

Zweiphasenströmung im oberen Erdmantel
und chemische Differentiation

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium

vorgelegt dem Rat der Chemisch-Geowissenschaftlichen Fakultät
der Friedrich-Schiller-Universität Jena

von Dipl.-Math. Norbert Gründer
geboren am 22.10.1965 in Berlin

Gutachter

1. Prof. Walzer
2. Prof. Jentsch
3. Prof. Jacoby

Tag des Rigorosums: 30.06.1999

Tag der öffentlichen Verteidigung: 07.07.1999

Zusammenfassung:

Konvektion ist die wichtigste Form des Wärmetransports im Erdmantel. Die Heizung von innen wird durch partielles Schmelzen und durch die dadurch verursachte Neuverteilung der radioaktiven Quellen modifiziert. Zur Beschreibung der Konvektion (durch Zweiphasenströmung) und der Auswirkungen auf die Konzentrationsverteilung der Radionuklide im oberen Erdmantel wird ein selbstkonsistentes Modell benutzt. Die Erhaltungsgleichungen der Energie, des Impulses, der Masse und der Atomanzahlen der wesentlichsten Radionuklide und ihrer Zerfallsprodukte werden verwendet, um die Fließgeschwindigkeiten, Temperaturen und Konzentrationen sowohl der festen Matrix als auch des längs der Korngrenzen strömenden fluiden Materials als Funktionen des Ortsvektors und der Zeit zu bestimmen. Den Zusammenhang zwischen den Mikro- und Makrogeschwindigkeiten vermittelt das Darcy-Gesetz. Die Viskosität wird als Funktion der Temperatur und des Drucks behandelt. In den Modellen wird sowohl das Verhalten der festen Matrix als auch das der Schmelze berechnet.

Das prinzipielle Ziel dieser Arbeit ist die Modellierung des Einflusses einer Zweiphasenströmung auf die Entwicklung des Erdmantels. Die Berechnungen beruhen auf einer realistischen Verteilung der für die Wärmeproduktion hauptverantwortlichen Elemente. Diese Verteilung ändert sich durch die thermische Mantelkonvektion und die chemische Segregation im Laufe der Erd-

geschichte. Es bildet sich ein an Radionukliden verarmerter oberer Erdmantel. Realistische Verteilungen der Temperatur, der Viskosität und der Geschwindigkeiten konnten berechnet werden. Der Wärmestrom an der Oberfläche des Modells hat eine akzeptable Nähe zum realen Wärmestrom an der Erdoberfläche. Der Einfluß der Variation der Parameter wurde am Beispiel der Geschwindigkeit der Schmelze, als einer der empfindlicheren Größen, untersucht. Es konnte gezeigt werden, daß leichte Änderungen von Parametern des aufgestellten Modells nicht zu elementaren Störungen führen und der Mechanismus prinzipiell stabil funktioniert. Vergleiche der berechneten Ergebnisse mit den Resultaten anderer Modelle, die die thermische und geochemische Entwicklung der Erde untersuchten, zeigen eine gute Übereinstimmung.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Geophysikalische Grundlagen	11
2.1	Erhaltungsgleichungen	11
2.1.1	Massen- und Impulserhaltung	11
2.1.2	Energieerhaltung	14
2.2	Konzentrationsgleichungen	15
2.3	Wärmeproduktion	16
2.4	Randbedingungen	18
3	Numerische Grundlagen	21
3.1	Diskretisierung	21
3.1.1	Finite-Differenzen-Verfahren	21
3.1.2	Diskretisierungsformeln	22
3.2	Stabilitätskriterien	27
3.2.1	ADI-Verfahren	27
3.2.2	upwind-Verfahren	28
3.2.3	Zeitschranken	30
3.3	Freie Randwertprobleme	32
4	Das Modell	36
4.1	Problemformulierung	36
4.1.1	Motivation	36
4.1.2	Schmelze und Porosität	38

	4
4.1.3 Viskosität	39
4.1.4 Strömungen	39
4.1.5 Konzentrationen	41
4.1.6 Temperatur	45
4.1.7 Anfangs- und Randbedingungen	47
4.2 Implementierung	48
5 Ergebnisse	51
5.1 Benchmarktest	51
5.2 Referenzmodell	57
5.3 Parametervariationen	70
6 Diskussion und Schlußfolgerungen	75

Kapitel 1

Einleitung

Im letzten Jahrzehnt haben hydrodynamische Modelle der Extraktion basaltischer Schmelzen aus Mantelperidotit zu wesentlichen neuen petrologischen Erkenntnissen geführt. Solche Modelle beruhen auf der Annahme, daß sehr geringe Schmelzanteile (weniger als 1%) extrahiert werden. Auch die Basalte der mittelozeanischen Rücken (MORB), die ungefähr die Hälfte der Magmatite der Erdoberfläche ausmachen, entsprechen Ansammlungen von relativ kleinen Schmelzpaketen [McKenzie, 1984; McKenzie & Bickle, 1988]. Numerische Modellierungen kleinräumiger Schmelzvorgänge im Bereich mittelozeanischer Rücken führen zu einer weiteren Unterstützung dieser Behauptung [Spiegelman, 1993], speziell durch die intensiven Untersuchungen der Porosität unterhalb der Riftzonen der ozeanischen Lithosphäre.

In älteren Modellen zur Entstehung der Schmelze war man hingegen der Meinung, daß die Schmelze nur dann extrahiert werden kann, wenn ein wesentlich höherer Schmelzgrad (etwa 10 - 25 %) erreicht wird. Die Anwendbarkeit der neuen Modelle ist deshalb von großer Bedeutung für die gesamte magmatische Petrologie und kann zusätzlich zu neuen Erkenntnissen bei der Betrachtung metamorpher Gesteine führen, sofern dort Fluide in ähnlicher Art mobil sind.

Die Extraktion von Schmelze in der Matrix erfordert zwei wichtige Vorausset-

zungen. Als erstes muß partielle Schmelze innerhalb der Matrix entstehen. Dies geschieht entweder durch Erhöhung der Temperatur oder durch eine Minderung des Drucks und der daraus folgenden Änderung der Solidustemperatur. Nachdem solche Zonen entstanden sind, muß sich die Schmelze von der restlichen Matrix trennen können. Solch eine Separation bedeutet, daß es eine Relativbewegung zwischen Matrix und Schmelze gibt, d.h. es entwickelt sich eine Zweiphasenströmung. In der Natur sind diese zwei Prozesse nicht unabhängig voneinander, da sich die Extraktion der Schmelze zur gleichen Zeit vollzieht wie die Erzeugung der Schmelze.

Schmelze tritt zuerst an den Kontaktstellen zwischen verschiedenen Mineralkörnern auf. In den Kornecken berühren sich die Mineralkörner in einem Punkt, und die erste Schmelze entsteht an dieser Stelle. Die Fähigkeit einer Schmelze, sich entlang der Korngrenzen zu bewegen, wird durch den diedrischen oder Benetzungswinkel ausgedrückt. Der Wert des Benetzungswinkels kontrolliert die Geometrie und die Stabilität der Poren [Beeré, 1975]. Nur wenn dieser Winkel zwischen den Mineralen kleiner als 60° (Abb. 1.1a) ist, kann sich die Schmelze entlang der Korngrenzen bewegen und ein dreidimensionales Netzwerk bilden. Das bedeutet, daß die Schmelze eine kontinuierlich verbundene Phase durch das Gestein hindurch bilden kann. Eine weitere wichtige Schlußfolgerung ist, daß die Schmelze nicht in den Ecken verbleibt, in den sie erzeugt wurde, sondern sich entlang der Kornflächen bewegt. Dies geschieht auch dann, wenn der Anteil der Schmelze am Gesamtvolumen sehr gering ist (weniger als 1%). Wo der Benetzungswinkel größer als 60° ist, bilden kleine Schmelzvolumina isolierte Poren in den Kornecken (Abb. 1.1b), welche sich erst bewegen können, wenn ein viel höherer Schmelzgrad erreicht wird [Bulau et al., 1979].

Obwohl die Schmelze durch physikalische Prozesse im Maßstab von wenigen Mineralkörnern bestimmt wird, wirken die Oberflächenenergien auf das Fließregime in einer Ausdehnung von Tausenden von Kilometern [Foley, 1997]. Der Benetzungswinkel ist somit verantwortlich entweder für ein poröses Fließverhalten innerhalb eines dreidimensional verbundenen Schmelznetzwerks oder

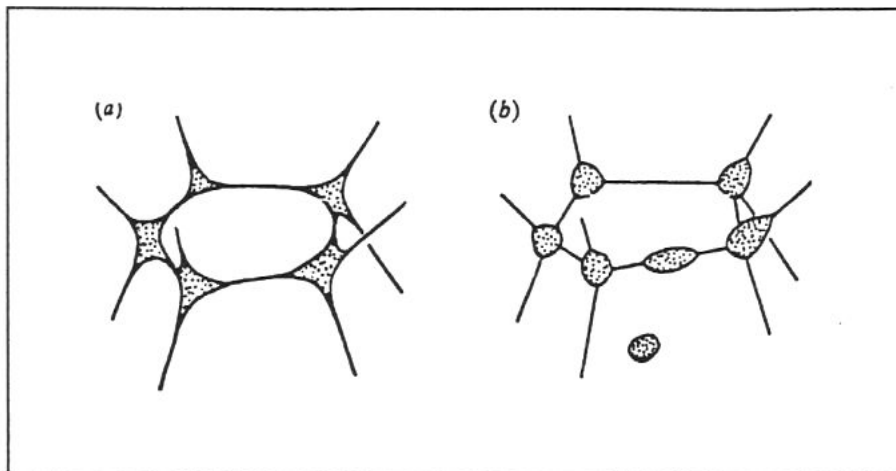


Abbildung 1.1: Struktur und Verteilung von Schmelze in Abhängigkeit vom Benetzungswinkel (nach Harte et al., 1993). In (a) und (b) werden die Schmelzporen (gepunktet) innerhalb einer dreidimensionalen Ansammlung von Mineralkörnern bei einem Benetzungswinkel, welcher kleiner bzw. größer als 60° ist, gezeigt. Während in (a) sich die Schmelze entlang der Korngrenzen ausdehnen kann, bildeten sich in (b) isolierte Schmelzpole zwischen den Korngrenzen bzw. -flächen.

oder für ein kanalisiertes Fließregime, also einen auf makroskopische Risse begrenzten Schmelzfluß.

Für präzise theoretische Abschätzungen des Benetzungswinkels müßten Kristalltyp und kristallographische Orientierung, die Haupt- und Nebenelementchemie der Schmelze und der Matrix sowie weitere physikalische Parameter berücksichtigt werden. Da dies nicht möglich ist, bleibt nur die experimentelle Bestimmung der Werte für den Benetzungswinkel.

Eine Aufstellung experimenteller Daten [Cheadle, 1989] zeigt, daß für eine Olivin- und Orthopyroxenmatrix, welche die Zusammensetzung des oberen Mantels bis in 410 km Tiefe kennzeichnet, die Benetzungswinkel für basaltische und karbonatitische Schmelzen kleiner als 60° sind und hauptsächlich im Bereich von 25 bis 40° liegen. Das zeigt, daß sogar geringe Schmelzanteile im

Mantel ein Netzwerk aufbauen und die Gesteinsmatrix durchfließen können. Auch durch experimentelle Untersuchungen [Kohlstedt, 1992] konnte diese Behauptung gestützt werden.

Ein wichtiger Hinweis für das Vorhandensein einer Schmelzphase ist die Existenz von mindestens einer Schicht mit niedrigen seismischen Geschwindigkeiten (*low-velocity layer* - *LVL*). In einer solchen Schicht, die besonders unter den Ozeanen stark ausgeprägt ist, zeigt die Geschwindigkeit der Scherwellen eine Abnahme um bis zu 10%. Der Grund dieser Abnahme kann auf verschiedene Sachverhalte zurückgeführt werden [Schmeling & Bussod, 1996]. Wichtige Argumente sprechen jedoch für einen starken Zusammenhang zwischen dem Vorhandensein von Schmelze und niedrigen seismischen Geschwindigkeiten. Ein Hauptargument ist die Beziehung zwischen vulkanischer Aktivität und dem Volumen des eruptiven Materials, hoher Dämpfung und hoher elektrischer Leitfähigkeit in Gebieten mit niedriger Scherwellengeschwindigkeit [Schmeling & Bussod, 1996].

Es wird allgemein angenommen, daß Olivin der Hauptbestandteil des oberen Mantels bis zu einer Tiefe von 410 km ist und damit das rheologische Verhalten dieses Bereiches bestimmt. Unter den Bedingungen des oberen Mantels ist der vorherrschende Deformationsmechanismus beim Fehlen von Schmelze das Versetzungskriechen. Dies führt auf die Frage nach möglichen Effekten der partiellen Schmelze auf das Verhalten der Mantelströmung. Rheologische Hinweise aus experimentellen Untersuchungen zeigen, daß beim Vorhandensein von geringen Schmelzanteilen (meist um 1%, selten bis 10%) die Deformation prinzipiell durch die feste Phase bestimmt wird [Bussod & Christie, 1991].

Das Schmelzen unterhalb der mittelozeanischen Rücken ist ein interessantes Gebiet für das Studium von dynamischen Merkmalen der Schmelzentstehung und -bewegung im aufsteigenden Mantelgestein [McKenzie, 1984; Langmuir et al., 1992]. Hierbei wird ein permeabler Fluß der Schmelze durch das Gestein betrachtet. Die chemische Zusammensetzung der Basalte der

mittelozeanischen Rücken (MORB) sollte Hinweise auf diese Schmelzbewegung enthalten, auch wenn die Zusammensetzung von weiteren Faktoren, wie Kristallisation und Mantelinhomogenitäten, abhängt. Die Anreicherung inkompatibler Elemente in der Schmelze wird als ein Resultat des dynamischen Schmelzens gesehen [Ozawa & Shimizu, 1995; Spiegelman, 1996]. Außerdem kann die Schmelzbewegung einen äußerst effektiven Mechanismus zur Mischung von Schmelzen unterschiedlicher Zusammensetzung aus benachbarten Gebieten darstellen [Kenyon, 1990].

In vielen Modellierungen des Schmelzprozesses werden *a-priori*-Vereinfachungen vorgenommen. So wird z.B. die Schmelzrate als Funktion der Tiefe angenommen [Spiegelman & Elliott, 1993] oder es werden Parameter für das Verhalten von Schmelzfluß und chemischer Zusammensetzung ohne die direkte Lösung von dynamischen Gleichungen eingeführt [Ichihara & Ida, 1998].

Ein anderes Modell [Schmeling & Bussod, 1996] untersucht die Entstehung partieller Schmelze in der kontinentalen Asthenosphäre. Dabei wird eine nichtnewtonsche Rheologie für Olivin in Abhängigkeit von Temperatur und Druck angenommen. In diesem Modell findet man ein stark zeitabhängiges Verhalten der Konvektion. Gebiete mit partieller Schmelze treten in Episoden von 5 bis 10 Ma auf. Der Schmelzanteil bewegt sich zwischen 0 und 2% bei einer trockenen Soliduskurve und zwischen 2 und 4% bei einem mit Wasser gesättigten Solidus. Dem Modell liegt ein kontinentaler Wärmefluß von $53.3 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2}$ an der Erdoberfläche zugrunde. Der Einfluß von Mantelströmungen innerhalb der Lithosphäre auf die Plattentektonik wurde an vorangegangenen Modellen [Schmeling & Marquart, 1993] diskutiert.

Um im folgenden zu einem in sich stimmigen Modell zu gelangen, werden die Erhaltungsgleichungen der Energie, des Impulses, der Masse und der Atomzahlen der wesentlichen Radionuklide verwendet, um die Fließgeschwindigkeiten, Temperaturen und Konzentrationen sowohl der festen Matrix als auch des längs der Korngrenzen strömenden fluiden Materials als Funktion des Ortsvektors und der Zeit zu bestimmen.

Auf Grund der obigen Erkenntnisse stellt sich die Frage, wie sich die Schmelzextraktion auf die chemische Zusammensetzung und damit auch auf das thermische Verhalten des Erdmantels auswirkt.

Kapitel 2

Geophysikalische Grundlagen

2.1 Erhaltungsgleichungen

Die in den folgenden Abschnitten näher erläuterten Gleichungen für die Massen-, Impuls- und Energieerhaltung und für die Konzentration beziehen sich auf das Modell einer Zweiphasenströmung. Für die Bedeutung und Gestalt der Erhaltungsgleichungen im Fall einer Einphasenströmung bei geodynamischen Konvektionsmodellen sei auf die bekannte Literatur [Schmeling, 1990; Bittner, 1994; Schott, 1996] verwiesen. Die Formulierung der Gleichungen (2.1) bis (2.11) stammt weitgehend aus der schriftlichen Aufgabenstellung [Walzer, 1995].

2.1.1 Massen- und Impulserhaltung

Die Erhaltungssätze für Masse und Impuls können wie folgt zusammengefaßt werden, wobei die Bedeutung der einzelnen Größen in Tabelle 2.1 auf der Seite 13 ersichtlich ist.

$$\frac{\partial(\varrho_m f)}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_m f \mathbf{v}) = \frac{DM}{Dt} \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial[\varrho_s(1-f)]}{\partial t} + \nabla \cdot (\varrho_s(1-f)\mathbf{V}) = -\frac{DM}{Dt} \quad (2.2)$$

$$f(\mathbf{v} - \mathbf{V}) = -\frac{K_f}{\mu}(P + \varrho_m g z) \quad (2.3)$$

$$(1-f) \frac{\partial P}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j} \eta \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\xi - \frac{2}{3} \eta \right) \nabla \cdot \mathbf{V} \\ + \frac{\mu f^2}{K_f} (\mathbf{v} - \mathbf{V}) - (1-f) \varrho_s g \delta_{i3} \quad (2.4)$$

$$K_f = \frac{a^2 f^n}{b} \quad (2.5)$$

Für die Massenerhaltung gilt, daß der in ein Volumen einströmende Massenfluß gleich dem ausströmenden Fluß ist, abzüglich der durch Kompression verdichteten Masse und zuzüglich der durch Ausdehnung expandierten Masse. Bei einer Zweiphasenströmung muß diese Erhaltung für beide Komponenten, also sowohl für die Schmelze als auch für die Matrix, gemeinsam gelten.

Die Gleichungen (2.1) und (2.2) stellen die Massenerhaltung der Matrix und der Schmelze getrennt dar. Sie erlauben jedoch mittels der Schmelzgeschwindigkeit DM/Dt einen Massentransport zwischen fest und flüssig. Bei positiver Schmelzgeschwindigkeit schmilzt der Festkörper und wenn DM/Dt negativ ist, kommt es zum Erstarren der Schmelze. Bei der Indizierung der Dichten steht der Index m für die Schmelze und der Index s für die Matrix bzw. den Festkörper. Gleichung (2.3) beinhaltet die Impulserhaltung der Schmelze und steuert die Trennung der Schmelze von der Matrix. Diese Gleichung ist eine erweiterte Form des Darcy-Gesetzes. Der Trennungsfluß der Schmelze von der Matrix ist proportional zur Permeabilität und dem strömungsabwärtsgerichteten Druckgradienten.

Tabelle 2.1: Übersicht über die verwendeten Größen

Variable bzw. Parameter	Bedeutung	Wert	Einheit
ϱ_m	Dichte der Schmelze	$2.8 \cdot 10^3$	$kg\ m^{-3}$
ϱ_s	Dichte der Matrix	$3.3 \cdot 10^3$	$kg\ m^{-3}$
\mathbf{v}	Geschwindigkeit der Schmelze	variabel	$m\ s^{-1}$
\mathbf{V}	Geschwindigkeit der Matrix	variabel	$m\ s^{-1}$
f	Porosität	variabel	<i>dimensionslos</i>
$\frac{DM}{Dt}$	Schmelzgeschwindigkeit	variabel	$kg\ m^{-3}\ s^{-1}$
ξ	Volumenviskosität der Matrix	10^{18}	$Pa\ s$
η	Scherviskosität der Matrix	10^{18}	$Pa\ s$
μ	Scherviskosität der Schmelze	1	$Pa\ s$
P	Druck	variabel	Pa
g	Schwerebeschleunigung	9.81	$m\ s^{-2}$
a	Kornradius	10^{-3}	m
K_f	Permeabilität	variabel	m^2
n	Exponent der Permeabilität	3	<i>dimensionslos</i>
b	Permeabilitätskonstante	10^3	<i>dimensionslos</i>
x	horizontale kartesische Komponente des Ortsvektors		m
z	vertikale kartesische Komponente des Ortsvektors		m
h	Schichtdicke	$2.891 \cdot 10^6$	m
ΔS	spezifische Schmelzentropie	362	$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
c_{ps}	spezifische Wärme der Matrix (bei konstantem Druck)	10^3	$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
c_{pm}	spezifische Wärme der Schmelze (bei konstantem Druck)	10^3	$J\ kg^{-1}\ K^{-1}$
α_s	thermischer Ausdehnungskoeffizient der Matrix	$4 \cdot 10^{-5}$	K^{-1}
α_m	thermischer Ausdehnungskoeffizient der Schmelze	$6.8 \cdot 10^{-5}$	K^{-1}
D_s	Diffusivität der Matrix	10^{-17}	$m^2\ s^{-1}$
D_m	Diffusivität der Schmelze	10^{-10}	$m^2\ s^{-1}$
k	Wärmeleitfähigkeit	3.3	$W\ m^{-1}\ K^{-1}$
κ	Temperaturleitfähigkeit	10^{-6}	$m^2\ s^{-1}$
Q	Wärmeleistungsdichte	variabel	$W\ m^{-3}$
H	spezifische Wärmeproduktion	variabel	$W\ kg^{-1}$
$K_{c\nu}$	Verteilungskoeffizienten	s.Tab. 2.2	<i>dimensionslos</i>
$c_{t\nu}$	homogene Anfangskonzentration	s.Tab. 2.2	<i>dimensionslos</i>
$a_{if\nu}$	isotopischer Gehaltsfaktor	s.Tab. 2.2	<i>dimensionslos</i>
$H_{0\nu}$	anfängliche spezifische isotopische Wärmeproduktion	s.Tab. 2.2	$W\ kg^{-1}$

Die Gleichung (2.4) enthält die Impulserhaltung der Matrix, welche als kompressibles, hochviskoses Fluid behandelt wird. Sie ist die Stokesgleichung für Festkörperkriechen und zeigt, daß der Druckgradient die Schmelzbewegung sowohl von der Auftriebsdifferenz zwischen Matrix und Schmelze als auch von der viskosen Deformation der Matrix abhängig macht.

Gleichung (2.5) stellt die Permeabilität als eine nichtlineare, skalare Funktion der Korngröße a , der Porosität f und des dimensionslosen Permeabilitätskoeffizienten b dar. Diese Gleichung ist eine annehmbare Parameterisierung für den Bereich einer Porosität-Permeabilität - Relation bei kleineren Porositäten ($\leq 10\text{-}20\%$) [Bear, 1988].

2.1.2 Energieerhaltung

Die Grundlage für Wärmeleitung und Konvektion, Erstarrungs- und Aufschmelzprozesse ist ein räumlich und zeitlich variierendes Temperaturfeld.

Änderungen im Temperaturfeld führen zu Dichteunterschieden und sind somit die Antriebskraft für thermisch bedingte Konvektion innerhalb des Erdmantels. Die hauptsächliche Wärmequelle, die diese Dichteunterschiede verursacht, ist der radioaktive Zerfall von ^{40}K , ^{232}Th , ^{235}U und ^{238}U .

Eine weitere Wärmequelle ist der Wärmefluß von der Kern-Mantel-Grenze in ca. 2891 km Tiefe her. Dieser dürfte aber nicht größer als 20 mW/m^2 sein [Stacey, 1992; Walzer & Hendel, 1999].

Betrachtet man die Wärmetransportgleichung und berücksichtigt die beiden Phasen, erhält man folgende Gleichung für die Berechnung des Temperaturfeldes im Erdmantel.

$$\begin{aligned}
0 = & -T \cdot \Delta S \cdot M_p - [(1-f) \varrho_s c_{ps} + f \varrho_m c_{pm}] \frac{\partial T}{\partial t} \\
& + T [(1-f) \alpha_s + f \alpha_m] \frac{\partial P}{\partial t} - (1-f) \varrho_s c_{ps} \mathbf{V} \cdot \nabla T \\
& - f \varrho_m c_{pm} \mathbf{v} \cdot \nabla T + (1-f) \alpha_s T \mathbf{V} \cdot \nabla P \\
& + f \alpha_m T \mathbf{v} \cdot \nabla P + k \nabla^2 T + \frac{\mu}{K} f^2 (\mathbf{v} - \mathbf{V})^2 \\
& + \frac{\eta}{2} \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial V_l}{\partial x_l} \right)^2 + Q
\end{aligned} \tag{2.6}$$

Neben den in Abschnitt 2.1.1 erläuterten Größen, ist bei der Temperaturfeldberechnung die Wärmeleitfähigkeit k (als Faktor vor dem diffusiven Term), die Wärmequellendichte Q und der advektive Term der Matrixbewegung von großer Bedeutung. Weitere in der Gleichung verwendete Größen sind die spezifische Wärme, sowohl der Matrix c_{ps} als auch der Schmelze c_{pm} , die thermischen Ausdehnungskoeffizienten für Matrix α_s und Schmelze α_m und die spezifische Schmelzentropie ΔS . Die Bedeutung und Herleitung von M_p wird bei der Konzentrationsbetrachtung (2.2) in Formel (2.9) ersichtlich.

