



УДК 552.323

© 2010

О. В. Арясова

Проницаемость расплавленных горных пород при плавлении по граням зерен кристаллической структуры

(Представлено академиком НАН Украины В. И. Старостенко)

Розглядається задача обчислення провідності та проникності частково розплавленої гірської породи. Оскільки новітні дослідження показали, що основна частка розплаву можливо сконцентрована в плоских включеннях, які займають грані зерен, нами вивчається випадкова система провідних елементів, розташованих на гранях зерен кубічної решітки. Методами чисельного моделювання з'ясовано, що порогове значення зв'язності системи p_c відповідає приблизно 50% зайнятих граней решітки. Якщо ймовірність p того, що грань зайнята, перевищує поріг зв'язності, то провідність лінійно залежить від $p - p_c$.

С точки зрения макроскопических свойств частично расплавленных горных пород, таких как проницаемость, электропроводность и эффективная вязкость, критическим параметром является связность расплавных включений, определяющая, в частности, динамику сегрегации магмы [1–3]. В свою очередь, связность системы расплавов и абсолютные значения физических параметров очень чувствительны к количеству расплава и распределению жидкой фазы в зернах кристаллической структуры.

Обычно предполагается, что при плавлении горных пород первые расплавы появляются в местах тройных сочленений зерен [3]. В идеальной мономинеральной породе этого достаточно, чтобы система расплавных включений была связанной с начала плавления [4]. Реальные породы не являются ни мономинеральными, ни идеальными. Последнее означает, что поверхностная энергия анизотропна, т. е. зависит от ориентации поверхности зерна относительно кристаллической решетки, а следовательно, может приводить к появлению первых расплавов не на ребрах зерен, а на их гранях [5]. Влияние этого эффекта на значение порога проницаемости описывается в настоящем сообщении.

Проницаемость и электропроводность системы расплавных включений, расположенных по граням кубической решетки. Для моделей, в которых расплав размещается в уплощенных включениях, распределенных случайным образом [6], проницаемость

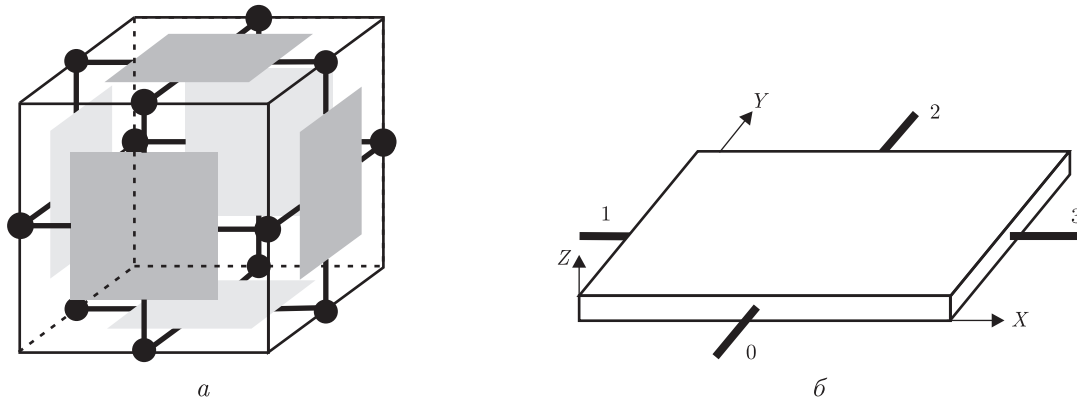


Рис. 1. Схематический вид кубического элемента (а) и проводящего элемента (б). Плоские проводники (четырёхполюсники) располагаются на гранях куба (затемнены). Подводящие провода соединяются на ребрах. Ось Z локальной системы координат перпендикулярна плоскости элемента

можно найти по формуле:

$$k = \frac{c^3 d^2}{l^3} f(p), \quad (1)$$

где c , d и l — средняя толщина, диаметр включений и расстояние между ними соответственно; f — фактор, характеризующий связность системы; p — вероятность обнаружить расплав на грани зерна. Если включения расплава размещаются случайным образом на гранях зерен кубической решетки, то диаметр включений и расстояние между ними порядка размера зерна a :

$$k = \frac{c^3}{a} f(p). \quad (2)$$

Для некоторых специальных видов решетки функция $f(p)$ может быть найдена аналитически (например, в [7]), однако в общем случае требуется численное моделирование. Определение вида функции $f(p)$ для трехмерной кубической решетки, в которой расплавы размещаются по граням зерен, является целью данной работы. Несмотря на то что проводимость и проницаемость случайных сред интенсивно исследовались (например, в [7]), модели с такой геометрией ранее не рассматривались.

