

A kvarc-coesite átalakulás nyírózónákban: 2D numerikus modellezés termodinamikai adatok felhasználásával

Kosza Benedek

Földtudományi BSc III. évfolyam

Elérhetőség: kosztabeni4@student.elte.hu

Témavezető: Porkoláb Kristóf, Phd

HUN-REN Földfizikai és Űrtudományi Kutatóintézet



ELTE

Geofizikus TDK 2024
Budapest, 2024. december 09.

A KULTURÁLIS ÉS INNOVÁCIÓS MINISZTERIUM EKÖP-24 KÓDSZÁMÚ EGYETEMI KIVÁLÓSÁGI ÖSZTÖNDÍJ PROGRAMJÁNAK A NEMZETI KUTATÁSI, FEJLESZTÉSI ÉS INNOVÁCIÓS ALAPBÓL FINANSZÍROZOTT SZAKMAI TÁMOGATÁSÁVAL KÉSZÜLT.

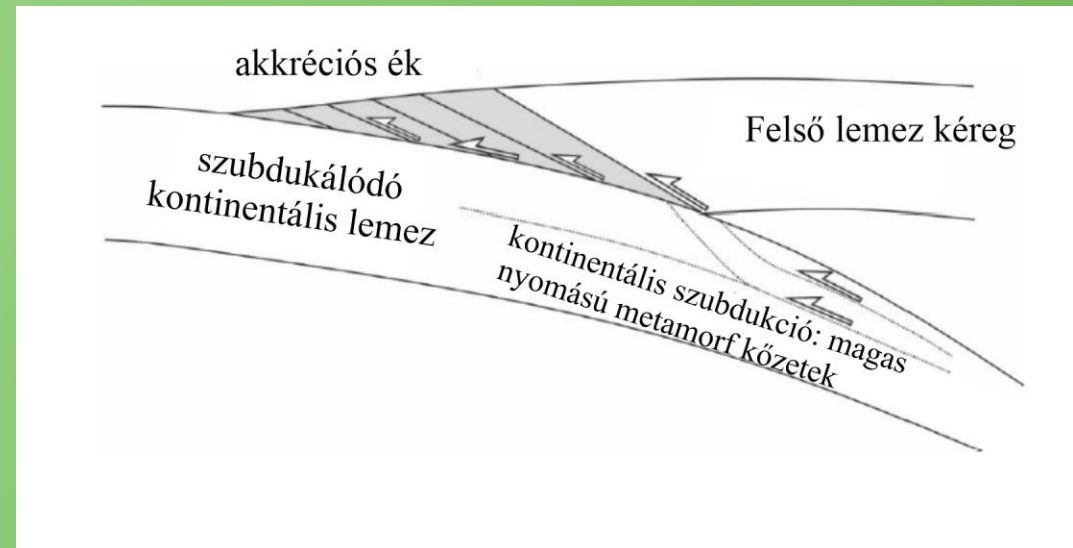
Deformáció és a metamorfózis kapcsolata a nyírózónákban

Szubdukciós zónák képlékenyen deformálódó részei

Dinamikus (tektonikus) és a litosztatikus nyomás

Metamorf kőzetek meghatározása a nyomás alapján

Szerkezetfejlődési következtetések lehetséges hibái



1. ábra: A szubdukciós zónák sematikus ábrázolása (Porkoláb, 2021 módosítva).

Deformáció és a metamorfózis kapcsolata a nyírózónákban

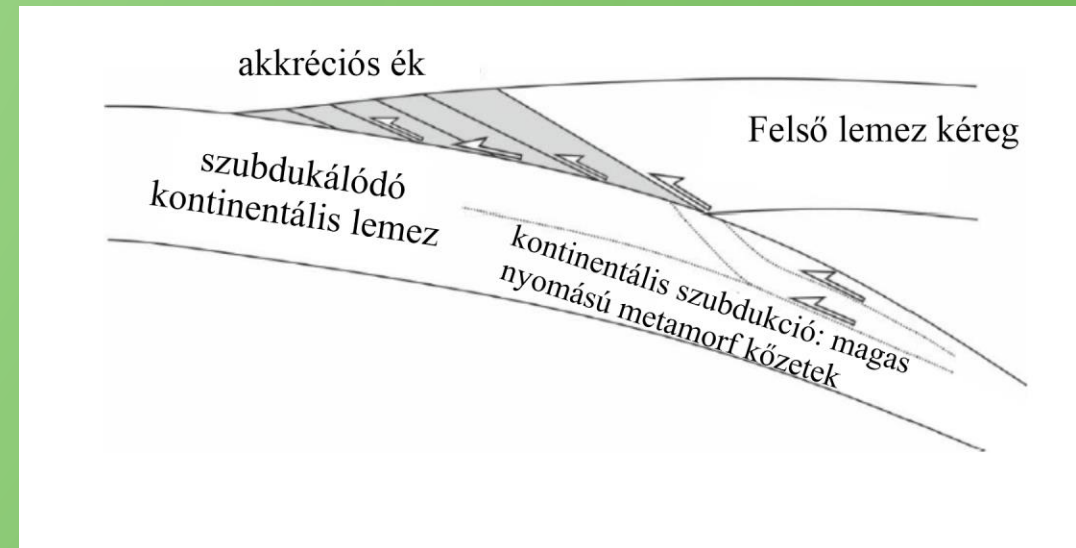
Szubdukciós zónák képlékenyen deformálódó részei

Dinamikus (tektonikus) és a litosztatikus nyomás

Metamorf kőzetek meghatározása a nyomás alapján

Szerkezetfejlődési következtetések lehetséges hibái

Cél: Csatolt modellek felépítése a kémiai átalakulás és a deformáció között



1. ábra: A szubdukciós zónák sematikus ábrázolása (Porkoláb, 2021 módosítva).