2.2 Konzentrationsgleichungen

Bei Zwei-Phasen-Problemen ist es notwendig, die Zusammensetzung sowohl der Schmelze als auch der Matrix zu betrachten. Für ein Transportgleichgewicht steht die Zusammensetzung der Matrix in direkter Beziehung zur Zusammensetzung der Schmelze.

Mit $c_{m\nu}$ als Gewichtskonzentration des ν -ten Elements in der Schmelze, $c_{s\nu}$ als Gewichtskonzentration des ν -ten Elements in der Matrix und mit $K_{c\nu}$ als Verteilungskoeffizient gilt folgende Beziehung:

$$c_{s\nu} = K_{c\nu} c_{m\nu} \tag{2.7}$$

Daher gilt für die Erhaltung der Gesamtmasse jedes Elements:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_{m\nu}}{\partial t} [(1-f)\varrho_s K_{c\nu} + f\varrho_m] + [\varrho_m f \mathbf{v} + \varrho_s (1-f) K_{c\nu} \mathbf{V}] \cdot \nabla c_{m\nu} \\ = \varrho_m D_m \nabla \cdot [f \nabla c_{m\nu}] + (K_{c\nu} - 1) c_{m\nu} M_p \end{aligned} \quad (2.8)$$

Hierbei verdeutlicht die linke Seite der Gleichung, daß die zeitliche Änderung des ν -ten Elements vom Fluß der Matrix und von der Schmelze abhängt. Zusätzliche Quellterme, wie für Diffusion oder radioaktiven Zerfall, können die rechte Seite der Gleichung ergänzen, wobei zu beachten ist, daß die Diffusion der Matrix vernachlässigt wird, da ihre Auswirkungen zu gering sind.

In (2.8) ist D_m die totale Diffusivität, die aus der molekularen Diffusion in der Schmelze entsteht und M_p durch die Gleichung (2.9), in Abhängigkeit von Porosität, Dichte und Geschwindigkeitskomponenten der Schmelze und der Matrix, gegeben.

$$M_p = \left(\frac{1}{\varrho_m} - \frac{1}{\varrho_s} \right)^{-1} \nabla \cdot (\mathbf{v} - \mathbf{V}) \quad (2.9)$$

In Abhängigkeit von der Dichte der Schmelze, der Dichte der Matrix und der Porosität läßt sich die totale Gewichtskonzentration $c_{t\nu}$ aus der Gewichtskonzentration in der Schmelze $c_{m\nu}$ und der Gewichtskonzentration in der Matrix $c_{s\nu}$ für das jeweilige ν -te Element nach Gleichung (2.10) berechnen.

$$c_{t\nu} = \frac{[f\varrho_m c_{m\nu} + (1-f)\varrho_s c_{s\nu}]}{[f\varrho_m + (1-f)\varrho_s]} \quad (2.10)$$

2.3 Wärmeproduktion

Wie in 2.1.2 erwähnt, ist die hauptsächliche Wärmequelle für die thermische Aufheizung des Erdmantels der radioaktive Zerfall von ^{40}K , ^{232}Th , ^{235}U und ^{238}U . Die Berechnung der radioaktiven Wärmequellendichte Q erfolgt in Abhängigkeit von den Werten dieser Radionuklide (Tabelle 2.2) durch die Gleichung (2.11) [Walzer & Hendel, 1997b].

$$Q = \varrho_s \left[\sum_{\nu=1}^4 c_{t\nu} \cdot a_{if\nu} \cdot H_{0\nu} \cdot \exp(-t/\tau_\nu) \right] \quad (2.11)$$

Neben der zeitlichen Variation der Wärmequellichte, die durch den radioaktiven Zerfall bedingt ist, kann es durch Änderungen in den Konzentrationsverteilungen (2.8) der Radionuklide auch zu räumlichen Variationen in der Wärmequellichte kommen.

Die Werte der in (2.11) verwendeten Größen sind in Tabelle (2.2) ersichtlich. Mit dem Laufindex ν werden im Modell die einzelnen Radionuklide bezeichnet. Nach der Zeit τ_ν ist von der ursprünglichen Masse des Radionuklids noch $1/e$ vorhanden. $H_{0\nu}$ ist die anfängliche spezifische isotopische Wärmeproduktion des jeweiligen Radionuklids ν . Mit $a_{if\nu}$ wird der isotopische Gehaltsfaktor und mit $K_{c\nu}$ der Verteilungskoeffizient angegeben. Der Wert für $c_{t\nu}$ stellt die einzelnen homogenen Anfangsverteilungen der Isotope dar.

Die Wärmeleistungsdichte geht wie gebräuchlich als Quellterm in die Berechnung des Temperaturfeldes (2.6) ein.

Tabelle 2.2: Übersicht über die einzelnen Werte der Radionuklide

Isotopenwerte

Isotope	⁴⁰ K	²³² Th	²³⁵ U	²³⁸ U
ν	1	2	3	4
$\tau_\nu [Ma]$	$2.0153 \cdot 10^3$	$2.02122 \cdot 10^4$	$1.0154 \cdot 10^3$	$6.4462 \cdot 10^3$
$H_{0\nu} [\frac{W}{kg}]$	$2.919 \cdot 10^{-5}$	$2.640 \cdot 10^{-5}$	$5.692 \cdot 10^{-4}$	$9.473 \cdot 10^{-5}$
$a_{if\nu}$	$1.19 \cdot 10^{-4}$	$1.0 \cdot 10^0$	$7.1 \cdot 10^{-3}$	$9.928 \cdot 10^{-1}$
$K_{c\nu}$	$1.0 \cdot 10^{-3}$	$7.0 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-3}$	$1.5 \cdot 10^{-3}$
$c_{t\nu}$	$2.553 \cdot 10^{-3}$	$9.393 \cdot 10^{-8}$	$1.855 \cdot 10^{-6}$	$4.254 \cdot 10^{-8}$

2.4 Randbedingungen

Die in den Erhaltungsgleichungen vorkommenden physikalischen Feldgrößen müssen wegen der Struktur der Differentialgleichungen, die die physikalischen Gegebenheiten darstellen, bestimmten Randbedingungen genügen. In diesem Abschnitt werden im ersten Teil die Randbedingungen für das Geschwindigkeitsfeld behandelt. Danach werden die Bedingungen an den Rändern der Temperatur- bzw. Konzentrationsfelder untersucht.

Randbedingungen für Geschwindigkeiten

Für alle Punkte (x, z) eines festen Randes $\Gamma := \partial\Omega$ sind die folgenden Randbedingungen möglich. Hierbei sei im folgenden die Geschwindigkeitskomponente senkrecht zum Rand, also in Normalenrichtung, mit u und die Geschwindigkeitskomponente parallel zum Rand, also in Tangentialrichtung, mit w bezeichnet. Außerdem wird nur ein senkrechtetes Randstück betrachtet. Für waagerechte Randstücke sei auf die Literatur [Griebel et al., 1995] verwiesen.

1. Haftbedingung (*no-slip*):

Die kontinuierlichen Geschwindigkeiten am Rand sollen nach dieser Bedingung gleich Null sein. Das bedeutet, daß kein Fluid durch den Rand dringen kann und daß es am Rand haftet.

$$u(x, z) = 0 \quad \text{und} \quad w(x, z) = 0$$

2. Gleitbedingung (*free-slip*):

Bei dieser Randbedingung soll die Geschwindigkeit senkrecht zur Wand Null sein, ebenso wie die Ableitung der Geschwindigkeit parallel zur Wand. Physikalisch gesehen bedeutet dies, daß ein Fluid den Rand nicht durchdringen

kann. Außerdem gibt es entlang des Randes keine Reibungsverluste.

$$u(x, z) = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial w(x, z)}{\partial x}$$

3. Einströmbedingung (*inflow*):

Bei Einströmbedingungen werden die Geschwindigkeitskomponenten explizit vorgegeben,

$$u(x, z) = u_0 \quad \text{und} \quad w(x, z) = w_0$$

wobei u_0 und w_0 die gegebenen Werte der Geschwindigkeitenkomponenten auf dem Rand sind.

4. Ausströmbedingungen (*outflow*):

Am Rand werden die Normalenableitungen beider Geschwindigkeitskomponenten auf Null gesetzt. Dies bedeutet, daß sich die gesamte Geschwindigkeit senkrecht zum Rand nicht ändert.

$$\frac{\partial u(x, z)}{\partial x} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\partial w(x, z)}{\partial x} = 0$$

5. Periodische Randbedingungen

Die Geschwindigkeiten an den gegenüberliegenden Rändern müssen gleich sein. Bei Problemen dieser Art kann man sich auf die Berechnung einer Periode beschränken.

Sind an allen Rändern die Geschwindigkeiten selbst und nicht deren Normalableitung gegeben, so muß zusätzlich das Randintegral über die Geschwindigkeiten senkrecht zum Rand Null sein¹.

$$\int_{\Gamma} \begin{pmatrix} u \\ w \end{pmatrix} \cdot \vec{n} ds = 0$$

¹Dies resultiert aus der Divergenzfreiheit des Geschwindigkeitsfeldes zusammen mit dem Gaußschen Integralsatz: $0 = \int_{\Omega} \operatorname{div} \begin{pmatrix} u \\ w \end{pmatrix} dx dz = \int_{\Gamma} \begin{pmatrix} u \\ w \end{pmatrix} \cdot \vec{n} ds$

Randbedingungen für Temperatur und Konzentration

Für Temperatur T und Konzentration C unterscheidet man im wesentlichen zwei Randbedingungen. Hierzu sei im folgenden der Rand in zwei disjunkte Teilstücke zerlegt: $\Gamma := \Gamma_1 \cup \Gamma_2$.

1. Dirichlet-Randbedingung

Diese Randbedingung besagt, daß die Temperatur oder Konzentration am Rand vorgeschrieben wird. Physikalisch kann damit die Heizung oder Kühlung eines Fluids über eine Wand im Falle der Temperatur beschrieben werden. Bei Konzentrationsfeldern kann über solche Ränder eine Zuleitung von chemischen Substanzen erfolgen.

$$T|_{\Gamma_1} = T_1 \quad \text{und} \quad C|_{\Gamma_1} = C_1$$

2. Neumann-Randbedingungen

Im Falle der Temperatur läßt sich mit dieser Randbedingung festlegen, wieviel Wärme vom Fluid über den Rand abgeleitet werden kann. Dies hängt physikalisch gesehen vom Material der Wand ab, und von den Temperaturen auf beiden Seiten der Wand.

$$-\kappa \frac{\partial T}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = q_w$$

Hierbei sei κ die Wärmeleitfähigkeit des Fluids und q_w der Wärmefluß durch die Wand. Wenn $q_w = 0$ heißt diese Randbedingung homogen bzw. adiabatisch und besagt, daß kein Wärmeaustausch über diesen Rand geschieht. Für die Konzentration funktionieren diese Randbedingungen analog.

Kapitel 3

Numerische Grundlagen

3.1 Diskretisierung

Unter den Begriff der Diskretisierung beschreibt man in der Numerik den Übergang von einem kontinuierlichen Problem zu einem Problem, das nur in endlich vielen Punkten betrachtet wird. Insbesondere zur Lösung von Differentialgleichungen und damit auch zur Lösung von Differentialgleichungssystemen werden Diskretisierungen verwendet. Dabei wird die Differentialgleichung in ein Gleichungssystem umgewandelt, das die Werte der Lösungsfunktion nur an endlich vielen Punkten des Lösungsgebietes näherungsweise bestimmt.

3.1.1 Finite-Differenzen-Verfahren

Bei der Diskretisierung der in Kapitel 2 aufgestellten Differentialgleichungen wurde die Methode der Finiten Differenzen¹ [Hackbusch, 1986; Lliboutry, 1987; Quarteroni & Valli, 1994; Karrenbach, 1996] verwendet.

¹Daneben existieren eine Reihe weiterer Diskretisierungsverfahren wie Finite Elemente [Goering et al., 1993; Schwarz, 1991] oder Finite Volumen [Patankar, 1980].

Differenzenverfahren sind dadurch charakterisiert, daß Ableitungen durch Differenzenquotienten (dividierte Differenzen) ersetzt werden. Diese Differenzenquotienten werden oft auch einfach als "Differenz" bezeichnet.

Bei der Finiten Differenzenmethode wird das zu berechnende Gebiet mit einem äquidistanten Gitter überzogen. Die partiellen Ableitungen einer Funktion werden in jedem Gitterpunkt durch einen Differenzenquotienten (s. 3.1.2) ersetzt. Der Differenzenquotient beinhaltet die Werte der Funktion in dem Gitterpunkt und in seinen Nachbarpunkten. Bei diesem Übergang vom Kontinuum zu diskreten Gitterpunkten ist die Genauigkeit der Rechnung durch den Abbruchfehler des finiten Differenzenquotienten und die Anzahl der verwendeten Gitterpunkte bestimmt.

Daher ergeben sich für die Genauigkeit der Finiten Differenzenmethode folgende zwei Strategien. Entweder die Gitterabstände sind relativ groß und ein Differenzenschema der Ordnung 4 oder höher wird verwendet, um den Abbruchfehler zu reduzieren, oder man verwendet ein einfaches Differenzenschema und der Abbruchfehler wird durch eine Verkleinerung der Gitterabstände gering gehalten.

3.1.2 Diskretisierungsformeln

Zunächst wird die Diskretisierung im eindimensionalen Fall betrachtet. Dabei wird ein Intervall $\Omega := [0, a] \subset \mathcal{R}$ mit einem äquidistanten Gitter überzogen. Die h Teilintervalle des Gitters haben dabei die Größe $\delta x := a/h$ (Abb. 3.1).

Die Differentialgleichung wird dann nur noch an diesen Gitterpunkten betrachtet. Gemäß der Definition der Ableitung

$$\frac{du}{dx} := \lim_{\delta x \rightarrow \infty} \frac{u(x + \delta x) - u(x)}{\delta x}$$

einer differenzierbaren Funktion $u : \mathcal{R} \rightarrow \mathcal{R}$ wird nun der kontinuierliche Differentialoperator du/dx am Gitterpunkt x_i durch den folgenden, diskreten Differenzenoperator approximiert.

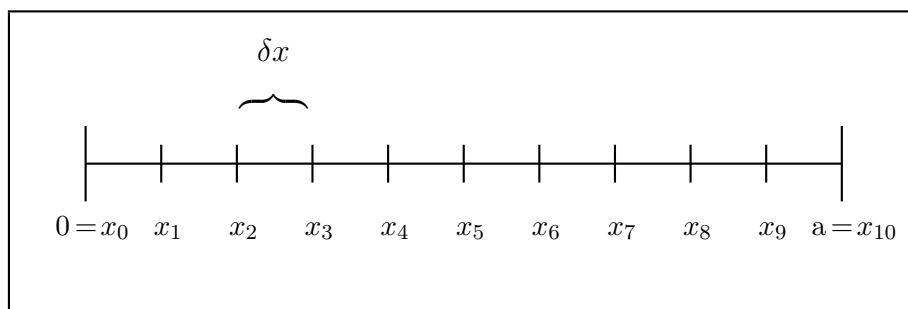


Abbildung 3.1: Eindimensionales äquidistantes Gitter mit $h = 10$ und einer Teilintervallgröße von $\delta x := a/h$.

$$\left[\frac{du}{dx} \right]_i^r := \frac{u(x_{i+1}) - u(x_i)}{\delta x}$$

Dabei ist $x_{i+1} = x_i + \delta x$ der rechts benachbarte Gitterpunkt von x_i , weshalb auch von der Vorwärts-Differenz oder rechtsseitigen Differenz gesprochen wird. Entsprechend existiert auch die Rückwärts-Differenz oder linksseitige Differenz

$$\left[\frac{du}{dx} \right]_i^l := \frac{u(x_i) - u(x_{i-1})}{\delta x}$$

und die symmetrische oder zentrale Differenz

$$\left[\frac{du}{dx} \right]_i^z := \frac{u(x_{i+1}) - u(x_{i-1}))}{2\delta x}$$

für den kontinuierlichen Differentialoperator du/dx .

Offensichtlich führt eine Verfeinerung des Gitters, d.h. eine Verkleinerung der Schrittweite δx , zu einer besseren Approximation des Differentialquotienten. Dabei hat der Diskretisierungsfehler der rechts- und linksseitigen Differenz die Größenordnung $\mathcal{O}(1/\delta x)$, d.h. bei einer Halbierung der Schrittweite ist auch in etwa eine Halbierung des Fehlers zu erwarten. Bei der zentralen Differenz hat der Fehler dagegen die Größenordnung $\mathcal{O}(1/(\delta x)^2)$. Hier würde

sich bei einer Halbierung der Schrittweite der Fehler ungefähr um den Faktor 4 verringern. Will man die zweite Ableitung d^2u/dx^2 einer Funktion u an einem Gitterpunkt x_i approximieren, so bildet man die Differenz halber Schrittweite aus den ersten Ableitungen an den Punkten $x_{i+1/2} := x_i + \delta x/2$ und $x_{i-1/2} := x_i - \delta x/2$, die wiederum durch zentrale Differenzen halber Schrittweite approximiert werden.

$$\left[\frac{d^2u}{dx^2} \right]_i := \frac{1}{\delta x} \left(\left[\frac{du}{dx} \right]_{i+\frac{1}{2}}^z - \left[\frac{du}{dx} \right]_{i-\frac{1}{2}}^z \right) = \frac{u(x_{i+1}) - 2u(x_i) + u(x_{i-1}))}{\delta x^2}$$

Allgemein erhält man Differenzenquotienten für die Ableitungen niedriger Ordnung aus den entsprechenden Taylorreihenentwicklungen [Anderson, 1992; Lliboutry, 1987].

Differenzenquotienten												
<i>symmetrisch</i>												
	2. Ordnung					4. Ordnung						
$\frac{\partial u}{\partial x}$	$-\frac{1}{2}$	0	$\frac{1}{2}$			$\frac{1}{12}$	$-\frac{2}{3}$	0	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{12}$		
$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$		1	-2	1		$-\frac{1}{12}$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{5}{2}$	$\frac{3}{4}$	$-\frac{1}{12}$		
$\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}$	1	-4	6	-4	1	$-\frac{1}{6}$	2	$-\frac{13}{2}$	$\frac{28}{3}$	$-\frac{13}{2}$	2	$-\frac{1}{6}$
<i>asymmetrisch</i>												
	2. Ordnung					4. Ordnung						
$\frac{\partial u}{\partial x}$		$-\frac{3}{2}$	2	$-\frac{1}{2}$		$-\frac{25}{1}$	4	-3	$\frac{4}{3}$	$-\frac{1}{4}$		

Abbildung 3.2: Einige symmetrische und asymmetrische Differenzenquotienten 2. und 4. Ordnung für den eindimensionalen Fall (nach Lliboutry, 1987).

Der Abbruchfaktor bestimmt hierbei die Fehlerordnung des Differenzenquotienten. Außer für die Gitterpunkte in Randnähe werden immer symmetrische

Differenzen benutzt. Die Approximation ist daher von gerader, mindestens 2. Ordnung. Für die Gitterpunkte in Randnähe können rechts- oder linksseitige Differenzen benutzt werden, oder man setzt virtuelle Gitterpunkte ein, um mit symmetrischen Differenzen zu rechnen. Einige symmetrische und asymmetrische Differenzen verschiedener Ordnung sind in Tabelle 3.2 für den eindimensionalen Fall dargestellt.

Im Zweidimensionalen werden die Differenzenquotienten in analoger Weise hergeleitet. Bei einer partiellen Differentialgleichung 4. Ordnung

$$\Delta^2 u = f \quad \text{in } \Omega$$

mit

$$\Delta^2 = \frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial z^2} + \frac{\partial^4}{\partial z^4}$$

ist die einfachste Differenzenformel der 13-Punkte-Differenzenquotient.

$$\begin{bmatrix} & & 1 & & \\ & 2 & -8 & 2 & \\ 1 & -8 & 20 & -8 & 1 \\ & 2 & -8 & 2 & \\ & & 1 & & \end{bmatrix}$$

Dieser Differenzenquotient zeigt die Notwendigkeit der Verwendung von virtuellen Gitterpunkten zur symmetrischen Approximation in Randnähe bei höheren Ableitungen.

Grafisch dargestellt wird die Benutzung virtueller Gitterpunkte in Abb. 3.3 am Beispiel der Berechnung von inneren Gitterpunkten einer partiellen Differentialgleichung 4. Ordnung.

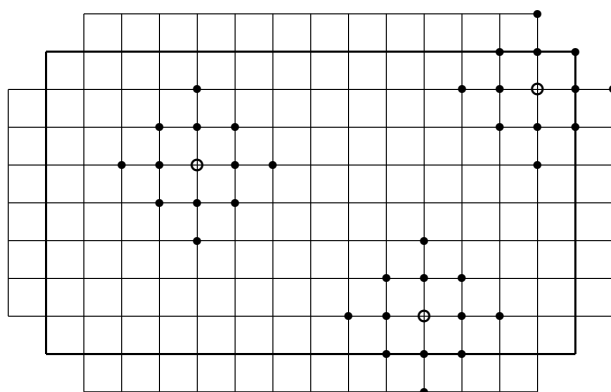


Abbildung 3.3: Virtuelle Gitterpunkte zur Berechnung des Wertes einer biharmonischen Funktion in einem inneren Punkt (*Kreisring*).

3.2 Stabilitätskriterien

3.2.1 ADI-Verfahren

Neben der Diskretisierung des Raumes ist bei vielen geophysikalischen Problemen auch eine Diskretisierung der Zeit notwendig, um das zeitabhängige Verhalten von Problemen realistisch zu modellieren. Als Beispiel für ein zeitabhängiges Problem wird nun eine parabolische Differentialgleichung betrachtet.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad \text{in } \Omega$$

Die zugehörigen Dirichlet-Randbedingungen können ebenfalls von der Zeit abhängen.

$$T(0, t) := T_0(t), \quad T(a, t) := T_a(t)$$

Zusätzlich besteht bei zeitabhängigen Problemen die Notwendigkeit der Angabe einer Anfangsbedingung.

$$T_0(x_i, 0) := T_0(x_i, t_0)$$

Diese Bedingung besagt, daß zu einem Zeitpunkt t_0 das Feld T im gesamten Gebiet Ω bekannt sein muß. Wenn mit T das Temperaturfeld und mit κ die Temperaturleitfähigkeit bezeichnet wird, beschreibt die Differentialgleichung die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung.

Eine mögliche Ersetzung der Differentialquotienten durch Differenzenquotienten in jedem Gitterpunkt stellt die folgende Gleichung dar.

$$\frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\delta t} = \kappa \frac{T_{i+1}^l - 2T_i^l + T_{i-1}^l}{\delta x^2}$$

Hierbei bezieht sich i auf die räumliche und l auf die zeitliche Diskretisierung. Der räumliche Differentialquotient wird durch einen zentralen Differenzenquotienten und der zeitliche durch einen rechtsseitigen

bzw. vorwärtsgerichteten Differenzenquotienten approximiert. Während die räumliche Fehlerordnung $\mathcal{O}(1/(\delta x)^2)$ ist, ist der zeitliche Fehler von der Ordnung $\mathcal{O}(1/\delta t)$.

Ein Verfahren bei dem die zeitliche Approximation von gleicher Güte ist wie die räumliche, ist mit dem ADI¹ (*alternate direct implicit*) - Verfahren gefunden. Im Zweidimensionalen hat diese Diskretisierung folgende Gestalt.

$$\frac{T_{i,j}^{l+\frac{1}{2}} - T_{i,j}^l}{\frac{\delta t}{2}} = \kappa \left(\frac{T_{i+1,j}^{l+\frac{1}{2}} - 2T_{i,j}^{l+\frac{1}{2}} + T_{i-1,j}^{l+\frac{1}{2}}}{\delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^l - 2T_{i,j}^l + T_{i,j-1}^l}{\delta z^2} \right)$$

$$\frac{T_{i,j}^{l+1} - T_{i,j}^{l+\frac{1}{2}}}{\frac{\delta t}{2}} = \kappa \left(\frac{T_{i+1,j}^{l+\frac{1}{2}} - 2T_{i,j}^{l+\frac{1}{2}} + T_{i-1,j}^{l+\frac{1}{2}}}{\delta x^2} + \frac{T_{i,j+1}^{l+1} - 2T_{i,j}^{l+1} + T_{i,j-1}^{l+1}}{\delta z^2} \right)$$

Bei diesen Verfahren wird jeder Zeitschritt in zwei Teilschritte unterteilt. In jedem Unterschritt wird eine der Dimensionen implizit und die andere explizit gelöst [Schmeling, 1990]. Ein weiterer Vorteil, neben der Approximationsgüte, besteht darin, daß zu jedem Teilschritt nur ein tridiagonales Gleichungssystem gelöst werden muß.

