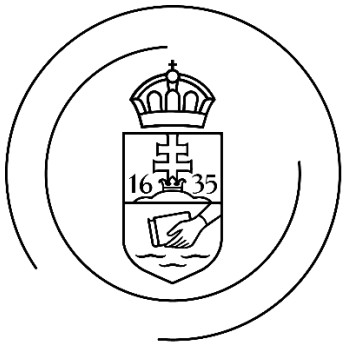
A kvarc-coesite átalakulás nyírózónákban: 2D numerikus modellezés termodinamikai adatok alapján

Koszta Benedek

Eötvös Loránd Tudományegyetem Természettudományi Kar

földtudományi BSc III. évfolyam (geofizika specializáció)



Témavezető:

Porkoláb Kristóf, PhD

tudományos munkatárs

HUN-REN Földfizikai és Űrtudományi Kutatóintézet

Országos Tudományos Diákköri Dolgozat

2024/25-ös tanév

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

Tartalom

Absztrakt 2
1. Bevezetés és célkitűzés 3
2. Nyírózónák és metamorf reakciók 4
2.1. A feszültség és a nyomás kapcsolata 4
2.2. Mélységprobléma a tektonikában: litosztatikus nyomás és tektonikus túlnyomás 5
3. A kvarc-coesite átalakulás 5
3.1. A kvarc-coesite átalakulás ásványtani leírása 6
3.2. Laboratóriumi kísérletek a kvarc-coesite átalakulásra 7
4. Adatok és módszerek 8
4.1. Matematikai modell 8
4.1.1. Kontinuitási egyenlet 9
4.1.2. Navier–Stokes-egyenlet 10
4.1.3. Az anyagi összefüggések 11
4.1.4. Az egyenletrendszer összefoglalása 11
4.2. Numerikus megoldás 11
5. Eredmények 13
5.1. Termodinamikai adatok és fizikai paraméterek 13
5. 2. Referenciamodell 15
5.2.1. Modellgeometria, kezdeti feltételek, határfeltételek 15
5.2.1. Az referenciamodell eredményei 17
5.3. Paramétertesztek 19
5.3.1. Felbontásteszt 20
5.3.2. Toleranciateszt 20
5.3.3 Deformációs sebesség teszt 21
6. Diszkusszió 23
6.1 A modell megbízhatósága 23
6.3 A kvarc-coesite átalakulás időskálája 26
6.4 A modell jelentősége és továbbfejlesztési lehetőségei 27
7. Összefoglalás 28
8. Felhasznált irodalom 29
9. Köszönetnyilvánítás 33
Függelék 33

Absztrakt

A lemeztektonika egyik fő színterén, a szubdukciós zónákban, a kőzetek deformációja és a metamorf átalakulások közötti kölcsönhatásokra hagyományos megfigyelésekkel nehéz kvantitatív kapcsolatot felépíteni, ezért fontos feladat a csatolt modellek fejlesztése. A magas nyomású szubdukciós környezet egyik fő fázisátalakulása a kvarc-coesite átalakulás, amely nagy hatással lehet a szubdukciós zónák fejlődésére.

Kutatásomban a kvarc-coesite nyírózónában való átalakulását modellezem termodinamikai adatok felhasználásával, összenyomható közegben, valamint viszkózus reológiát és izoterm állapotot feltételezve. A matematikai modellt numerikusan MATLAB programozási környezetben, véges differenciák módszerével oldom meg.

A modell igazolja, hogy a kvarc-coesite fázisátalakulás nem csak passzív betemetődés miatt, hanem deformáció hatására is végbe mehet. A modellben a deformáció hatására megjelenik egy magasabb nyomású zóna (tektonikus túlnyomás), ahol elindul a fázisátalakulás. A coesite mennyiségére az idő függvényében egy exponenciális függvény illeszthető, ami az átalakulás időbeli lecsengését írja le. A maximális nyomás a fázisátalakulás során konstans, előtte és utána viszont gyorsan növekszik.

A modellezés során paramétereket is végeztem. A tolerancia- és a felbontásteszt a referencia modell pontosságát mutatja be. Emellett a leginkább meghatározó paraméternek, a deformációs sebességnek a nagyságrendi változását is teszteltem. A deformációs sebességtől erősen függ a fázisátalakulás lejátszódásához szükséges idő is. Gyorsan deformálódó nyírózónákban ($\geq 10^{-12}$ 1/s) az átalakulás geológiai időskálán szinte pillanatszerűen végbe megy, míg $\leq 10^{-13}$ 1/s esetén az átalakuláshoz több, mint 100 000 évre is szükség lehet. Az eredmények arra utalnak, hogy gyorsan deformálódó nyírózónákban a tektonikus túlnyomás hatékonyabban indítja be a fázisátalakulást, mint a betemetődés (szubdukció).