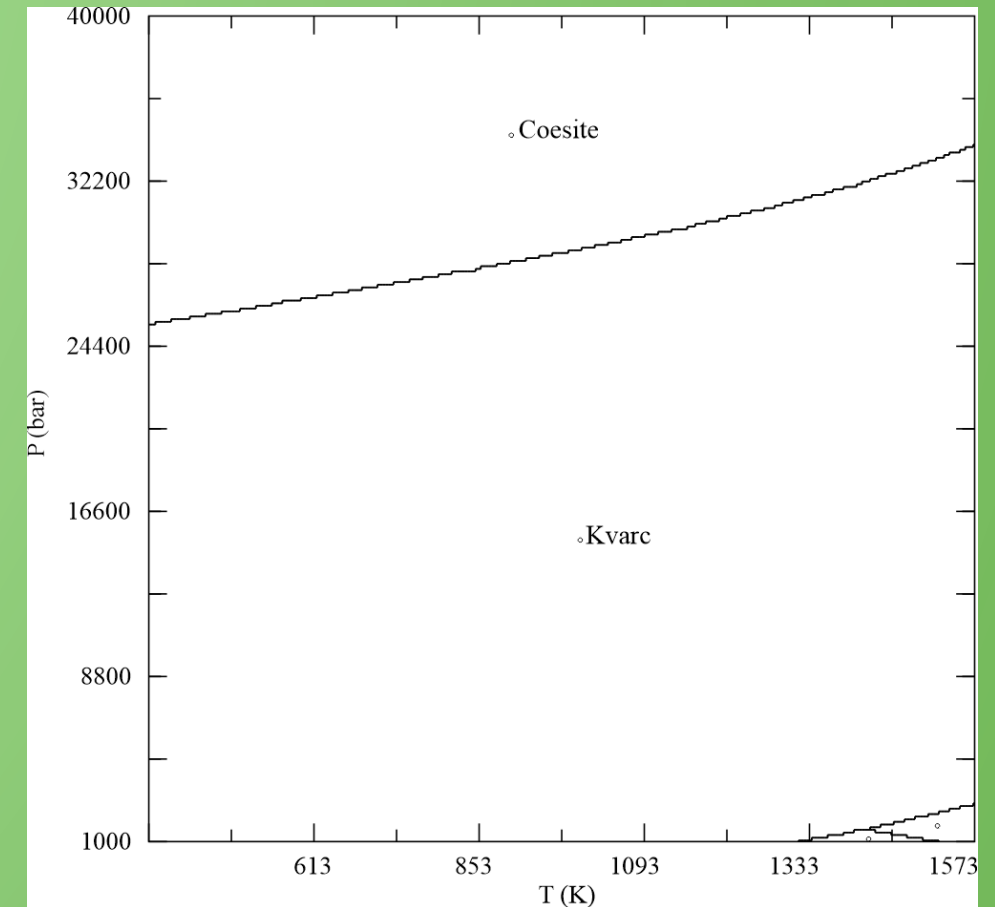
A kvarc-coesite átalakulás

Szilárd fázisú ásványtani átmenet ← metamorfózis

Coesite: az UHP kőzetek indexásványa

Laboratóriumi kísérletek az átalakulásra

A dinamikus nyomás és a maximális főfeszültség szerepe



2. ábra: A SiO₂ P-T fázisdiagramja (Holland és Powell, 1998; Conolly, 2005, 2009).

A matematikai modell

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{v} = 0 \quad \text{Kontinuitási egyenlet}$$

$$-\operatorname{grad} p + \operatorname{div} \boldsymbol{\tau} = 0 \quad \text{Stokes-egyenlet}$$

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta \dot{\boldsymbol{\epsilon}} \quad \text{Newtoni viszkózus reológia}$$

$$\beta \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad \text{Kompresszibilitás izoterm esetben}$$

Jel	Név
ρ	sűrűség
\mathbf{v}	áramlási sebesség
t	idő
p	nyomás
$\boldsymbol{\tau}$	deviatórikus feszültségtenzor
$\dot{\boldsymbol{\epsilon}}$	sebességdeformációs tenzor
η	dinamikus viszkozitás
β	kompresszibilitás

1. táblázat: A matematikai modellben használt fizikai mennyiségek.

