

Ein Kontinuumsmodell zur Beschreibung der Mikrostrukturausbildung bei der Versiegelung von Brüchen in Gesteinsadern

Britta Nestler, Michael Selzer, Frank Wendler

Institut für Angewandte Forschung, Hochschule Karlsruhe
Moltkestraße 30, D 76133 Karlsruhe

britta.nestler@hs-karlsruhe.de, michael.selzer@hs-karlsruhe.de, frank.wendler@hs-karlsruhe.de

Zusammenfassung:

Mit Hilfe einer Kontinuumsmodellierung werden die Mechanismen der Bruchversiegelung in Geomaterialien analysiert. Simulationen ermöglichen die Beschreibung des von den Wänden eines Bruches ausgehenden polykristallinen Wachstums in einer Gesteinsader und die Klassifikation der auftretenden faser- und blockartigen Kornmorphologien. In numerischen Berechnungen wird der Einfluss der Dynamik der sich während der Bruchbildung bewegenden und scherenden Risswände auf die Mikrostrukturausbildung der in den Rissen nachwachsenden Körner untersucht. Für isotrope und anisotrope Korngrenzen wird ein Prozess aus mehrfach hintereinander auftretenden Bruchbildungen und Versiegelungen modelliert. Die Ergebnisse zeigen, dass die sich bildenden Korngrenzen der Bewegung der Bruchwand bei der Scherung folgen und die Tendenz besitzen, auf die Spitzen der gegenüber liegenden Bruchprofile zuzuwachsen. Der Kristallisationsprozess wird für verschiedene Wandgeometrien, Bruchprofile, Anfangskornverteilungen, Anisotropien und Bruchbildungsszenarien simuliert und die entstehende Mikrostrukturen werden charakterisiert.

1 Einleitung

Gesteinsadern sind klar getrennte, polykristalline Kornbereiche, die aus Mineralien bestehen und sich aus einer übersättigten, wässrigen Lösung in einem Bruch gebildet haben. In diesen aderförmigen Bereichen einer Gesteinsprobe wird z.B. in Beeler (1997), Bons (1997), Hilgers (2000) eine Vielzahl von Mikrostrukturen wie z.B. faserige oder blockartige Texturen beobachtet, Abb. 1. Die verschiedenen Formen und Morphologien resultieren aus unterschiedlichen Mechanismen der Strukturbildung. Der Materialtransport in einem Bruch wird durch Diffusion, Advektion und Strömung angetrieben. Die Adern enthalten geschichtliches Datenmaterial über Deformationsprozesse, die auf einer großen Zeitskala stattgefunden haben. Die Kenntnis der Morphologien und der Strukturbildung geben Aufschluss über Vorgänge in Gesteinsschichten, die in der Vergangenheit stattgefunden haben. Aufgrund der langzeitigen Entwicklungen in Gesteinen und der dadurch bedingten, eingeschränkten experimentellen Analysemöglichkeiten sind Computersimulationen von der polykristallinen Kornstrukturentwicklung in einer Gesteinsader geeignet, zum Verständnis der Prozessabläufe und Einflussgrößen beizutragen (Jessell (2004)). In diesem Artikel wird ein sich bereits für materialwissenschaftliche Anwendungen bewährtes Kontinuumsmodell zur Simulation der Mikrostrukturausbildung in

Gesteinsadern eingesetzt. Insbesondere werden blockartige Strukturen und länglich ausgedehnte Kornformen, die sich durch wiederholte Bruchbildung und anschließende Versiegelung bilden, numerisch berechnet.