A kvarc-coesite átalakulás jelen modelljét reológiai visszacsatolásokkal kiegészítve a modell alkalmas lehet a szubdukciós zónák összetett reológiai, szerkezetfejlődési vizsgálatára is.

1. Bevezetés és célkitűzés

A litoszféra képlékenyen deformálódó részein a kőzetek tektonikus deformációja szükségszerűen együtt jár az ásványfázisok között lezajló kémiai reakciókkal, vagyis a metamorfózissal. A szilárd anyag deformációja és metamorfózisa között komplex kölcsönhatások lépnek fel, amelyet hagyományos, megfigyelés alapú kutatási módszerekkel rendkívül nehéz mennyiségileg leírni (pl. Kelemen és Hirth, 2012; Schmalholz et al., 2020; Yamato et al., 2021). Ezen kölcsönhatások vizsgálata, és prediktív modellek fejlesztése a geodinamika egyik fontos kihívása, hiszen a deformáció és metamorfózis kapcsolta nagyban meghatározza a litoszféra reológiáját (a kőzeteket ért erőhatások és a deformáció kapcsolatát) és deformációs mechanizmusait a lemeztektonika egyik fő színterén, a nyírózónákban. A szubdukciós zónákban zajló folyamatok alapjaiban befolyásolják a lemeztektonikát, ezért a reológiai változások különösen fontosak ezeken a területeken. A nyomás és a hőmérséklet növekedésével a metamorfózis HP-UHP (*high pressure, ultrahigh pressure – nagy, ultranagy nyomás*) fáciesbe lép, ahol számos metamorf fázisátalakulás történik, mint például a víztartalmú ásványok dehidratációja, vagy a kvarc-coesite átalakulás. Az elmúlt néhány év során mind az analitikai vizsgálatok (pl. Plümper et al., 2022), mind pedig a numerikus modellezési technikák (pl. Räss et al., 2022; Schmalholz et al., 2023) megértek arra, hogy egy új szintre emeljék a deformáció és metamorf reakciók között fellépő komplex kölcsönhatások megértését; ebből kifolyólag a két folyamat közti kapcsolat vizsgálata egy rendkívül időszerű, dinamikusan fejlődő téma (pl. Baïsset et al., 2024).

A tudományos diákköri munka fő célja a képlékeny kőzetdeformáció és egy szilárd fázisú metamorf fázisátalakulás csatolt matematikai modelljének felállítása, és véges differenciák módszerével történő numerikus megoldása. A felépített numerikus modell alkalmazási példája a kvarc-coesite fázisátalakulás, amely a nagy nyomású szubdukciós környezetek egyik tipikus átalakulása. A kutatás hipotézise, hogy a kvarc-coesite fázisátalakulás nem csak passzív betemetődés miatt, hanem deformáció hatására is végbe mehet, és ez a folyamat numerikusan megoldható, modellezhető. A dolgozat igazolja a hipotézist, bemutatja a szilárd, reaktív, deformálódó kvarc-coesite rendszer elsőrendű fizikai összefüggéseit, és lehetővé teszi tektonikus deformáció és a kvarc-coesite átalakulás kölcsönhatásainak mennyiségi vizsgálatát. A modell komplexebb reológiai és szerkezetfejlődési hatások vizsgálatának alapjául szolgálhat a közeljövőben, amelyek jelentősen hozzájárulhatnak a szubdukciós zónák fejlődésének megértéséhez.

2. Nyírózónák és metamorf reakciók

A nyírózónák olyan kőzettestek a Föld belsejében, ahol a környező kőzettesthez képest jelentősen nagyobb mértékű a deformáció (pl. Fossen, 2010). A képlékenyen (kristályplasztikusan) deformálódó nyírózónák vastagsága jóval nagyobb lehet, mint egy kizárólag töréses mechanizmusú vetőé; a nyírózóna széle felé fokozatosan csökken a deformáció mértéke. Az általam vizsgált mély litoszférában a képlékeny (kristályplasztikus) deformáció jellemző, ami így szorosan együtt jár a metamorf fázisátalakulás kristálytani átalakulásaival. Ez egy komplex, csatolt rendszer, hiszen egy metamorf fázisátalakulás során történhetnek olyan reológiai változások, melyek megváltoztatják a kőzetek deformációját is (pl. Fossen, 2010; Baïsset et al., 2024).