Описание модели. Предположим, что “кристаллическая решетка” состоит из кубических зерен с ребром a . Размеры рассматриваемой области решетки (“кристалла”) $Ma \times Na \times Ka$ (по осям X , Y , Z соответственно). Верхняя и нижняя плоскости модели перпендикулярны оси Z и являются идеально проводящими шинами (в задаче о проводимости — задача 1) или имеют нулевое гидродинамическое сопротивление (в задаче о проницаемости — задача 2). Между этими поверхностями поддерживается фиксированная разность потенциалов ΔU (задача 1) или фиксированная разность давлений ΔP (задача 2). Проводящими (с электрической или гидродинамической точки зрения) есть также включения на гранях элементарных кубов толщиной $c \ll a$ (рис. 1, а). С математической точки зрения обе задачи абсолютно эквивалентны, поэтому для краткости далее рассмотрим задачу расчета эффективной электропроводности такой системы.

Эффективная проводимость состоящего из непроводящих кубических зерен “кристалла”:

$$\sigma_{\text{эфф}} = \frac{\langle j_z \rangle}{\langle E_z \rangle}, \quad (3)$$

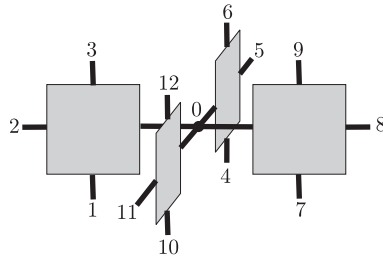


Рис. 2. Внутренний узел модели. Во внутреннем узле модели (0) сходятся выводы четырех проводников, расположенных на четырех кубах, имеющих общее ребро

где $\langle j_z \rangle = I/S$ и $\langle E_z \rangle = \Delta U/H$ — средние по поперечному сечению “кристалла” плотность тока и напряженность электростатического поля соответственно; I — сила тока в цепи; $H = Ka$ — расстояние между шинами; $S = MNa^2$ — поперечное сечение “кристалла”. Следовательно, при заданном расположении проводящих элементов для определения проводимости необходимо найти полный ток, протекающий через “кристалл”.

Проводящие элементы, расположенные на соседних гранях зерен, контактируют вдоль ребер решетки. Задача существенно упрощается, если считать, что вдоль каждого из ребер потенциал постоянен. Это упрощение позволяет рассматривать задачи о протекании тока через отдельный проводящий элемент и через систему таких элементов независимо. Приведем решение второй задачи, а решение первой — описывается в приложении.

Каждый проводящий элемент в этой модели представляет собой четырехполосник на грани “зерна” (см. рис. 1, б). Выводы четырехполосников сходятся в узлах, расположенных на ребрах, причем в каждом внутреннем узле сходятся выводы четырех четырехполосников, в каждом узле, расположенном на боковой грани модели, — трех, а в каждом узле на ребре модели — двух четырехполосников.

Задачу о протекании тока через такую систему проводников при заданной разности потенциалов между проводящими шинами проще всего алгоритмизовать, если выбрать в качестве неизвестных потенциалы в узлах. Количество неизвестных потенциалов равно количеству ребер “кристалла”, за исключением ребер, лежащих на шинах:

$$L = [M(N + 1) + N(M + 1)](K - 1) + (M + 1)(N + 1)K, \quad (4)$$

а система уравнений для нахождения потенциалов состоит из условий равенства нулю суммы токов в каждом из узлов. При этом токи, протекающие через четырехполосник, выражаются через потенциалы узлов и стандартные интегралы, введенные в приложении (см. уравнение (15)).

