Perkolationstheorie mit eingebetteten Netzwerken ein Modell für den Leitfähigkeitsmechanismus in der mittleren Kruste

Daniel Labendz - Institut für Geophysik, Göttingen

1 Einleitung

Untersuchungen der mittleren und unteren Kruste haben in den letzten Jahren immer wieder Hinweise auf 'anomal' hoch leitfähige Schichten ergeben. Grundlage dieser Untersuchungen waren Methoden der elektromagnetischen Tiefenforschung mit der diese Schichten lokal nachgewiesen werden konnten (z.B. ERCEUGT, 1992).

Als Ursache für derart hoch leitfähige Schichten werden zur Zeit netzwerkartig verbundener Kohlenstoff in Form von Graphit und salinare Fluide diskutiert. Die Frage nach der effektiven Größe der Leitfähigkeit bleibt jedoch unbeantwortet, da die elektromagnetische Tiefenforschung nur integrierte Größen liefert.

Ein weiterer charakteristischer Parameter ist die elektrische Anisotropie ($\sigma_{min} : \sigma_{max}$). Der Versuch, Felddaten mit Werten von 10-100 (KELLET et al., 1992; EISEL, 1995) durch Labormessungen an Gesteinsproben mit Werten von 3-5 (z.B. MARESCHAL et al., 1992) zu reproduzieren, offenbart jedoch eine erhebliche Diskrepanz.

2 Theorie I - Mischungsgesetze und Perkolationstheorie

Unser Verständnis für effektive Leitfähigkeit soll auf einer heterogenen Gesteinsmatrix basieren, die zwei Phasen unterschiedlicher Leitfähigkeitseigenschaften besitzen soll. Bei starker Heterogenität sind Berechnungen mit Hilfe der Effektiv-Medium-Theorie, die statistische Homogenität verlangt, nicht mehr tragbar, so daß nach einer anderen Möglichkeit der Berechnung gesucht werden muß. Mischungsgesetze (MADDEN, 1976) sind in der Lage, Zwei-Komponenten-Systeme zu modellieren, wobei dies gleichzeitig eine Anwendung der Perkolationstheorie darstellt (SHANTE und KIRCKPATRICK, 1971). Für unsere Absichten wird das Variationsprinzip von HASHIN und SHTRIKMAN (1962) verwendet, das für alle Mischungsverhältnisse β maximale Leitfähigkeit bei perfekter Vernetzung (HS⁺) ermittelt und minimale für den Fall von isolierten Taschen (HS⁻). Die effektive Leitfähigkeit σ_{eff} ist variabel und befindet sich innerhalb der definierten Grenzen. Führt man als Leitfähigkeit für den Anteil der gut leitfähigen Phase σ_m und für den Anteil der schlecht leitenden σ_s ein, so erhält man

$$\underbrace{\sigma_m + (1-\beta)(1/(\sigma_s - \sigma_m) + \beta/3\sigma_m)^{-1}}_{HS^+} > \sigma_{eff} > \underbrace{\sigma_s + \beta(1/(\sigma_m - \sigma_s) - (1-\beta/3\sigma_s)^{-1})}_{HS^-}$$

Für die Verhältnisse in der Kruste ist das Mischungsverhältnis größer als das Verhältnis der Leitfähigkeiten, so daß man schließich WAFF's (1974) Approximation erhält

$$\sigma_{eff} \approx \frac{2}{3} \beta \sigma_m. \tag{1}$$

Für quasi-homogene Systeme kann Gleichung (1) durchaus verwendet werden, für stark heterogene Netzwerke versagt sie. Aus diesem Grund wird die Perkolationstheorie verwendet. Mit ihrer Hilfe ist es möglich die Clusterbildung in einem System zu beschreiben. Der wichtigste Parameter hierbei ist die elektrische Konnektivität (Vernetzbarkeit) $C(p) \in [0,1]$, die von der Wahrscheinlichkeit des Auftretens der gut leitfähigen Phase abhängt. Bei einer bestimmten Wahrscheinlichkeit wechselt der endliche Cluster zum 'unendlichen', der das ganze System durchzieht. Übertragen auf das heterogene Medium bedeutet das, daß an dieser Stelle zum ersten Mal ein Stromfluß zu verzeichnen ist. Dieser Punkt wird als Perkolationsschwelle p_c bezeichnet und hängt von der Art des Netzwerkes, der Dimension und der Art der Perkolation ab. In der Nähe der Schwelle wird das ganze System zum Fraktal.