A nyírózónák különösen fontos színterei a lemeztektonikának, hiszen nyírózónák határolják a lemezeket; viselkedésük meghatározza többek között a lemezek relatív mozgását, földrengések jellegét és eloszlását, szubdukciós zónákban a kőzettestek betemetődési-exhumációs mechanizmusait (pl. Brudzinski et al., 2007; Fossen, 2010; Porkoláb, 2021).

2.1. A feszültség és a nyomás kapcsolata

A nyomást le lehet vezetni a teljes feszültségtenzor segítségével (1). A feszültségtenzort szét lehet bontani két tagra, melyek közül az egyik izotróp vagy átlagos ($\boldsymbol{\sigma_m}$), a másik az anizotróp vagy deviatórikus feszültségtenzor ($\boldsymbol{\tau}$) (2).

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_m & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_m & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{11} - \sigma_m & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} - \sigma_m & \sigma_{23} \\ \sigma_{13} & \sigma_{23} & \sigma_{33} - \sigma_m \end{pmatrix} \tag{2}$$

Az izotrópikus feszültségtenzor nevezhetjük nyomásnak is (3), ez felel egy deformáció során a térfogatváltozásért, míg a deviatórikus feszültségtenzor okozza az alakváltozást, a nyírást.

$$P = \sigma_m = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3} \tag{3}$$

$$\sigma_{11} \geq \sigma_{22} \geq \sigma_{33} \tag{4}$$

Litosztatikus esetben a főfeszültség tengelyek (3) ugyanakkorák, vagyis a deviatórikus feszültségtenzor zéró.

2.2. Mélységprobléma a tektonikában: litosztatikus nyomás és tektonikus túlnyomás

A litosztatikus közelítés egy széles körben alkalmazott egyszerűsítés a geodinamikai, tektonikai kutatások során, annak ellenére, hogy tektonikus deformációk során, és különösen nyírózónákban, a főfeszültség irányok nagysága nem egyenlő, és a nyomás mértéke jelentősen eltérhet a litosztatikus közelítéstől (Schmalholz és Podladchikov, 2013; Moulas et al., 2013). A teljes és a litosztatikus nyomás különbségét nevezzük tektonikus nyomásnak (δP), ami lehet pozitív és negatív is (pl. Li et al., 2010; Fossen, 2010).

$$P_L = \rho g z \tag{5}$$

$$\delta P = P - P_L = \frac{\sigma_{11} + \sigma_{22} + \sigma_{33}}{3} - \rho g z \tag{6}$$

Metamorf kőzetek vizsgálata során az ásványtani átalakulásokból termodinamikai adatok és összefüggések alapján meg lehet becsülni a kőzetet ért maximális nyomást (pl. Connolly, 2005). Ezekből a becslésekből bevett gyakorlat következtetni arra, hogy az adott kőzet vagy ásvány mekkora maximális mélységben volt a metamorfózis során, ami fontos peremfeltétele tektonikai és geodinamikai modelleknek, rekonstrukciónak (pl. Jolivet et al., 2003; van Hinsbergen et al., 2020). A mélységbecslés általános módja a litosztatikus nyomás feltételezése (7); a számításnál egy átlagos sűrűség és nehézségi gyorsulás mellett megadható a kőzet maximális mélysége (pl. Moulas et al., 2013).