3.2.2 upwind-Verfahren

In vielen geophysikalischen Modellen treten Probleme im Zusammenhang mit bewegten Medien oder Flüssigkeiten auf. Als Beispiel für ein solches Problem wird nun eine hyperbolische Differentialgleichung betrachtet.

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -v \frac{\partial T}{\partial x} \quad \text{in } \Omega$$

¹Erstes effizientes Verfahren zur numerischen Lösung parabolischer und elliptischer Probleme, das Mitte der fünfziger Jahre vorgestellt wurde [Peaceman & Rachford, 1955].

Als Nebenbedingungen seien die Rand- und Anfangsbedingungen analog zu 3.2.1 gewählt.

Mit dieser Differentialgleichung kann zum Beispiel die Ausbreitung der Wärme durch Materialtransport im Erdmantel beschrieben werden. Der Term $v \partial T / \partial x$ beschreibt die Ausbreitung der Wärme, die durch die Strömung (mit der Geschwindigkeit v) hervorgerufen wird, die sogenannte Advektion. In jedem Gitterpunkt kann nun der Differentialquotient durch Differenzenquotienten ersetzt werden.

$$\frac{T_i^{l+1} - T_i^l}{\delta t} = -v_i \frac{T_{i+1}^l - T_{i-1}^l}{2\delta x}$$

Hierbei bezieht sich der Index i auf die räumliche und der Index l auf die zeitliche Diskretisierung. Bei Advektions-Problemen treten bei der Diskretisierung des Terms $v \partial T / \partial x$ mit zentralen Differenzenquotienten Stabilitätsprobleme auf. Es werden unphysikalische Oszillationen in der numerischen Lösung erzeugt. Dies liegt daran, daß die diskrete Gleichung bestimmte Eigenschaften der kontinuierlichen Gleichung nicht mehr korrekt widerspiegeln kann (Abb. 3.4).

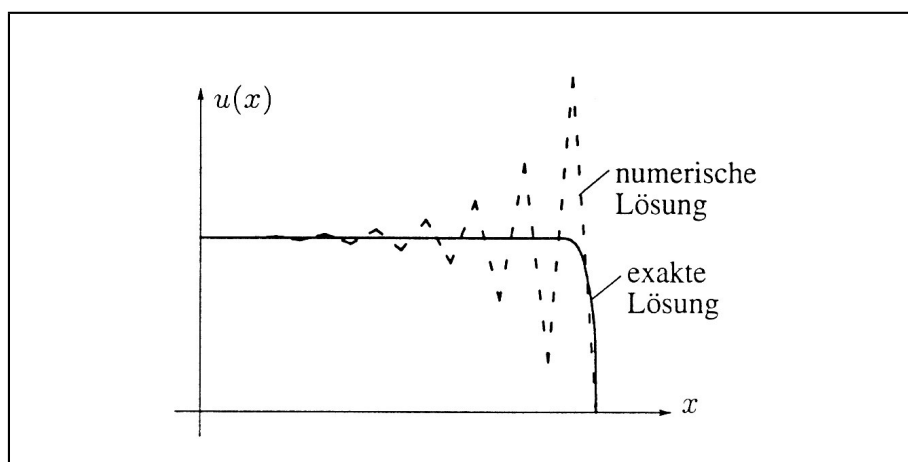


Abbildung 3.4: Oszillation bei Advektions-Problemen unter Verwendung zentraler Differenzenquotienten (nach Griebel et al., 1995)

Einen einfachen Ausweg bietet das sogenannte, in den meisten fluiddynamischen Problemen zur Anwendung kommende, upwind-Verfahren. Hierbei wird der Differenzenquotient des Advektionsterms einseitig genommen und zwar zur negativen Strömungsrichtung hin.

$$\left[\frac{\partial T}{\partial x} \right]_i^{up} := \frac{(1 + \epsilon)(T_i + T_{i-1}) + (1 - \epsilon)(T_{i+1} + T_i)}{2\delta x} \quad \text{mit} \quad \epsilon := \text{sign}(v)$$

Der Preis, für diese stabile Diskretisierung, ist allerdings eine geringere Approximationsgüte ($\mathcal{O}(1/\delta x)$ statt $\mathcal{O}(1/(\delta x)^2)$) [Hackbusch, 1986]. Dies führt beim upwind-Verfahren zu numerischer Diffusion [Schmeling, 1990], die die Konvergenz der Lösung negativ beeinflusst, wenn es zu einer Verletzung des Courant-Friedrich-Levi-Kriteriums (s.a. 3.2.3) kommt.

Als Kompromiß kann eine Mittelung der einseitigen und der zentralen Diskretisierung gewählt werden.

$$\theta \cdot \text{upwind-Differenz} + (1 - \theta) \cdot \text{zentrale Differenz}$$

Der reelle Parameter θ muß dabei aus dem Intervall $[0, 1]$ gewählt werden und zwar um so größer, je größer der advective Term v ist.

3.2.3 Zeitschranken

Um die Stabilität des numerischen Algorithmus zu gewährleisten, müssen Stabilitätsbedingungen an die Schrittweiten der räumlichen und der zeitlichen Diskretisierung gestellt werden. Am häufigsten findet man in der Literatur die bekannte Courant-Friedrichs-Levi-Bedingung (CFL), die bedeutet, daß kein Partikel eines Fluids in der Zeit δt mehr als eine Gitterweite δx bzw. δz zurücklegen darf. Diese Bedingung steht im unmittelbaren Zusammenhang zur numerischen Behandlung der hyperbolischen Differentialgleichung (s.a. Abschnitt 3.2.2). Genauere Stabilitätsuntersuchungen hierzu

können z.B. bei Peyretl & Taylor (1983) oder Roache (1976) gefunden werden. Basierend auf diesen Untersuchungen wird in der Numerik oft eine adaptive Schrittweitensteuerung [Tome & McKee, 1994] verwendet. Dabei wird die zeitliche Schrittweite für den nächsten Zeitschritt so gewählt, daß die CFL-Bedingung erfüllt ist.

$$\delta t := \omega \min \left(\frac{\delta x}{|u_{max}|}, \frac{\delta z}{|w_{max}|} \right)$$

Hierbei sind $|u_{max}|$ und $|w_{max}|$ die maximalen Absolutwerte der vorkommenden Geschwindigkeiten. Der Faktor $\omega \in (0, 1]$ ist hierbei als Sicherungsfaktor eingebaut. Natürlich kann man auch von Anfang an mit einer festvorgegebenen Schrittweite die Berechnung durchführen. In diesem Fall muß in jedem Zeitschritt die Stabilitätsbedingung erfüllt sein. Bei einer hohen Variation des Geschwindigkeitsfeldes führt dies zu unnötig kleinen Zeitschritten bei langsamen Geschwindigkeiten, was eine Verlängerung der Rechenzeit bewirkt. Außerdem kann gezeigt werden [Schmeling, 1990], daß eine starke Abweichung der Zeitschrittlänge von der CFL-Bedingung ebenfalls zu numerischen Schwierigkeiten bei der Approximation der exakten Lösung führt.

Analog zur Schranke für den advektiven Partikeltransport gibt es auch für Diffusionsprobleme eine Beschränkung des zulässigen Zeitschritts. Dieser besagt, physikalisch gesehen, daß der maximal zulässige Zeitschritt kleiner als die charakteristische Diffusionszeit über eine Gitterweite sein muß. Daraus folgt für diffusive Prozesse folgende Zeitschranke.

$$\delta t \leq \frac{1}{2 \cdot \kappa \left(\frac{1}{\delta x^2} + \frac{1}{\delta z^2} \right)}$$

Zusammen mit dem CFL-Kriterium ergibt sich damit eine obere Schranke für die Berechnung von zeitabhängigen Advektions-Diffusions-Problemen.

3.3 Freie Randwertprobleme

Nachdem bisher nur Differentialgleichungen in einem fest vorgegebenen Gebiet Ω berücksichtigt wurden, sollen jetzt sogenannte freie Randwertprobleme behandelt werden. Bei diesen Problemen kann sich die Form des Gebietes, in dem die Berechnung erfolgt, zeitabhängig verändern. Es sind also nicht nur physikalische Größen wie die Geschwindigkeitskomponenten und die Temperaturverteilung, sondern auch das Gebiet Ω_t gesucht, welches eine Substanz zum Zeitpunkt t einnehmen kann.

Neben den vorangegangenen Differentialgleichungen, den Anfangsbedingungen und den Randbedingungen an den festen Rändern werden hier zusätzlich die Anfangskonfiguration des Gebietes Ω_t und Bedingungen an den freien Rändern zur Problembeschreibung benötigt. In dem Modell einer Zweiphasenströmung stellt die Grenze zwischen dem Gebiet mit Schmelzanteil und dem Gebiet ohne Schmelzanteil einen freien Rand dar. Dieser Rand ist zeitabhängig und kann sich von Zeitschritt zu Zeitschritt räumlich ändern.

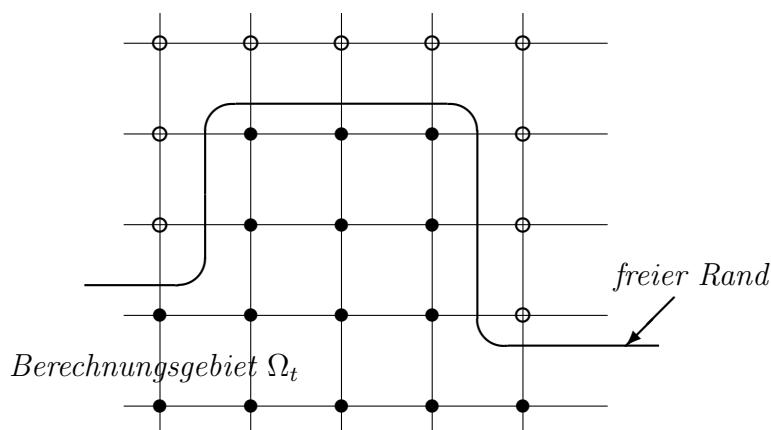


Abbildung 3.5: Das Berechnungsgebiet Ω_t wird durch einen zeitlich veränderlichen freien Rand begrenzt .

In jedem Zeitschritt muß bei freien Randwertproblemen also zunächst das

aktuelle Gebiet Ω_t bestimmt werden. Dies kann zum Beispiel durch die Verwendung von Partikeln geschehen, die von Zeitschritt zu Zeitschritt aufgrund der aktuellen Geschwindigkeiten fortbewegt werden und die die aktuelle Lage des Gebietes beschreiben. Mit Hilfe dieser Partikel kann ein rechteckiges Grundgebiet in zwei (oder mehrere) Teilgebiete zerlegt werden, die durch die Präsenz oder das Fehlen von Partikeln charakterisiert sind. Die Grenze zwischen den Gebieten bildet dann den freien Rand (Abb. 3.5).

Neben der Methode, die Gebietsform durch Partikel zu bestimmen, gibt es noch einige weitere Möglichkeiten, die insbesondere im Speicher- und Rechenaufwand wesentlich günstiger abschneiden. Zum Beispiel kann der freie Rand durch den Graphen einer Höhenfunktion $h = h(x)$ oder $h = h(z)$ beschrieben werden [Hirt et al., 1975] oder die Partikel werden nur zur Berechnung des freien Randes benutzt [Chen et al., 1991].

Des Weiteren besteht die Möglichkeit ein gegebenes Feld F als Kriterium zur Bestimmung des freien Randes zunutzen. Im diskretisierten Fall wird hierbei jeder Gitterpunkt F_{ij} auf einen gegebenen Wert f_{ex} getestet. Gleichzeitig erfolgt dieser Test für alle umliegenden Gitterpunkte. Dadurch wird festgestellt, ob es sich um einen Randpunkt handelt und in welchen Richtungen sich das gesuchte Gebiet befindet. Die Kennzeichnung der verschiedenen Gitterpunkte erfolgt mit einem Integer-Feld durch das Setzen verschiedener Bits (Abb. 3.6).

<i>1.Bit</i>	<i>2.Bit</i>	<i>3.Bit</i>	<i>4.Bit</i>	<i>5.Bit</i>
Mitte	Ost	West	Süd	Nord

Abbildung 3.6: Die Setzung der Bits erfolgt für Gitterpunkte, bei denen eine vorgegebene Feldgröße einen Grenzwert übersteigt. Für Feldwerte unterhalb dieser Grenze werden die Bits nicht gesetzt.

Für Gitterpunkte mit $F_{ij} > f_{ex}$ wird das erste Bit auf 1 gesetzt und für Gitterpunkte mit $F_{ij} \leq f_{ex}$ auf 0. Die Kennzeichnung der umliegenden Gitterpunkte erfolgt durch das entsprechende Setzen des 2. bis 5. Bits, entsprechend den Himmelsrichtungen Nord, Ost, Süd und West, auf 1, falls für den jeweilige Gitterpunkt $F_{lk} > f_{ex}$ gilt und auf 0 falls nicht. Insgesamt sind so 15 verschiedene Typen von Randpunkten zu unterscheiden.

Mit Hilfe dieser Markierung werden die einzelnen Gitterpunkte in verschiedene Typen aufgeteilt.

leere Punkte: Punkte mit $F_{ij} \leq f_{ex}$

innere Punkte: Punkte mit $F_{ij} > f_{ex}$, die nicht an leere Punkte angrenzen

Randpunkte: leere Punkte, die aber auch zu inneren Punkten benachbart sind

Das Gebiet Ω_t wird durch die inneren Punkte approximiert, und der freie Rand wird durch die Randpunkte näherungsweise beschrieben.

Mit diesen Informationen lassen sich nun die notwendigen Randwerte, entsprechend den gestellten Randbedingungen, aus den inneren Gitterpunkten berechnen.

Bei der Bestimmung des Randes kann es vorkommen, daß Randpunkte entweder vollständig innerhalb innerer Punkte liegen oder an gegenüberliegenden Seiten zu inneren Punkten benachbart sind. In diesem Fall werden die Randpunkte zu inneren Punkten gewandelt. Sollte diese Änderung des Randes von der Modellierung her nicht erwünscht sein, so kann es durch eine Gitterverfeinerung verhindert werden. Analog werden so gelegene innere Punkte bei der Berechnung nicht behandelt. Auch dies kann durch eine Verfeinerung des Gitters verhindert werden. In Abbildungen (3.7) sind einige Beispiele für zulässige und unzulässige innere Punkte dargestellt. Zur weiteren Veranschaulichung dieser Methode sei auf die Problemformulierung in Abschnitt 4.1 verwiesen.

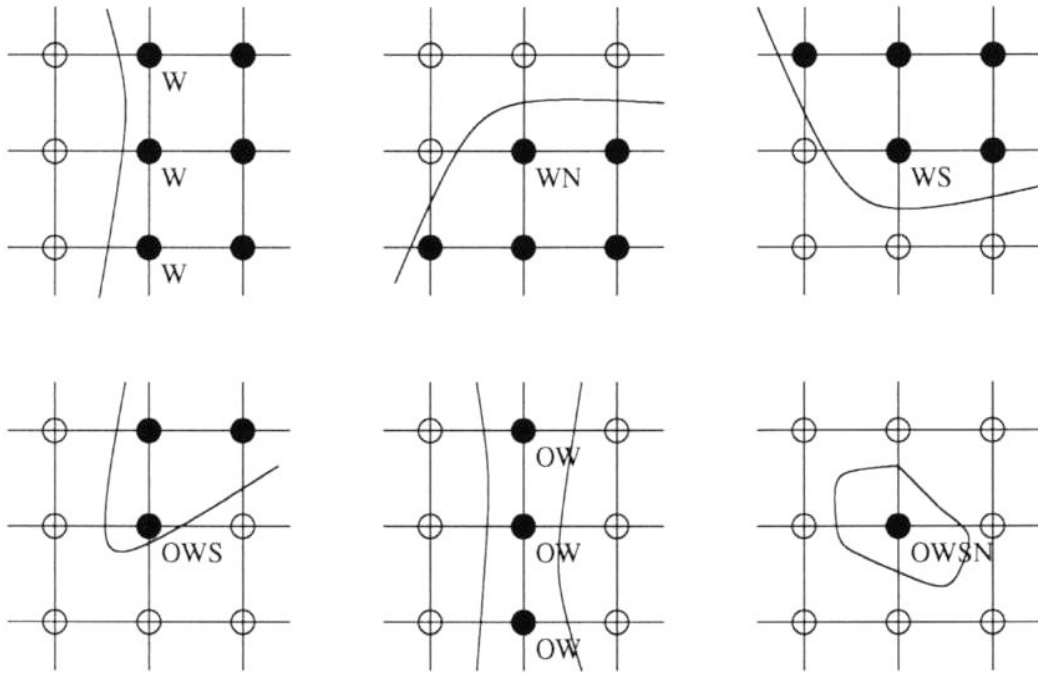


Abbildung 3.7: In den Grafiken der oberen Reihe sind zulässige innere Punkte dargestellt. In der unteren Reihe werden unzulässige innere Punkte gezeigt, d.h. hier müssen diese Gitterpunkte in leere Punkte gewandelt werden. Durch eine Gitterverfeinerung kann dies jedoch umgangen werden.

Kapitel 4

Das Modell

4.1 Problemformulierung

4.1.1 Motivation

Im Erdmantel und in der Erdkruste gibt es Reservoirs, die sich durch ihre chemischen Zusammensetzungen voneinander unterscheiden. Sie werden nach ihren chemischen und isotopischen Mengenverhältnissen und ihrer Entstehung klassifiziert. Die Entstehung kann durch eine Kombination mehrerer Prozesse, wie partielles Schmelzen, Segregation, Aufstieg der Schmelze, Differentiation der Schmelze und lateraler Transport der Schmelze, beeinflusst werden. Die Differentiation erzeugt chemische und isotopische Unterschiede, während die thermische Konvektion in Richtung einer Homogenisierung in Bereichen des Erdmantels wirkt. In früheren Modellen [Walzer & Hendel, 1999, 1997a, 1997b] wurden die Auswirkungen dieses Zusammenspiels untersucht. Die thermische und chemische Entwicklung des Erdmantels und der Erdkruste wird hierbei simultan modelliert. Es erfolgt die gleichzeitige Modellierung eines Fraktionierungsmechanismus und einer thermischen 2D-FD-Boussinesq-Konvektion.

Bei diesen Modellen konnten erstaunlich gute Übereinstimmungen zwischen den berechneten Modellergebnissen und geophysikalischen, geologischen und geochemischen Beobachtungen erzielt werden. Die beschriebenen Mechanismen zeigten akzeptable Werte für die Temperatur, die Viskosität, den Wärmefluß, die Mantelkriechgeschwindigkeit und die Geschwindigkeit der Kontinente. Im aktuellsten Modell kann zusätzlich die Entstehung einer hauptsächlich verarmten oberen Hälfte des Mantels, einschließlich großer Bereiche des oberen Teils des unteren Mantels, gezeigt werden. Es verbleibt eine überwiegend angereicherte untere Hälfte des Mantels. Diese, seit dem Phanerozoikum existenten zwei Hälften werden durch eine nicht sehr scharfe Grenze getrennt.

In einer erweiterten Theorie und im hier vorzustellenden Modell ist die Einführung zweier Geschwindigkeitsfelder möglich, eines für die Matrix und eines für die Schmelze. Gebiete mit partieller Schmelze entstehen an Stellen, wo die aktuelle Temperatur die Schmelztemperatur für bestimmte Minerale, in Abhängigkeit vom hydrostatischen Druck, übersteigt. Es wird nun ein einfacher Mechanismus zur chemischen Fraktionierung benutzt. Wenn die vertikale Geschwindigkeitskomponente, in einem hinreichend großen Gebiet, einen kritischen Wert w_c erreicht, wird angenommen, daß die Schmelze nach oben steigt und so der Mantelregion entzogen wird. Die Größe des aufsteigenden Anteils der Schmelze wird durch einen kritischen Porositätswert f_c bestimmt. Die Schmelze ist wegen der hohen Inkompatibilität der Radionuklide an diesen angereichert.

Dies führt zu den Fragen, ob es zu einer Verarmung an diesen Elementen im Erdmantel kommt, ob sich dies auf bestimmte Bereiche, räumlich und zeitlich, beschränkt und welche Auswirkungen dieser Mechanismus für beobachtbare geophysikalische, geologische und geochemische Größen hat.

Im Unterschied zu anderen Modellen ist der neue Ansatz zur Beantwortung dieser Fragen über das Modell einer Zweiphasenströmung wesentlich effektiver und wirklichkeitsnäher. Alle physikalischen Größen werden über

die Lösung von Differentialgleichungssystemen, die aus den jeweiligen Erhaltungsgleichungen hergeleitet wurden, ermittelt.

Die Entstehung einer frühen Lithosphäre und die Bildung von kontinentaler Kruste wird in diesem Modell nicht berücksichtigt.

4.1.2 Schmelze und Porosität

Gebiete mit partieller Schmelze entstehen an Stellen, wo die aktuelle Temperatur die Schmelztemperatur für bestimmte Minerale, in Abhängigkeit vom hydrostatischen Druck, übersteigt.

Bei der Modellierung wird der Massenanteil der Schmelze aus dem gegebenen Temperatur- und Druckfeld nach den Gleichungen (4.1) und (4.2) [McKenzie, 1984] berechnet, wenn die Temperatur hoch genug und der Druck niedrig genug ist.

für $P \geq 3.5 \cdot 10^9$ gilt:

$$X = \frac{1}{124} (T - 115 - 120 \cdot 10^{-9} P) \quad (4.1)$$

für $P \leq 3.5 \cdot 10^9$ gilt:

$$X = \frac{T - 1115 - 120 \cdot 10^{-9} P}{600 - 136 \cdot 10^{-9} P} \quad (4.2)$$

Hierbei ist T die Temperatur in Kelvin, P der Druck in GPa und X der Gewichtsanteil der Schmelze. Mit dem Gewichtsanteil erfolgt dann die Berechnung der Porosität f in Abhängigkeit von den Dichten der Matrix ϱ_s und der Schmelze ϱ_m durch die Gleichung (4.3).

$$f = \frac{X \varrho_s}{\varrho_m + X (\varrho_s - \varrho_m)} \quad (4.3)$$

4.1.3 Viskosität

Im Modell wird die Scherviskosität der Matrix als temperatur- und druckabhängig angenommen. Über diese Abhängigkeit wird sie als Funktion des Raumes und der Zeit betrachtet.

$$\eta = k_1 \cdot \exp(k_2 T_m / T) \quad (4.4)$$

Die Schmelztemperatur T_m wurde hierbei zusammengesetzt [Ranalli, 1991] aus einer Soliduskurve für reinen Peridotit für den oberen Mantel [Ito & Takahashi, 1987], einer Schmelzpunktkurve für Perovskit [Heinz & Jeanloz, 1987] für den unteren Mantel bis zu einer Tiefe von 1500 km und einer Schmelzpunktkurve für Perovskit [Knittle & Jeanloz, 1989] für den Mantel unterhalb einer Tiefe von 1500 km (Abb 4.1). k_1 und k_2 sind konstante Größen und haben in Anlehnung an andere geodynamische Modelle [Walzer & Hendel, 1997b] die Werte $5 \cdot 10^7$ bzw. 29.

4.1.4 Strömungen

Das Umschreiben der Erhaltungsgleichungen der Masse und des Impulses in die Form einer Stromfunktion [Walzer, 1995] ergibt eine biharmonische Gleichung 4. Ordnung (4.5).

$$\begin{aligned} 4 \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \left(\eta \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial z} \right) + \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) \left[\eta \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) \right] = \\ (\varrho_s \alpha_s g) \frac{\partial T}{\partial x} + [(\varrho_s - \varrho_m) g] \frac{\partial f}{\partial x} \end{aligned} \quad (4.5)$$

Wobei x die horizontale und z die vertikale kartesische Komponente, η die dynamische Viskosität der Matrix, ϱ_s und ϱ_m die Dichten der Matrix und der Schmelze, α_s der thermische Ausdehnungskoeffizient der Matrix und g

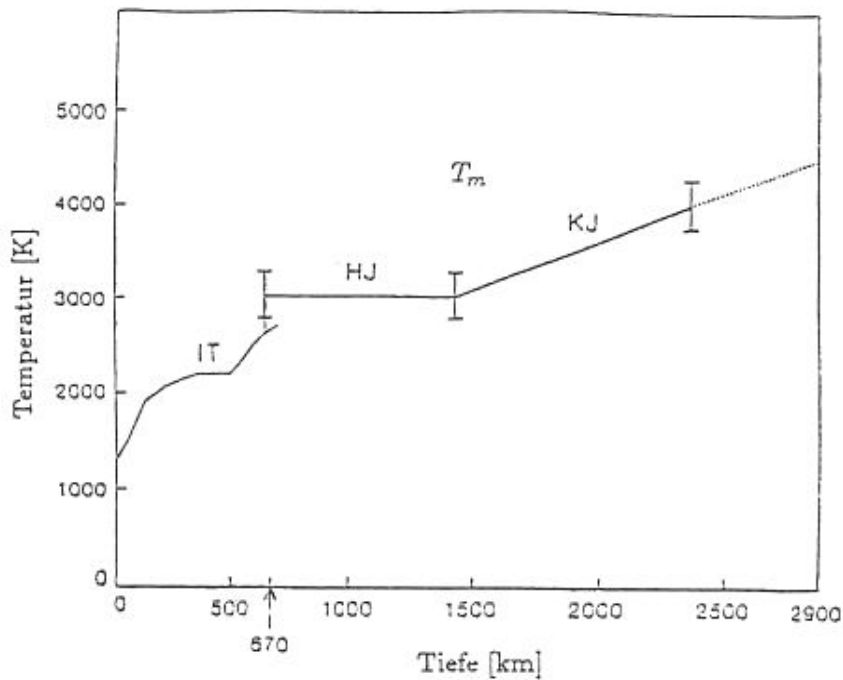


Abbildung 4.1: Die Schmelztemperatur T_m im Erdmantel (nach Ranalli, 1991). KJ, HJ: Schmelzpunktkurve für Perovskit [Knittle & Jeanloz, 1989; Heinz & Jeanloz, 1987]; IT: Soliduskurve für reinen Peridotit [Ito & Takahashi, 1987].

die Schwerebeschleunigung ist. ψ ist die Stromfunktion, welche durch die horizontale und vertikale Geschwindigkeitskomponente der Matrix

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad \text{und} \quad w = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad (4.6)$$

gegeben ist.