Mit dem neugewonnenen Parameter läßt sich Gleichung (1) schließlich schreiben als

$$\sigma_{eff} \approx \frac{2}{3} \beta \sigma_m C(p).$$
 (2)

Das heißt, wenn wir Informationen über β und σ_m besitzen, ist es nur notwendig, C(p) zu bestimmen, um σ_{eff} zu erhalten.

3 Theorie II - Eingebettete Netzwerke

Zur Berechnung der Konnektivität soll auf eingebettete Netzwerke zurückgegriffen werden (MADDEN, 1976; BAHR, 1997). Hierbei repräsentieren Widerstände den Anteil der gut bzw. schlecht leitenden Phase. Abbildung 1a zeigt die typische Struktur eines Netztwerkes, das aus 12 Widerständen besteht, die entweder offen (schwarz) oder geschlossen (weiß) sind. Die Wahrscheinlichkeit für den Anteil der gut leitfähigen Phase beträgt in diesem Fall p = 50% (insgesamt gibt es $2^{12} = 4096$ Möglichkeiten der Anordnung). Abbildung 1b zeigt den Fall, daß ein Widerstand durch ein komplettes Netzwerk ersetzt wurde (Einbettungsgrad: 1). Abbildung 1c schließlich verdeutlicht das zweifach eingebettete Netzwerk mit 1728 Widerständen und 2^{1728} verschiedenen Möglichkeiten der Anordnung. Mit höheren Einbettungsgraden wird die Berechnung der Konnektivität für alle Realisierungen sehr zeitintensiv, so daß im weiteren Verlauf auf Mittelwerte und Häufigkeitsverteilungen zurückgegriffen wird.

Um die natürlichen Gegebenheiten von erhöhter Konzentration der beiden Phasen zu berücksichtigen, besteht die Möglichkeit der Fragmentierung, d.h. daß an manchen Stellen die Einbettung wieder aufgehoben wird, so daß sich ein Gemisch aus 'Mikro-' und 'Makrostruktur' ergibt (s. Abbildung 1d).

Unsere Absicht ist es aus dem oben beschriebenen Model die elektrische Konnektivität zu berechnen. Zu diesem Zweck benutzen wir das Urnetzwerk mit 12 Widerständen und 9 dazugehörenden Strömen. Das Gleichungssystem, das zu lösen ist, hat die Form

$$\underline{I} = \underline{\underline{R}}^{-1} \, \underline{\underline{U}}$$



Abbildung 1: Eingebettete Netzwerke mit einer Wahrscheinlichkeit von p = 50% für den Anteil der gut leitfähigen Phase. Offene Widerstände sind durch die schwarzen Blöcke symbolisiert. Abbildung 1a: Urnetzwerk mit 12 Widerständen. Abbildung 1b: Einfach eingebettet mit 12² Widerständen. Abbildung 1c: Zweifach eingebettet mit 12³ Widerständen. Abbildung 1d: Wie Abbildung 1c aber mit einer Fragmentierungswahrscheinlichkeit von $p_{frag} = 40\%$.

Die Elemente der Matrix $\underline{\underline{R}}^{-1}$ sind durch die folgenden Gesetzmäßigkeiten festgelegt (KEMMERLE, 1977).

- U ist ein konservatives Potential in jeder Elementarzelle
- KIRCHHOFF's Gesetz in jedem Knoten
- Einer Normierung

Anschließend wird die Matrix mit Hilfe des GAUSS-JORDAN-Eliminationsverfahren invertiert, um den Durchgangsstrom zu erhalten. Somit wird es möglich, einen Mittelwert der elektrischen Konnektivität aus einer bestimmten Anzahl von Netzwerken zu erhalten, die durch einen Zufallsgenerator erzeugt worden sind.



Abbildung 2: Die elektrische Konnektivität C(p) für zwei Netzwerke mit unterschiedlichem Einbettungsgrad. Die Werte für die Anzahl der Realisierungen und des Einbettungsfaktors sind in den Abbildungen vermerkt.