$$p = \rho_{\text{átlagos}} g z \tag{7}$$

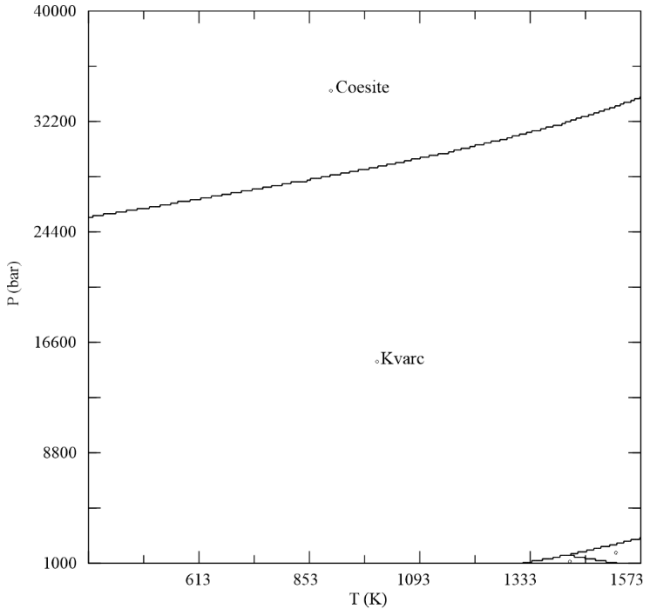
Ez a modell azonban elhanyagolja az esetleges tektonikus túlnyomást, mely akár 0,5-1,5 GPa is lehet (Brace és Kohlstedt, 1980; Moulas et al., 2013). 1 GPa nyomásanomália körülbelül 30 km-es mélységkülönbséget okoz a litosztatikus feltételezést használva, amely alapján már egy teljesen más tektonikai rekonstrukcióra és szerkezeti fejlődéstörténetre lehet következtetni. A tektonikus túlnyomás további lényeges következménye, hogy a nyomásfüggő metamorf fázisátalakulások nem csak passzív betemetődés-exhumáció hatására, hanem deformáció hatására is végbe mehetnek, tehát a fázisátmeneteket érdemes dinamikus kontextusban vizsgálni (pl. Schmalholz et al., 2023). A kvarc-coesite fázisátmenet ilyen szempontú vizsgálata kifejezett célkitűzése jelen dolgozatnak.

3. A kvarc-coesite átalakulás

A metamorf kőzeteket nyomás és hőmérséklet alapján szokás osztályozni, hiszen ezek befolyásolják az átalakulás módját, az adott kémiai összetételre jellemző metamorf reakciókat. A HP-LT (*high pressure – low temperature: nagy nyomás – alacsony hőmérséklet*) és UHP-LT

(*ultra high pressure – ultranagy nyomás*) metamorf környezetek olyan kőzeteket foglalnak magukban, amelyeket nagyon nagy nyomás és ehhez képest viszonylag alacsony hőmérséklet ért, jellemzően szubdukciós környezetben (pl. Beltrando et al., 2010; Burov et al., 2014).

Egy SiO_2-tartalmú metamorf kőzetet akkor sorolunk az UHP kategóriába, ha a SiO_2-nek megjelenik a magas nyomású ásványfázisa, a coesite (az UHP környezet úgynevezett index ásványa). Ennek a megjelenése hőmérsékletfüggő, de legalább 2,3 GPa nyomás kell hozzá (1. ábra, Liou et al., 1994; Sági et al., 2022).



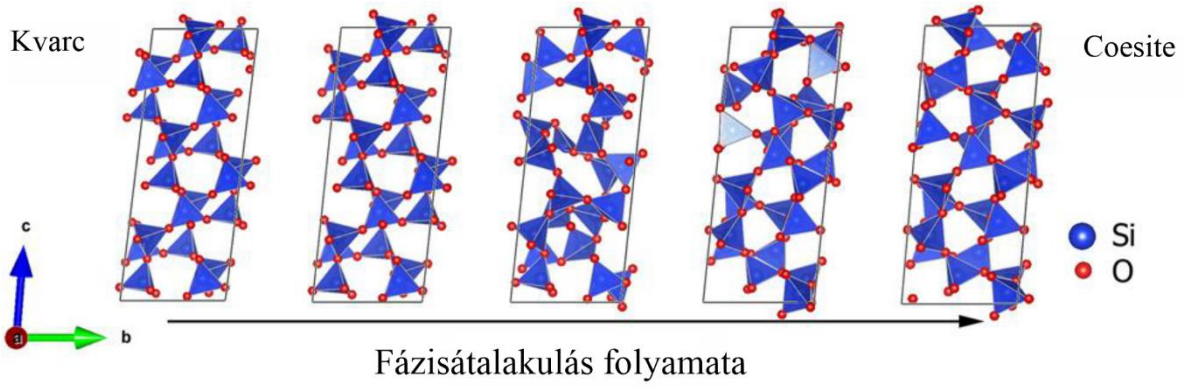
1. ábra: A SiO_2 fázisdiagramja a Perple_X szoftverből exportálva (módosítva) (Conolly, 2005, 2009). Az ábrán látható, hogy a hőmérséklet függvényében nő az átalakuláshoz szükséges nyomás, így az UHP kőzetekre jellemző nyomás legalább 2,3-2,8 GPa. Az dolgozatban bemutatott modell izoterm, hőmérséklete 773 K, ilyen hőmérsékleten a fázisátalakulás 2,76 GPa nyomás esetén megy végbe.

3.1. A kvarc-coesite átalakulás ásványtani leírása

A kvarc és a coesite egymás polimorfjai, azaz ugyanazon kémiai összetétel (SiO_2) mellett különböző kristálytani szerkezettel rendelkeznek: a kvarc trigonális, míg a coesite monoklin kristályrendszerű. A coesite Coes-ről kapta a nevét, aki 1953-ban szintetizálta először ezt az ásványt (Coes, 1953).