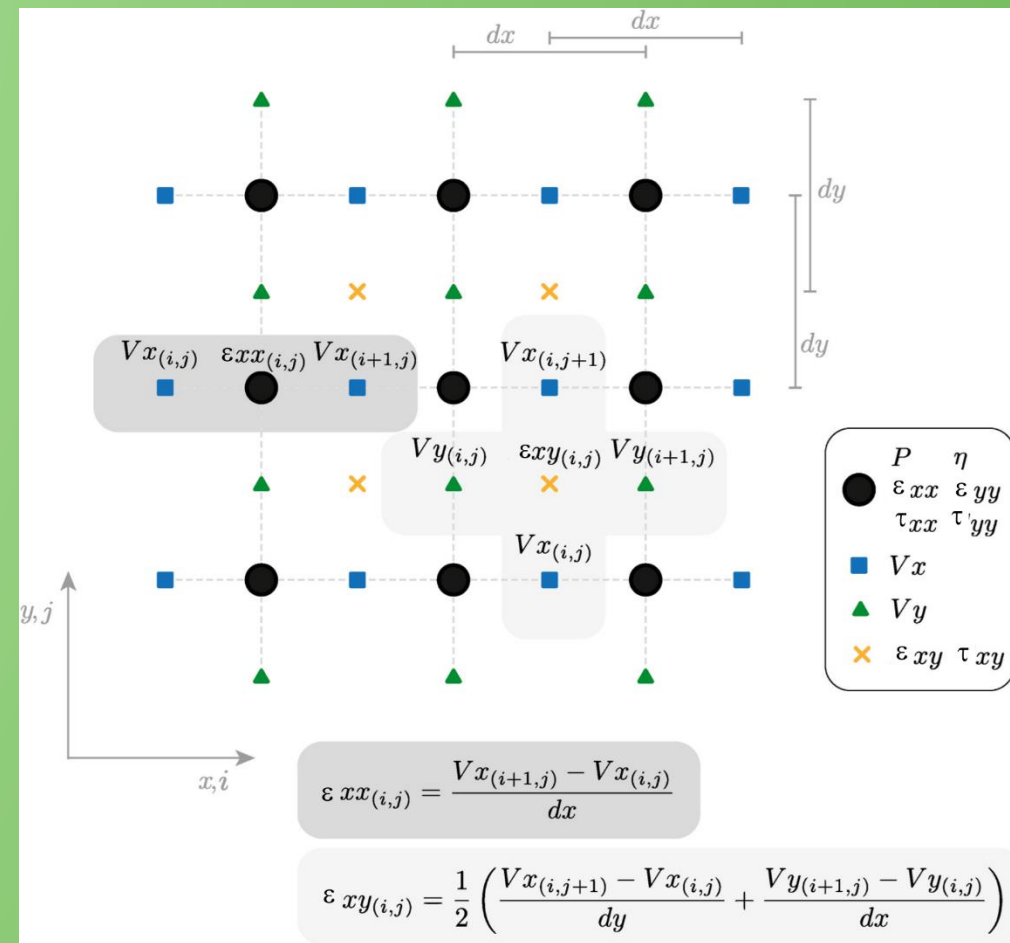
A numerikus megoldás

Véges differenciák módszerének segítségével

A közelítés:

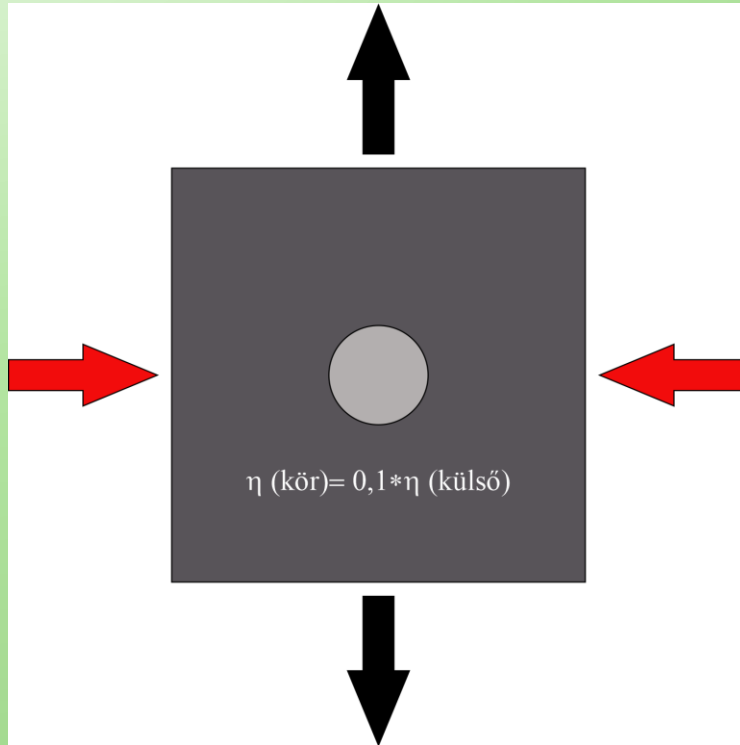
$$\frac{df(x)}{dx} \approx \frac{f(x + \delta x) - f(x)}{\delta x}$$

Saját fejlesztésű kód
Matlab környezetben



3. ábra: A lépcsőzetes rácsháló a véges differenciás modellezésnél (Halter et al., 2022 módosítva).

A modellgeometria és a határfeltételek



200*200-as felbontású 10 cm*10 cm-es négyzetes modelltartomány

Kezdeti viszkozitás reológiai összefüggésekből

Tiszta nyírásos deformációs zóna

Kör alakú kezdeti viszkozitás-anomália

$10^{-12} \frac{1}{s}$ -os deformációs sebesség

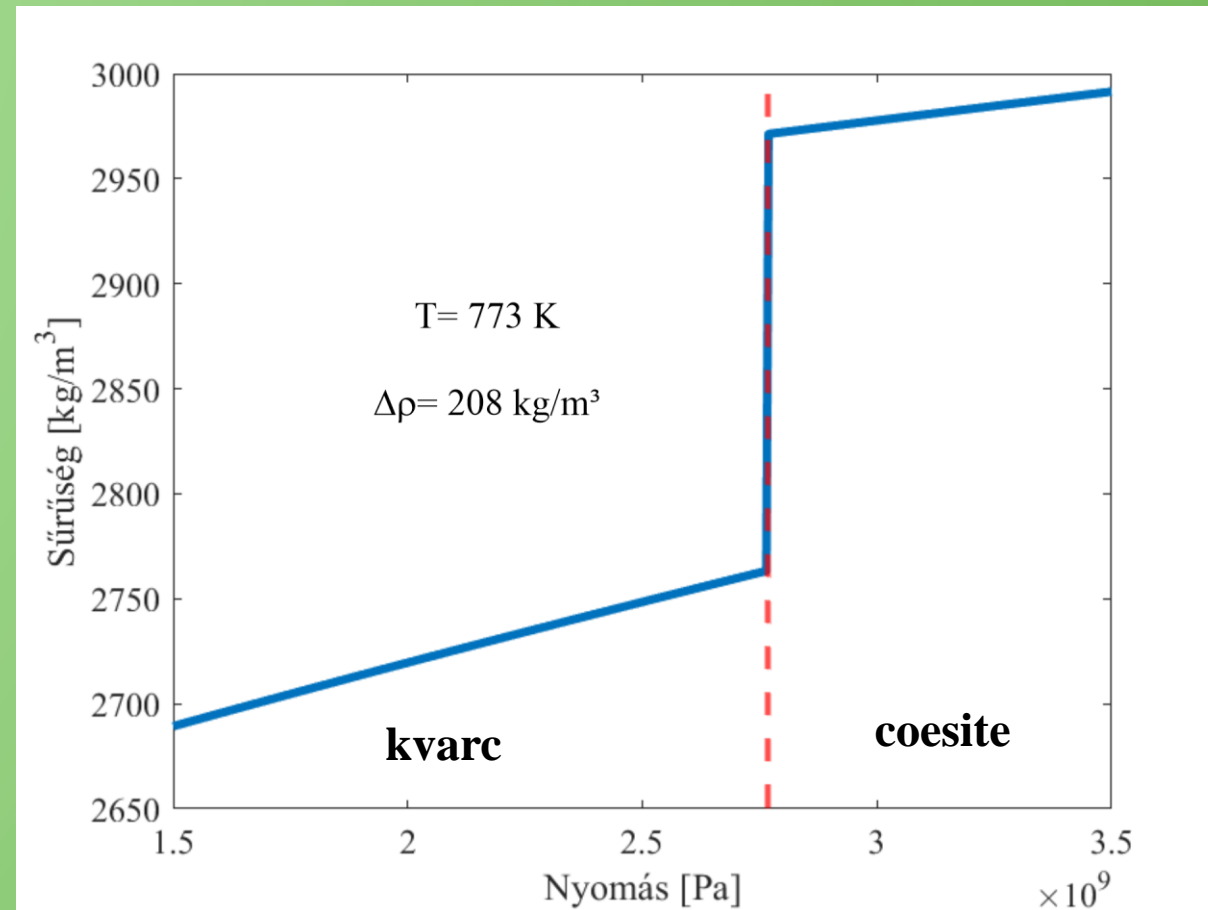
4. ábra: A modell geometriája és kezdeti- és határfeltételei.