Zur Lösung des Geschwindigkeitsfeldes wird die Differenzenform der biharmonischen Gleichung [Hackbusch, 1986] für die Stromfunktion ψ durch ein Eliminationsverfahren nach Cholesky berechnet. Dieses direkte Lösungsverfahren bietet sich besonders an, da die Koeffizientenmatrix positiv definit ist.

Mittels des verallgemeinerten Darcy-Gesetzes (2.3) erfolgt die Berechnung der Geschwindigkeitskomponenten für die Schmelze aus den ermittelten Ge-

schwindigkeitskomponenten der Matrix in Abhängigkeit von der Porosität und anderen physikalischen Größen. Hierbei werden im Modell folgende Vereinfachungen vorgenommen. Es wird nur vertikale Entmischung angenommen und bei der Druckzusammensetzung wird bei der Berechnung nur der hydrostatische als relevant betrachtet. Ein Problem der numerischen Berechnung entsteht aufgrund des enormen Viskositätskontrastes. Während die Viskosität der Matrix bei etwa $10^{18} Pa s$ angenommen wird, liegt die der Schmelze um Größenordnungen tiefer bei etwa $1...10 Pa s$. Ein solcher Kontrast läßt sich mit der heutigen Rechentechnik numerisch nicht fassen, wie auch durch Arbeiten an Modellen mit ähnlicher Problematik gezeigt werden konnte [Christensen et al., 1999; Bittner, 1995]. Aus diesem Grund wird ein künstlicher Viskositätswert für die Schmelze im Modell benutzt. Dieser variiert um 2 bis 4 Größenordnungen, je nach Modellierung und je nach Lauf, von der Viskosität der Matrix. Dies ist eine gute Variante um trotz numerischer Unzulänglichkeiten geophysikalisch sinnvoll modellieren zu können, wie u.a. durch das Referenzmodell (Abschnitt 5.2) gezeigt werden kann.

4.1.5 Konzentrationen

Nach der Berechnung der Geschwindigkeitskomponenten wird die Konzentrationsverteilung der Radionuklide berechnet. Der Index ν bezeichnet die einzelnen, für die radiogene Aufheizung der Erde hauptverantwortlichen, Nuklide. Der Index 1 steht für das Isotop ^{40}K , 2 für ^{232}Th , 3 für ^{235}U und 4 für ^{238}U . Zu Beginn der Evolution der Erde wird eine homogene Anfangsverteilung der Elemente im oberen und unteren Erdmantel gefordert. Durch chemische Segregation und konvektive Strömungen ändert sich diese Verteilung der Wärmequellen kontinuierlich. Besonders interessant sind während der zeitlichen Entwicklung des Erdmantels Bereiche mit vorhandener partieller Schmelze. Diese Gebiete lassen sich aus dem in (4.3) berechneten Porositätsfeld ermitteln. Für diese Regionen wird die Konzentrationsgleichung (2.8) gelöst und man erhält $c_{m\nu}$ als Gewichtskonzentration des ν -ten Ele-

ments in der Schmelze.

Es wird nun ein einfacher Mechanismus zur chemischen Fraktionierung benutzt. Wenn die vertikale Geschwindigkeitskomponente, in einem hinreichend großen Gebiet, einen kritischen Wert w_c erreicht, wird angenommen, daß die Schmelze der betreffenden Mantelregion entzogen wird. Die Schmelze ist wegen der hohen Inkompatibilität der Radionuklide an diesen angereichert. Die Größe des aufsteigenden Anteils der Schmelze wird durch einen kritischen Porositätswert f_c bestimmt. Dabei wird $c_{m\nu}$ durch $f_c \cdot c_{m\nu}$ ersetzt, d.h. die Gewichtskonzentration der Schmelze wird um den Faktor f_c vermindert und so ein Aufstieg der Schmelze vorgegeben.

Unter Berücksichtigung der Beziehung (2.7) wird im Anschluß, in Abhängigkeit von der Dichte der Schmelze, der Dichte der Matrix und der Porosität, die aktuelle totale Gewichtskonzentration $c_{t\nu}$ (2.10) des ν -ten Elements berechnet. Die totale Gewichtskonzentration wird außerdem als von der Matrixgeschwindigkeit abhängig betrachtet. Die zeitliche und örtliche Variation der totalen Gewichtskonzentration wird vereinfacht durch die Gleichung (4.7) berechnet. Die Diffusivität der Matrix wird dabei vernachlässigt, da sie von zu geringer Bedeutung ist.

$$0 = - [(1 - f) \varrho_s K_{c\nu}] \frac{\partial c_{t\nu}}{\partial t} - (1 - f) \varrho_s K_{c\nu} \mathbf{V} \cdot \nabla c_{t\nu} \quad (4.7)$$

Diese neue totale Gewichtskonzentration der Radionuklide geht über die Berechnung der Wärmequellendichte nach der Gleichung (2.11) in die Berechnung eines neuen Temperaturfeldes (folgender Abschnitt) ein.

Für die Berechnung der Größen der Schmelze, wie die Gewichtskonzentrationen $c_{t\nu}$ und die Geschwindigkeitskomponenten, wird die Methode der freien Randprobleme (Abschnitt 3.3) numerisch adaptiert und genutzt.

Hierbei erfolgt die Berechnung dieser Größen nur in den Regionen des Auftretens der partiellen Schmelze (Abb. 4.2) und nicht im gesamten Gebiet,

wo partielle Schmelze evt. auftreten könnte. Dies bewirkt eine günstigere Rechenlast auch für kleine Zeitintervalle, die durch hohe Geschwindigkeitspitzen bedingt sein können.

Im Detail wird dabei wie folgt vorgegangen. Gebiete, in denen partielle Schmelze entsteht, sind in Abhängigkeit vom Porositätsfeld vorgegeben. Diese Bereiche sind räumlich und zeitlich veränderlich. Um sie numerisch fassen zu können, ist es notwendig, daß die Ränder und die Gebiete bestimmt werden. Hierzu wird jeder Gitterpunkt auf einen gegebene Porositätswert getestet. Wird dieser überschritten gehört der Gitterpunkt zum Gebiet. Um Aussagen über Ränder treffen zu können, ist es aber notwendig auch die umgebenen Gitterpunkte zu testen, um festzustellen ob diese zum Gebiet gehören oder nicht. Die Kennzeichnung der einzelnen Gitterpunkte geschieht über ein vorgestelltes Bit-Feld (Abb. 3.6).

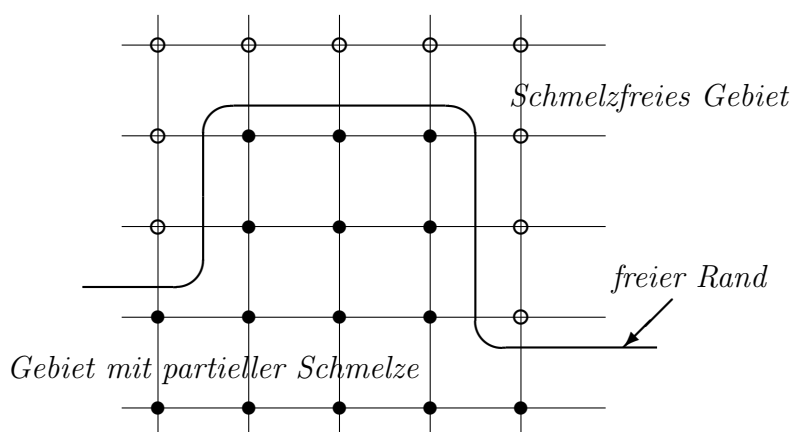


Abbildung 4.2: Darstellung des freien Randes zwischen Gebieten ohne und mit Schmelzanteil.

In diesen Bit-Feld werden nun verbotene Randpunkte, d.h. Gitterpunkte die an gegenüberliegenden Seiten an zwei Gebiete grenzen, in Gebietspunkte umgewandelt. Sollte dies von der Modellierung her nicht erwünscht sein, so kann

man durch eine Gitterverfeinerung die Gebietsränder wieder herstellen. Außerdem werden einzelne Gebietspunkte von der weiteren Berechnung ausgeschlossen. Dies stimmt mit der Modellforderung, daß Schmelzaufstieg erst in einem hinreichend großen Gebiet stattfindet, überein. Die wichtigsten Größen bei der Berechnung des Schmelzverhaltens sind die Geschwindigkeitskomponenten und die Gewichtskonzentrationen der Schmelze, weitere in Gleichung (2.8) dargestellte Größen ergeben sich entweder daraus, sind bereits berechnet oder sind gegebene Parameter. Die Geschwindigkeitskomponenten sind über das verallgemeinerte Darcy-Gesetz bestimmt, was ein großer Vorteil des Modells ist. Zu berücksichtigen ist jedoch, daß an ehemaligen verbotenen Rändern die Werte, auch anderer benötigter Größen, z.B. durch Mittelung neu berechnet werden müssen. Danach werden die Randwerte des Gebietes entsprechend den geforderten Randbedingungen bestimmt. Im Falle der Geschwindigkeitskomponenten werden sie so gewählt, daß keine Strömung in die Gebiete hinein oder hinaus geht, da die Porosität nur im Inneren den Wert hat, der eine Schmelzgeschwindigkeit erlaubt.

Als nächstes benötigt man Werte für die Gewichtskonzentration der einzelnen Elemente in der Schmelze. In Bereichen, wo schon im vorherigen Rechenschritt Schmelze auftrat, wird der Wert übernommen. Für neu (oder wieder) geschmolzene Bereiche wird eine Anfangsschmelze nach $c_{m\nu} = c_{t\nu}/K_{c\nu}$ in Abhängigkeit von der totalen Schmelze gewählt. Die Randbedingung dieser physikalischen Größe wird als impermeabel angenommen.

Ein weiteres Problem stellt die unterschiedliche Zeitdiskretisierung für das Verhalten der Schmelze und das Verhalten der Matrix dar. In Abhängigkeit von den entsprechenden Geschwindigkeiten erhält man unterschiedliche Zeitschrittlängen wegen der notwendigen Einhaltung des CFL-Kriteriums. Ein Zeitschritt in der Matrixberechnung deckt i.a. mehrere kleinere Zeitschritte in der Schmelzberechnung ab. Aus diesem Grund wird die Berechnung der Größen der Schmelze in einer Schleife sooft durchlaufen, bis der neue Zeitschritt der Matrixberechnung erreicht ist.

Eine bestimmte Anzahl von Läufen basieren auf der Annahme einer homogenen Anfangsverteilung der Gehalte der Radionuklide im gesamten Mantel. In anderen Läufen erfolgt in Anlehnung an andere Modelle [Walzer & Henedel, 1997b] die Annahme, daß für Tiefen kleiner als 660 km die c_{tv} aller vier Radionuklide um einen Faktor k_8 erhöht sind. Obwohl man so akzeptable thermische Werte erhält, führt dies zu einem verarmten oberen Mantel im Laufe der Evolution. Für den unteren Mantel wird $k_8 = 1$ gesetzt, während im oberen Mantel verschiedene Werte $k_8 = 5.491 \dots 5.552$ getestet wurden. Im Referenzmodell wurde ein Wert von 5.512 für k_8 angenommen. Der Einfluß leichter Variationen dieses Parameters auf das Modell wird im Abschnitt 5.3 diskutiert.

Die Berechnung der Konzentrationen erfolgt mit einem modifizierten *upwind*-Verfahren. Wenn die Geschwindigkeiten relativ groß sind erfolgt die Berechnung nach der in Abschnitt 3.2.2 dargestellten *upwind*-Differenz. Bei kleineren Geschwindigkeiten erfolgt die Berechnung durch eine Mittlung der *upwind*- und der zentralen Differenz. Zur weiteren numerischen Stabilität wird das ADI-Verfahren eingesetzt. Im Unterschied zu anderen Modellen erfolgt die Berechnung der beiden Teilschritte jedoch direkt hintereinander und ohne zwischenzeitliche Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes.

4.1.6 Temperatur

Die in Gleichung (2.6) dargestellte Form der Berechnung des Temperaturfeldes wird in diesem Modell stark vereinfacht. Da einerseits die Rechenzeit in realistischen Bereichen gehalten werden muß und andererseits der Schwerpunkt des Modells bei der Simulation einer Zweiphasenströmung liegt, werden bei der Temperaturberechnung nur die Terme aus Gleichung (2.6) berücksichtigt, die einen bedeutenden Einfluß auf das Modell haben. Gleichung (2.6) wird hierbei vereinfacht zu (4.8).

$$0 = -[(1-f)\varrho_s c_{ps}] \frac{\partial T}{\partial t} - (1-f)\varrho_s c_{ps} \mathbf{V} \cdot \nabla T + k \nabla^2 T + Q \quad (4.8)$$

Die Änderung in der Verteilung der Gewichtskonzentrationen der Radionuklide geht so über die Wärmeleistungsdichte Q in die Berechnung des Temperaturfeldes ein. Die Berechnung erfolgt, wie bei der Konzentrationsberechnung, über ein modifiziertes upwind-Verfahren und über die direkte Hintereinanderausführung der beiden ADI-Teilschritte.

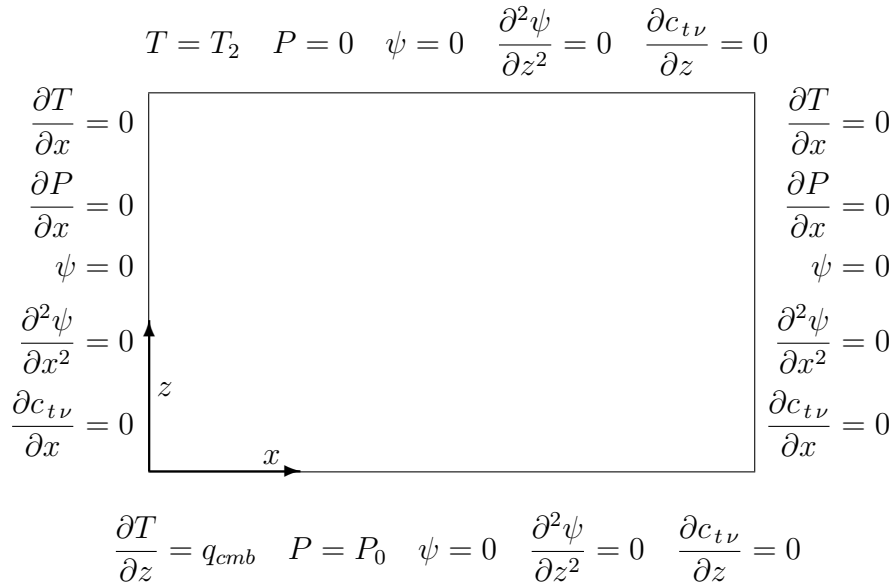


Abbildung 4.3: Darstellung der Randbedingungen für die Matrixberechnung mit den Werten $T_2 = 293 \text{ K}$, $P_0 = \varrho_s \cdot g \cdot h = 9.355797 \cdot 10^{10} \text{ Pa}$ und $q_{cmb} = 20 \text{ mW/m}^2$.

4.1.7 Anfangs- und Randbedingungen

In dem Modell wird eine moderate Anfangsverteilung der Temperatur verwendet. Diese wird nach $T_{anf} = 0.71 \cdot T_m$ über die Schmelztemperatur T_m (Abb. 4.1) ermittelt. Da die Oberflächentemperatur der Erde seit mindestens $3.8 \cdot 10^9$ Jahren in dem relativ kleinen Intervall zwischen Fest- und Siedepunkt des Wassers geblieben ist, obwohl die Leuchtkraft der Sonne seit $4.55 \cdot 10^9$ Jahren um etwa 26% zugenommen hat, ist die Annahme einer konstanten Temperatur an der Erdoberfläche gerechtfertigt [Walzer & Hendel, 1997b]. An der Kern-Mantel-Grenze wird im Modell keine feste Temperatur angenommen. Die Abnahme der Heizung im Mantel wird durch die Konvektion verursacht. Die Grundlage der Wärmeproduktion ist der radioaktive Zerfall. Diese gegensätzlichen Prozesse können die Konstanz der Temperatur an der Kern-Mantel-Grenze nicht gewährleisten. An dieser Grenze wird jedoch ein konstanter Wärmestrom von $q_{ob} = 20 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2}$ angenommen, was u.a. aus der Theorie des Geodynamos geschlossen werden kann [Stacey, 1992; Walzer & Hendel, 1999]. Die Randwerte der Matrixströmung sind wie üblich als tangentialspannungsfrei angesetzt. Dies ist im Fall des oberen und unteren Randes auch geophysikalisch, wegen des hohen Viskositätskontrastes zwischen Kruste und Ozean (*oben*) und zwischen unterem Mantel und äußeren Erdkern (*unten*), gerechtfertigt. Die Randbedingungen für die Größen der Schmelzbereiche werden wie in Abschnitt 4.1.5 erläutert gewählt.

Um die Strömung zu aktivieren wird eine in anderen geodynamischen Modellen [Walzer & Hendel, 1997b] bewährte Anfangsstörung (4.9) mit $A_s = 0.01$ gewählt.

$$T_s(x, z) = A_s \cdot \sin\left(\frac{\pi \cdot x}{x_{max}}\right) \cdot \cos\left(\frac{\pi \cdot z}{2 \cdot z_{max}}\right) \cdot T_m(z) \quad (4.9)$$

Hierbei ist $T_m(z)$ die diskretisierte Schmelzpunktkurve und x_{max} bzw. z_{max} die Ausdehnung des Modellgebietes in horizontaler bzw. vertikaler Richtung.

Es ist bekannt, daß in einer Tiefe von 660 *km* eine starke Änderung der Seismizität stattfindet. Die seismische Geschwindigkeit steigt um über 6% und eine negative Clapeyron-Neigung $(-3.0 \pm 1.0) \text{ MPa} \cdot \text{K}^{-1}$ ist wahrscheinlich [Akaogi & Ito, 1993]. Durch den endothermen Phasenübergang von Spinel nach Perovskit und Magnesiowüstit wird auch eine beachtliche Änderung der Viskosität erwartet. Beides führt zu einer großen Verminderung des Durchflusses an dieser Diskontinuität. Dies begünstigt eine zweischichtige Konvektion im Erdmantel. Aus diesem Grund wird in einer Tiefe von 660 *km* die horizontale Geschwindigkeitskomponente im Modell heuristisch auf Null gesetzt. Dies erzwingt eine zweischichtige Mantelkonvektion. Zur detaillierteren Motivation dieser Modellannahme sei auf Arbeiten mit dieser Annahme [Walzer & Hendel, 1997a, 1997b] und auf Arbeiten mit einer eleganteren und wirklichkeitsnäheren Lösung [Walzer & Hendel, 1999] verwiesen. In der letzteren Arbeit wird gezeigt, daß sich unter Berücksichtigung der Clapeyron-Neigung und weiterer physikalischer Parameter eine nicht explizit vorgegebene zweischichtige Konvektion im Erdmantel einstellt.

Auf die Problematik des Übergangs zu dimensionslosen Größen soll im Rahmen dieser Arbeit nicht explizit eingegangen werden. Die dimensionsbehafteten Größen werden, wie schon oft gezeigt [Schmeling, 1990; Walzer & Hendel, 1999; Spiegelman, 1996], mit Skalierungswerten in dimensionslose Größen umgewandelt.

4.2 Implementierung

Das Programm wurde auf der Basis des Finiten Differenzenverfahrens in Fortran90 geschrieben. Die Programmiersprache Fortran90 wurde gewählt, da sie einerseits viele Elemente moderner Sprachen (Objektorientiertheit, Zeigertechnik, dynamische Speicherverwaltung, etc.) enthält und andererseits einen leichten Übergang zu HPF (High Performance Fortran) bietet, welches speziell für Mehrprozessorrechner entwickelt wurde.

Der Aufbau des Programmes ist stark modular geprägt und ermöglicht so einen relativ leichten Austausch von Unterprogrammen bzw. das Hinzufügen von weiteren, neuentwickelten Programmteilen.

Die Eingabe von Daten und Steuerparametern geschieht durch das Einlesen einer leicht editierbaren ASCII-Datei zum Programmstart. Diese Datei enthält alle notwendigen Anfangs- und Randbedingungen für die verwendeten Felder und Skalare. Anfangswerte werden speziell für das Temperaturfeld (linear, T-Profil), für das Druckfeld und für die vier Konzentrationsfelder benötigt. Randbedingungen werden, zusätzlich zu diesen Feldern, speziell für die Strömungsfelder eingelesen. Des weiteren können bestimmte Aspekte des Programmablaufs durch diese Datei gesteuert werden. So ist es z.B. möglich die Berechnung mit und ohne innere Heizung oder mit und ohne Schmelzbildung durchzuführen.

Die Ausgabe kann in drei Protokollierungsdateien erfolgen, die über die Eingabe einzeln wählbar sind. In der ersten Datei (prot1.dat) werden alle für die Auswertung wichtigen Felder abgespeichert. Die zweite Datei (prot2.dat) beinhaltet notwendige gemittelte Tiefenplots dieser Felder und in einer dritten Datei (prot3.dat) wird das räumlich gemittelte Langzeitverhalten einzelner Felder und Skalare aufgezeichnet. Abb. 4.4 verschafft einen groben Überblick über die verwendeten Unterprogramme und ihre prinzipiellen Aufgaben. Der geschriebene Programmquelltext hat einen Gesamtumfang von über 5000 Zeilen, was ungefähr 80 A4-Seiten entspricht.

Zur Auswertung der Programmergebnisse wurden mehrere umfangreiche Programme in IDL (*Interactive Data Language*) geschrieben, welche hauptsächlich auf die Auswertung und grafische Darstellung der Daten der drei Protokollierungsdateien abgestimmt sind. Des weiteren wurde ein Perl-Script programmiert, welches in Verbindung mit IDL und \LaTeX ein Postscript-Dokument erstellt, das Grafiken wählbarer Felder zu festen Zeitschritten (1 Ga, ..., 4.5 Ga) beinhaltet.