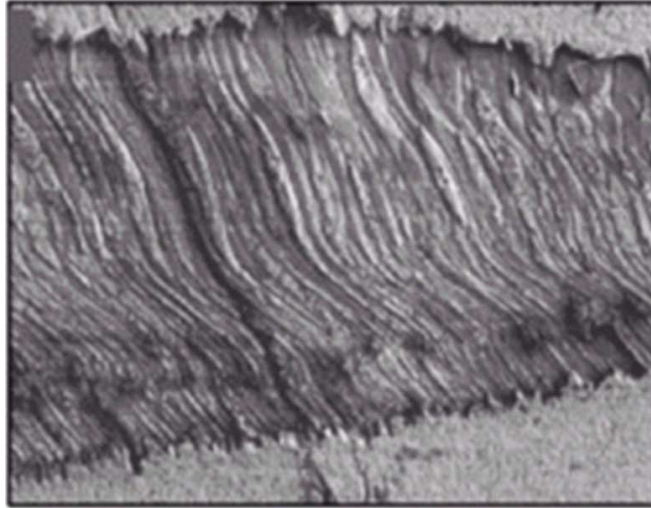
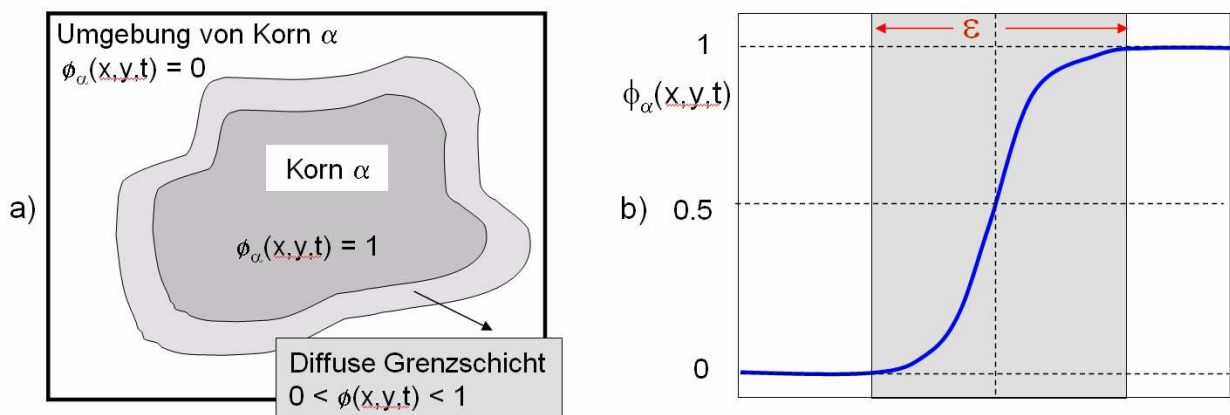


Abbildung 1. Nach dem Auftreten eines Bruches bilden sich an der Bruchwand Kristallkeime, die in den Bruch hineinwachsen und ihn wieder versiegeln (aus der Dissertation von Hilgers (2000)).

2 Kontinuumsmodell

Zur Formulierung des Kontinuumsmodells wird für jedes Korn und für die Flüssigphase ein Ordnungsparameter $\phi_\alpha(x,y,t)$ definiert. Der Satz an Ordnungsparametern beschreibt zu jedem Zeitpunkt t und an jedem Ort (x,y) den Zustand des Systems. Die Flüssigphase wird mit $\alpha=N$ indiziert. $\phi_\alpha(x,y,t)=1$ gibt die numerischen Zellen an, in denen das Korn α vorliegt. In der Umgebung von Korn α ist der entsprechende Ordnungsparameter $\phi_\alpha(x,y,t)=0$. Bei der Kontinuumsmodellierung werden die Bereiche an den Korngrenzen durch glatte, kontinuierliche Übergänge beschrieben, die sich über eine diffuse Grenzschicht der



Dicke ϵ erstrecken (Abb. 2).

Abbildung 2. Diffuses Grenzflächenprofil des Ordnungsparameters $\phi_\alpha(x,y,t)$ mit der Breite ϵ . Die Schemazeichnung in a) zeigt eine zweidimensionale Ansicht eines Korns α , während in b) der kontinuierliche Übergang an der Korngrenze dargestellt ist.

Abhängig davon, welche weiteren Systemvariablen wie z.B. Konzentrationen oder Temperatur betrachtet werden sollen, basiert das Modell auf einem Energiedichtefunktional $F(\phi)$ oder Entropiefunktional $S(\phi)$. In der Arbeit Nestler (2005) wurde eine allgemeine Formulierung eines Kontinuumsmodells für mehrkomponentige und mehrphasige Systeme vorgestellt, die sich auch für die Anwendung auf polykristalline Korngefüge eignet. Ohne Berücksichtigung von Masse- und Wärmediffusion hängt das Energiedichtefunktional nur von dem

$$F(\phi) = \int_V \varepsilon a(\phi, \nabla \phi) + \frac{1}{\varepsilon} w(\phi) + f(\phi) dV$$

vektoriellen Ordnungsparameter $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_N)$ ab und hat die Form

wobei ε die Breite der diffusen Grenzschicht ist. Die Beiträge $a(\phi, \nabla \phi)$ und $w(\phi)$ sind Grenzflächenenergiedichten, die nur an den Korngrenzen auftreten. $f(\phi)$ ist eine Volumenenergiedichte, die die treibende Kraft für das Wachstum der Körner enthält. Mit $\nabla \phi$ ist der Gradient des vektoriellen Ordnungsparameters bezeichnet. Die expliziten Ausdrücke für die Energiedichten lauten

$$a(\phi, \nabla \phi) = \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} (\phi_\alpha \nabla \phi_\beta - \phi_\beta \nabla \phi_\alpha)^2$$

$$w(\phi) = 9 \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} \phi_\alpha^2 \phi_\beta^2$$