Termodinamikai adatok

Izoterm közelítés ($T=773\text{ K}$)

A Perple_X szoftverből kiexportálható a sűrűség-nyomás összefüggés

Az átalakulás kb. 200 kg/m^3 sűrűségnövekedéssel jár



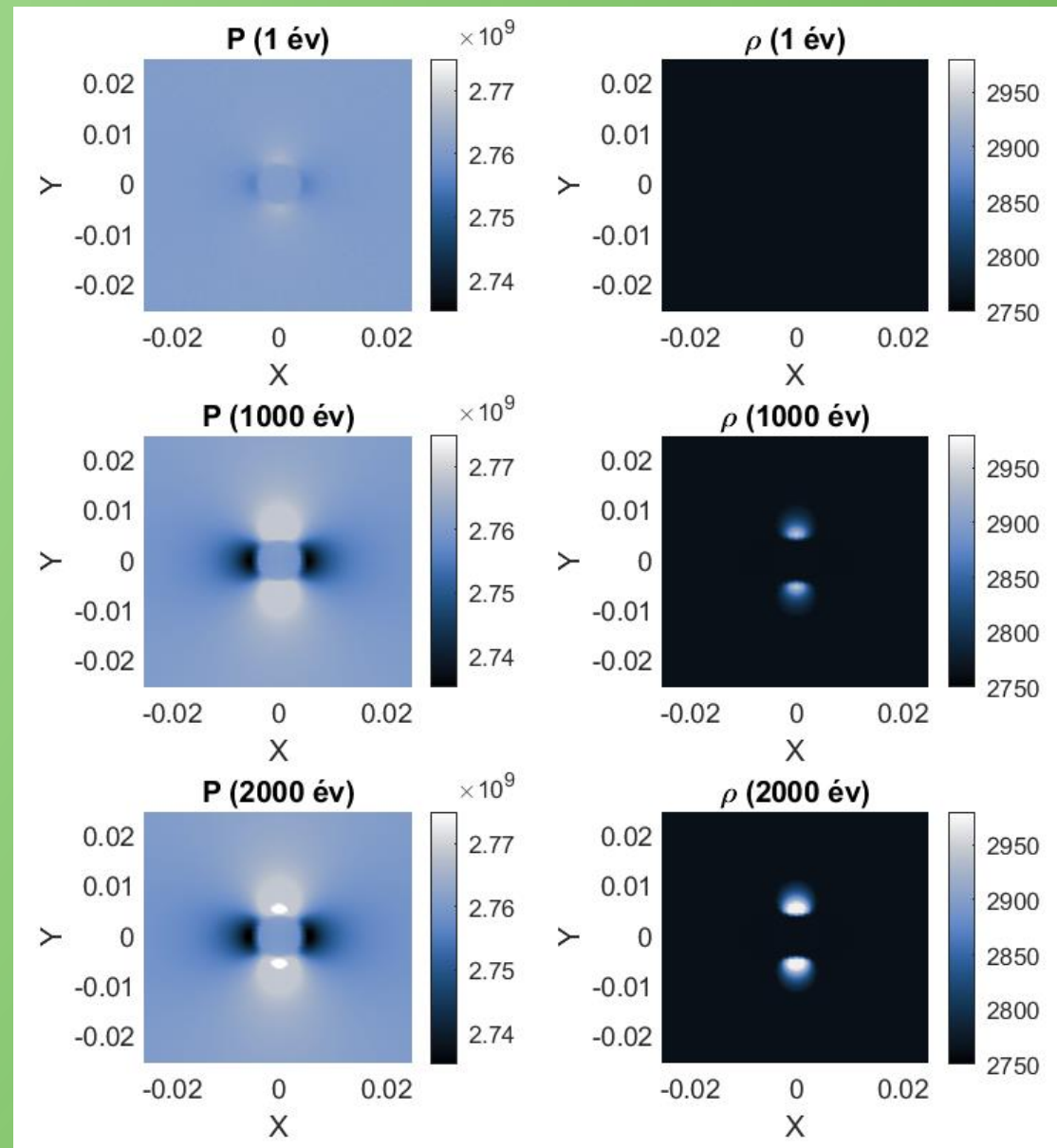
5. ábra: A kvarc-coesite átalakulás során létrejövő sűrűségváltozás $T=773\text{ K}$ -en (Holland és Powell, 1998; Conolly, 2005, 2009).

A referenciamodell eredményei

Nyomásárnyékos és túlnyomásos zónák megjelenése

Lokalizálódik az átalakulás

6. ábra: A referenciamodell időbeli fejlődése. Minden mértékegység SI-ben van megadva (színskála: Crameri, 2018).