4 Ergebnisse

4.1 Elektrische Konnektivität

Abbildung 2 verdeutlicht die elektrische Konnektivität als Funktion der Wahrscheinlichkeit für den Anteil des guten Leiters, wobei verschiedene Einbettungsgrade für eine bestimmte Anzahl von Realisierungen verwendet worden sind. Wie man erkennt, wird die Perkolationsschwelle bei höherer Einbettung immer später erreicht, d.h. ein Strom innerhalb einer Gesteinsmatrix fließt erst bei höherem Anteil von gut leitfähigem Material. Da es sich bei der berechneten Konnektivität nur um gemittelte Werte handelt, kann es durchaus von Interesse sein, die zugehörigen Verteilungsfunktionen bei einer bestimmten Wahrscheinlichkeit zu betrachten.

Abbildung 3 zeigt die relativen Häufigkeiten für zwei verschiedene Einbettungsfaktoren bei einer konstanten Wahrscheinlichkeit von 75%. Während die Verteilungsfunktion bei dem einfach-eingebetteten Netzwerk noch recht breit ist, wird sie zu höherer Einbettung hin immer schmaler. Dies gibt Anlaß zur Vermutung, daß für kompliziertere Netzwerke die berechnete Konnektivität stabil bleibt, was besonders hinsichtlich der Berechnung von σ_{eff} von Bedeutung wäre. Ein weiterer Punkt, auf den hingewiesen werden soll, ist die gute Übereinstimmung zwischen der Form der hier aufgeführten Verteilungen und denen, die sich aus Leitfähigkeitsmessungen an Bohrkernen und 'in situ'-Messungen ergeben (z.B. RAUEN und LASTOVICKOVA, 1993).



Abbildung 3: Verteilungsfunktionen für die elektrische Konnektivität bei einer Wahrscheinlichkeit von 75% für 1000 Realisierungen bei einfacher sowie dreifacher Einbettung.

4.2 Ein einfaches Modell

Die bisherigen Ergebnisse entstammtem einem Modell mit fraktaler Geometrie, die nicht zwingend erscheint. Daher soll anhand eines Netzwerkes mit einfacherer Struktur (Abbildung 4) ein Vergleich der berechneten Parameter stattfinden und gleichzeitig die Frage nach der Notwendigkeit der fraktalen Geometrie geklärt werden. In den Abbildungen 5 und 6 ist das vergleichende Ergebnis der elektrischen Konnektivität für das einfach eingebettete Netzwerk (12² Widerstände) und einer 12 x 12 Anordnung dargestellt. Während die gemittelten Werte fast identisch sind, läßt sich allein in den Verteilungsfunktionen eine Abweichung des Zentralwertes feststellen. Eine Notwendigkeit der fraktalen Geometrie ist also nicht zwingend aber durchaus erlaubt (was vor allen Dingen hinsichtlich der geringeren Rechenzeiten von Bedeutung ist). Das einfache Modell liefert aber noch mehr. Zum Einen sollte sich eine fraktale Struktur an der Perkolationsschwelle $(p_c = 0.5)$ ausmachen lassen, und zum Anderen sollte es möglich sein, die fraktale Dimension an dieser Stelle zu berechnen. Beide Überlegungen wurden in den Abbildungen 7 und 8 realisiert. Hierbei läßt sich einerseits der lineare Zusammenhang zwischen Clustergröße und Häufigkeit, der nur im Bereich der Perkolationsschwelle auftreten sollte, erkennen und andererseits wird die fraktale Dimension an dieser Stelle aus der Steigung von linearer Dimension des Gitters und maximaler Größe der betreffenden Clusters mit $D_{frac} = 1.859$ bestimmt.

Zusammenfassend bedeutet das, daß die Anwendung von eingebetteten Netzwerken mit fraktaler Geometrie durchaus berechtigt ist.

array: 12 x 12 probability for open resistors: 75 %



Abbildung 4: Darstellung des einfachen Modells einer 12 x 12 Anordnung. Die Wahrscheinlichkeit der offenen Widerständen beträgt 75%, wobei jeweils zwei Widerstände zu einem zusammengefaßt werden.