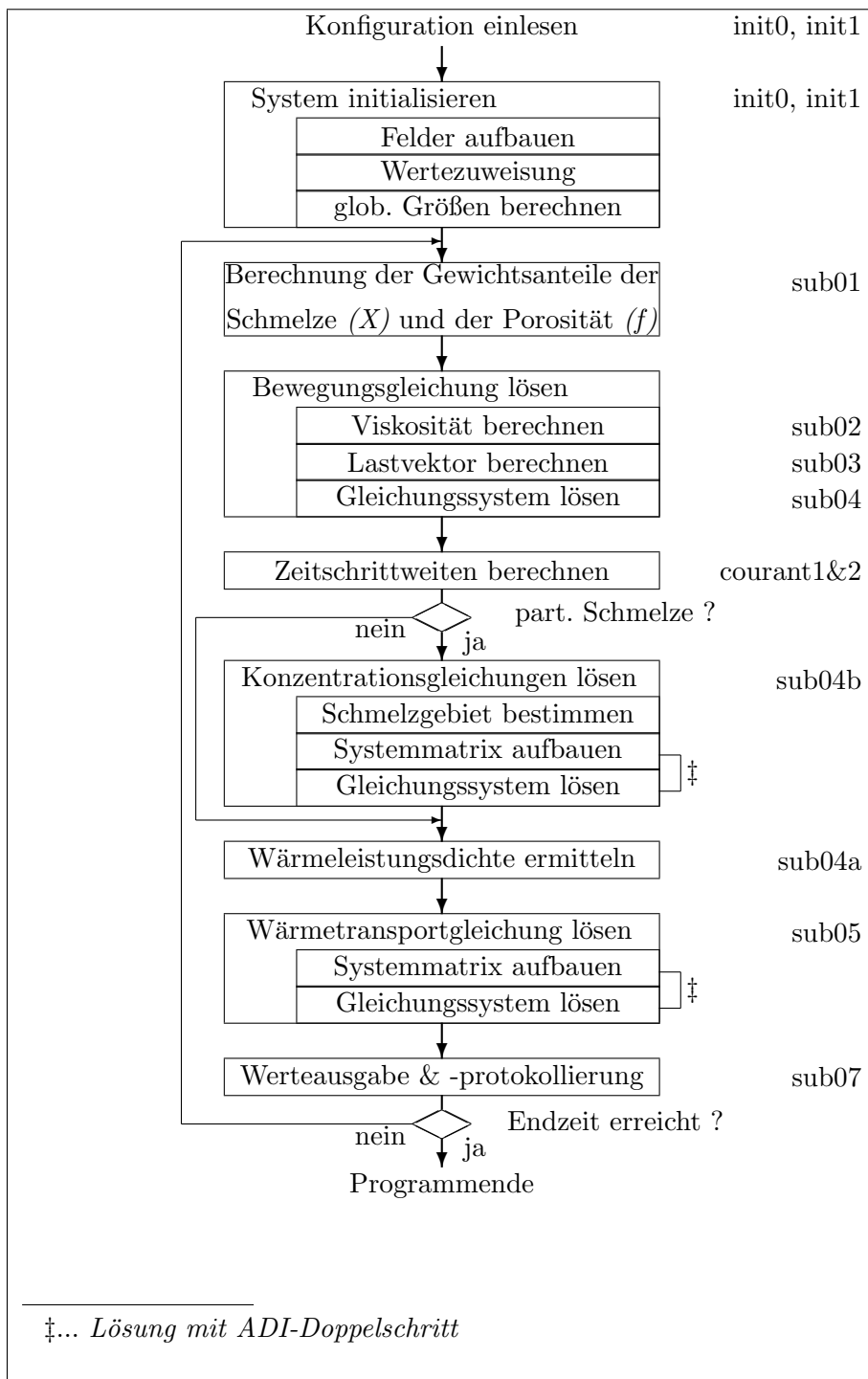


Abbildung 4.4: Grobstruktur des Programms

Kapitel 5

Ergebnisse

5.1 Benchmarktest

Um das neu entstandene Programm zu testen, wurden zuerst Modelle berechnet, die in einem Benchmark [Blankenbach et al., 1989] veröffentlicht wurden.

Im Blankenbach-Benchmark werden typische Beispiele thermischer Konvektion mit konstanter und variabler Viskosität sowie unterschiedlichem Zeitverhalten (stationär und zeitabhängig) beschrieben. Die Lösungen verschiedener, von unterschiedlichen Gruppen verwendeter, Programmcodes wurden miteinander verglichen und eine “beste” Näherung als Richtwert für neu zu entwickelnde Programme angegeben.

Im ersten Fall wird eine stationäre Konvektion mit konstanter Viskosität in einer quadratischen Box betrachtet. Für das Strömungsfeld wurde als Randbedingung Scherspannungsfreiheit (“free slip”) an allen Rändern gewählt. Die Werte des Temperaturfeldes werden unten ($T = 1000^\circ K$) und oben ($T = 0^\circ K$) konstant gehalten und an den Seitenwänden als symmetrisch (d.h. $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$) vorausgesetzt. Es wird keine innere Heizung angenommen und

Variablen und Referenzwerte

Variable	Bedeutung	Referenzwert (SI-Einheiten)
h	Höhe des Kastens	10^6
ΔT	Temperaturkontrast	1000
ρ	Dichte (<i>Boussinesq-Wert</i>)	$4 \cdot 10^3$
κ	Kontrast der Temperaturleitfähigkeit	10^{-6}
g	Gravitationsbeschleunigung	10
α	thermischer Ausdehnungskoeffizient	$2.5 \cdot 10^{-5}$
ν	kinematische Viskosität	$2.5 \cdot 10^{19}$ (<i>1a</i>)
		$2.5 \cdot 10^{18}$ (<i>1b</i>)
		$2.5 \cdot 10^{17}$ (<i>1c</i>)
c_p	Wärmekapazität	$1.25 \cdot 10^3$

Tabelle 5.1: Übersicht über die im Blankenbach-Benchmark verwendeten Variablen und deren dimensionsbehafteten Referenzwerte (*Auszug*).

die verwendete Rayleigh-Zahl ($Ra = \alpha g \Delta T h^3 / \kappa \nu$) wird für drei Fälle variiert:

$$\mathbf{1a)} \quad Ra = 10^4$$

$$\mathbf{1b)} \quad Ra = 10^5$$

$$\mathbf{1c)} \quad Ra = 10^6$$

Weitere wichtige Variablen sind in Tabelle 5.1 auszugsweise dargestellt. Die Werte des Temperatur- und des Strömungsfeldes im stationären Zustand für die Fälle 1a) bis 1c) sind in den Abbildungen 5.2 auf Seite 54 ersichtlich. Die zeitliche Entwicklung der dimensionslosen, räumlich gemittelten Geschwindigkeit

$$v_{rms} = \frac{h}{\kappa} \left\{ \frac{1}{hl} \int_0^l \int_0^k (u^2 + w^2) dz dx \right\}^{1/2}$$

und der Nußeltzahl¹

$$Nu = -h \frac{\int_0^l \partial T(x, z = h) dx}{\int_0^l T(x, z = 0) dx}$$

wird am Beispiel des Falles 1a in Abbildung 5.1 dargestellt.

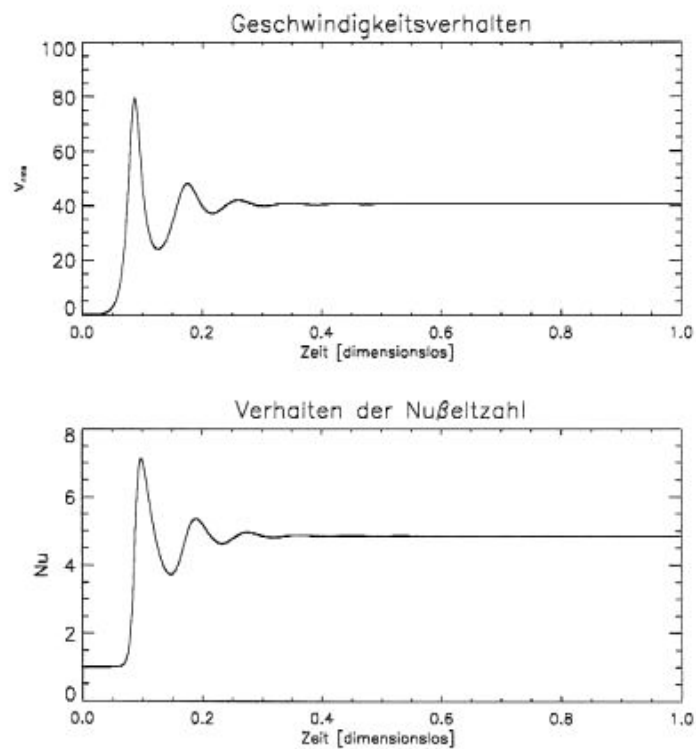


Abbildung 5.1: Zeitliche Entwicklung der dimensionslosen, räumlich gemittelten Geschwindigkeit v_{rms} (oben) und der dimensionslosen Nußeltzahl Nu (unten) am Beispiel des Falles 1a.

¹Benannt nach Wilhelm Nußelt (1882 - 1957), der seine Lebensaufgabe in der Erforschung des konvektiven Wärmeübergangs sah. Von 1925 bis 1951 wirkte er als Ordinarius auf den "Lehrstuhl für Maschinenlehre" der Technischen Hochschule München.

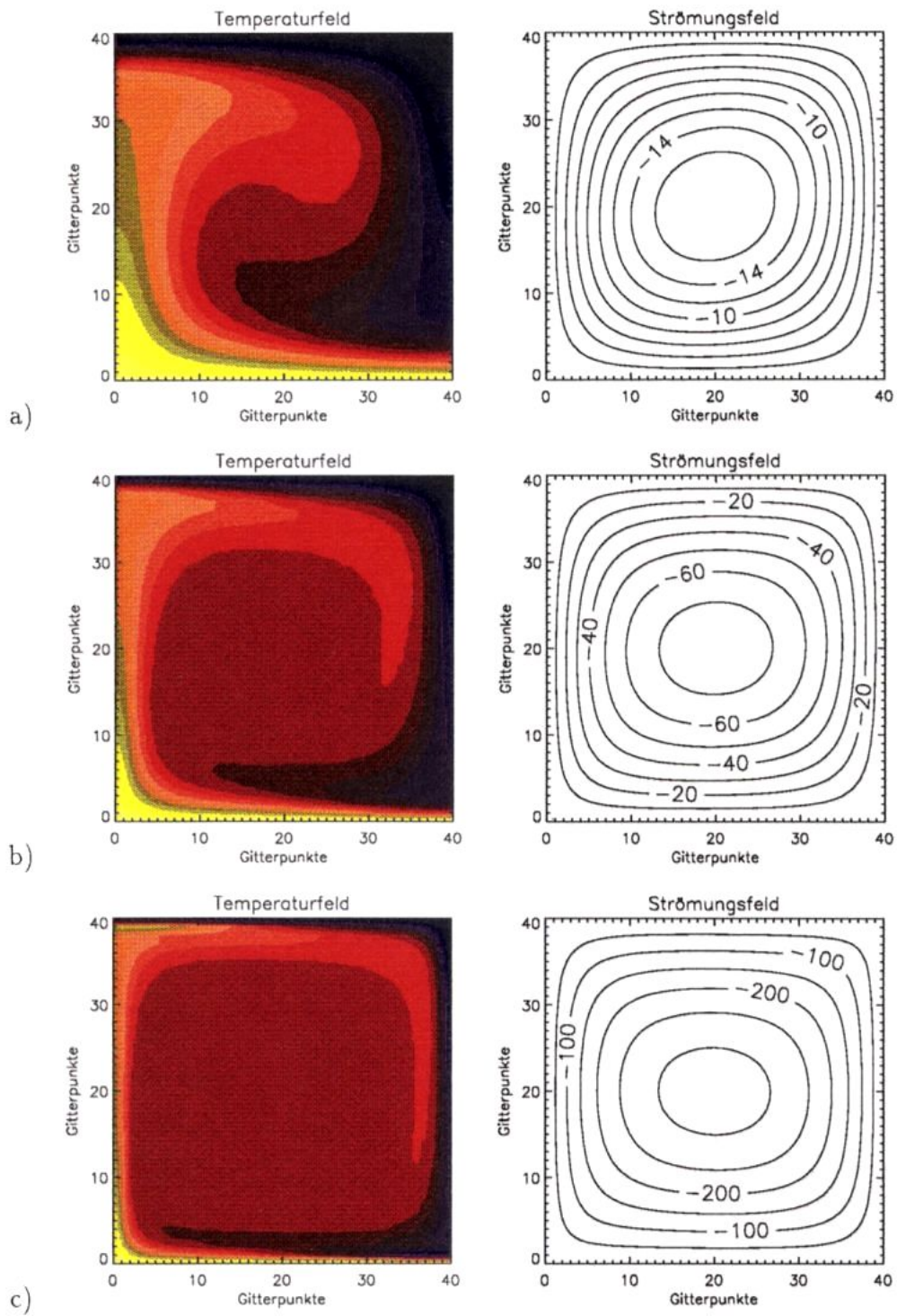


Abbildung 5.2: Temperatur- und Strömungsfelder zu den Fällen 1a-1c des Blankenbach-Benchmark im stationären Endzustand.

Im zweiten Fall wird eine stationäre Konvektion mit temperatur- und tiefenabhängiger Viskosität betrachtet. Hierbei gelten für das Temperatur- und das Strömungsfeld die gleichen Randbedingungen wie im ersten Fall. Die temperatur- und tiefenabhängige Viskosität wird durch folgenden funktionalen Zusammenhang beschrieben:

$$\nu = \nu_0 \exp \left\{ -\frac{bT}{\Delta T} - \frac{c(1-z)}{h} \right\}$$

Im Fall 2a wird ebenfalls eine quadratische Box angenommen. Die verwendete Rayleigh-Zahl hat den Wert 10^4 und die Konstanten b und c haben die Werte $\ln(1000)$ bzw. 0. Im Fall 2b wird für die Boxbreite das 2,5fache der Boxhöhe angenommen. Der Wert der Rayleigh-Zahl ist ebenfalls 10^4 und die Konstanten b und c haben diesmal die Werte $\ln(1000)$ bzw. 0. Ein Vergleich der Ergebnisse für den Endzustand des Temperatur- und des Strömungsfeldes zwischen dem neuentwickelten Programm und dem Blankenbach-Benchmark [Blankenbach et al., 1989; Seite 34] zeigt die gute Übereinstimmung beider Ergebnisse am Beispiel des Falles 2b (Abb. 5.3).

Fall	BBB	ZPS	Abweichung
1a	42.86	42.81	0.11 %
1b	193.2145	193.2079	0.003 %
1c	833.9897	833.6716	0.03 %
2a	480,4334	482,9796	0.52 %
2b	171,755	174.0734	1.34 %

Tabelle 5.2: Gegenüberstellung der Ergebnisse des Blankenbach-Benchmark und des neuentwickelten Programms ZPS. Es werden die Werte für die räumlich gemittelte, dimensionslose Geschwindigkeit v_{rms} dargestellt. Im Fall 1 wird Konvektion mit konstanter Rayleigh-Zahl überprüft. Im Fall 2a ist die Viskosität temperaturabhängig und im Fall 2b temperatur- und tiefenabhängig. Die Ermittlung der Ergebnisse wurden bei einer Gitterauflösung von 41×41 durchgeführt.

Die im Benchmark dokumentierten Werte sind in Tabelle 5.2 den Werten des neuentwickelten Programms gegenübergestellt. Die gute Übereinstimmung

zeigt, daß mit dem neuen Programm ZPS auch für andere Konvektionsmodelle korrekte Ergebnisse zu erwarten sind.

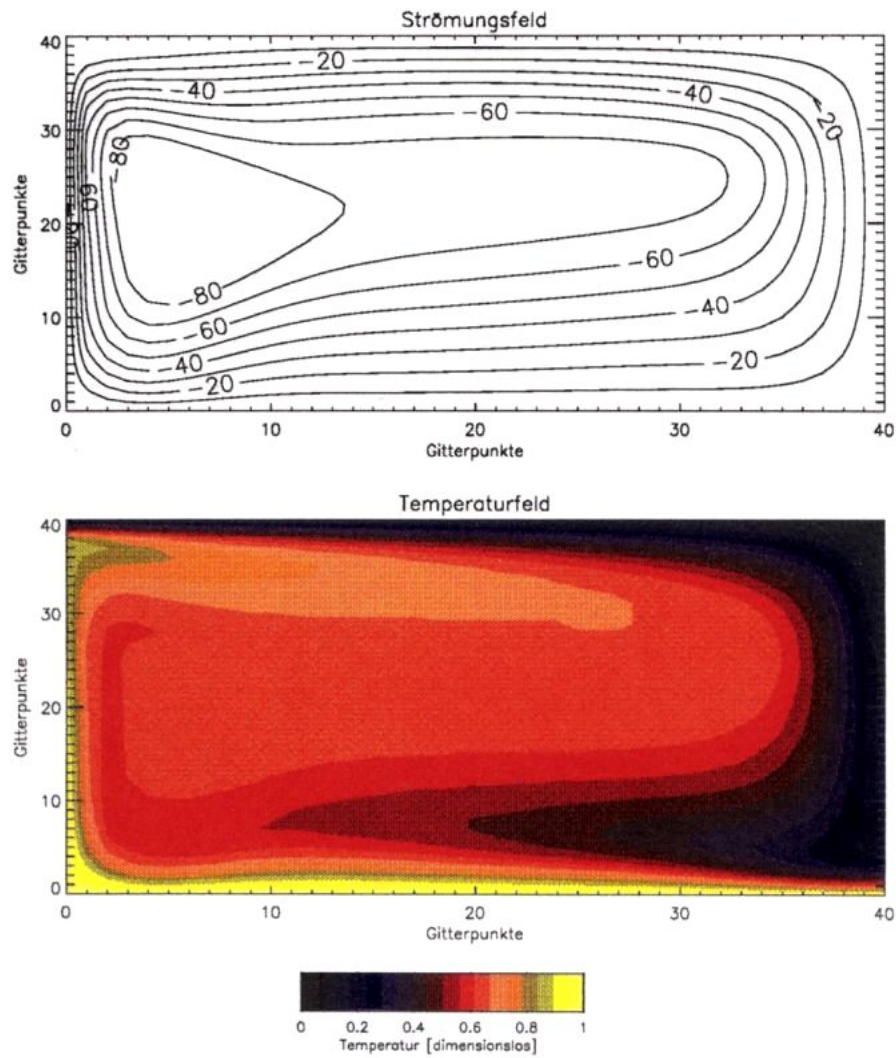


Abbildung 5.3: Temperatur- und Strömungsfeld im stationären Endzustand beim Fall 2b. In diesem Fall ist die Viskosität temperatur- und tiefenabhängig.

5.2 Referenzmodell

Nach dem Test der Konvergenz und Stabilität des neuentwickelten Programmcodes anhand des Blankenbach-Benchmarks [Blankenbach et al., 1989] für verschiedene geodynamische Konvektionsmodelle, wurden umfangreiche Modellierungsläufe durchgeführt, um durch die Variation verschiedener Parameter ein gut geeignetes Modell zu finden. Obwohl die reale Natur der Erde wesentlich komplizierter ist, als sie in einem geodynamischen Modell beschrieben werden kann, wurden Parameterwerte gesucht, bei denen die berechneten Ergebnisse möglichst gut mit geologisch und geophysikalisch beobachteten Werten übereinstimmen. Da diese Näherung aufgrund vieler geologischer und geophysikalischer Randbedingungen, die im Modell wegen ihrer Mannigfaltigkeit keine Berücksichtigung finden konnten, nicht in allen Bereichen eine vortreffliche Übereinstimmung zeigt ist verständlich und liegt durchaus in der Natur der Sache.

Als Ergebnis liefert das Referenzmodell eine Verarmung an Radionukliden im Bereich des oberen Mantels und akzeptable Werte für den Wärmefluß an der Erdoberfläche. Außerdem steht auch die Verteilungen der Temperatur und der Viskosität sowie die Werte für die Matrix- und Schmelzgeschwindigkeit nicht im Widerspruch zu beobachteten Daten oder zu Daten anderer relevanter Modellierungen.

Die Schwankungen im zeitlichen Verlauf der Schmelzgeschwindigkeit und den damit verbundenen Maxima und Minima eines möglichen Aufstiegs von Schmelze, veranschaulichen grob die Zyklen der Entstehung von ozeanischen Plateaus, die bekannterweise eine Anreicherung an inkompatiblen Elementen aufweisen.

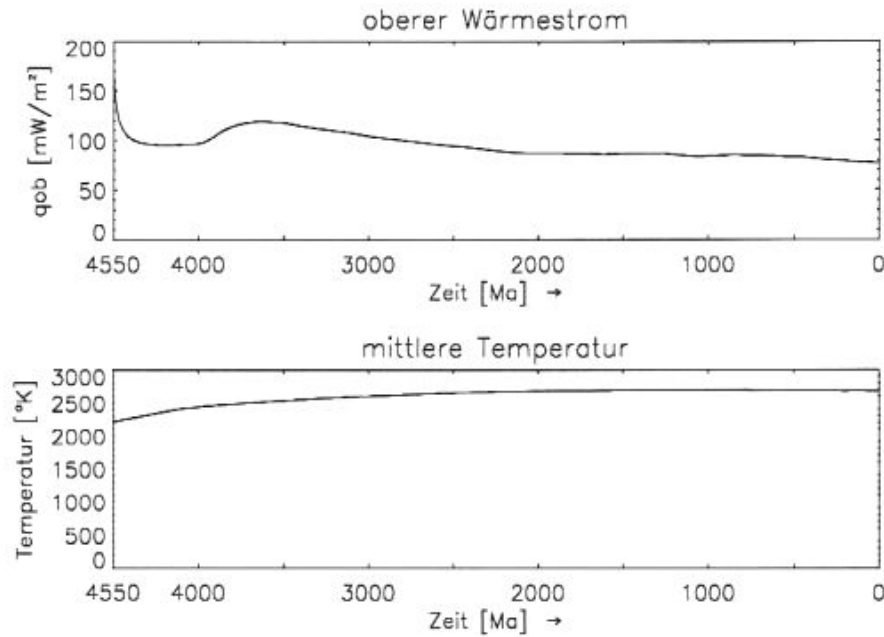


Abbildung 5.4: Darstellung der zeitliche Entwicklung des Wärmestroms an der Erdoberfläche (*obere Grafik*) und des räumlich gemittelten Temperaturfeldes (*untere Grafik*) bei dem Referenzmodell.

In Abbildung 5.4 wird die zeitliche Entwicklung des Wärmestroms an der Erdoberfläche und die zeitliche Entwicklung des Temperaturfeldes zusammengefasst. Ein langsamer Rückgang des gemittelten Wärmeflusses an der Erdoberfläche vom Archaikum zum Proterozoikum und Phanerozoikum wurde bereits in anderen Arbeiten gefolgert [Pollack, 1980, 1986; Nyblade & Pollack, 1993]. Eine ähnliche Tendenz wird in der oberen Grafik der Abbildung erkennbar. Dort ist der berechnete mittlere Wärmestrom an der Modelloberfläche, q_{ob} , als eine Funktion der Zeit dargestellt. Der globale Wärmestrom an der Erdoberfläche beträgt heute $87 mW/m^2$ [Pollack et al., 1993], wobei dieser Wert in Abhängigkeit von der Beschaffenheit der Erdkruste variiert. So liegt der mittlere Wert des Wärmestroms in ozeanischer Bereichen bei ca. $101 mW/m^2$, während er in kontinentalen Bereichen einen Wert von ca. $65 mW/m^2$ hat. Der Wert von $87 mW/m^2$ für die globale Erdoberfläche wird

in akzeptabler Weise angenähert. Außerdem ist zu erkennen, daß das globale Mittel des Wärmeflusses für 3800 Ma monoton fällt. In der unteren Grafik der Abbildung 5.4 ist die Entwicklung des räumlich gemittelten Temperaturfeldes des Erdmantels in Abhängigkeit von der Zeit ersichtlich. Die Darstellung zeigt, daß die gemittelte Temperatur des Erdmantels für 3000 Ma annähernd konstant ist. Dieses Verhalten konnte auch bei anderen Modellen [Walzer & Hendel, 1997a; Walzer & Hendel, 1997b] beobachtet werden.

In Abbildung 5.5 wird die zeitliche Entwicklung der mittleren Geschwindigkeiten für die Matrix und für die Schmelze im Erdmantel dargestellt.

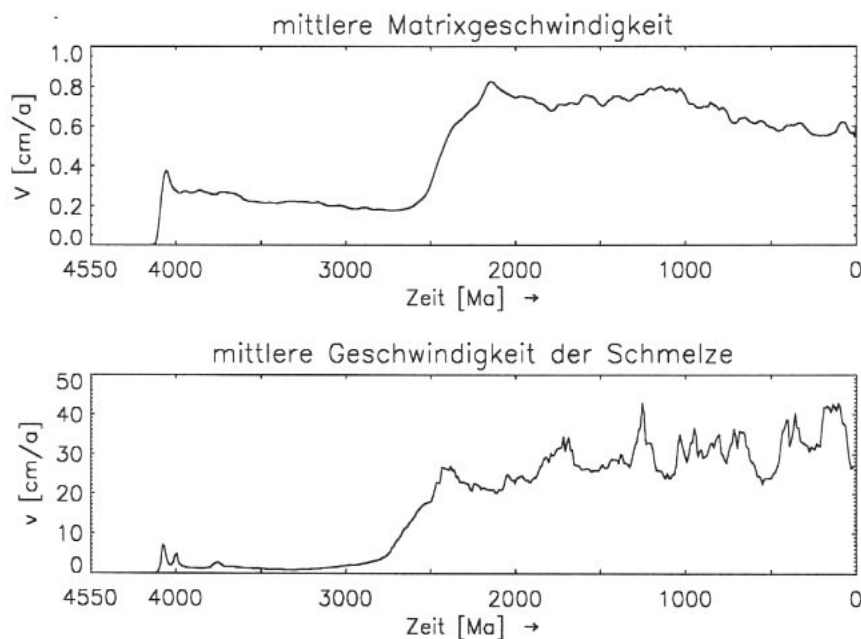


Abbildung 5.5: Darstellung der zeitliche Entwicklung der mittleren Geschwindigkeiten für die Matrix (*obere Grafik*) und die Schmelze (*untere Grafik*) bei dem Referenzmodell.

Die Änderungen in der zeitlichen Entwicklung sind ein gutes Maß für die konvektiv wirkenden Kräfte. Auch wenn die Eingangsparameter geringfügig geändert werden, bleibt das Verhalten der gemittelten Geschwindigkeiten stabil (vgl. auch Abschnitt 5.3). Im frühen Archaikum, vor 3400 Millio-

nen Jahren, zeigt sich eine Dominanz der Konvektion im oberen Erdmantel. Während des Proterozoikums und des Phanerozoikums findet thermische Konvektion sowohl im unteren als auch im oberen Erdmantel statt. Diese Zeitspanne ist durch beträchtliche Schwankungen bei der Schmelzgeschwindigkeit und einem allgemein höheren Niveau der gemittelten Geschwindigkeiten charakterisiert.