$$f(\phi) = m_\alpha \phi_\alpha$$

Durch die Doppelsummen werden die Energiebeiträge aller möglichen paarweisen Korngrenzen berücksichtigt. Der Parameter $\gamma_{\alpha\beta}$ ist die Grenzflächenenergiedichte der Korngrenze zwischen den Körnern α und β bzw. zwischen Korn α und der Flüssigphase, falls $\beta=N$. Bei anisotropen Grenzflächenenergien hängt $\gamma_{\alpha\beta}$ von der Orientierung der Korngrenze ab und besitzt Vorzugswachstumsrichtungen. m_α legt die treibende Kraft für das Wachstum von Korn α fest. Durch Variationsableitung wird aus dem Funktional ein gekoppelter Satz nichtlinearer, partieller Differentialgleichungen für die Ordnungsparameter hergeleitet:

$$\varepsilon \tau \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = - \frac{\delta F}{\delta \phi_\alpha} = \left(\frac{\partial F}{\partial \phi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial F}{\partial \nabla \phi_\alpha} \right)$$

Der zusätzliche Parameter τ ist ein kinetischer Koeffizient, der im allgemeinen Fall anisotrop und der für jede Korngrenze einzeln festgelegt werden kann.

Numerische Lösungsverfahren

Der Satz partieller Differentialgleichungen für die Ordnungsparameter ϕ_α wurde mit einem Finite-Differenzen-Verfahren diskretisiert und mit einem expliziten Zeitupdate (forward-Euler-Verfahren) auf einem regelmäßigen, rechteckigen Gitter numerisch gelöst. Das verwendete FCTS – Schema (forward in time, centered in space) konvergiert in den räumlichen Koordinaten mit zweiter und in der Zeit mit erster Ordnung. Bei der Implementierung in der Programmiersprache C wurde eine modulare Struktur angelegt, die die Anwendung zur Simulation einer Vielzahl experimenteller Strukturen und Versuchsszenarien erlaubt. Es können verschiedene Initialisierungen für die Korn- und Phasenverteilungen, für die Randbedingungen, für die physikalischen Parameter, für Anisotropien und Energieausdrücke konfiguriert werden. Zur Optimierung der Lösungsalgorithmen hinsichtlich Rechenzeit und Speicherbedarf wird ein adaptives Gitterverfahren verwendet, bei dem der Speicher dynamisch verwaltet wird und die Phasenfeldgleichungen nur im Bereich der diffusen Grenzschicht gelöst werden. In Bereichen der Kornvolumina ($\phi_\alpha=0$ oder $\phi_\alpha=1$) weisen die Zeiger für die ϕ_α -Variablen auf Einheitsvektoren.

Das Finite-Differenzen-Verfahren wurde durch eine Gebietszerlegung und durch MPI Routinen (Message Passing Interface Routines, MPI Forum (2006)) für Linux-Clustersysteme parallelisiert, bei denen einzelne Rechner (Knoten) durch eine Netzwerktechnologie verbunden sind. Die Verwendung der Message Passing Interface Bibliothek ist für verschiedene Programmiersprachen frei verfügbar und standardisiert. Um für Simulationen flexibel auch Mehrprozessorplattformen mit einem gemeinsamen Arbeitsspeicher (z.B. Dual-Core-Opteron-Prozessoren) optimal einsetzen zu können, wurde kombiniert zu der MPI Parallelisierung eine shared-memory-Parallelisierung mit OpenMP (Standard für Shared Memory Programmierung, OpenMP Forum (2006)) realisiert, bei der einzelne Schleifen verteilt berechnet werden.

Komplexe Simulationsaufgaben, die für große Rechengebiete konzipiert sind, werden in mehrere Teilaufgaben/Teilgebiete zerlegt und von einem Verbund zusammengefügter Recheneinheiten gemeinsam gelöst. Eine Herausforderung bei der Anwendung paralleler Ansätze besteht in der Zerlegung der Simulationsaufgabe, da gegenseitige Abhängigkeiten auftreten und bestimmte Prozeduren nicht aufgeteilt werden können. Da mit steigender Anzahl Knoten der Datentransfer und damit der Kommunikationsaufwand im Netz zunehmen, gibt es für ein konkretes Simulationsvorhaben ein Optimum für die Anzahl an Rechenknoten. Die Voraussetzung für einen effizienten Parallelisierungsansatz ist daher die genaue Analyse des numerischen Problems und eine optimierte Zerlegung in Teilprobleme, bei deren Lösung aufeinander abgestimmte Zeit und Rechenleistung benötigt werden. Das gewählte Softwaredesign bietet die Möglichkeit, sowohl beide Parallelisierungskonzepte getrennt als auch kombiniert anzuwenden. Zusammen mit den Optimierungen wurde die nötige Flexibilität für eine gut skalierende Anwendung erzielt, deren Einsatz nicht nur auf spezialisierte Hochleistungsrechner beschränkt ist. Beispielsweise sind Simulationen auf CIP-Pools mit nichttransparenten Gerätekonfigurationen bzw. wechselnder Auslastung möglich.