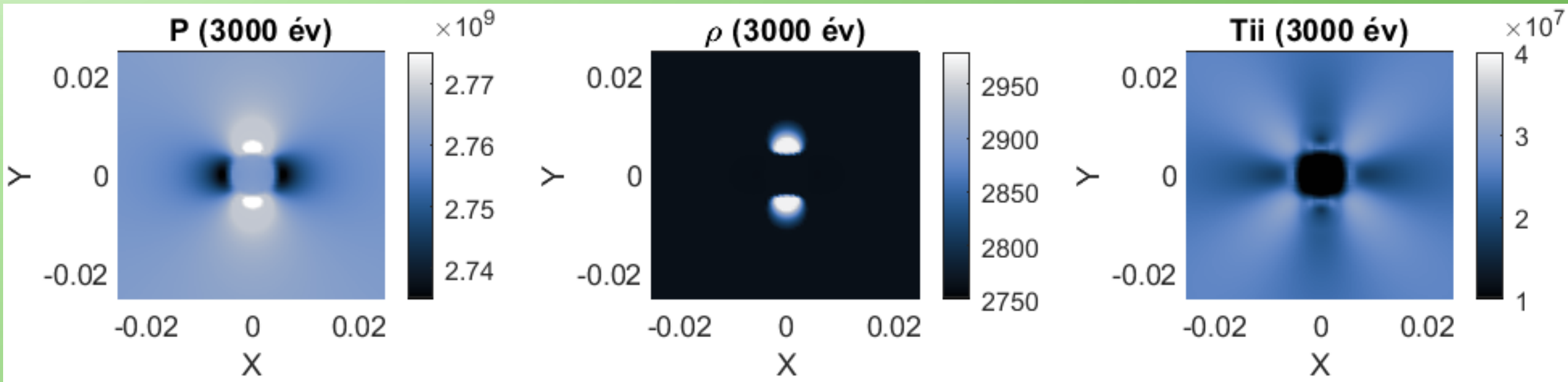


A referenciamodell eredményei

Nyomás

Sűrűség

Nyírófeszültség

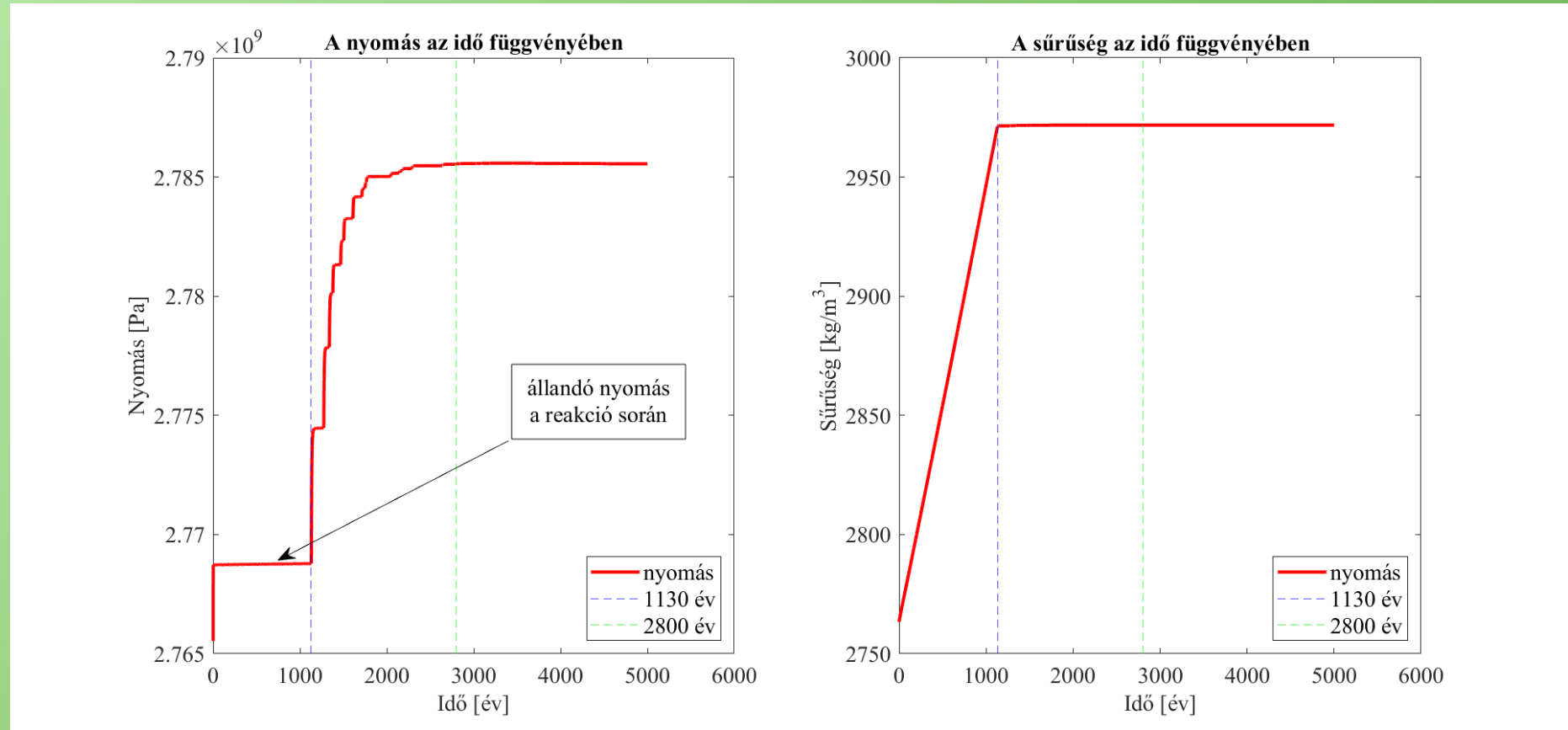


7. ábra: A referenciamodell eredményei 3000 év után. Minden mértékegység SI-ben van megadva (színskála: Crameri, 2018).