Abbildung 5: Vergleich der gemittelten elektrischen Konnektivitäten für die beiden Modelle bei etwa der gleichen Größe.



Abbildung 6: Vergleich der Verteilungsfunktion der elektrischen Konnektivitäten für die beiden Modelle bei etwa der gleichen Größe (p = 75%).



Abbildung 7: Absolute Häufigkeit der Clustergröße einer 30 x 30 Anordnung bei 1000 Realisierungen. Der lineare Zusammenhang, der auf die fraktale Strunktur hinweist, ist nur bei der Perkolationsschwelle von $p_c = 0.5$ gegeben.



Abbildung 8: Abhängigkeit der Größe des längsten Clusters von der linearen Dimension des Gitters an der Perkolationsschwelle. Die fraktale Dimension wird anhand der linearen Regression zu $D_{frak} = 1.859$ bestimmt.

4.3 Das Gedankenexperiment mit der Anisotropie

Elektrische Anisotropien sind bei Leitfähigkeitsmessungen im Feld oder im Labor immer wieder nachgewiesen worden. Mit den dabei erzielten Werten bietet sich die Möglichkeit, eine Verbindung zwischen natürlichen Gegebenheiten und numerischer Simulation zu schaffen. Da in Abschnitt 2) gezeigt wurde, daß eine Proportionalität zwischen effektiver Leitfähigkeit und elektrischer Konnektivität vorhanden ist, besteht somit die Möglichkeit, Verhältnisse von Konnektivitäten als 'Anisotropien' zu interpretieren. Realisiert wird dies, indem man elektrische Konnektivitäten für die beiden horizontalen Raumrichtungen mit unterschiedlicher Wahrscheinlichkeit berechnet und somit eine 'künstliche' Anisotropie schafft.

Abbildung 9 stellt das Verhältnis der elektrischen Konnektivitäten in Abhängigkeit von der Wahrscheinlichkeit in beiden Raumrichtungen dar. Wie man erkennt, sind Anisotropiewerte in der Nähe der Perkolationsschwelle von 10 und mehr durchaus möglich. Mit Hilfe von bekannten Feld- und Labordaten, die in unserem Fall aus dem Eifel-Plume-Projekt und aus Bohrkernmessungen (DUBA et al., 1994) stammen sollen, ist es möglich auf den Anteil der gutleitfähigen Phase zu schließen. Mit diesem Wert läßt sich die betreffende elektrische Konnektivität bestimmen und mittels Gleichung (2) wird es möglich, Aussagen über die effektive Leitfähigkeit zu treffen. Hierbei muß jedoch berücksichtigt werden, daß das Mischungsverhältnis β und die Leitfähigkeit der gut leitfähigen Phase σ_m nur als variable Größen in die Rechnung eingehen werden. Da wir aber nach einem Indikator für die Ursache der hoch leitfähigen Schichten suchen, ist das im Fall von σ_m sogar erwünscht. Um die Rechnung zu veranschaulichen, soll anhand eines Beispiels diese exemplarisch dargestellt werden.



Abbildung 9: Verhältnis der elektrischen Konnektivitäten für die beiden horizontalen Raumrichtungen bei einer vorgegebenen Betragsdifferenz von 20%. Zusätzlich eingetragen sind die Anisotropiedaten aus dem Eifel-Plume-Projekt und aus Labormessungen an Bohrkernen.

Zu diesem Zweck soll die Station Osburg (OSB), von der integrierte Leitfähigkeiten τ_x und τ_y vorliegen, näher untersucht werden. Es ist

$$\tau = d \sigma_{eff} \quad \rightsquigarrow \quad \tau = \frac{2}{3} \ d \ \beta \ \sigma_m \ C(p) \quad \rightsquigarrow \quad d\beta = \frac{3}{2} \ \frac{\tau}{\sigma_m \ C(p)}$$