Parallelisierung mit MPI

Der Lösungsalgorithmus des Mikrostruktursimulators greift für jeden zu rechnenden Zeitschritt auf die Daten aus dem vorangegangenen Zeitschritt zurück. Die Berechnung der Feldvariablen in einem bestimmten Gitterpunkt benötigt außerdem nur die Werte der angrenzenden Zellen. Dies bedeutet, dass bei einer räumlichen Zerlegung des Rechengebiets jeweils eine Randfläche der Dicke einer Gitterzelle ausgetauscht werden muss. Das Simulationsgebiet wird in z-Richtung in quaderförmige Scheiben aufgeteilt. Jeder dieser Simulationsquader stellt eine Teilaufgabe dar und wird durch jeweils einen Knoten des Clusters abgedeckt. Die Situation ist in Abb. 3 schematisch dargestellt.

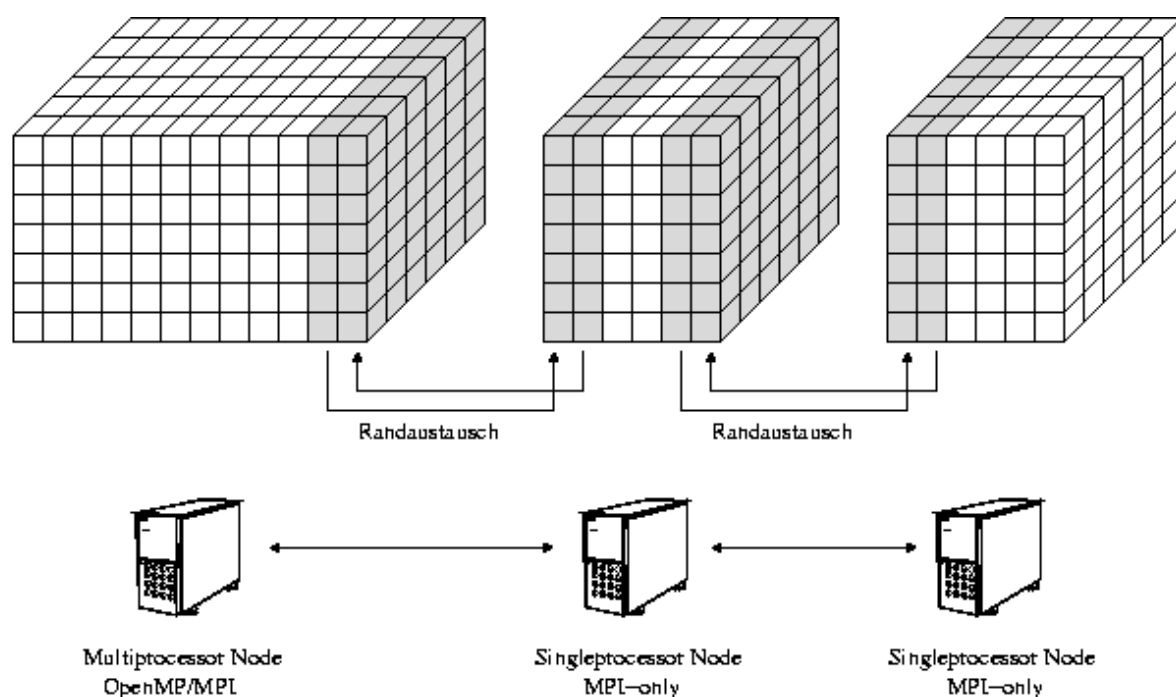


Abbildung 3. Gebietszerlegung und Datenaustausch bei der Parallelisierung des Simulationsverfahrens.

Obwohl die Simulation über die Dauer der Gesamtrechenzeit vollständig verteilt gerechnet werden kann, müssen nach einer festgesetzten Zahl an Zeitschritten alle Knoten ihren Datenbestand auf einem Masterknoten zusammenfügen, um einen kompletten Bilddatensatz zu einem bestimmten Zeitpunkt zu erzeugen. Dies ist nötig, um die Simulationsdaten in Echtzeit graphisch aufzubereiten und zu kontrollieren.

Eine weitere Anforderung liegt in der Anwendung des Programms auf asymmetrischen Rechnerverbünden mit Knoten unterschiedlicher Rechenleistung. Komplementär hierzu ist die Situation, dass bei einer Zerlegung in gleich große Rechengebiete einzelne Knoten mit einer wesentlich höheren Belastung konfrontiert sein können als andere. Eine Lösung hierfür ist die dynamische Aufteilung des Gebiets in unterschiedlich große Teilgebiete während der Simulation. Um diese zeitaufwendige Umverteilung effektiv zu gestalten, wird für eine definierte Zahl an Zeitschritten die individuelle Rechendauer pro Knoten ermittelt und eine Statistik erstellt. Anhand dieser Daten wird den stark ausgelasteten Knoten ein kleineres

Teilgebiet und den Knoten, die dagegen in Warteposition stehen, ein größeres Gebiet zugewiesen. Dieser parallel zur Simulation ablaufende Mechanismus ist vollständig adaptiv und reagiert auf Änderungen der Leistungsfähigkeit wie ein zusätzlich auf einem Knoten gestarteter Prozess.