Amennyiben csökken a nyomás (például a kőzettest exhumációja során), a coesite általában visszaalakul kvarccá, ebből kifolyólag viszonylag ritkán lehet a felszínen megfigyelni az ásványt (Perillat et al., 2003). Bizonyos esetekben a visszaalakult kvarc szerkezeti tulajdonságaiból lehet következtetni arra, hogy korábban coesite volt, így akár megőrződött

coesite nélkül is meg lehet határozni a kőzetről, hogy UHP környezetben volt (Perillat et al., 2003; Campanale et al., 2019).



2. ábra: A kvarc-coesite átalakulás atomi skálán (módosítva) (Schaffrina et al., 2024). A fázisátalakulás során a jellemző hatszöges elrendezésből rombuszossá válik a szerkezet, ezáltal sűrűségnövekedés lép fel.

3.2. Laboratóriumi kísérletek a kvarc-coesite átalakulásra

A kvarc-coesite átalakulásra számos laboratóriumi kísérletet végeztek (pl. Boyd és England, 1960; Hirth és Tullis, 1994; Zhou et al., 2005; Richter et al., 2016; Ren, 2022), ami annak is köszönhető, hogy a coesite ásvány nagyon fontos szerepet játszik a metamorf geológiában.

A laboratóriumi kísérletek kezdetben hidrosztatikus nyomást és magas hőmérsékletet alkalmaztak (pl. Boyd és England, 1960). Ilyenkor csak nagyon magas (általában legalább 3 GPa) nyomás mellett sikerült laboratóriumban coesitet előállítani. Emellett sokszor több, mint 1000 °C-os hőmérsékletre is szükség volt. Későbbiekben felmerült, hogy talán a maximális főfeszültség vagy a differenciális feszültség (8, σ_d, a legnagyobb és legkisebb főfeszültség tengely közötti különbség) is szerepet játszhat az átalakulásban, így számos kísérletet is végeztek differenciális feszültség mellett is. Ezekben az esetekben nagyon magas deformációs sebességet ($\approx 10^{-3}$-10^{-5} 1/s) használtak, hogy viszonylag rövid idő alatt megtörténjen az átalakulás, majd ezekből extrapolálták az eredményeket a geológiai léptékre (Richter et al., 2016). A deviatórikus feszültség mellett végzett kísérletekből egyöntetűen azt a következtetést vonták le, hogy a kvarc-coesite átalakulás pontját nem a litosztatikus nyomás, hanem inkább a differenciális feszültség határozza meg (Zhou et al., 2005; Richter et al, 2016):

$$\sigma_d = \sigma_{11} - \sigma_{33} \tag{8}$$

A differenciális feszültség mellett a maximális főfeszültség nagysága is kulcsfontosságú; amennyiben átlépi az átalakuláshoz szükséges nyomást, akkor végbemegy a fázisátalakulás, hiába van a litosztatikus nyomás jóval ezalatt (pl. Richter et al., 2016). A számos kísérleti minta

összehasonlítása alapján elmondható, hogy az átalakulás magasabb hőmérsékleten könnyebben megy végbe, valamint az idővel egyre nagyobb mennyiségű coesite keletkezik (pl. Ren, 2022). A kísérletek azt mutatták ki, hogy néhány esetben még a maximális főfeszültség se érte el az átalakuláshoz szükséges nyomást, de jelent meg nagyon kis mennyiségű coesite a mintán. Továbbá amennyiben nagyon rövid ideig és kis mértékben lépi át a nyomás a szükséges határt, akkor gyakori a coesite-kvarc visszaalakulás is (Richter et al., 2016).

A nyírózónákban a laboratóriumi kísérletekhez képest jóval lassabban történnek a folyamatok. A deformációs sebesség – földrengések során fellépő sokkal gyorsabb deformációkat kivéve - általában 10^{-10}-10^{-15} 1/s nagyságrend között változik, és így a jellemző differenciális feszültség is kisebb (Richter et al., 2016). Ennek az értéke általában néhány száz megapascal, ami már befolyásolja az átalakulás mélységét (Richter et al., 2016). Bizonyos esetekben azonban ez a differencia sokkal jelentősebb is lehet: konvergens lemeztektonikai környezetekben a tektonikus túlnyomás akár egyenlő is lehet a litosztatikus nyomással (Reuber et al., 2016). Továbbá kis skálán is komoly változások álhatnak be speciális helyeken, így akár helyileg létre is jöhet az átalakulás (Rowe és Griffith, 2015). Ilyen esetekre lehet példa a fluidumáramlás, melyből eredő nyomás kisebb skálán okoz anomáliákat.