A referenciamodell eredményei

„nyomás késés”
jelensége

Látens mechanikai
energia a reakció során

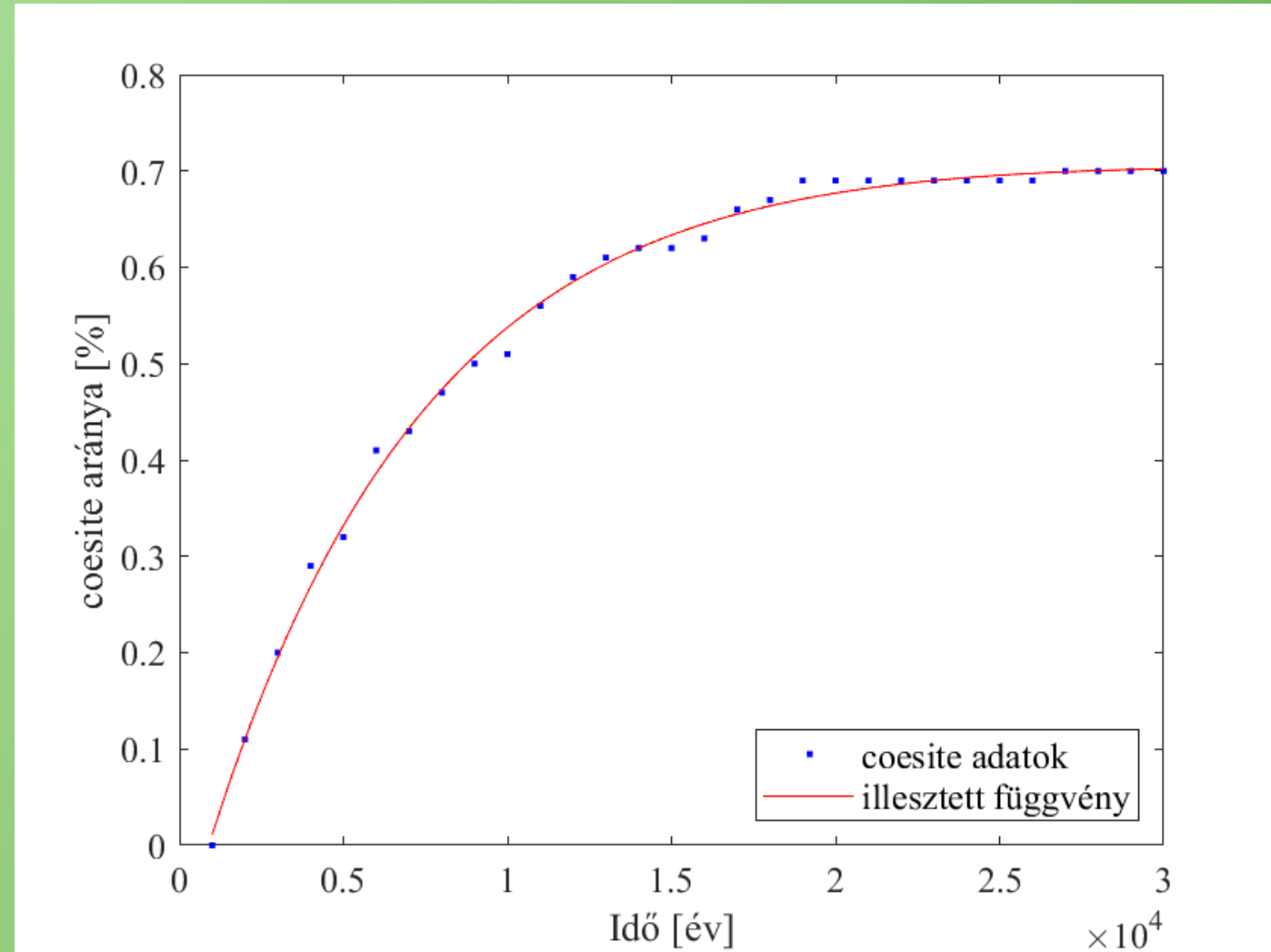


8. ábra: A maximális nyomás és a sűrűség változása az időben az alapmodell esetén.

A referenciamodell eredményei

Coesite mennyisége időben exponenciális függvényre illeszkedik

Idővel egyensúly áll be



9. ábra: A coesite arányának változása a modellben.

Paramétertesztek

Felbontásteszt

→ modell verifikációja

Toleranciateszt

Deformációs sebesség teszt: 10^{-10} - 10^{-14} 1/s közötti értékekre

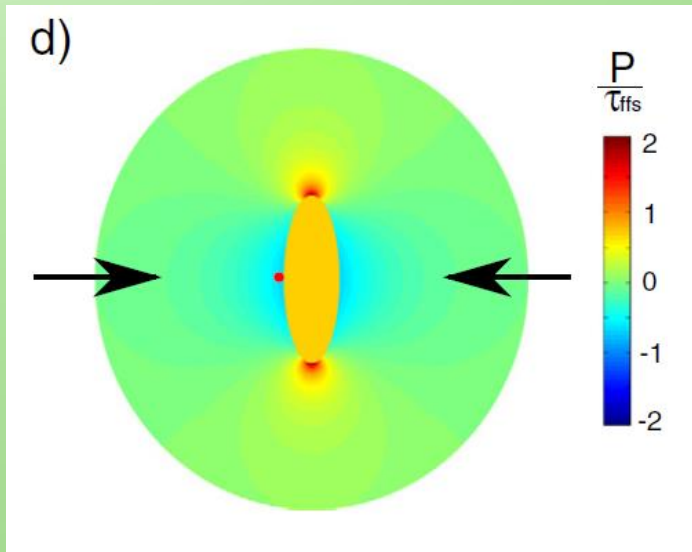
Reakció végbemenetelének időskálája

Deformációs sebesség [1/s]	A reakció létrejöttéhez szükséges idő [év]	Elért maximális sűrűség [kg/m ³]
10^{-10}	8,34	2976
10^{-11}	93,1	2973
10^{-12}	1 130	2971,8
10^{-13}	142 000	2971,3
10^{-14}	Nincs reakció	2763,5