Parallelisierung mit OpenMP

Bei der auf OpenMP basierenden Parallelisierungsmethode zur Nutzung von Systemen mit Mehrprozessorboards und einem gemeinsamen Arbeitsspeicher (shared memory) wird eine weitere Gebietsaufteilung in den x-y Ebenen durchgeführt. Da sämtliche Prozessoren eines Mehrprozessorknotens Zugriff auf das gesamte Teilgebiet besitzen, entfällt die Datenübertragung.

3 Konfiguration der Simulationsszenarien

3.1 Modellierung der Risswände

Die Risswände werden durch die Festlegung von zwei Barrieregebieten modelliert, die durch eine Lücke räumlich voneinander getrennt sind. Abb. 4 zeigt in Schemadarstellung, dass auf den oberen Risswand eine Schicht Solidphase gesetzt wird. Der Solidbereich besteht aus Körnern mit unterschiedlichen Kristallorientierungen, die durch einen Voronoi-Algorithmus (siehe Kapitel 4.2) gefüllt werden.

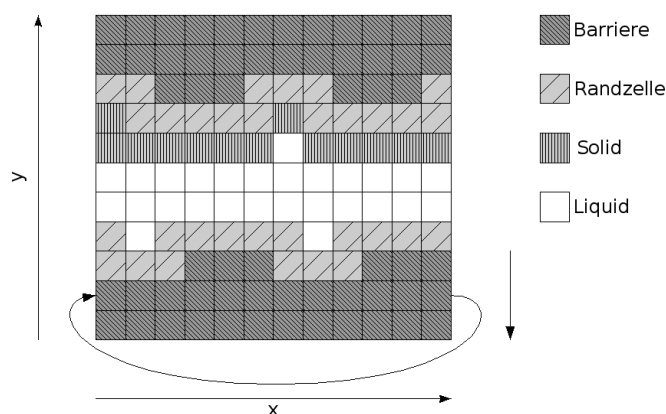


Abbildung 4. Schematische Darstellung der Zellbelegungen in der Umgebung der Risswände. Es werden periodische Randbedingungen in x-Richtung angenommen.

Das restliche Gebiet innerhalb des Risses wird mit Liquid/Flüssigphase (wässrige Lösung) gefüllt. Nach einer frei festlegbaren Anzahl von Zeitschritten wird die untere Barriere um eine bestimmte Anzahl von Gitterzellen in die Raumrichtungen verschoben. Auf diese Weise wird die wiederholt auftretende Bruchbildung beschrieben. Die Verschiebung in y-Richtung legt die Breite des Risses fest. In x-Richtung wird eine Scherung durch periodisches Verschieben der Barriere dargestellt. Der dadurch neu entstehende Riss wird mit Flüssigphase aufgefüllt. In den Barrierezellen, die keine Phasenfeldinformation enthalten, werden die Arrayzeiger auf NULL gesetzt. Dies ermöglicht die Zuordnung als Barriere und verringert gleichzeitig den Speicherplatzbedarf. Die an die Barrieren angrenzenden Zellen stellen Randzellen dar, die mit den Gebietsrandzellen vergleichbar sind. Es können verschiedene Randbedingungen an den Barrieren wie z.B. Dirichlet und Neumann Randbedingungen definiert werden.

Diese entsprechen der mathematischen Beschreibung, die auch an den Gebietsrändern verwendet wird. Mit der Anwendung von Barrieren ist es möglich, unterschiedliche Rissstrukturen und Rauigkeiten der Risswände zu modellieren. Mit einem Füllalgorithmus werden dazu verschiedene geometrische Formen festgelegt, die die Oberflächenstruktur der Wände beschreiben. Durch diese Methode lassen sich der Einfluss der Oberflächenstruktur und die Auswirkung der verwendeten Randbedingung auf den Versiegelungsmechanismus des Risses und die Mikrostruktur untersuchen.

Voronoi Algorithmus

Die Verteilung von Anfangskeimen in einer dünnen Schicht entlang der Risswand wird über einen Voronoi-Algorithmus realisiert. Bei diesem Verfahren werden zunächst Punkte in der ausgewählten Schicht entlang des Risses zufällig generiert. Die Anzahl der Punkte kann in der Initialisierungsdatei vorgegeben werden und korreliert mit der Feinheit des Gefüges als anfängliche Konfiguration. Als nächstes wird nun die Schicht (die Fläche) mit Polygonen gefüllt und in Bereiche unterteilt, die einzelnen Körnern zugewiesen werden. Hierzu werden die Punkte untereinander verbunden. Jeweils auf der Hälfte werden zu den Verbindungsgeraden senkrechte Polygone konstruiert. Die Polygone schneiden sich, partitionieren die Fläche und bilden die Korngrenzen für die Anfangskonfiguration der Simulation. Die Konstruktion nach dem Voronoi-Algorithmus ist in Abb. 5 schematisch dargestellt. Da die Punkte nach einem Zufallsgenerator bestimmt werden, entstehen beim Starten der Simulation verschiedene Szenarien.