4. Adatok és módszerek

4.1. Matematikai modell

1. táblázat: A modell során használt fizikai mennyiségek és mértékegységeik.

Jel	Név	Mértékegység
ρ	sűrűség	kg/m^3
$\boldsymbol{v}$	áramlási sebesség	m/s
t	idő	s
p	nyomás	Pa
β	kompresszibilitás	Pa^{-1}
$\boldsymbol{\tau}$	deviatórikus feszültségtenzor	Pa
τ_{ij}	nyírófeszültség	Pa
$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$	sebességdeformációs tenzor	$1/s$
η	dinamikus viszkozitás	$Pa*s$
$\boldsymbol{g}$	gravitációs gyorsulás	m/s^2
$\boldsymbol{\Omega}$	A Föld forgási szögsebessége	$1/s$
A	preexponenciális konstans	$Pa^{-n} * s^{-1}$
Q	aktivációs energia	J/mol
n	viszkozitási kivető	-

A modellt leíró alapvető két megmaradó fizikai mennyiség a tömeg és az impulzus. Ezek a kontinuitási- (tömegmegmaradás) és a Navier–Stokes-egyenletben (impulzusmegmaradás) nyilvánulnak meg. Ezek mellett az anyagi és termodinamikai egyenletek jelennek meg a matematikai modellben.

4.1.1. Kontinuitási egyenlet

A tömegmegmaradás során feltehetjük, hogy a vizsgált területen nincs tömegforrás vagy tömegnyelő. Ez alapján felírható az, hogy a felületen kilépő tömeg nagysága egyenlő a térfogatban lévő tömeg megváltozásával.

$$\frac{\partial}{\partial t}\int \rho \, dV = -\int \rho \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{F} \tag{9}$$

Vegyük észre, hogy ez a Gauss–Osztrogradszkij-tétel (10) segítségével átalakítható és így kapjuk a (11) egyenletet. Mivel a sűrűség és a közeg is folytonos, a parciális deriválás bevihető az integrálásba a (9) egyenletben.

$$\int \rho \boldsymbol{v} \, d\boldsymbol{F} = \int div\,(\rho \boldsymbol{v})\, dV \tag{10}$$

$$\int \frac{\partial \rho}{\partial t}\, dV = -\int div\,(\rho \boldsymbol{v})\, dV \tag{11}$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + div\,(\rho \boldsymbol{v}) = 0 \tag{12}$$

Az integrálok azonosak, így az integrálandók is, így ebből adódik a kontinuitási egyenlet legtöbbet használt alakja (12). A (12)-es egyenletből látszódik, hogy a tömeg megváltozását vagy a sűrűségváltozás, vagy az anyagáramlás okozhatja. Ebben a modellben mindkét tényező fontos szerepet játszik, így nem lehet egyiket sem elhanyagolni. Az összenyomhatóságra izotermikus esetben vonatkozó termodinamikai egyenletből (13) adódóan tovább lehet alakítani a (12) -es egyenletet.

$$\beta = \frac{1}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial p} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial t}\frac{\partial t}{\partial p} \tag{13}$$

$$\beta \frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{\rho}\frac{\partial \rho}{\partial t} \tag{14}$$

Mivel a sűrűség homogén izotróp, így a divergenciából kihozható. Ezután a (12) -es egyenlet átalakítva:

$$\frac{\partial \ln \rho}{\partial t} + div\, \boldsymbol{v} = 0 \tag{15}$$

A (15) -es egyenlet a modellben használt alakja a kontinuitási egyenletnek. A (14) alapján látható, hogy mindez valójában megadja a nyomás időbeli változását is.

4.1.2. Navier–Stokes-egyenlet

A modellben a folytonos közegek mechanikájához kapcsolódó másik egyenlet a Navier–Stokes-egyenlet, mely az impulzusmegmaradást írja le. Ennek a földtudományi kutatásokban használt teljes alakja:

$$\rho \frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = \rho \boldsymbol{g} - 2\rho \boldsymbol{\Omega} \times \boldsymbol{v} - grad\ p + div\ \boldsymbol{\tau} \tag{16}$$

Mivel a modellünk méretének nagyságrendje 0,1 méter, így számos egyszerűsítés hajtható végre az egyenleten. Egyrészt a Coriolis- és a nehézségi erő ilyen mérettartományban nem változik, így azok elhanyagolhatóak. Másrészt a rendszer stabil, így a bal oldalon szereplő inerciaerő is nulla. Az így kapott egyszerűsített egyenletet (17) már Stokes-egyenletnek szokás nevezni.

$$0 = -grad\ p + div\ \boldsymbol{\tau} \tag{17}$$

Felhasználva a deviatórikus feszültségtenzor tulajdonságait (20, 21) a (17)-es vektoregyenletből két dimenzióban az alábbi kettő koordináta-egyenletre jutunk.