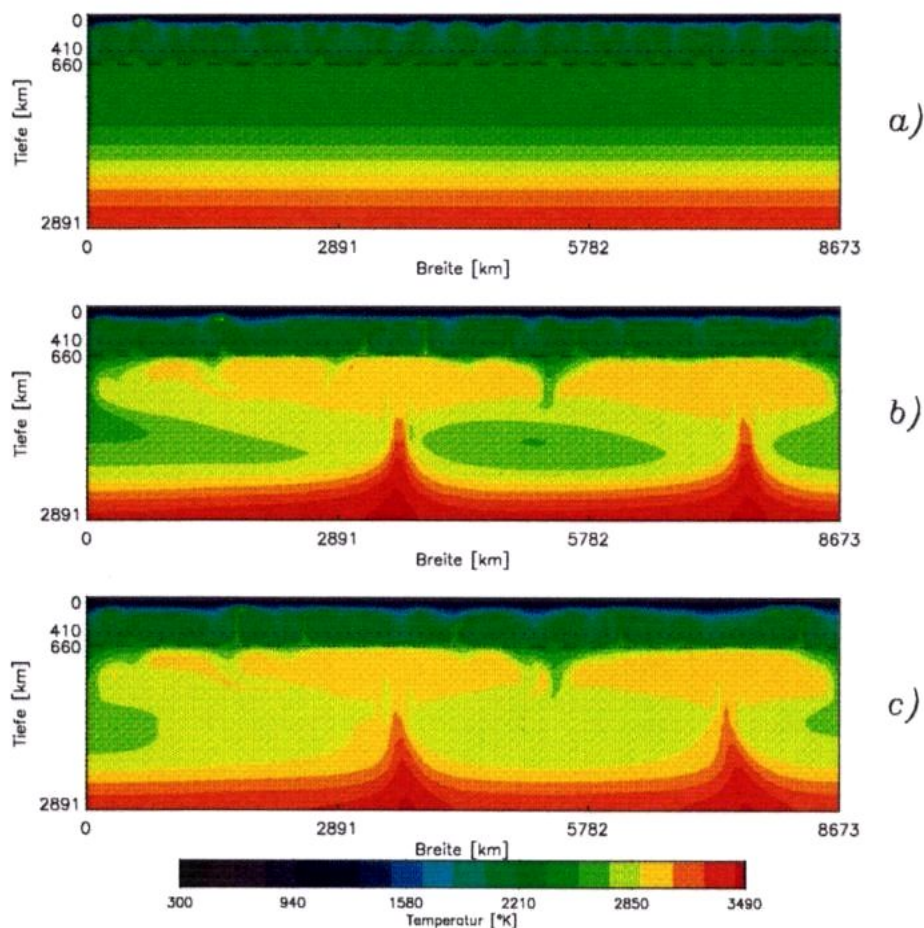


Abbildung 5.6: Darstellung der Entwicklung des Temperatur-Feldes für die Alter von 3.5 Ga (a), 2.5 Ga (b) und 0.1 Ga (c).

In den tieferen Bereichen des unteren Mantels können sich konvektive Strömungen wegen der hohen Viskosität kaum entwickeln. Bei der Deutung

des Verhaltens der gemittelten Geschwindigkeiten ist zu berücksichtigen, daß Rückkopplungsmechanismen, wie die Bildung ozeanischer Plateaus, in diesem Modell nicht wirken. Abbildung 5.6 stellt die zeitliche Entwicklung des Temperaturfeldes zu ausgewählten Zeitschritten dar. Es sind kalte Abstrombereiche und warme Aufstiegszonen zu sehen. Das obere Teilbild der Abbildung zeigt, daß sich im Erdmantel zunächst im oberen Bereich eine große Anzahl von kleineren Konvektionszellen entwickeln. Im Proterozoikum und Phanerozoikum sind konvektive Strömungen auch im unteren Erdmantel zu erkennen.

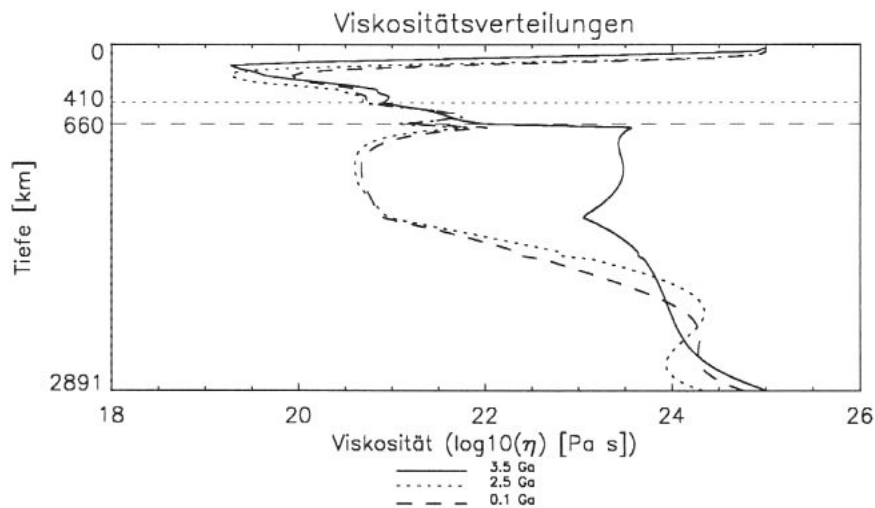


Abbildung 5.7: Darstellung der Entwicklung des Viskositäten-Tiefen-Profiles für die Alter von 3.5 Ga, 2.5 Ga und 0.1 Ga.

Die drei Grafiken in Abbildung 5.8 zeigen die Entwicklung der Scherviskosität der Matrix. Diese wichtige physikalische Größe ist in dem Modell weder räumlich noch zeitlich konstant, sondern entwickelt sich dynamisch. Sie ist für einige Ordnungen variable und abhängig vom Temperaturfeld, da Modelle mit einer konstanten Viskosität die thermische und chemische Entwicklung der Erde nicht richtig widerspiegeln können. Durch eine Mittlung über den

ganzen Mantel, bei einer festen Tiefe, erhält man die in Abbildung 5.7 dargestellte Entwicklung eines Viskositäten-Tiefen-Profiles.

Die 660 km Diskontinuität ist in allen Zeitschritten, wegen der lokal höheren Viskosität, zu erkennen. Sie stellt eine Barriere zwischen oberen und unteren Erdmantel dar. Auch die geringer ausgeprägte Diskontinuität in 410 km Tiefe ist noch zu erkennen.

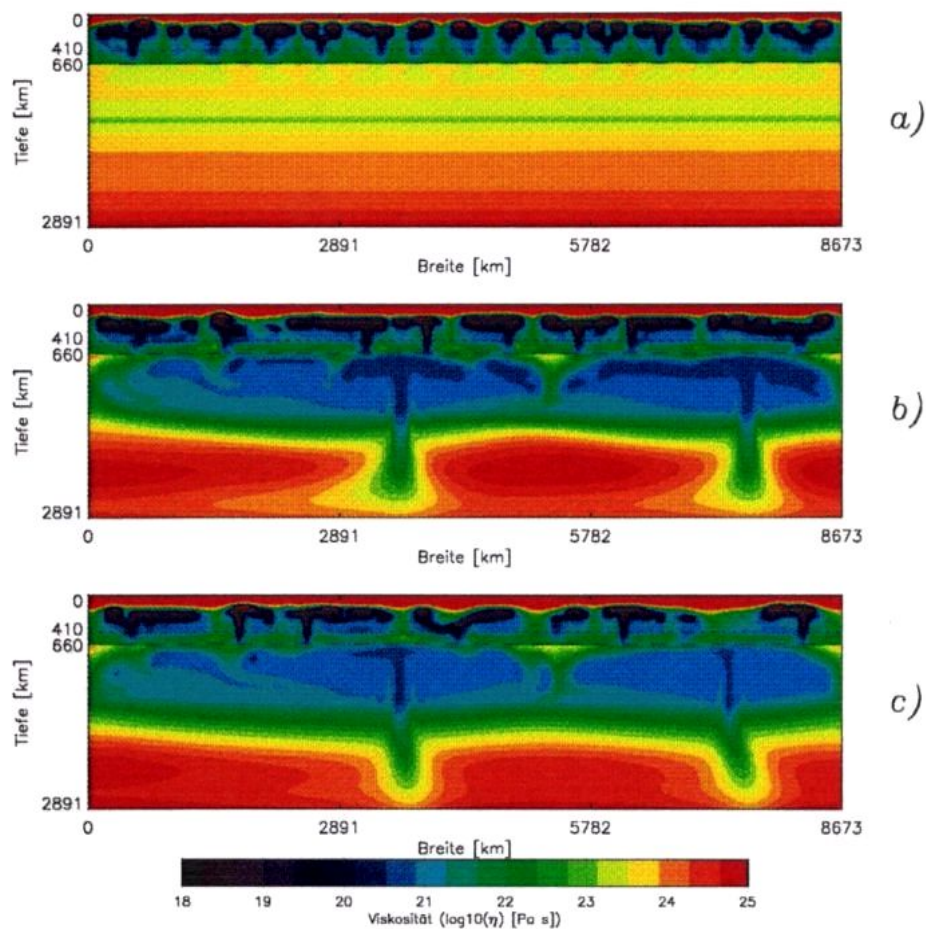


Abbildung 5.8: Darstellung der Entwicklung des Viskosität-Feldes η für die Alter von 3.5 Ga (a), 2.5 Ga (b) und 0.1 Ga (c).

Die temperatur- und druckabhängige Scherviskosität übt einen großen Einfluß auf die Verteilung und die Stärke der Geschwindigkeiten aus. In Abbil-

dung 5.9 wird die Entwicklung der Stromfunktion zu den gleichen Zeitschritten dargestellt, zu denen auch die Darstellung des Temperaturfeldes (Abb. 5.6) und die Darstellung der Viskosität (Abb. 5.8) erfolgte.

Den großräumigen Konvektionszellen im unteren Mantel stehen kleinskalare Strömungen im oberen Mantel gegenüber.

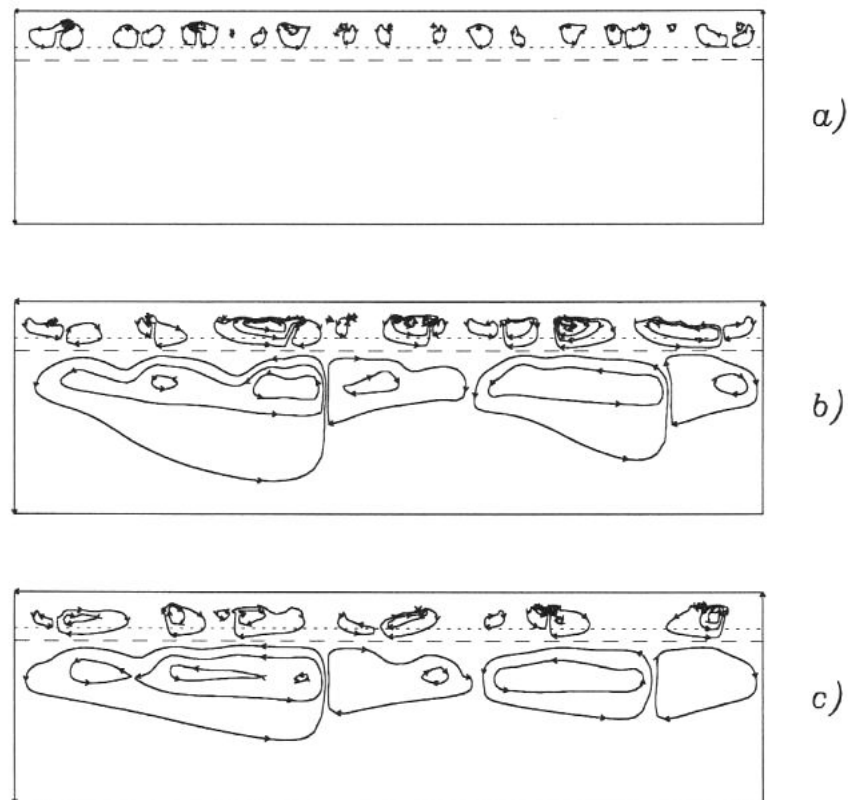


Abbildung 5.9: Darstellung der Entwicklung des Strömungsfeldes ψ für die Alter von 3.5 Ga (a), 2.5 Ga (b) und 0.1 Ga (c).

In allen Abbildungen sind separate Zyklen im oberen und im unteren Erdmantel erkennbar. Erst während des Archaikums zeigt sich die Entwicklung von konvektiven Einflüssen auch im unteren Mantel.

In den Abbildungen 5.10 und 5.11 wird die Veränderung der chemischen

Zusammensetzung des Mantels gezeigt.

Es wird die Verteilung der für die innere Heizung hauptverantwortlichen Radionuklide am Beispiel von ^{238}U und ^{232}Th dargestellt. Die Verteilungen der Radionuklide ^{40}K und ^{235}U verhalten sich ähnlich. Zu Beginn der Evolution der Erde wird eine homogene Verteilung der inkompatiblen Elemente gefordert. Durch chemische Segregation und konvektive Strömungen ändert sich diese Verteilung kontinuierlich.

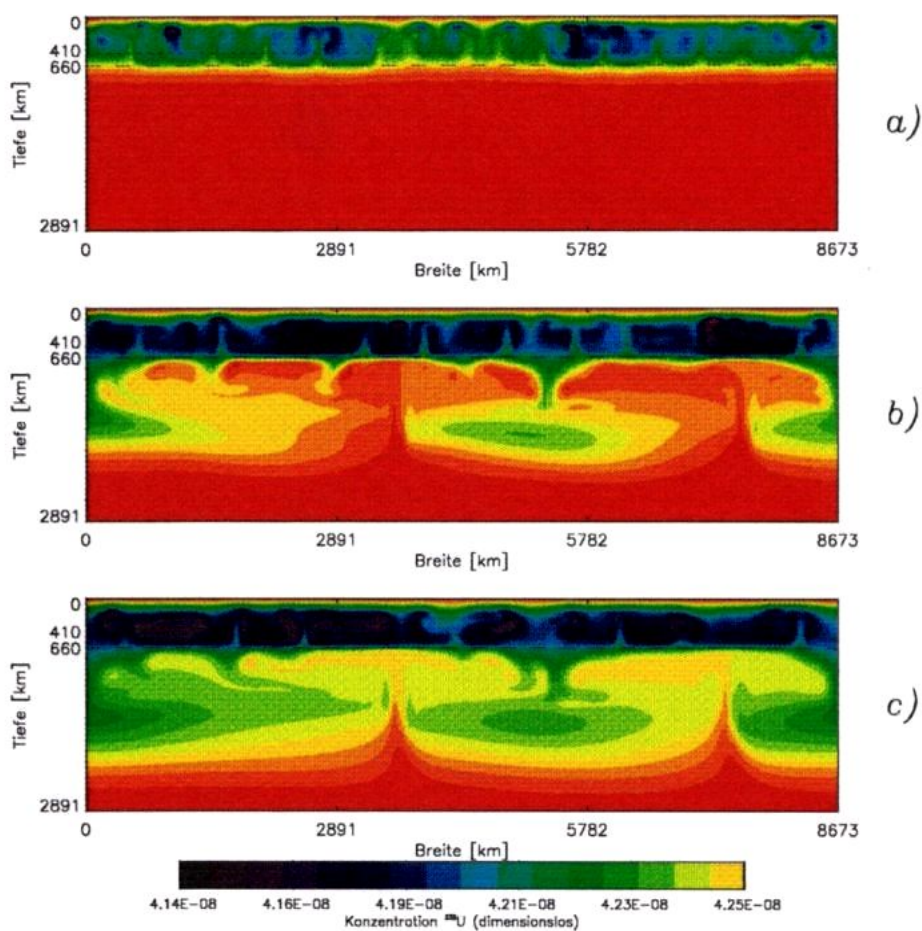


Abbildung 5.10: Darstellung der Entwicklung der Konzentrationsfelder am Beispiel des ^{238}U -Feldes für die Alter von 3.5 Ga (a), 2.5 Ga (b) und 0.1 Ga (c).

Das Wachstum eines verarmten Mantels beeinflusst das Verhalten der thermischen Mantelkonvektion und die Evolution der einzelnen Bereiche des Erdmantels. Durch die Behandlung der Schmelze wird keine einheitliche Verteilung der Wärmequellen erreicht oder vorausgesetzt.

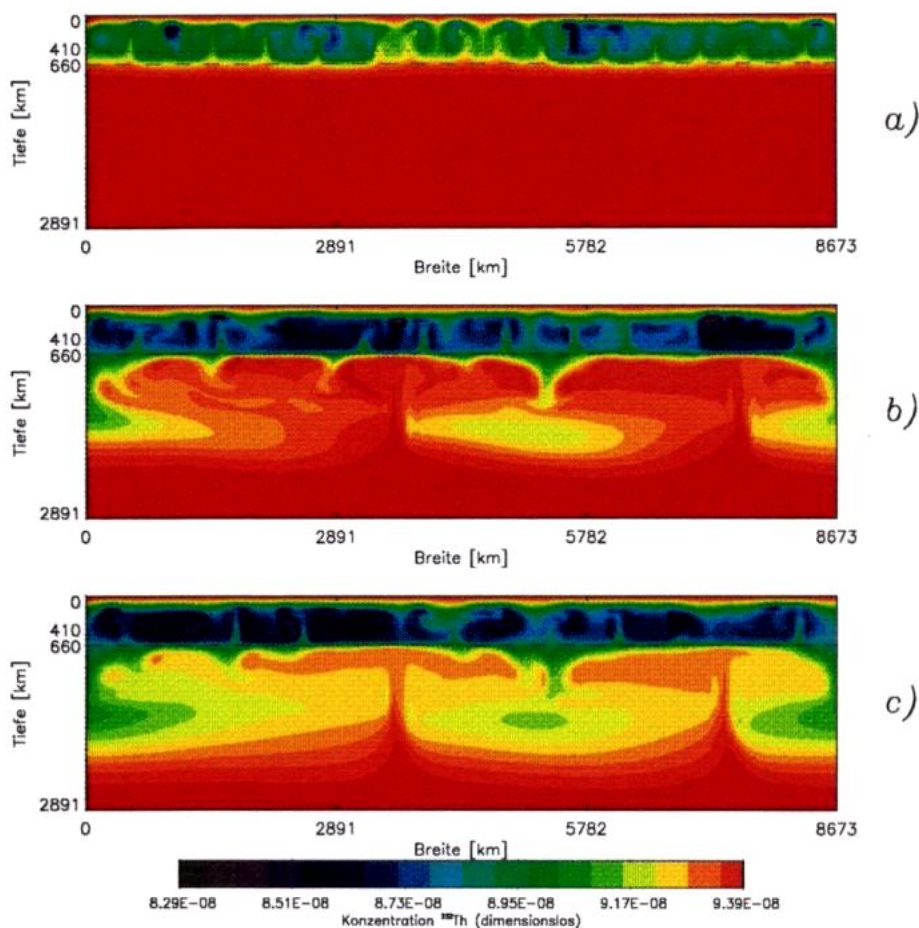


Abbildung 5.11: Darstellung der Entwicklung der Konzentrationsfelder am Beispiel des ^{232}Th -Feldes für die Alter von 3.5 Ga (a), 2.5 Ga (b) und 0.1 Ga (c).

Obwohl diese Daten nicht explizit in das Modell hineingesteckt wurden, zeigt die Verteilung der Radionuklide das Entstehen von an diesen Elementen verarmten Regionen innerhalb des oberen Mantels und unterhalb der Li-

thosphäre. Die Verarmung verstärkt sich während der Entwicklung des Erdmantels, wie in den Abbildungen 5.10 und 5.11 zu sehen ist.

Die Verarmung konzentriert sich auf die Bereiche partieller Schmelze. Die zeitliche Entwicklung der Porosität gemittelt über die Bereiche des Auftretens von partieller Schmelze ist in Abbildung 5.12 dargestellt. Die Größenordnung der Porosität konnte auch in anderen Modellen [Schmeling & Bussod, 1996] als akzeptabler Wert beschrieben werden. Hierbei ist zu berücksichtigen, daß die dort erzielten Ergebnisse unter Einbeziehung einer wesentlich komplizierteren Rheologiebetrachtung zustande kamen.

In den Abbildungen 5.13 bis 5.15 erfolgt die Darstellung des Wärmestroms, der Porosität und der Konzentration zu ausgewählten Zeitschritten.

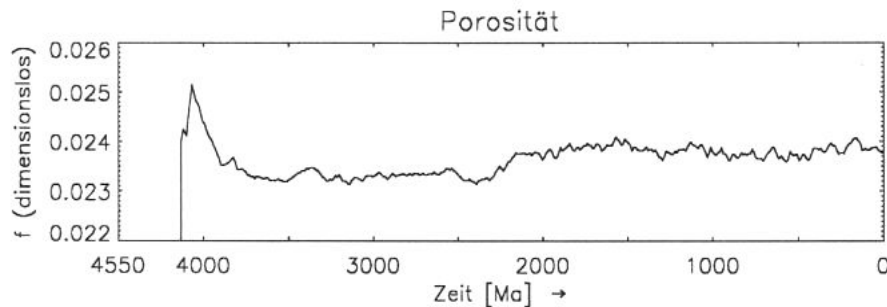


Abbildung 5.12: Darstellung der zeitlichen Entwicklung der Porosität beim Referenzmodell.

Im oberen Teilbild ist der Wärmestrom an der Modelloberfläche zu den ausgewählten Zeitschritten dargestellt. Das mittlere Teilbild zeigt eine Darstellung der zeitlich und örtlich veränderlichen Gebiete der partiellen Schmelze. Diese Gebiete sind wegen den Bedingungen die zur Bildung partieller Schmelze führen können stark von der Temperaturverteilung im Bereich des oberen Mantels abhängig. In den Teilbildern wurde nicht das gesamte Berechnungsgebiet zur Darstellung ausgewählt. Da partielle Schmelze nur im oberen Mantel auftreten kann, erfolgt die Darstellung des Mantels nur bis zu einer Tiefe von 1500 km.

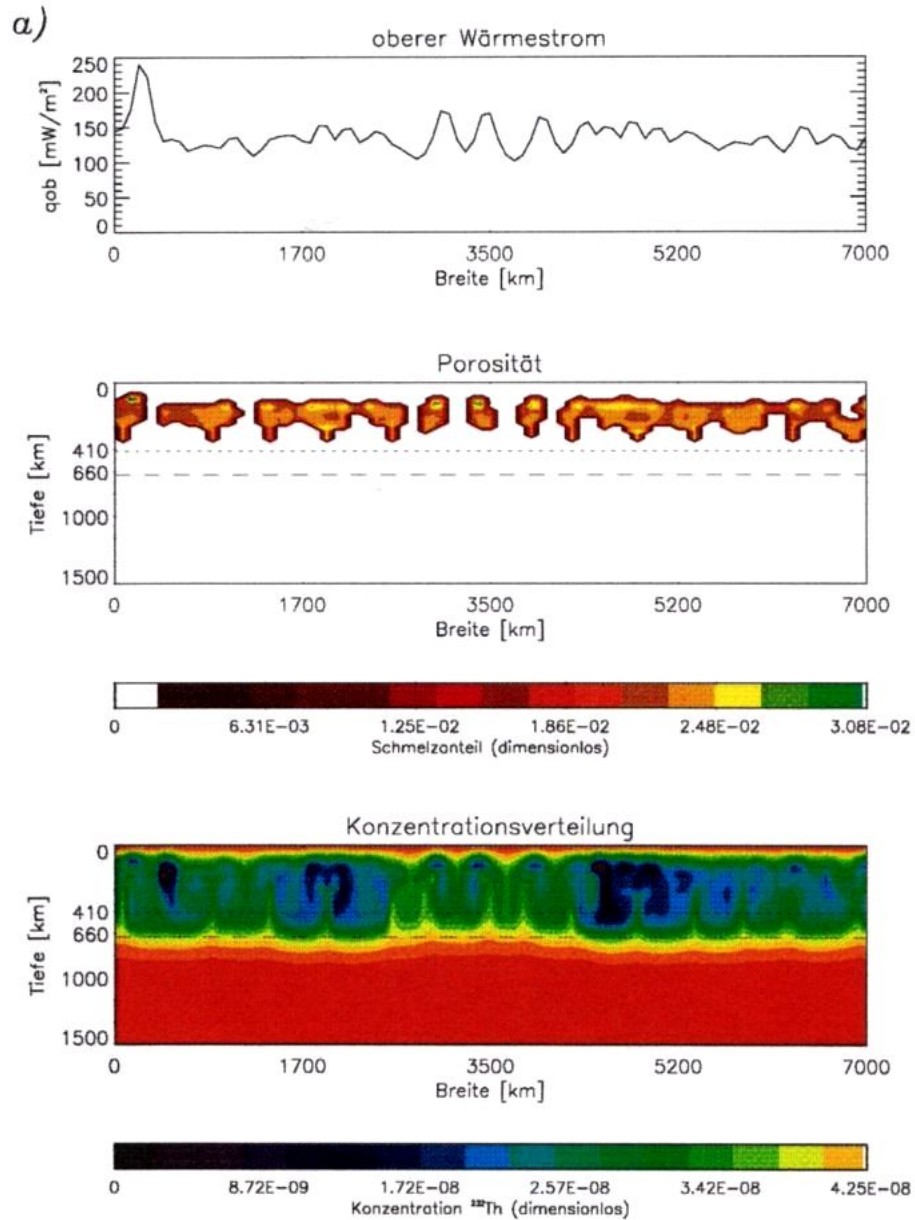


Abbildung 5.13: Darstellung des Wärmestroms, der Porosität und der Konzentrationsverteilung im Alter von 3.5 Ga. Der mittlere Wärmestrom an der Modelloberfläche beträgt etwa $135 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2}$.