Узел, для которого составляется условие баланса токов, может лежать внутри “кристалла” или на его поверхности (на грани или на ребре). На рис. 2 показан наиболее общий случай внутреннего узла. Как видно из рисунка, токи, подтекающие к узлу 0, определяются потенциалами этого узла и двенадцати его ближайших соседей, т. е. в уравнение баланса токов для внутреннего узла входят 13 неизвестных потенциалов. У находящихся на боковой поверхности “кристалла” узлов — девять ближайших соседей, а у находящихся на его ребре узлов — шесть соседей. Таким образом, наибольшее количество неизвестных, входящих в одно уравнение, — 13. Система решалась методом Чебышева с ускорением. После нахождения потенциалов токи, протекающие через четырехполосник, находим по формуле (15), а полный ток, протекающий через “кристалл”, ищем как сумму токов через одну из шин.

Предположим теперь, что проводимости отдельных включений могут принимать только два значения σ_S и $\sigma_L > \sigma_S$. Разбросав случайным образом эти значения проводимостей по сетке, можно найти значения потенциалов в узлах и определить значение тока, протекающего через шины в этой реализации. Повторяя многократно эту процедуру для тех же наборов вероятностей и проводимостей, можно найти средний по большому числу реализаций полный ток $\langle I \rangle$, протекающий через шину. Очевидно, что величина тока зависит только от относительной величины σ_S/σ_L , поэтому эффективная проводимость такой системы

$$\sigma_{\text{эфф}} = \alpha \sigma_L f\left(p, \frac{\sigma_S}{\sigma_L}\right), \quad (5)$$

где p — вероятность, с которой встречается большая из проводимостей. Заметим, что уравнение (5), фактически является определением функции f как отношения $\sigma_{\text{эфф}}/\alpha\sigma_L$.

Если $\sigma_S = 0$, то ненулевая проводимость возникает только тогда, когда система проводников является связной. Таким образом, перколяционная составляющая проводимости “кристалла” характеризуется функцией $f(p, 0)$

$$\sigma_{\text{эфф}} = \alpha \sigma f(p, 0) = \alpha \sigma f(\varphi/3\alpha, 0), \quad (6)$$

где $\varphi = 3p\alpha$ — степень плавления (коэффициент 3 связан с тем, что при $M, N, K \gg 1$ каждая из шести граней кубического зерна является общей для двух соседних зерен).

Если все проводники имеют одинаковую проводимость $\sigma_S = \sigma_L$ или $p = 1$, то, как легко показать,

$$\sigma_{\text{эфф}} = \alpha \sigma_L \left(2 + \frac{1}{M} + \frac{1}{N}\right), \quad (7)$$

т. е. в этом предельном случае

$$f(p, 1) = f\left(1, \frac{\sigma_S}{\sigma_L}\right) = 2 + \frac{1}{M} + \frac{1}{N}. \quad (8)$$

Заметим также, что при $p \rightarrow 0$ $\sigma_{\text{эфф}} \rightarrow \alpha \sigma_S (2 + 1/M + 1/N)$. Поскольку мы определили $f(p, \sigma_S/\sigma_L)$ как отношение $\sigma_{\text{эфф}}/\alpha\sigma_L$, то

$$f\left(0, \frac{\sigma_S}{\sigma_L}\right) = \frac{\sigma_S}{\sigma_L} \left(2 + \frac{1}{M} + \frac{1}{N}\right). \quad (9)$$

Значения (8), (9) использовались для контроля правильности численного моделирования.

Обсуждение результатов. Результаты численного моделирования для всех рассмотренных сеток и отношений проводимостей приведены в табл. 1 и показаны на рис. 3. Общий характер всех кривых $f(p, \sigma_S/\sigma_L)$ совпадает. Как и должно быть, при $p \rightarrow 1$ и при $p \rightarrow 0$ $f(p, \sigma_S/\sigma_L)$ стремится к значениям, несколько превышающим 2 и $2(\sigma_S/\sigma_L)$ соответственно (см. уравнения (8), (9)). При $p \rightarrow 1$ $f(p, \sigma_S/\sigma_L)$ перестает зависеть от отношения проводимостей и асимптотически приближается к прямой. В таблице приведены угловые коэффициенты асимптот df/dp координаты p^* точек пересечения асимптот с осью абсцисс.