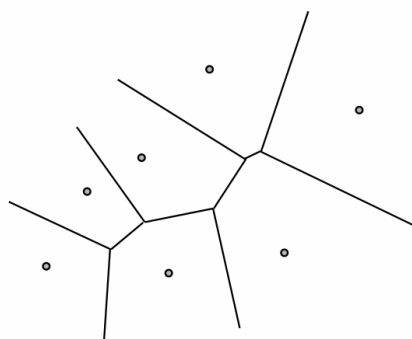


Abbildung 5. Voronoi-Konstruktion zur Generierung einer Anfangskornverteilung

5 Simulationsergebnisse zur Bruchversiegelung

5.1 Isotropes und anisotropes Kornwachstum

Für je zwei verschiedene Anfangskonfigurationen mit zufälliger Keimverteilung an der oberen Risswand wurden Simulationen mit isotropen (Abb. 6) und facettiert anisotropen Korngrenzenergien (Abb. 7) in einem Rechengebiet von 400×400 Zellen durchgeführt. Die Ergebnisse zeigen, dass die Ausrichtung der Korngrenzen von der Oberflächengeometrie, der Bewegung und der Scherung der unteren Risswand dominiert wird. Sowohl die anfängliche Kornverteilung als auch die Anisotropie der Korngrenzen beeinflussen die Wachstumsrichtung nicht.

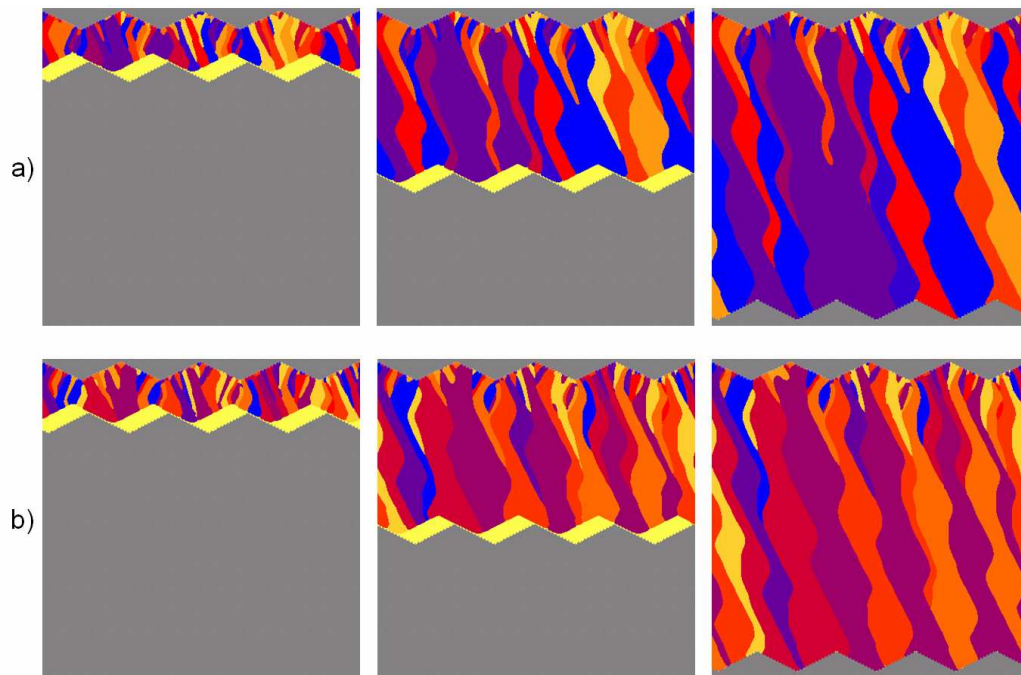


Abbildung 6. Simulationen des polykristallinen Kornwachstums in einem Gesteinsriss bei **isotropen** Korngrenzenergien mit unterschiedlicher, zufälliger Anfangskornverteilung in a) und b). Es sind je drei Zeitschritte während der stufenweisen Bruchbildung gezeigt.