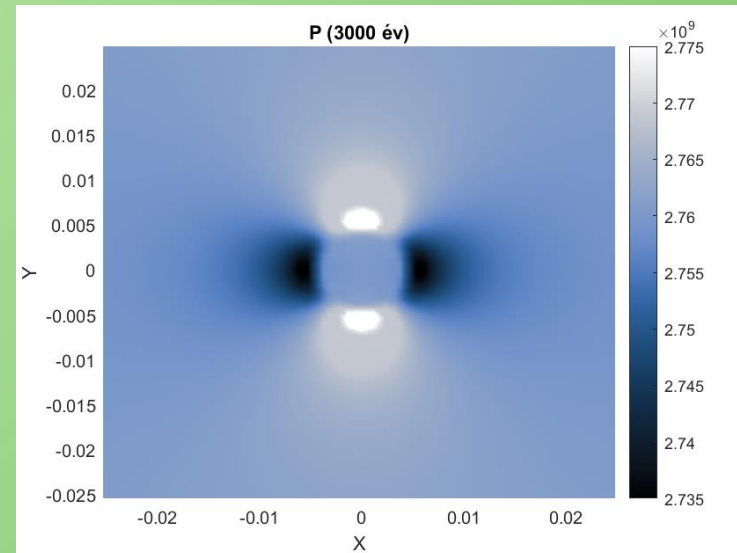
2. táblázat: A reakció létrejöttéhez szükséges idő és az elért maximális sűrűség a különböző deformációs sebességek esetében.

A modell megbízhatósága

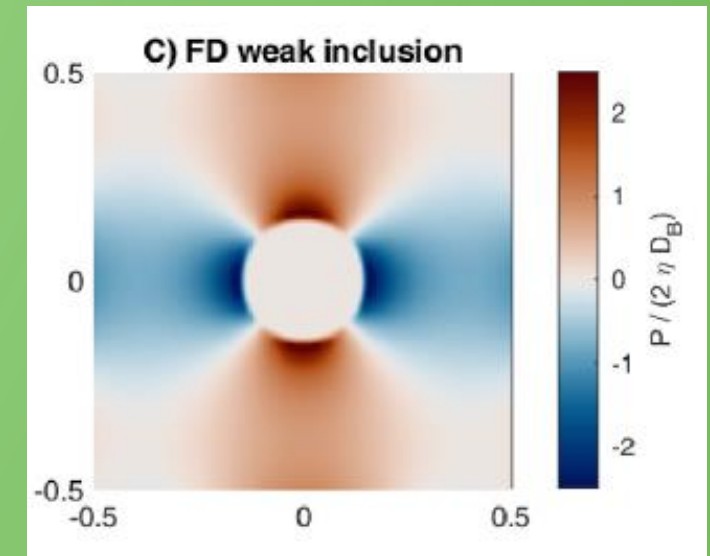
Összenyomhatatlan
analitikus megoldás



Összenyomható
numerikus megoldás

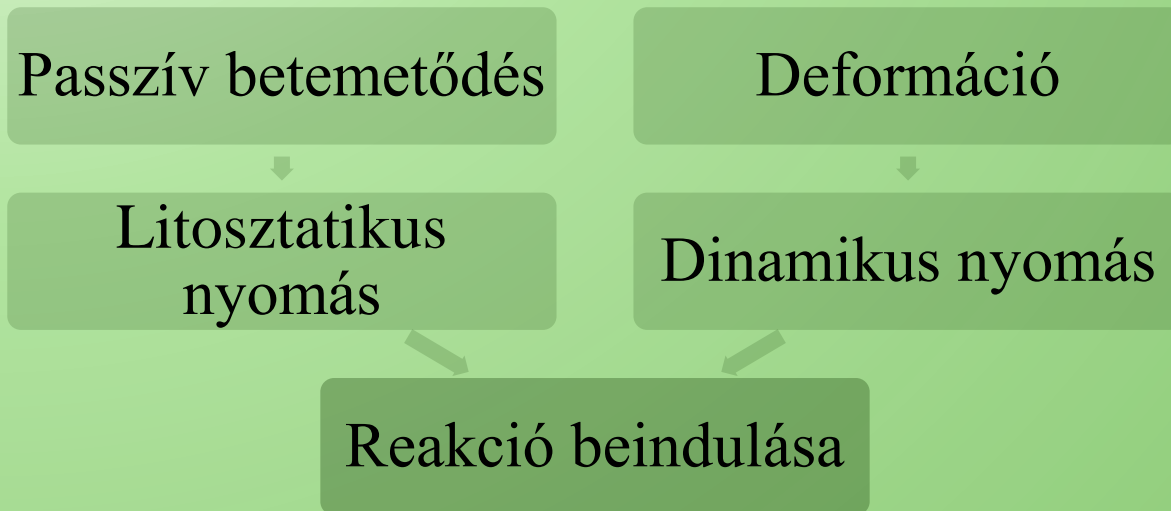


Összenyomhatatlan
numerikus megoldás



10. ábra: A modell összehasonlítása összenyomhatatlan esetekre készült analitikus (balra) és numerikus (jobbra) tanulmányokkal (Schmalholz et al., 2014, Halter et al., 2022). Mindkét tanulmányban a relatív nyomás van ábrázolva, míg az általam modellezett esetben a nyomás (Pa-ban).

A fázisátalakulás mechanizmusa és időskálája



Deformációs sebesség	10^{-12} 1/s	10^{-13} 1/s
Átalakuláshoz szükséges idő	1130 év	143 000 év
Differenciális nyomásnövekedés	≈ 21 MPa	≈ 19 MPa
Litosztatikus nyomásnövekedés	$\approx 0,5$ MPa	≈ 50 MPa
Fő mechanizmus	Deformáció	Betemetődés

3. táblázat: A fázisátalakulás időskálájának és a mechanizmusának kapcsolata egy átlagos szubdukciós zóna esetén.

Az átalakulás reológiai szerepe

A coesite erősebb reológiájú



A fő nyírózóna mélyebb rétegekbe kerülhet



Coesite-ben gazdag közzettetek exhumációja következhet be

A kvarc-coesite átalakulás lehetséges szerepe a szubdukciós zónák fejlődésében

Az átalakulás reológiai szerepe

A coesite erősebb reológiájú



A fő nyírózóna mélyebb rétegekbe kerülhet



Coesite-ben gazdag közettestek exhumációja következhet be

A kvarc-coesite átalakulás lehetséges szerepe a szubdukciós zónák fejlődésében

Továbbfejlesztési lehetőség: A reológiai visszacsatolások beépítése a modellbe.