Как видно из табл. 1, модели 5 и 7, у которых расстояние между шинами (“высота”) больше остальных размеров, по-видимому, завывают наклон асимптоты и значение p^* . С другой стороны, малое значение как наклона асимптоты, так и p^* , видимо, связано с чрезмерно малой “толщиной” модели. Среднее по остальным моделям значение $p^* = 0,498$.

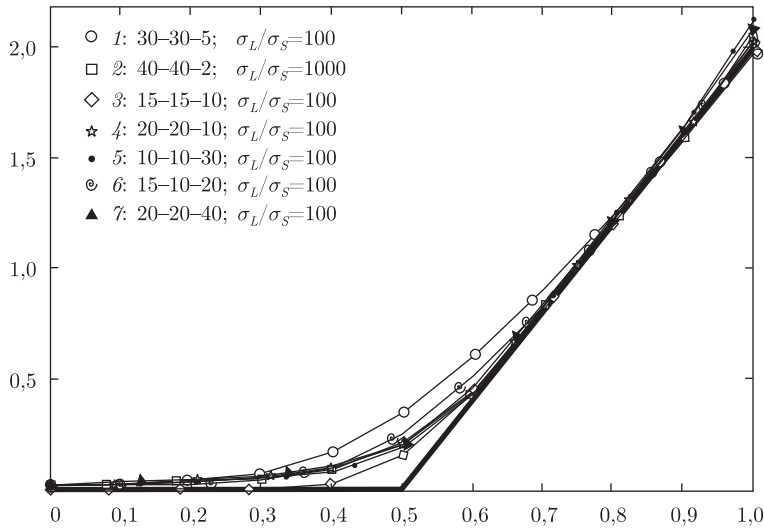


Рис. 3. Безразмерная проводимость $f(p, \sigma_S/\sigma_L)$ кубического “кристалла”. Предполагается, что на грани элементарного куба модели с вероятностью p находится проводник с проводимостью σ_L и с вероятностью $1 - p$ – проводник с проводимостью σ_S .

Символы – результаты расчета для моделей различного размера и с различающимися отношениями проводимостей (номера моделей соответствуют кривым 1–7, их размеры и отношения (σ_S/σ_L) проводимостей приведены на схеме; см. также табл. 1). Жирной линией показана функция (11)

Если в качестве значения $f(1)$ принять значение $f(1) = 2$, то уравнение асимптоты можно записать в виде

$$f(p) = 2 \frac{p - p^*}{1 - p^*}. \quad (10)$$

Поскольку численное моделирование выполняется на конечных сетках, то результаты несколько отличаются от предсказаний моделей протекания на бесконечных сетках. В первую очередь, это относится к понятию порога проницаемости. На бесконечных сетках существует значение p_c , так что $f(p, \sigma_S/\sigma_L) = 0$ при $p < p_c$. Это значение называется порогом связности, порогом протекания или порогом проницаемости системы. В то же время на конечных сетках всегда существует ненулевая вероятность того, что при случайном разбрасывании связей (в нашем случае больших проводимостей) возникнет связный кластер, пронизывающий всю модель. Поэтому на конечных сетках $f(p, \sigma_S/\sigma_L)$, строго говоря, отлична от нуля при всех значениях p , при которых связей достаточно для пересечения моде-

Таблица 1

Номер модели	σ_L/σ_S	Размеры модели			$f(0)$	$f(1)$	Асимптота	
		длина	ширина	высота			df/dp	p^*
1	100	30	30	5	0,0200	2,00	3,48	0,453
2	100	40	40	20	0,0198	1,98	3,93	0,497
3	1000	15	15	10	0,0020	2,07	4,18	0,508
4	100	20	20	10	0,0203	2,03	3,94	0,489
5	100	10	10	30	0,0213	2,13	4,51	0,532
6	100	15	10	20	0,0210	2,10	4,12	0,498
7	100	20	20	40	0,0204	2,04	4,16	0,512

ли по кратчайшему пути, в том числе и при значениях вероятности, меньших формального порога протекания p_c .