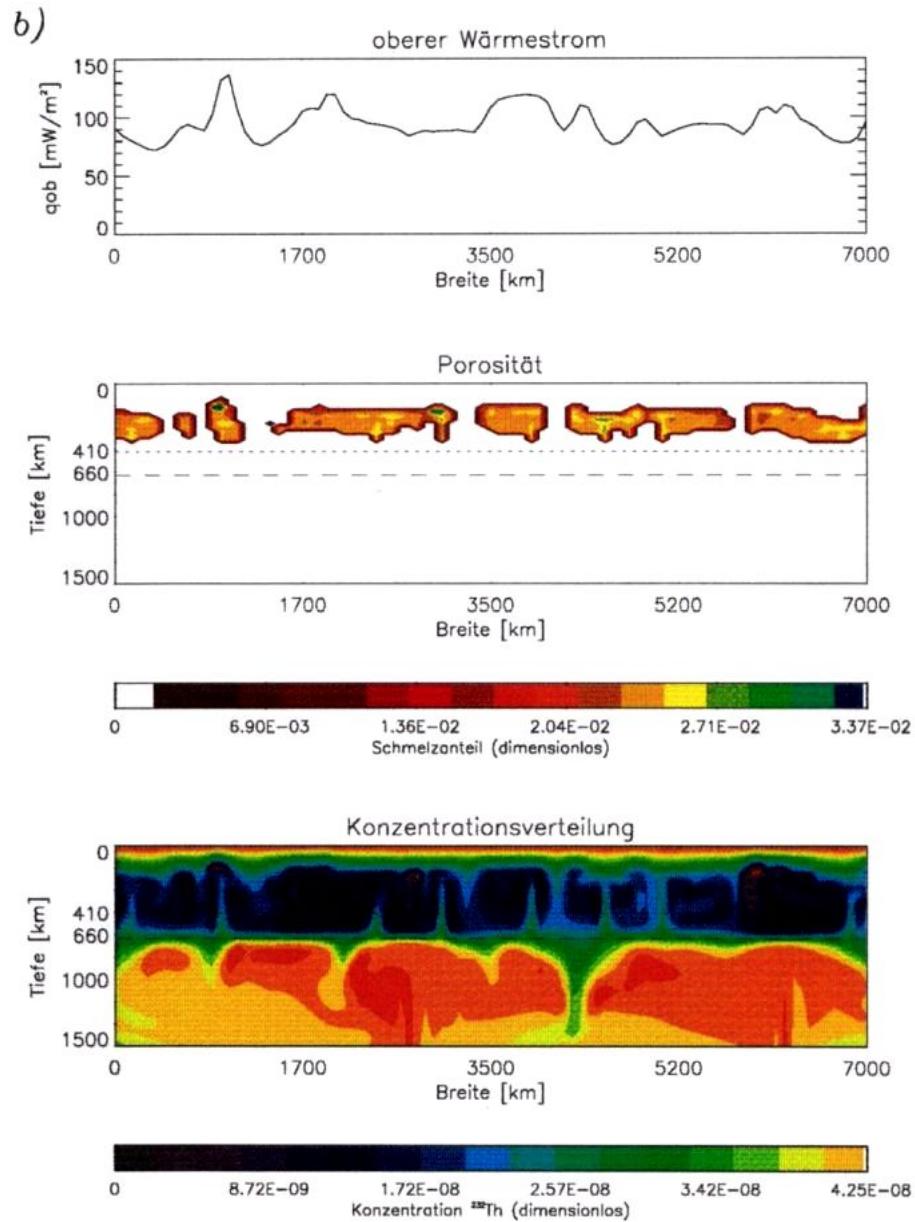


Abbildung 5.14: Darstellung des Wärmestroms, der Porosität und der Konzentrationsverteilung im Alter von 1.5 Ga. Der mittlere Wärmestrom an der Modelloberfläche beträgt etwa $96 mW \cdot m^{-2}$.

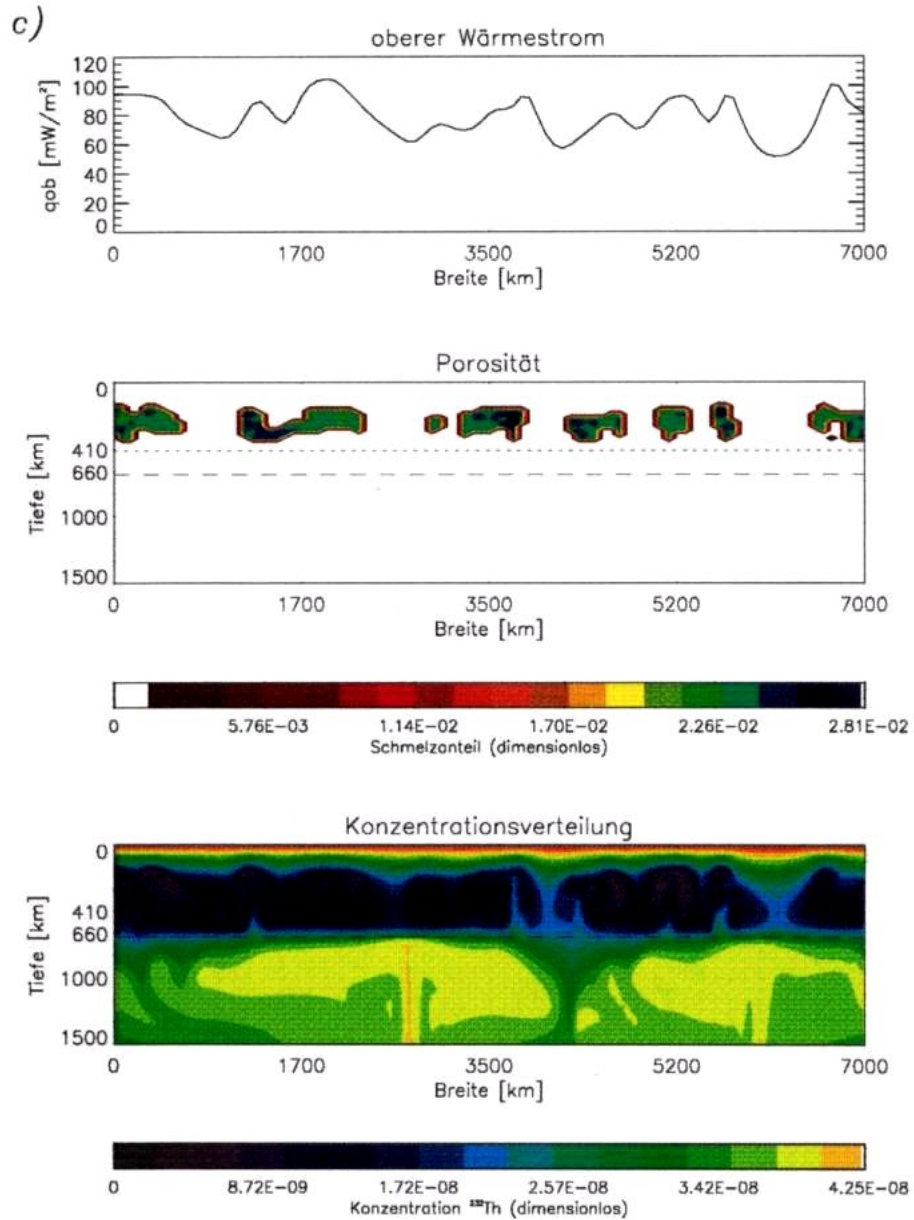


Abbildung 5.15: Darstellung des Wärmestroms, der Porosität und der Konzentrationsverteilung im Alter von 0.1 Ga. Der mittlere Wärmestrom an der Modelloberfläche beträgt etwa $80 \text{ mW} \cdot \text{m}^{-2}$.

Diese Einschränkung gilt auch für das untere Teilbild, welches die Konzentrationsverteilung zeigt. Besonders interessant ist der Zusammenhang zwischen der örtlichen Verteilung des Wärmestroms und den Bereichen des Auftretens von partieller Schmelze.

Während es zu Beginn der Evolution des Erdmantels relativ große Bereiche mit partieller Schmelze gibt, konzentriert sich diese in der voranschreitenden Entwicklung auf kleinere Bereiche, die jedoch im Inneren höhere Porositätswerte beinhalten. Der Zusammenhang dieses Verhaltens mit der fortschreitenden Verarmung des oberen Mantels an Radionukliden bedarf jedoch noch weiterer Berechnungen. Die Episodizität des Auftretens von Zeiten mit erhöhter partieller Schmelze wird durch die zeitliche Entwicklung der mittleren Geschwindigkeit der Schmelze charakterisiert (Abb. 5.5).

5.3 Parametervariationen

*k*8-Variationen

Eine Anzahl von Modellläufen basiert auf der Annahme, daß die Gehalte $c_{t\nu}$ der vier Radionuklide für Tiefen kleiner als 660 km Tiefe um einen Faktor *k*8 erhöht sind. Für den unteren Mantel wird $k8 = 1$ gesetzt und im oberen Mantel mit verschiedenen Werten 5.491 ... 5.552 experimentiert. Im Referenzmodell wurde für *k*8 ein Wert von 5.512 angenommen. Im folgenden soll der Einfluß der Variation des Parameters *k*8 auf die Entwicklung der Geschwindigkeit der Schmelze \mathbf{v} untersucht werden. Obwohl diese Geschwindigkeit ziemlich empfindlich gegenüber Änderungen von Parametern ist, zeigen die in Abbildung 5.16 dargestellten Kurven einen relativ stabilen Verlauf.

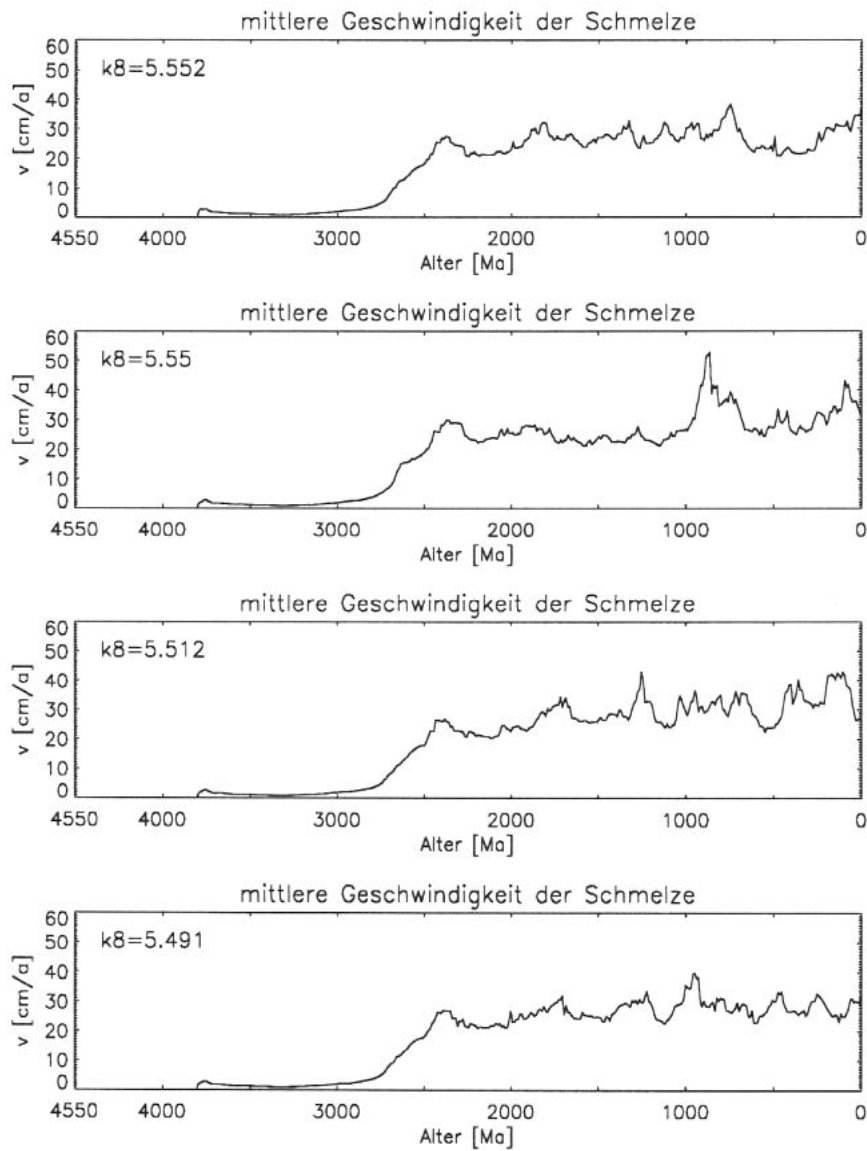


Abbildung 5.16: Veränderungen des Parameters k_8 haben nur geringen Einfluß auf das Verhalten der anderen Größen. Der Einfluß auf die Schmelzgeschwindigkeit wird in den unterschiedlichen Grafiken dargestellt und zeigt einen stabilen Verlauf für die unterschiedlichen Parameterwerte.

f_c, w_c -Variationen

Der im Modell wirkende Mechanismus zur chemischen Fraktionierung ist stark von dem kritischen Wert w_c der vertikalen Geschwindigkeitskomponente abhängig. Wird dieser Wert in einem Gebiet überschritten, wird angenommen, daß die Schmelze der Mantelregion entzogen wird. Die Schmelze ist wegen der hohen Inkompatibilität der für die innere Heizung wichtigsten Radionuklide an diesen angereichert. Die Größe der Verarmung des Mantels an den Radionukliden wird durch den kritischen Porositätswert f_c bestimmt. Dabei wird die Gewichtskonzentration der Schmelze c_{tv} um diesen Faktor vermindert und so ein Aufstieg der Schmelze vorgegeben. Im Referenzmodell ist der Wert von w_c mit 10 cm/a und der Wert für f_c mit 0.01 gegeben. In den Abbildungen 5.17 und 5.18 kann gezeigt werden, daß sich der prinzipielle Kurvenverlauf der mittleren Geschwindigkeit der Schmelze bei leichten Variationen dieser Parameter nicht verändert und stabil bleibt.

Obwohl sich der zeitliche Verlauf der Kurven in Abhängigkeit von den gewählten Parametern im Detail unterscheidet, sind während der Proterozoikums und Phanerozoikums beträchtliche Schwankungen in der mittleren Geschwindigkeit der Schmelze und ein allgemein höheres Niveau der Geschwindigkeit zu erkennen. Dieses Verhalten zeigt eine große Übereinstimmung mit anderen Modellen der thermischen und chemischen Evolution des Erdmantels [Walzer & Hendel, 1997b, Walzer & Hendel, 1999].

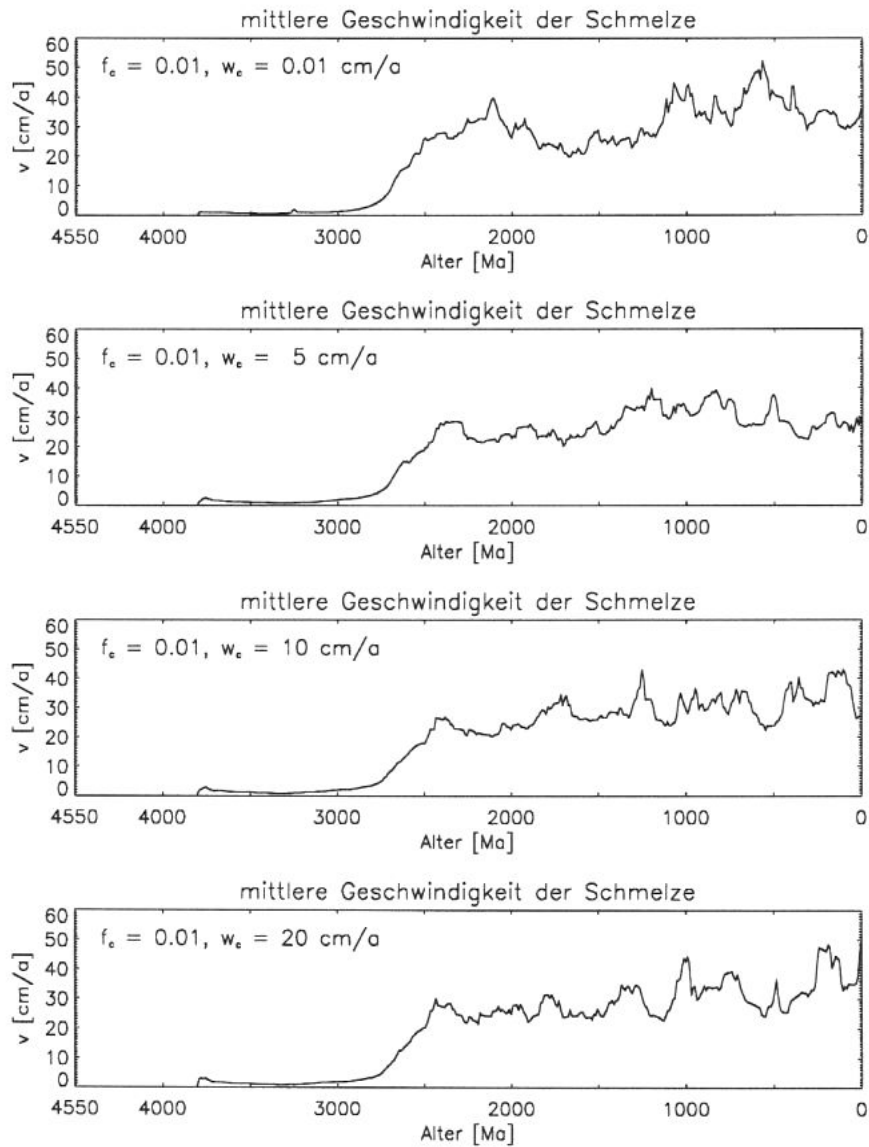


Abbildung 5.17: Veränderungen des Parameters w_c haben geringen Einfluß auf das Verhalten der anderen Größen. Der Einfluß auf die Schmelzgeschwindigkeit wird in den unterschiedlichen Grafiken dargestellt. Obwohl sich der zeitliche Verlauf in Abhängigkeit vom gewählten Parameter im Detail unterscheidet, verhält sich der prinzipielle Kurvenverlauf stabil.

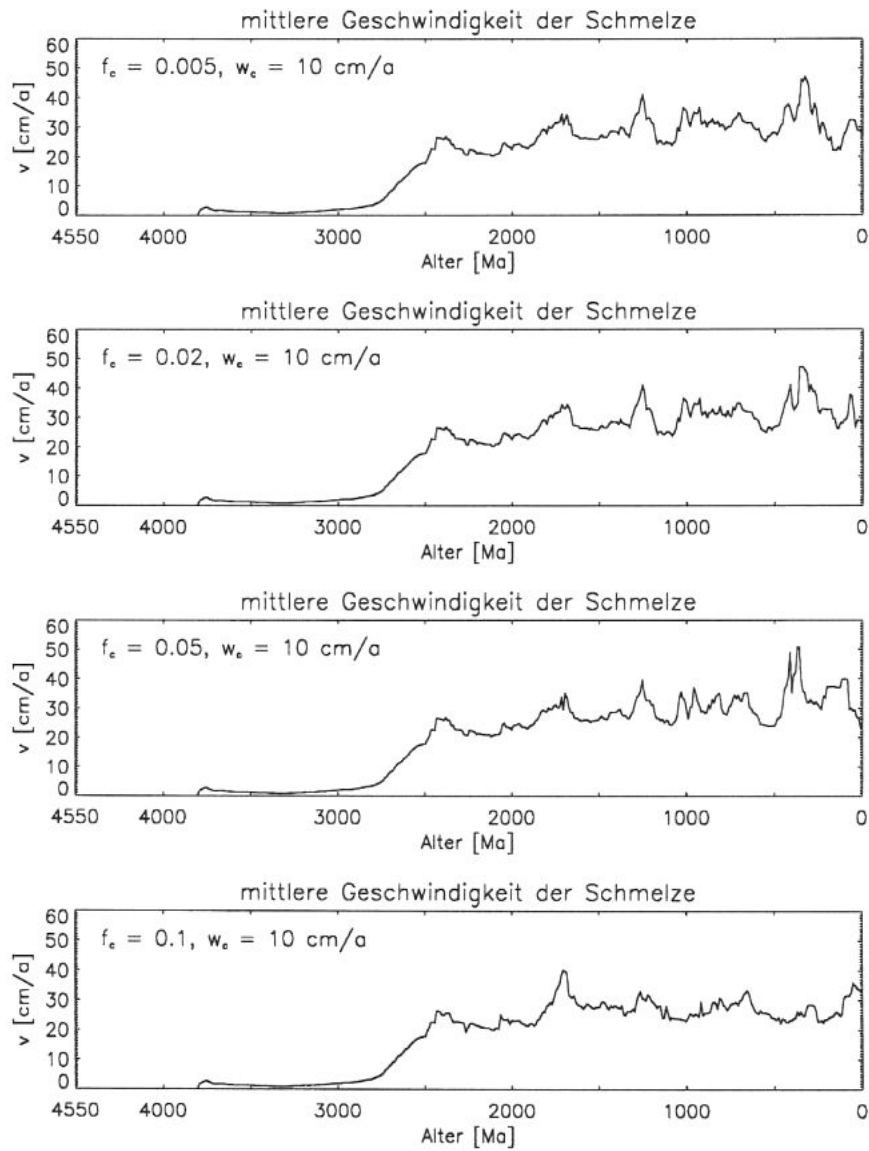


Abbildung 5.18: Darstellung der mittleren Geschwindigkeit der Schmelze bei verschiedenen Werten für den Parameter f_c . Analog zum Parameter w_e ist der prinzipielle Kurvenverlauf stabil.

Kapitel 6

Diskussion und Schlußfolgerungen

Die Konvektion im Erdmantel spielt eine wesentliche Rolle bei der thermischen, geochemischen und geologischen Entwicklung der Erde. Im Unterschied zu anderen Modellen der Erdevolution [Christensen, 1985] wird nicht parameterisierte Konvektion benutzt, sondern ein geschlossener geodynamischer Ansatz.

Dieser beruht auf den Erhaltungsgleichungen der Energie, des Impulses, der Masse und der Atomzahlen der für die innere Heizung wichtigsten Radionuklide. Aus der Beschreibung der Konvektion durch eine Zweiphasenströmung ergibt sich eine inhomogene Verteilung der Wärmequellen. Diese Methode ermöglicht die Aufstellung wesentlich realistischerer Modelle.

Das prinzipielle Ziel dieser Arbeit war das Studium des Einflusses einer Zweiphasenströmung und eines einfachen chemischen Segregationsmechanismus auf die Entwicklung des Erdmantels. Die Berechnungen basieren auf einer realistischen Verteilung der Anteile der für die Wärmeproduktion hauptverantwortlichen Elemente. Diese Verteilung ändert sich durch die thermische Mantelkonvektion und die chemische Segregation im Laufe der Erdgeschichte. Es bildet sich ein an Radionukliden verarmter oberer Mantel.

Die Aktivierungsenthalpie einer stark temperaturabhängigen Viskosität wurde mit Hilfe folgender Schmelzpunktkurven berechnet: nach Ito & Takahashi (1987) für den oberen Mantel, für den oberen Teil des unteren Mantels nach Heinz & Jeanloz (1987) und für die mittleren und unteren Teile des unteren Mantels nach Knittle & Jeanloz (1989). Die letzten beiden wurden bestimmt durch die Anwendung auf Perovskit.

Natürlich kann keine *exakte* Übereinstimmung mit signifikanten geologischen Beobachtungen erzielt werden. Dazu ist das Modell eine zu starke Vereinfachung.

Die innere Heizung, die starke nichtlineare Abhängigkeit der Viskosität von der Temperatur, die Konvektion durch eine Zweiphasenströmung und der beschriebene Segregationsmechanismus sind wesentlich für das Modell.

Zur numerischen Realisierung des geophysikalischen Modells wurde ein 5000 Programmzeilen umfassendes, anspruchsvolles Programm in Fortran90 entwickelt. Durch die Benutzung dieses relativ neuen Compilers wurde eine wesentliche Effizienzsteigerung bei der eigentlichen Berechnung und eine höhere Rechengenauigkeit erzielt.