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \tag{18}$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} \tag{19}$$

$$\boldsymbol{\tau} = \begin{pmatrix} \tau_{xx} & \tau_{xy} \\ \tau_{yx} & \tau_{yy} \end{pmatrix} \tag{20}$$

$$\tau_{yx} = \tau_{xy} \tag{21}$$

A koordinátaegyenletek felírása után megjelennek a nyírófeszültségek, melyek deviatórikus feszültségtenzor elemei.

A folytonos közegek mechanikájában a $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}$ sebességdeformációs tenzor elemei lassú áramlás esetén, mely során nincs rotáció az alábbi alakban írható fel, ahol δ_{ij} a Kronecker-delta:

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i}\right) - \frac{1}{3}\frac{\partial v_i}{\partial x_i}\delta_{ij} \tag{22}$$

A sebességdeformációs tenzor elemei a modellben kifejtve:

$$\dot{\varepsilon}_{xx} = \frac{2}{3}\frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{1}{3}\frac{\partial v_y}{\partial y} \tag{23}$$

$$\dot{\varepsilon}_{yy} = -\frac{1}{3}\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{2}{3}\frac{\partial v_y}{\partial y} \tag{24}$$

$$\dot{\varepsilon}_{xy} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x}\right) \tag{25}$$

4.1.3. Az anyagi összefüggések

Feltételezve, hogy a rendszerünk newtoni viszkózus reológiájú, azaz diffúziós folyással deformálódik, lineáris kapcsolat állítható fel a deviatórikus feszültségtenzor és a sebességdeformációs tenzor között (26). Ebben a modellben elhanyagoljuk az elasztikus deformációt, így az összefüggés a következőképpen alakul:

$$\boldsymbol{\tau} = 2\eta\dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \tag{26}$$

A (26) egyenlet alapvetően 3 egyenletet foglal magába, hiszen a mátrixok elemeire mind igaz lesz az összefüggés.

Mivel a deformációs sebesség és a deviatórikus feszültség tenzor jellegű mennyiség, így adott pontban a teljes hatásuk jellemzésére érdemes bevezetni mindkét esetben a második invariáns négyzetgyökét (27, 28, utóbbit nyírófeszültségnek is nevezzük). Ezek az értékek az iránytól és a koordinátarendszer megválasztásától függetlenek lesznek (pl. Halter et al., 2022).

$$\dot{\varepsilon}_{\mathrm{II}} = \sqrt{\dot{\varepsilon}_{xx}{}^2 + \dot{\varepsilon}_{yy}{}^2 + 2\dot{\varepsilon}_{xy}{}^2} \tag{27}$$

$$\tau_{\mathrm{II}} = \sqrt{\tau_{xx}{}^2 + \tau_{yy}{}^2 + 2\dot{\tau}_{xy}{}^2} \tag{28}$$

4.1.4. Az egyenletrendszer összefoglalása

Ezek alapján a megoldandó egyenletrendszerünkben van 10 ismeretlen és 10 egyenlet, melyből három parciális differenciálegyenlet, így a probléma numerikusan kezelhető.