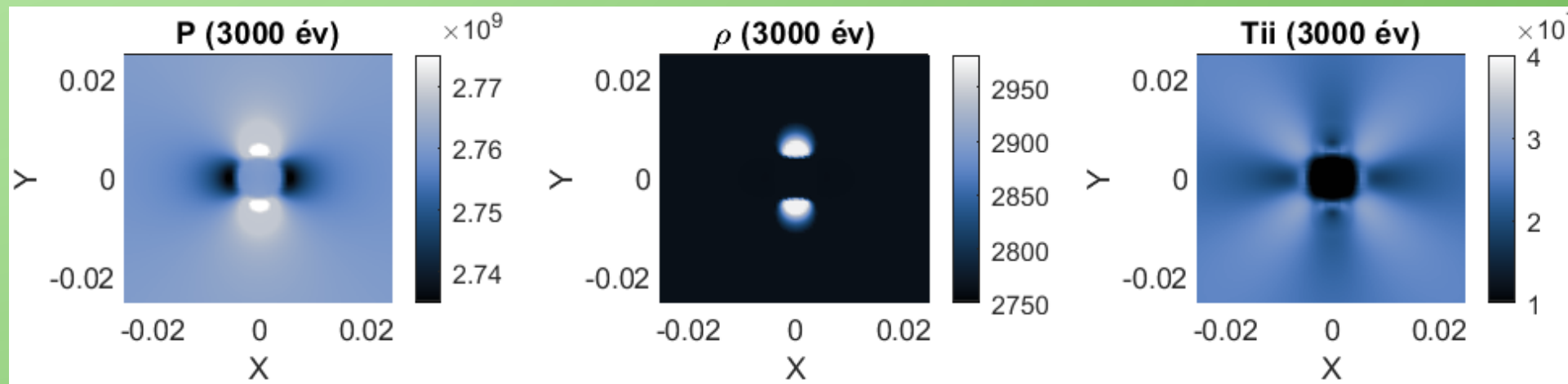
Összefoglalás

A deformáció és a metamorfózis kapcsolatának kvantitatív elemzése

Összenyomható Stokes-egyenletrendszer megoldó numerikus modell a kvarc-coesite átalakulásra

Az átalakulást létrehozó mechanizmusok időskálája: passzív betemetődés / deformáció

Az átalakulás lehetséges reológiai szerepe



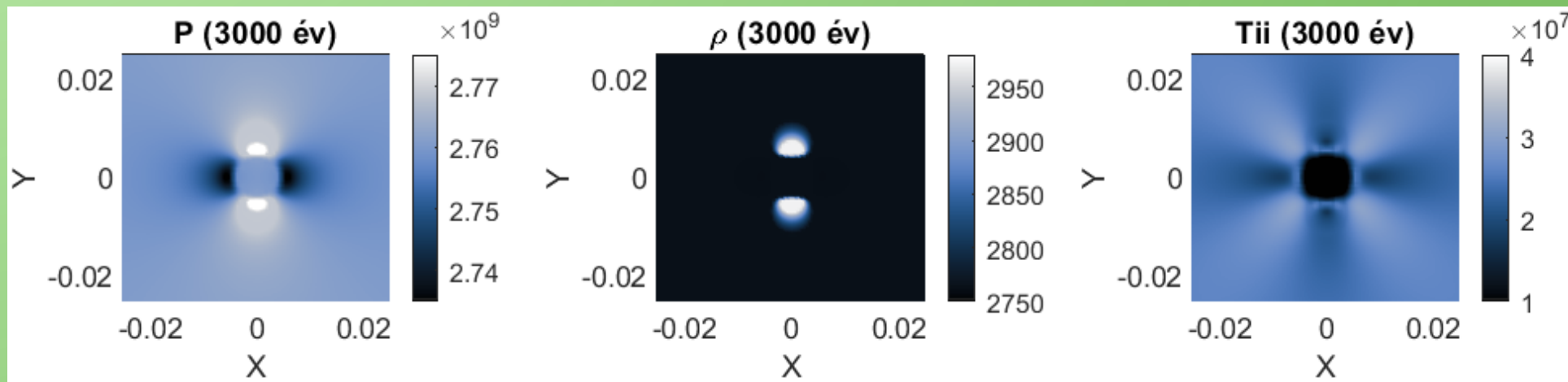
Köszönöm a figyelmet!

A deformáció és a metamorfózis kapcsolatának kvantitatív elemzése

Összenyomható Stokes-egyenletrendszer megoldó numerikus modell a kvarc-coesite átalakulásra

Az átalakulást létrehozó mechanizmusok időskálája: passzív betemetődés / deformáció

Az átalakulás lehetséges reológiai szerepe



Források:

- Connolly, J. A. D. (2005): Computation of phase equilibria by linear programming: A tool for geodynamic modeling and its application to subduction zone decarbonation. Earth and Planetary Science Letters 236, 524.
- Connolly, J. A. D. (2009): The geodynamic equation of state: what and how. Geochemistry, Geophysics, Geosystems 10, 10.
- Crameri, F. (2018)a: Geodynamic diagnostics, scientific visualisation and StagLab 3.0, Geoscientific Model Development 11, 2541.
- Crameri, F. (2018)b: Scientific colour maps. Zenodo
- Halter, W. R.; Macherel, E.; Schmalholz; S. M. (2022): A simple computer program for calculating stress and strain rate in 2D viscous inclusion-matrix systems. Journal of Structural Geology, 160, 104617.
- Holland, T. J. B.; Powell, R. (1998): An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest. Journal of Metamorphic Geology. 16, 309.
- Moulas, E.; Burg, J. P.; Podladchikov, Y. (2014): Stress field associated with elliptical inclusions in a deforming matrix: Mathematical model and implications for tectonic overpressure in the lithosphere. Tectonophysics, 631, 37.
- Porkoláb, K. (2021): Burial-exhumation cycles in the continental crust derived from Mediterranean field studies and numerical modelling, Phd thesis, Utrecht University