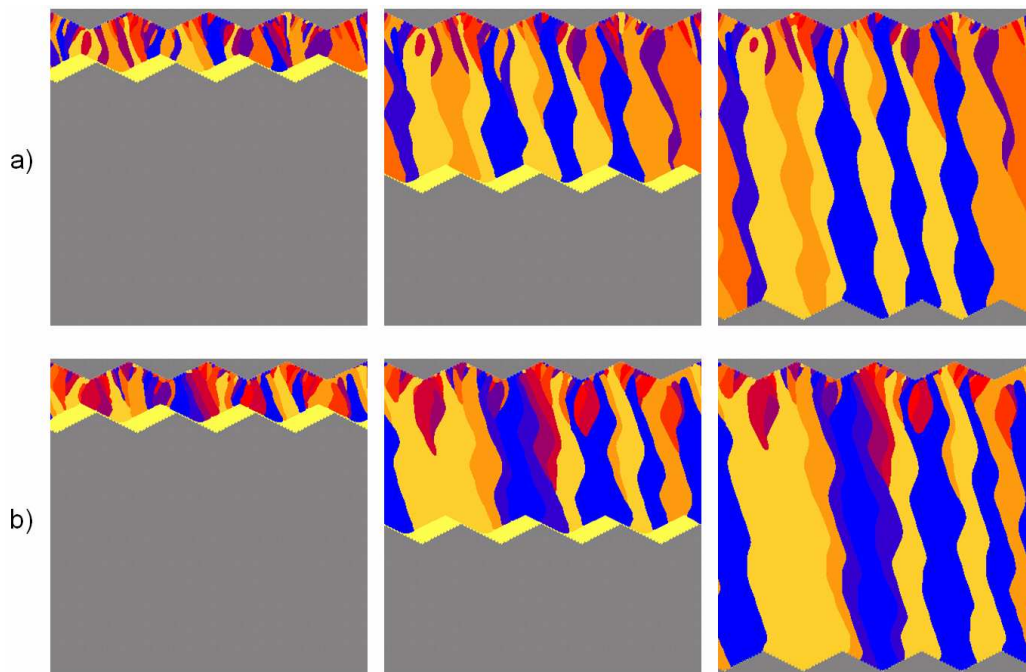


Abbildung 7. Simulationen des polykristallinen Kornwachstums in einem Gesteinsriss bei **facettiert anisotropen** Korngrenzenergien mit unterschiedlicher, zufälliger Anfangskornverteilung in a) und b). Es sind je drei Zeitschritte während der stufenweisen Bruchbildung gezeigt.

5.2 Einfluss der Scherung auf die Mikrostrukturausbildung

Die Abhängigkeit der Kornwachstumsrichtung von der Scherrate der unteren Risswand ist in Abb. 8 für zwei Simulationsserien mit unterschiedlichen Anfangskornverteilungen gezeigt. Findet bei den Bruchereignissen keine horizontale Verschiebung der Risswände gegeneinander statt, so versiegeln die Risse mit vertikal ausgerichteten Korngrenzen (Abb. 8 a) und b) links). Bei einer Bewegung der gegenüber liegenden unteren Risswand in x-Richtung folgen die sich bildenden Korngrenzen der Scherrichtung. Für stärkere Scherraten treten verstärkt wellenförmige Korngefügemuster auf.