Mit der Größe $d\beta,$ wobe
id die Schichtdicke repräsentiert, läßt sich der folgende Parameter bestimmen

$$\frac{\sigma_{eff}}{\beta} = \frac{\tau}{d\beta}.$$

Für die Station OSB berechnet man die integrierte Leitfähigkeiten $\tau_x = 1089.11 \ S$ und $\tau_y = 235.78 \ S$, was einem Anisotropiewert von 4.62 entspricht. Das Modell findet mit diesem Wert die beiden elektrischen Konnektivitäten $C(p_x) = 0.1455$ und $C(p_y) = 0.0312$, deren Verhältnis zu 4.66 bestimmt wurde. Wie bereits erwähnt, soll die Größe σ_m variabel gehalten werden. Wir beschränken uns hier darauf, Werte für stark salinare Fluide $(\sigma_m = 10 \ \frac{S}{m})$ und Graphite $(\sigma_m = 10^5 \ \frac{S}{m})$ zu untersuchen. In den Tabellen sind die entsprechenden Werte für diese beiden Annahmen aufgeführt.

Der Parameter $d\beta$ ermöglicht, bei Kenntnis des Mischungsverhältnises, Aussagen über die Schichtdicke d zu machen. Mit der Annahme, daß wir es im Fall der salinaren Fluide mit Porositäten von 1-3 % zu tun haben, erhält man Schichtdicken von mehreren Kilometern. Dieses Ergebnis ist nach geologischen Maßstäben instabil, so daß es verworfen werden muß. Im Gegensatz dazu sind die Werte für die Graphite durchaus tragbar, so daß ihnen ein größeres Vertrauen entgegengebracht werden kann. Diese Vorgehensweise

	$\sigma_m = 10 S/$	m
$d \ \beta \ [m]$	$\sigma_{eff x}\beta^{-1} [S/m]$	$\sigma_{eff y}\beta^{-1} \left[S/m\right]$
1127.67	0.9697	0.2083
	$\sigma_m = 10^5 S/$	m
$d \ \beta \ [m]$	$\sigma_m = 10^5 S/$ $\sigma_{eff x} \beta^{-1} [S/m]$	m $\sigma_{eff y}\beta^{-1} [S/m]$

zeigt eine Möglichkeit, den gesuchten Indikator zu berechnen und mit ihm evtl. Aussagen über die Ursachen der hoch leitfähigen Schichten in der mittleren Kruste zu machen.

Diese Arbeit ist Bestandteil eines Projektbereiches, der im Rahmen des SFB 468 'Wechselwirkungen an geologischen Grenzflächen' verwirklicht wird. http://www.uni-geochem.gwdg.de/sfb/Sfb-home.htm

Kontakt: Daniel Labendz E-mail : dan@willi.uni-geophys.gwdg.de

Literatur

- Duba et al.: Evidence from borehole samples for the role of accessory minerals in lower-crustal conductivity. Nature 367, p59-61, 1994.

- Bahr, K.: Electrical anisotropy and conductivity distribution functions of fractal random networks and of the crust: the scale effect of connectivity. Geophys. J. Int. 130, p649-660, 1997.

- Eisel, M.: Interpretation magnetotellurischer Messungen im Umfeld der Kontinentalen Tiefbohrung unter besonderer Berücksichtigung lateraler, anisotroper Leitfähigkeitsstrukturen. Diss. Geowiss. Freie Univ. Berlin, 1995.

- ERCEUGT group: An electrical resistivity transect from the Alps to the Baltic Sea (Central segment of the EGT). Tectonophysics 207, p123-139, 1992.

- Hashin, Z., Shtrikman., S.: A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials. J. Appl. Phys. 33, p3125-3131, 1962.

- Kellet et al.: A model of lower crustal electrical anisotropy for the Pointiac Subprovince of the Canadien Shield. Geophys. J. Int. 111, p141-150, 1992.

- Madden T. R.: Random networks and mixing laws. Geophysics 41, p1104-1125, 1976.

- Mareschal et al.: Grain-boundary graphite in Kapuskasing gneisses and implication for lower crustal conductivity. Nature 357, p674-676, 1992.

- Rauen A., Lastovickova M.: Investigation of electrical anisotropy in the deep borehole KTB. Surv. Geophys. 16, p37-46, 1995.

- Shante, V.K.S., Kirkpatrick, S.: An introduction to percolation theory. Adv. Phys. 20, p325-357, 1971.

- Waff H.S.: Theoretical considerations on electrical conductivity in a partially molten mantle and implications for geothermometry. J. Geophys. Res. 79, p4003-4010, 1974.