die physikalischen Basisannahmen grundsätzlich beschränkt.

In den letzten Jahren hat es einer Reihe von Versuchen gegeben, mit vollständigeren Modellen (genereller reaktiver Transport) bestimmte Einzelaspekte geologischer Prozesse zu modellieren [für viele: Steefel and Lasaga, 1990, Raffensperger, 1995a, Raffensperger and Garven, 1995, Bolton et al., 1997], von denen einige [Steefel and Lasaga, 1990, Raffensperger, 1995b,c] sich auf vergleichbare Phänomene beziehen. Die Berücksichtigung der Reaktionskinetik und eines komplizierteren Chemismus kann nicht nur zu realistischeren Aussagen führen als das hier vorgestellte Verfahren, sondern auch die Untersuchung neuartiger Phänomene ermöglichen. Mit der Annahme komplizierterer Modelle erhöht sich aber auch der quantitative und qualitative Anspruch an die notwendigen physikalischen und chemischen Eingangsdaten. Das schon bei einfachen Modellierungen bestehende Ungleichgewicht zwischen Basisdaten und der Menge der möglichen Modelle verschiebt sich hier noch mehr zuungunsten der letzteren.

In dieser Arbeit standen die hydrodynamischen Aspekte – Porositäts- und Druckentwicklung – im Vordergrund. Grade in dieser Hinsicht wäre es wünschenswert, auch die in diesem Bereich konkurrierenden Mechanismen einzubeziehen. Dies betrifft in chemischer Hinsicht beispielsweise die Modellierung von Phasenübergängen mit ihren thermodynamischen Konsequenzen, die physikalisch besonders im Zusammenhang mit der Deformation der Gesteinsmatrix sichtbar werden. Wegen des möglicherweise diskreten Charakters (Rißbildung) ist eine Modellierung sehr schwierig.

Numerisch führt die Kopplung verschiedener Prozesse zu besonderen Schwierigkeiten, die sowohl in ihren sehr verschiedenen Zeitkonstanten als auch im oft selbstverstärkenden Charakter der Kopplung begründet sind. So führt die Herausbildung von kleinräumigen, sehr inhomogenen Strukturen unmittelbar zur Forderung nach zeitlich und/oder räumlich adaptiven Verfahren. Bilden sich – wie in vielen der hier gezeigten Simulationen – lokale Zirkulationsformen heraus, so sind erheblich feinere Diskretisierungen in Raum und Zeit nötig. Effizienz ist jedoch zum jetzigen Zeitpunkt noch von großer Bedeutung, da nur wenig realistischere Modelle schon erhebliche höhere Anforderungen an Rechenzeit und Speicherplatz stellen.

Werdegang

Geburt: 11.6.52 Olpe/Westfalen

Ausbildung:

Schulbesuch: Ev. Volksschule Rheinhausen-Friemersheim Städt.
Math.-Naturw. Gymnasium Rheinhausen

Abitur: Sommer 1970

Studium: WS 70 – 74 Philosophie, Politik, VWL und Sinologie an TU und
FU Berlin

WS 76 Studium Philosophie und Geophysik an der RU Bo-
chum

WS 78 Wechsel FU Berlin

2/84 Diplom Geophysik FU Berlin. Diplomarbeit: *Ein
verbessertes Auswerteschema für die Magnetotellurik
- versuchsweise angewendet auf stark gestörte Daten
aus dem Gebiet von Travale/Italien*

Beruf

3/84 – 5/84 Projekt: Auswertung petrophysikalischer Eigen-
schaften der Gesteine bei der KTB (Prof. Dr. V.
Haak, FU Berlin, DFG)

1/84 – 12/84 Projekt: Leitfähigkeit Oberpfalz (Prof. Dr. V. Haak,
FU Berlin, DFG)

1/85 – 12/87 Projekt: Bewegung von Krustenfluiden (Prof. Dr. V.
Haak, FU Berlin, DFG)

1/88 – 12/88 Projekt: Dense Mapping of Electrical Conductivity
on the Island of Milos/Greece (Prof. Dr. V. Haak,
FU Berlin/ U Frankfurt, EG)

1/89 – 10/90 Projekt: Mobilität aktiver Kontinentalränder (Prof.
Dr. P. Giese, FU Berlin, DFG)

1/92 – 12/94 Projekt: SFB 269: Geowissenschaftliche Probleme
arider und semiarider Gebiete (Prof. Dr. H. Burk-
hardt, TU Berlin, DFG)

1/95 – 1/97 Projekt: Geophysikalische Anwendungen von HT_c -
SQUIDS bei elektromagnetischen Induktionsverfah-
ren (Prof. Dr. H. Burkhardt, TU Berlin, BMBF)

Danksagung

Ich möchte mich als erstes bei Prof. Dr. P. Giese, Prof. Dr. H. Burkhardt und Prof. Dr. S. Shapiro, bedanken, an deren Instituten ich diese Arbeit anfertigen durfte. Prof. Dr. Volker Haak, Potsdam hat diese Arbeit betreut und viel Geduld mit mir gehabt.

Besonderen Dank schulde ich den vielen Kollegen, die mir in verschiedenen Stadien der Arbeit wertvolle Hilfen gegeben haben. Dabei sind besonders hervorzuheben C. Voss (USGS), der mir freundlicherweise das Programmpaket SUTRA [Voss, 1984] nebst seiner vorzüglichen Dokumentation zur Verfügung stellte, aus der ich viel über die Programmierung Finiter Elemente gelernt habe. Y. Saad (UMN) verschaffte mir Zugang zu seinem Programmpaket SPARSKIT [Saad, 1990] und erleichterte mir so den Einstieg in die Materie der Lösung dünn besetzter Gleichungssysteme.

N. Chabanova, K. Schwalenberg und B. Troschke waren mir bei der technischen Herstellung der Arbeit und der Beschaffung von Literatur behilflich. H. Brasse, M. Eisel, O. Ritter, K. Schuster und K. Schwalenberg haben Teile der Arbeit korrekturgelesen.

Während der Abfassung dieser Arbeit wurde ich durch Mittel aus folgenden Projekten unterstützt: *Petrophysik KTB* (FU Berlin, DFG); *Leitfähigkeit Oberpfalz KTB* (FU Berlin, DFG); *Bewegung von Krustenfluiden* (FU Berlin, DFG); *Elektrische Kartierung Milos/Griechenland* (FU Berlin, Europäische Gemeinschaft); *Magnetotellurik Anden* (FU Berlin, DFG); *Magnetotellurik Marokko* (FU Berlin, DFG). *Geophysikalische Untersuchungen im Nordsudan* (TU Berlin, SFB 69); *Geophysikalische Anwendungen von Hochtemperatur-SQUIDS als Magnetfeldsensoren bei elektromagnetischen Induktionsverfahren* (TU Berlin, BMF). Herzlichen Dank an die jeweiligen Projektleiter, die mir so vielfältige Arbeitsmöglichkeiten öffneten...

Last, not Least hat auch die Bundesanstalt für Arbeit (Nürnberg) kräftig zu dieser Arbeit beigetragen.