Аналитически порог проницаемости определен для некоторых частных случаев сеток. В общем случае существует только неравенство, позволяющее оценить порог проницаемости $p_c > 1/(z - 1)$, где z — координационное число, т.е. количество связей, сходящихся в узле [7]. В нашем случае $z = 4$, так что $p_c > 1/3$. Наши численные результаты удовлетворяют этому условию. На основании приведенных расчетов можно предположить, что при увеличении размера сетки и нулевом значении меньшей из проводимостей зависимость $f(p, \sigma_S/\sigma_L)$ будет стремиться к функции, равной нулю при $p < p^*$ и совпадающей с $f(p)$ (10), при $p > p^*$, поэтому значение $p = p^*$ можно назвать практическим порогом связности системы.

При $\alpha \ll 1$ легко также записать зависимость функции f от степени плавления φ . Учитывая, что в этом приближении $\varphi = 3\alpha p$, получаем

$$f(\varphi) = \begin{cases} 0, & p < p^*, \\ 2 \frac{\varphi/3\alpha - p^*}{1 - p^*}, & p^* \leq \frac{\varphi}{3\alpha} \leq 1. \end{cases} \quad (11)$$

Эффективная проводимость выражается из уравнения (6):

$$\sigma_{\text{эфф}} = \alpha \sigma f(p) = \alpha \sigma f(\varphi). \quad (12)$$

Наступлению связности расплавов соответствует значение $\varphi_c = 3\alpha p^* \approx 1,5\alpha$. Это пороговое значение не зависит от размеров зерна. При α порядка 0,01 расплавы становятся связными при степени плавления около 1,5%, а при $\alpha \approx 0,05$, как наблюдалось в эксперименте [5], пороговое значение степени плавления составляет 7,5%

Рассмотренная модель является, конечно, существенной идеализацией реальной ситуации.

Следовательно, результаты настоящей работы являются, если иметь в виду приложения, скорее качественными, чем количественными. Тем не менее эти расчеты позволяют сделать некоторые существенные заключения.

Оценка $p_c^* \approx 0,51$ хотя и является только ориентировочной, но не может заметно отличаться от реальных значений. Действительно, для случайной системы сопротивлений на кубической решетке, которой соответствует координационное число $z = 6$, порог связности равен 0,249. Уменьшение координационного числа (напомним, что в рассматриваемой задаче $z = 4$) должно сопровождаться увеличением порога связности, что проявляется, в частности, в ужесточении неравенства $p_c > 1/(z - 1)$.

При этом ясно, что для достижения связности необходимо, чтобы расплавы появились на значительной (порядка 50%) части граней. Отсюда, в частности, следует, что к моменту начала сегрегации расплава из твердой матрицы расстояние между включениями расплава порядка размеров зерна. Этим определяется характерное время установления диффузионного равновесия между расплавом и релактантом, а значит, и окончательный химический состав расплава, просачивающегося сквозь твердый скелет.

Для рассмотренной модели при $p > p_c^*$ функция $f(p)$, характеризующая перколяционную составляющую проницаемости и проводимости, возрастает приблизительно линейно с ростом p . Вероятнее всего, зависимость такого вида сохранится и при другой геометрии решетки (возможно, при отличном значении порога проницаемости). Значительно менее

определенными являются пороговое значение степени плавления φ_c и зависимость проницаемости или проводимости от степени плавления при $\varphi > \varphi_c$. Эта зависимость несомненно нелинейная, но ее конкретный вид определяется тем, как изменяется с ростом степени плавления количество граней смоченных расплавом (т. е. p), и аспектное отношение включений расплава (т. е. α). Ясно только, что при $p = 1$ и $\alpha \ll 1$, т. е. в ситуации, когда расплав появился на всех гранях, но включения расплава еще можно считать тонкими, проницаемость и проводимость пропорциональны φ^3 и φ соответственно.

Наконец, можно заключить, что если справедливо утверждение Фаула [5], то сегрегация расплава из частично расплавленной среды со степенью плавления ниже нескольких процентов, если и не невозможна, то чрезвычайно затруднена. В заключение, отметим, что метод моделирования, разработанный нами, легко может быть распространен на случай регулярной решетки другой, отличной от кубической, геометрии.

Приложение. Введем локальную систему координат в четырехполюснике (см. рис. 1, б). Оси X и Y локальной системы лежат в его плоскости. Поскольку “зерна” “кристалла” являются непроводящими, то ток течет только в плоскости четырехполюсника, т. е. z -составляющая тока на его границах, параллельных плоскости XY , $\partial\psi/\partial z = 0$ (ψ — электростатический потенциал). Четырехполюсник тонкий $c \ll a$, и, следовательно, от координаты z потенциал не зависит.