Die Einbeziehung der Theorie der freien Randprobleme bei der numerischen Umsetzung des geophysikalischen Modells führte zu einer weiteren Verbesserung der Wirksamkeit der Berechnung. Durch die Anwendung dieser Theorie besteht die Möglichkeit, daß bei der Berechnung der physikalischen Größen in den Schmelzbereichen man sich auf diese Gebiete beschränken kann. Dies führt im Vergleich zur Berechnung im gesamten Rechengebiet zu einer Verringerung der Rechenlast um einen Faktor von 3 bis 5.

Erst hierdurch ist es möglich, die Zweiphasenströmung im Erdmantel in einer realistischen Rechenzeit zu modellieren und trotzdem so viele Informationen in die Berechnung zu stecken, daß die Ergebnisse mit beobachtbaren geophysikalischen und geologischen Werten in vernünftiger Übereinstimmung stehen.

Im Unterschied zur Vorgabe des Modells [Walzer, 1995] wurden Vereinfachungen (s. Kapitel 4) vorgenommen, um einerseits numerische Unzulänglichkeiten auszuschließen und die Rechenzeit in einem für die Modellierung notwendigen Rahmen zu halten. Andererseits sollten die eingehenden physikalischen Größen auch die eigentliche Geophysik und speziell die Zweiphasenströmung möglichst realistisch beschreiben können. Auf die zahlreichen Testläufe mit geänderten Parameterwerten und geänderten Programmcode zur Erreichung dieses Ziels kann aufgrund des enormen Umfangs im Rahmen dieser Arbeit nicht eingegangen werden. Es sei jedoch erwähnt, daß der Weg bis zum Erhalt eines akzeptablen Referenzmodells äußerst kompliziert und zeitaufwendig war. Das berechnete Referenzmodell liefert jedoch, unter Berücksichtigung der eingegangenen Werte und deren Umfang, sehr gute Ergebnisse für das Modell einer Konvektion durch Zweiphasenströmung.

Mit dem Modell können realistische Verteilungen für die Temperatur, die Viskosität und die Geschwindigkeiten berechnet werden. Diese Größen sind im Modell weder zeitlich noch örtlich konstant, sondern entwickeln sich dynamisch. Die temperatur- und druckabhängige Scherviskosität übt einen großen Einfluß auf die Verteilung und die Stärke der Geschwindigkeiten aus.

Der Wärmestrom an der Oberfläche des Modells hat eine akzeptable Nähe zum realen Wärmestrom an der Erdoberfläche. Ein langsamer Rückgang des gemittelten Wärmeflusses an der Modelloberfläche vom Archaikum zum Proterozoikum und Phanerozoikum konnte aufgezeigt werden.

Es entsteht ein an den für die Wärmeproduktion hauptverantwortlichen Elementen verarmter oberer Erdmantel. Das Wachstum eines verarmten oberen Mantels beeinflußt das Verhalten der thermischen Mantelkonvektion und die Evolution der einzelnen Bereiche des Erdmantels.

Der Einfluß der Variation der Parameter wurde am Beispiel der Geschwindigkeit der Schmelze, als einer der empfindlicheren Größen, untersucht. Es konnte gezeigt werden, daß leichte Änderungen von Parametern des aufgestellten Modells nicht zu elementaren Störungen führen und der physikalische

Mechanismus stabil funktioniert.

Abschließend soll ein Vergleich der berechneten Resultate mit den Ergebnissen anderer Autoren, die die thermische und geochemische Entwicklung der Erde modellierten, erfolgen. Im Unterschied zu einem aktuellen Modell [Walzer & Hendel, 1999] der chemischen Fraktionierung und der thermischen Konvektion wird im vorliegenden Modell die horizontale Geschwindigkeitskomponente in der Tiefe der 660 *km*-Diskontinuität heuristisch auf Null gesetzt und so eine zweischichtige Mantelkonvektion erzwungen. Dies wurde zwar durch andere Modelle [Walzer & Hendel, 1997b] als akzeptable Vereinfachung belegt, jedoch kann die im aktuellen Modell [Walzer & Hendel, 1999] gezeigte Verarmung auch von oberen Teilen des unteren Mantels auf diese Weise nicht modelliert werden. Auch die Bildung einer frühen Lithosphäre und die Entwicklung von Kontinenten und die damit verbundenen Rückkopplungsmechanismen werden im vorliegenden Modell nicht realisiert. Der Schwerpunkt liegt im wesentlichen in der Untersuchung der Wirkungen einer echten Zweiphasenströmung auf die Konvektion im Erdmantel. Die Konvektion durch eine Zweiphasenströmung liefert vergleichbare Ergebnisse, wie das vorgenannte Modell. Die ähnlichen Ergebnisse bei den berechneten Verteilungen der Temperatur, der Viskosität und der Geschwindigkeiten belegen dies.

Ein anderes Modell [Schmeling & Bussod, 1996] befaßt sich mit der Entstehung partieller Schmelze in der kontinentalen Asthenosphäre. Dabei wird eine nichtnewtonsche Rheologie für Olivin, in Abhängigkeit von Temperatur und Druck, angenommen. In diesen Modell bewegt sich der Schmelzanteil zwischen 0 und 2% bei einer trockenen Soliduskurve und zwischen 2 und 4% bei einem mit Wasser gesättigten Solidus. Die im vorliegenden Modell berechneten Porositätswerte stehen zu diesen Werten nicht im Widerspruch. Obwohl ein wesentlich einfacheres Viskositätsgesetz benutzt wird, liegen die berechneten Porositätswerte zwischen 0 und 3 %.

Diese Vergleiche zeigen, daß das erstellte Modell inklusive der numerischen

und programmtechnischen Realisierung sehr gute Ergebnisse für eine Konvektion durch Zweiphasenströmung liefert. Das bedeutet, daß die Aufgabe der Behandlung einer Zweiphasenströmung unter wesentlich realistischeren Bedingungen zu einem positiven Abschluß gebracht wurde. Natürlich könnte das Modell auf diesen Ergebnissen aufbauend in vielen Ansätzen erweitert werden.

Die Einführung eines komplizierteren Viskositätsgesetzes könnte zu weiteren Verbesserungen in der Modellierung führen. Weiterführende Modelle sollten sich durch eine möglichst realistische Rheologie auszeichnen. In ersten Tests könnte die Viskositätsberechnung nach Gleichung (4.4) durch

$$\eta_{\lambda} = \eta_{0\lambda} \cdot \left(\frac{E_{0\lambda} + V_{0\lambda} \cdot p_{dim}}{R \cdot T_{dim}} \right) \quad (6.1)$$

ersetzt werden. In dieser Gleichung ist $E_{0\lambda}$ die Aktivierungsenergie und $V_{0\lambda}$ das Aktivierungsvolumen, wobei der Index λ für durch Phasengrenzen getrennte Teile des Mantels steht.

Die Werte beider Größen können, was die Asthenosphäre betrifft, aus Riedel und Karato (1997) genommen werden. Der dimensionsbehaftete Druck p_{dim} stammt aus PREM [Dziewonski & Anderson, 1981]. Als grobe erste Näherung kann zunächst ein einheitliches Viskositätsgesetz für den gesamten Mantel angenommen werden, jedoch mit zwei Ausnahmen. Wegen der hohen Formsteife von Granat in der Übergangsschicht wird der Faktor $\eta_{\lambda 0}$ dort höher abgeschätzt als im restlichen Hauptanteil des Mantels und es wird eine konstante Viskosität in der Lithosphäre angenommen.

Ein weiterer Ansatz der Verbesserung des Modells ist die realistischere Beschreibung des Schmelzverhaltens, durch die Einbeziehung neuerer Erkenntnisse über Abhängigkeiten der geochemischen Verteilungskoeffizienten. Hierbei soll die Konzentrationen der für die Heizung der Erde hauptverantwortlichen Elemente ^{238}U , ^{235}U , ^{232}Th und ^{40}K nicht festgelegt werden. Statt dessen sollen sie aus den Verteilungskoeffizienten von Schritt zu Schritt in Abhängigkeit vom SiO_2 -Gehalt bestimmt werden. Hierbei besteht

die Möglichkeit, die Werte für die Verteilungskoeffizienten aus relevanten geochemischen Veröffentlichungen zu übernehmen und die physikalischen Abhängigkeiten in das Konvektionsmodell einzubauen. Dabei wird der Algorithmus bezüglich der Entwicklung der Schmelze weiter verfeinert.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Struktur und Verteilung von Schmelze in Abhängigkeit vom Benetzungswinkel	7
3.1	Finite Differenzendarstellung in 1D	23
3.2	Einige symmetrische und asymmetrische Differenzenquotienten 2. und 4.Ordnung	24
3.3	Virtuelle Gitterpunkte zur Berechnung des Wertes einer biharmonischen Funktion in einem inneren Punkt (<i>Kreisring</i>).	26
3.4	Oszillation bei Advektions-Problemen	29
3.5	Darstellung eines Berechnungsgebietes mit freien Rand	32
3.6	Bitfolge bei freien Randwertproblemen	33
3.7	Darstellung zulässiger und unzulässiger innerer Punkte	35
4.1	Die Schmelztemperatur im Mantel	40
4.2	Darstellung des freien Randes zwischen Gebieten ohne und mit Schmelzanteil.	43
4.3	Randbedingungen für die Berechnung der Matrixströmung	46
4.4	Grobstruktur des Programms	50

5.1	Zeitliche Entwicklung der dimensionslosen Geschwindigkeit v_{rms} und der dimensionslosen Nußeltzahl Nu	53
5.2	Temperatur- und Strömungsfelder zum Blankenbach-Benchmark Fälle 1a-1c	54
5.3	Temperatur- und Strömungsfeld im stationären Endzustand beim Fall 2b	56
5.4	Zeitlichen Entwicklung der Temperatur und des oberen Wärmestroms (<i>Referenzmodell</i>)	58
5.5	Zeitliche Entwicklung der Matrix- und Schmelzgeschwindigkeit (<i>Referenzmodell</i>)	59
5.6	Zeitliche Entwicklung des T-Feldes (<i>Referenzmodell</i>)	60
5.7	Viskosität-Tiefen-Profil (<i>Referenzmodell</i>)	61
5.8	Zeitliche Entwicklung des η -Feldes (<i>Referenzmodell</i>)	62
5.9	Zeitliche Entwicklung des ψ -Feldes (<i>Referenzmodell</i>)	63
5.10	Zeitliche Entwicklung des ^{238}U -Feldes (<i>Referenzmodell</i>)	64
5.11	Zeitliche Entwicklung des ^{232}Th -Feldes (<i>Referenzmodell</i>)	65
5.12	Zeitliche Entwicklung der Porosität (<i>Referenzmodell</i>)	66
5.13	Wärmestrom, Porosität und Konzentrationsverteilung im Alter von 3.5 Ga (<i>Referenzmodell</i>)	67
5.14	Wärmestrom, Porosität und Konzentrationsverteilung im Alter von 1.5 Ga (<i>Referenzmodell</i>)	68
5.15	Wärmestrom, Porosität und Konzentrationsverteilung im Alter von 0.1 Ga (<i>Referenzmodell</i>)	69
5.16	Variationen des Parameters k_8	71
5.17	Variationen des Parameters w_c	73
5.18	Variationen des Parameters f_c	74

Tabellenverzeichnis

2.1	Übersicht über die verwendeten Größen	13
2.2	Isotopenwerte	17
5.1	Variablen und Referenzwerte des Blankenbachbenchmarks . . .	52
5.2	Ergebnisse des Blankenbach-Benchmark	55

Literaturverzeichnis

- Akaogi, M. & Ito, E., 1993. *Refinement of enthalpy measurement of MgSiO₃ perovskite and negative pressure-temperature slopes for perovskite-forming reactions*, Geophys. Res. Lett, 20, 1839-1842
- Anderson, J.D., 1992. *Discretisation of partial differential equations*, Computational fluid dynamics, Berlin: Springer, 85-100
- Bear, J., 1988. *Dynamics of fluids in porous media*, New York: Dover, 764 S.
- Beeré, W., 1975. *A unifying theory of the stability of penetrating liquid phases and sintering pores*, Acta Metall. 23, 131-138
- Bittner, D., 1995. *Numerische Modellierung von Schmelzprozessen und induziertem Diapirismus in der Unterkruste*, Dissertation, Aachen: Verlag Shaker, 133 S.
- Blankenbach, B., Busse, F., Christensen, U., Cserepes, L., Gunkel, D., Hansen, U., Harder, H., Jarvis, G., Koch, M., Marquart, G., Moore, D., Parsons, B., Schmeling, H. und Schnaubelt, T., 1989. *A benchmark comparison for mantle convection codes*, Geophys. J. Internat. 98, 38-69
- Braun, M., 1994. *Differentialgleichungen und ihre Anwendungen* Berlin: Springer, 596 S.

- Bulau, J.R., Waff, H.S. & Tyburczy, J.A., 1979. *Mechanical and thermodynamic constraints on fluid distribution in partial melts*, J. Geophys. Res. 84, 6102-6108
- Bussod, G.Y. & Christie, J.M., 1987. *Experimentally deformed lherzolite at hypersolidus conditions: an experimental example of diffusion-controlled power-law creep*, Int. Union Geod. Geophys. Comptes Rendus 19th Assembly, 196
- Bussod, G.Y. & Christie, J.M., 1991. *Textural development and melt topology in spinel lherzolite experimentally deformed at hypersolidus conditions*, J. Petrol., 32, 17-39
- Cheadle, M.J., 1989. *Properties of texturally equilibrated two phase aggregates*, Ph.D. thesis, University of Cambridge
- Chen, S., Johnson, D. & Raad, P., 1991. *Computational Modelling of Free and Moving Boundary Problems*, de Gruyter, 223-235
- Christensen, U.R., 1985. *Thermal evolution models for the Earth*, J. geophys. Res., 90, 2995-3007
- Christensen, U.R., Olson, P. & Glatzmeier, G., 1999. *Numerische Dynamomodelle: Eine Parameterstudie*, Vortrag MA02, 59. Jahrestagung der DGG, Braunschweig, S. 137
- DeVries, P.L., 1995. *Computerphysik*, Heidelberg: Spektrum Akademischer Verlag, 432 S.
- Dziewonski, A.M. & Anderson, D.L., 1981. *Preliminary reference Earth model*, Phys. Earth Planet. Int., 25, 297-356

- Foley, S.F., 1997. *Die Geometrie und Extrahierbarkeit partieller Schmelzen und Fluidphasen in ultramafischen Gesteinen*, SFB 468, Göttingen, <http://www.uni-geochem.gwdg.de/sfb/tpc-4s.htm>
- Griebel, M., Dornseifer, T. & Neinhoeffer, T., 1995. *Numerische Simulation in der Strömungsmechanik* Braunschweig, Wiesbaden: Vieweg, 219 S.
- Goering, H., Roos, H.-G., Tobiska, L., 1993. *Finite-Element-Methode*, Berlin: Akademie-Verlag, 252 S.
- Hackbusch, W., 1986. *Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen*, Stuttgart: Teubner Studienbücherei, 276 S.
- Harte, B., Hunter, R.H. & Kinny, P.D., 1993. *Melt geometry and mantle metasomatism*, Phil. Trans. Roy. Soc. London A 342, 1-21
- Heinz, D.L. & Jeanloz, R., 1987. *Measurement of the melting curve of $Mg_{0.9}Fe_{0.1}SiO_3$ at lower mantle conditions and its geophysical implications*, J. geophys. Res., 92, 11.437-11444
- Hirt, C., Nichols, B. & Romero, N., 1975. *SOLA - A Numerical Solution Algorithm for Transient Fluid Flows*, Technical report, Los Alamos Scientific Lab. Rep. LA-5852
- Hirth, G. & Kohlstedt, D.L., 1996. *Water in the oceanic upper mantle: implications for rheology, melt extraction, and the evolution of the lithosphere* Earth Planet. Sci. Lett. 144 93-108
- Ichihara, M. & Ida, Y., 1998. *Effect of lateral migration of melt on chemical compositions: Implications for the local variations of mid-ocean ridge basalts*, J. Geophys. Res. 103, 20.949-20.962
- Ito, E. & Takahashi, E., 1987. *Melting of peridotite at uppermost lower-mantle conditions*, Nature, 328, 514-517

- Karato, S. & Wu, P., 1993. *Rheology of the upper mantle: a synthesis*, Science, 260, 771-778
- Karrenbach, M., 1996. *Modeling physical systems: wave propagation by FD examples*, Karlsruhe University, 106 S.,
<http://www-gpi.physik.uni-karlsruhe.de/pub/martin/>
- Kenyon, P.M., 1990. *Trace element and isotopic effects arising from magma migration beneath mid-ocean ridges*, Earth Planet. Sci. Lett., 101, 367-378
- Knittle, E. & Jeanloz, R., 1989. *Melting curve of (Mg, Fe)SiO₃ perovskite to 96 GPa: evidence for a structural transition in lower mantle melts*, Geophys. Res. Lett., 16, 421-424
- Kohlstedt, D.L., 1992. *Structure, rheology and permeability of partially molten rocks at low melt fraction*, Geophys. Monogr. Scr., 71, 103-121
- Koonin, S.E., 1986. *Computational Physics*, Menlo Park, Cal.: The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., 271 S.
- Koonin, S.E., & Meredith, D.C., 1990. *Computational Physics - Fortran Version*, Reading, Mass.: Addison-Wesley Publishing Company, 635 S.
- Langmuir, C.H., Klein, E.M. & Plank, T., 1992. *Petrological systematics of mid-ocean ridge basalts: Constraints on melt generation beneath ocean ridges*, Geophys. Monogr. Scr., 71, 183-280
- Lliboutry, L.A., 1987. *Very Slow Flows of Solids*, Dordrecht: Martinus Nijhoff Publishers, 510 S.
- McKenzie, D.P., 1984. *The generation and compaction of partially molten rock*, J. Petrol. 25, 713-765

- McKenzie, D.P. & Bickle, M.J., 1988. *The volume and composition of melt generated by extension of the lithosphere*, J. Petrol. 29, 625-679
- Oliver, I., 1994. *Programming classics*, New York: Prentice Hall, 386 S.
- Ozawa, K. & Shimizu, N., 1995. *Open-system melting in the upper mantle: Constraints from the Hayachine-Miyamori ophiolite, northeastern Japan*, J. Geophys. Res. 100, 22.315-22.335
- Patankar, S.V., 1980. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Taylor & Francis
- Peaceman, D. & Rachford, H., 1955. *The numerical solution of parabolic and elliptic differential equations*. J.Soc.Indus.Appl.Math. 3, 28-41
- Peyret, R. & Taylor, T., 1983. *Computational Methods for Fluid Flow*, Berlin: Springer, 467 S.
- Pollack, H.N., Hurter, S.J. & Johnson, J.R., 1993. *Heat flow from the Earth's interior: analysis of the global data set*, Rev. Geophys., 31, 267-280
- Quarteroni, A. & Valli, A., 1994. *Numerical Approximation of Partial Differential Equations*, Berlin, Heidelberg: Springer, 543 S.
- Ranalli, G., 1991. *The microphysical approach to mantle rheology*, in *Glacial Isostasy, Sea Level and Mantle Rheology*, Ed.: Sabadini, R., Lambeck, K. & Boschi, E., Dordrecht: Kluwer Academic, 343-378
- Richter, W., 1986. *Numerische Lösung partieller Differentialgleichungen mit der Finiten-Elemente-Methode*, Wiesbaden: Vieweg, 281 S.
- Riedel, M.R. & Karato, S.-I., 1997. *Grain-size evolution in subducted oceanic lithosphere associated with olivine-spinel transformation and its effects on rheology*, Earth Planet. Sci. Lett., 148, 27-43

- Roache, P.J., 1976. *Computational Fluid Dynamics*, Albuquerque: Hermosa, 648 S.
- Schmeling, H., 1996. *Numerische Methoden in der Geophysik*, Universität Bayreuth, Vorlesung
- Schmeling, H. & Bussod, G.Y., 1996. *Variable viscosity convection and partial melting in the continental asthenosphere*, J. Geophys. Res. 101, 5411-5423
- Schmeling, H. & Marquart, G., 1993. *Mantle flow and the evolution of the lithosphere*, Phys. Earth planet. Inter., 79, 241-267
- Schott, B., 1998. *Delamination und Abriß der orogenen Lithosphärenwurzel und deren Bedeutung für die Orogenese der Varisciden und des Himalaya* Dissertation, Aachen: Shaker Verlag, 83 S.
- Schwarz, H.R., 1991. *Methode der finiten Elemente*, Stuttgart: Teubner Studienbücherei, 436 S.
- Schwarz, H.R., 1991. *Fortran-Programme zur Methode der finiten Elemente*, Stuttgart: Teubner Studienbücherei, 224 S.
- Spiegelman, M., 1993. *Physics of melt extraction: theory, implications and applications*, Phil. Trans. Roy. Soc. London A 342, 23-41
- Spiegelman, M., 1996. *Geochemical consequences of melt transport in 2-D: The sensitivity of trace elements to mantle dynamics*, Earth Planet. Sci. Lett., 139, 115-132
- Spiegelman, M., & Elliott, T., 1993. *Consequences of melt transport for uranium series disequilibrium in young lavas* Earth Planet. Sci. Lett., 118, 1-20

Stacey, F.D., 1992. *Physics of the Earth*, 3rd edn., Brookfield Press, Brisbane, 513 S.

Tome, M., & McKee, S., 1994. *A computational marker and cell method for free surface flows in general domains*, J.Comp.Physics 110, 171-186

Walzer, U., 1995. *Zweiphasenströmung mit Entfernen der radioaktiven Quellen aus der Schmelze in der Nähe der oberen Grenze*, schriftliche Aufgabenstellung, T130-T140

Walzer, U. & Hendel, R., 1997a. *Tectonic episodicity and convective feedback mechanisms*, Phys. Earth Planet. Int. 100, 167-188

Walzer, U. & Hendel, R., 1997b. *Time-dependent thermal convection, mantle differentiation and continental-crust growth*, Geophys. J. Int. 130, 303-325

Walzer, U. & Hendel, R., 1999. *A new convection-fractionation model for the evolution of the principal geochemical reservoirs of the Earth's mantle*, Phys. Earth Planet. Int. 112, 211-256

Wendt, J.F., 1992. *Computational fluid dynamics*, Heidelberg: Springer, 302 S.

Zahorski, S., 1982. *Mechanics of viscoelastic fluids*, Dordrecht: Martinus Nijhoff Publ.

Danksagung

Ich möchte allen danken, die mich bei meiner Arbeit in den letzten Jahren unterstützten.

Prof. Uwe Walzer stellte mir ein überaus interessantes Thema zur Verfügung. Seine Betreuung und stete Bereitschaft zur Diskussion waren eine solide Basis für die Durchführung dieser Arbeit. Seine aufmunternden Hinweise halfen mir über nicht wenige schwierige Passagen hinweg. Dafür danke ich ihm herzlich. Bei Dr. Thomas Burghardt und Dipl.-Math. Roland Hendel möchte ich mich für die gute Zusammenarbeit und viele Diskussionen über numerische Probleme und programmtechnische Fragen bedanken.

Alle Mitglieder der Arbeitsgruppe Geodynamik waren für mich in den unterschiedlichsten Fragen lehr- und hilfreich. Für das gute Arbeitsklima und die interessanten fachlichen Diskussionen danke ich ihnen, sie haben damit zum Gelingen der Arbeit wesentlich beigetragen. Besonders bedanken möchte ich mich bei Dipl.-Math. Birgit Fechtner, Dipl.-Phys. Klaus Gottschaldt, Dipl.-Geophys. Sigward Funke, Dipl.-Phys. Clemens Schmitz und Dipl.-Geophys. Steffen Abe.

Prof. Wolfgang R. Jacoby und Prof. Gerhard Jentzsch danke ich für ihre Bemühungen als Zweitgutachter.

Bei meiner Frau und meiner Tochter bedanke ich mich besonders. Sie haben mich in den letzten Jahren begleitet und damit entscheidend dazu beigetragen, daß diese Arbeit einen erfolgreichen Abschluß fand.

Lebenslauf

Norbert Gründer

22.10.1965 geboren in Berlin-Pankow als Sohn von Helga und Erhard
Gründer

1972-1980 Besuch der Polytechnischen Oberschule in Berlin-Mitte

1980-1984 Besuch der Erweiterten Oberschule in Berlin-Mitte
Abschluß: Abitur

1984-1987 Wehrdienst

1987-1992 Studium der Mathematik an der TU Freiberg

1992 Diplom im Fach Mathematik, Titel der Diplomarbeit:
Parametrische Transportoptimierung

1993-1994 Weiterbildung und Arbeit als Organisationsprogrammierer

seit 1995 wissenschaftlicher Mitarbeiter bei Prof. U. Walzer am Insti-
tut für Geowissenschaften der Universität Jena, im Fachbereich
Geodynamik

Ich bin seit 1990 mit Dorit Gründer, geb. Kluge, verheiratet. Meine Tochter
Anne-Kathrin wurde im selben Jahr geboren.

Jena, 04.06.1999

Selbständigkeitserklärung

Ich erkläre, daß ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Hilfsmittel und Literatur angefertigt habe.

Jena, 04.06.1999