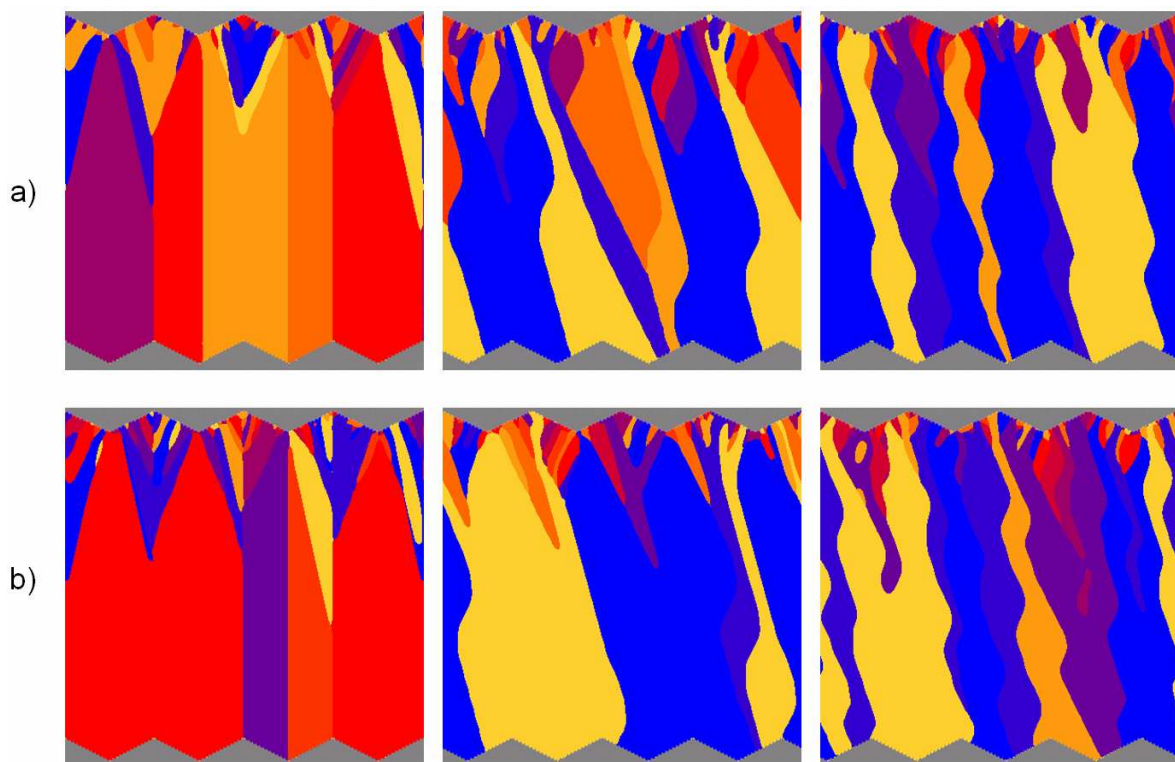


Abbildung 8. Zwei Simulationsserien mit verschiedenen Anfangskornverteilungen und je drei verschiedenen Scherraten der unteren Risswand: (links) ohne Scherung, (Mitte) Scherung um $\Delta x = 10$ Zellen und (rechts) Scherung um $\Delta x = 20$ Zellen bei jedem Teilbruch.

6. Fazit und Ausblick

Es wurde ein Kontinuumsmodell vorgestellt, mit dem die Ausbildung der polykristallinen Kornstruktur bei der Entstehung einer Gesteinsader beschrieben werden kann. In Simulationen wurde der sich wiederholende Prozess der Bruchbildung, der Scherung der Risswände und der anschließenden Versiegelung modelliert. In den behandelten Szenarien wurden sowohl isotrope als auch anisotrope Korngrenzen betrachtet, verschiedene Rissgeometrien konfiguriert und das Ausmaß der Scherung der Bruchwände variiert. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass eine Kornselektion und eine Kornvergrößerung stattfinden und dass die sich ausbildenden Korngrenzen der Bewegungsrichtung der Risswand folgen. Die

Korngrenzen weisen außerdem die Eigenschaft auf, sich mit ihrer Wachstumsrichtung auf die Spitzen der gegenüber liegenden Risswand zu orientieren.

Die Kontinuumsmodellierung hat ihre Tradition in der Beschreibung von Phasenübergängen und Mikrostrukturausbildungen in metallischen Legierungen. Um das Potential des sehr weit entwickelten Verfahren für Anwendungen in den Geowissenschaften zu nutzen, wurden im Rahmen dieser Arbeit die Konzepte übertragen, weiterentwickelt und erstmalig zur Behandlung von Prozessabläufen in geologischen Materialien eingesetzt. Die dargestellten Zeitsequenzen illustrieren, dass die Methode in der Lage ist, die generellen Phänomene der experimentell beobachteten Kornstrukturen und die Komplexität des polykristallinen Wachstums in numerischen Simulationen zu beschreiben. In den durchgeführten Simulationen wurde eine konstante treibende Kraft für die Kristallisation eingesetzt. Diffusions- und Strömungsprozesse zum Materialtransport wurden nicht berücksichtigt. Diese Erweiterungen besitzen vielseitige Anwendungen und versprechen neue Einblicke in die Entstehungsmechanismen und Strukturbildungsprozesse von Gefügestrukturen in geologischen Gesteinsschichten.

Danksagung

Das Forschungsvorhaben wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen des Schwerpunktprogramms 1095 „Mehrskalenprobleme“, Projektnummer Ne 822/1-3 gefördert. Die Verfasser danken für die Unterstützung.

Literaturangaben

Beeler, N., Hickman, S. (1997); Crack healing in quartz via solution transport: Experimental observations of healing morphology and kinetic implications. *Eos, Trans. AGU*, F732, 78.

Bons, P.D., Jessell, M. W. (1997); Experimental simulation of the formation of fibrous veins by localised dissolution-precipitation creep. *Mineralogical Magazine* 61, 53-63.

Hilgers, Ch. (2000); Vein growth in fractures – experimental, numerical and real rock studies. Dissertation, RWTH Aachen. Shaker Verlag, ISBN 3-8265-7963-1.

Jessell, M. W. (2004); The numerical simulation of microstructures in geological materials. Recrystallization and Grain Growth, Proceeding of the first joint international conference, Editors: G. Gottstein and D. Molodov, Springer Verlag.

MPI Forum (2006): Message Passing Interface, <http://www.mpi-forum.org>.

Nestler, B., Garcke, H., Stinner, B. (2005); Multicomponent alloy solidification: Phase-field modelling and simulations. *Phys. Rev. E* 71, 041609-1.

OpenMP Forum (2006): OpenMP Standard, <http://www.openmp.org>.