Нас интересует ток, протекающий через сторону 0 при заданных потенциалах на всех сторонах квадрата. Координаты x, y нормируем на длину стороны квадрата a , так что $0 \leq x, y \leq 1$. Распределение потенциала в четырехполюснике описывается двумерным уравнением Лапласа (Δ_2 — двумерный оператор Лапласа)

$$\Delta_2\psi = 0 \quad (13)$$

с граничными условиями $\psi = \psi_i$ на стороне i ($i = 0, \dots, 3$).

Пусть $\psi^{(100)}(x, y)$, $\psi^{(010)}(x, y)$ и $\psi^{(001)}(x, y)$ — решения уравнения (13) при единичном потенциале на одной из сторон (1, 2 или 3 соответственно) и нулевом на остальных сторонах. В силу очевидной симметрии $\psi^{(001)}(x, y) = \psi^{(100)}(1 - x, y)$.

Если обозначить

$$I^{(100)} = - \int_0^1 \frac{\partial\psi^{(100)}(x, 0)}{\partial y} dx, \quad I^{(010)} = - \int_0^1 \frac{\partial\psi^{(010)}(x, 0)}{\partial y} dx, \quad I^{(001)} = I^{(100)}, \quad (14)$$

то ток $I^{(k)}$, протекающий через сторону 0 проводящего элемента с номером k , выражается через потенциалы на сторонах этого проводника и одинаковые для всех элементов стандартные интегралы $I^{(100)}$ и $I^{(010)}$:

$$I^{(k)} = c\sigma_k[(\psi_1 + \psi_3 - 2\psi_0)I^{(100)} + (\psi_2 - \psi_0)I^{(010)}], \quad (15)$$

где c — толщина проводящего элемента, а σ_k — его проводимость. В формуле (15) учтено, что $I^{(001)} = I^{(100)}$. Значения интегралов $I^{(k)}$ находились численно.

1. Navon O., Stolper E. Geochemical consequences of melt percolation: The upper mantle as a chromatographic column // J. Geol. — 1987. — **95**. — P. 285–307.
2. Cooper R. F., Kohlstedt D. L. Rheology and structure of olivine-basalt partial melts // J. Geophys. Res. — 1986. — **91**. — P. 9315–9323.

3. *Laporte D., Provost A.* The grain scale distribution of silicate, carbonate and metallosulfide partial melts: a review of theory and experiments // *Physics and chemistry of partially molten rocks* / Ed. N. Bagdassarov, D. Laporte, A. Thompson. – Dordrecht: Kluwer, 2000. – P. 93–140.
4. *McKenzie D.* The extraction of magma from the crust and mantle // *Earth Planet. Sci. Lett.* – 1985. – **74**. – P. 81–91.
5. *Faul U. H.* Permeability of partially molten upper mantle rocks from experiments and percolation theory // *J. Geophys. Res.* – 1997. – **102**. – P. 10299–10311.
6. *Gueguen Y., Dienes J. K.* Transport properties of rocks from statistics and percolation // *Math. Geol.* – 1989. – **21**. – P. 1–13.
7. *Vaughan P. J., Kohlstedt D. L., Waff H. S.* Distribution of the glass phase in hot-pressed olivine-basalt aggregates: An electron microscope study // *Contrib. Mineral. Petrol.* – 1982. – **81**. – P. 253–261.

*Институт геофізики ім. С. І. Субботина
НАН України, Київ*

Поступило в редакцію 23.09.2009

O. V. Aryasova

Permeability of molten rocks under melting on grain sides of a crystal structure

We consider a problem of finding the conductivity and the permeability of partially molten rock. Since recent experiments have demonstrated that the main part of a melt is possibly concentrated in flat inclusions occupying the grain sides, we consider a random system of conductive elements placed on sides of grains of a cubic lattice. By numerical modeling, it is shown that the connectivity threshold p_c of the system corresponds approximately to 50% of the occupied lattice sides. If the probability p for a side to be occupied exceeds the threshold, the conductivity scales linearly with $p - p_c$.