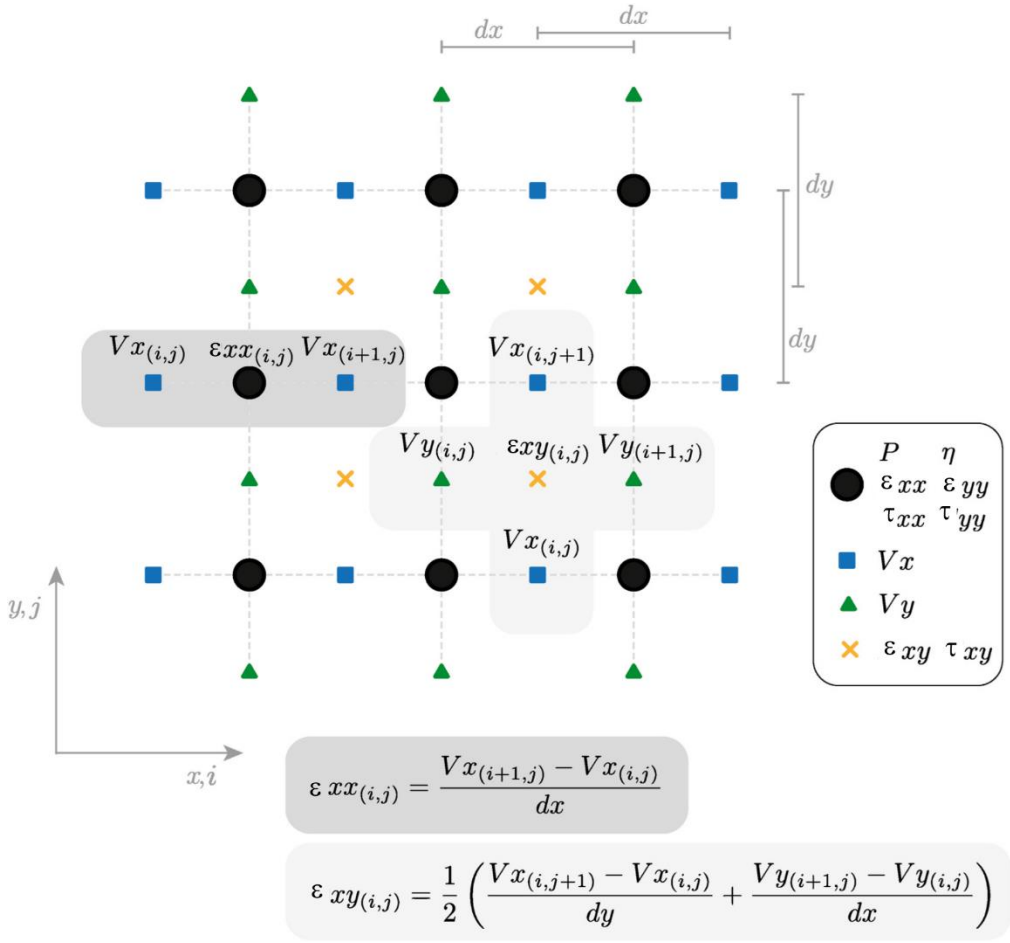
A 10 ismeretlen a következő: $v_1, v_2, \rho, p, \tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{yy}, \dot{\varepsilon}_{xx}, \dot{\varepsilon}_{xy}, \dot{\varepsilon}_{yy}$, és ezekhez az alábbi 10 egyenlet tartozik: (14), (15), (18), (19), (23), (24), (25) és a (26), ami önmagában 3 egyenletet tartalmaz.

4.2. Numerikus megoldás

A parciális differenciálegyenleteket numerikusan MATLAB programozási környezetben oldom meg véges differenciák módszerével. Ebben az esetben a deriváltakat a differenciahányodosukkal lehet közelíteni (29). A véges differenciák módszere esetében a hibát a differencia- és a differenciálhányados közti különbség okozza, ami attól függ, hogy milyen sűrű rácshálót veszünk fel, azaz milyen kicsi távolságokra vesszük a differenciahányadosokat.

$$\frac{df(x)}{dx} \approx \frac{f(x+\delta x) - f(x)}{\delta x} \tag{29}$$

A differenciaszámítás során az értékek hányadosa éppen a két érték felezőpontjában jelenik meg, ezért a rácshálót úgy kell felvenni, hogy a megfelelő deriválások után az egymással összehasonlítandó tagok ugyanazokban a pontokban legyenek (3. ábra), ilyen módon ún. lépcsőzetes rácshálót kapunk (*staggered grid*).



3. ábra: A lépcsőzetes rácsháló a véges differenciális módszerben (módosítva) (Halter et al, 2022). Az ábrán mutatja, hogy két elem differenciahányadosa pontosan középen helyezkedik el, valamint az is, hogy milyen méretű sebesség-vektorokra (*Vx, Vy*) van szükség.

A modellezés során gyorsított pszeudo-tranziens numerikus megoldást használok a differenciálegyenletek véges differenciális megoldásaihoz. A módszer 1950 óta létezik (Frankel, 1950), és a földtudományokban 1976-ban használták először (Cundall, 1976). Ez nagyon jól használható elliptikus parciális differenciálegyenletek megoldásához, ami ebben a matematikai modellben is szerepel; továbbá számos alkalommal használták folytonos mechanikai problémák megoldására a földtudományokban (Räss et al., 2022). A módszer

előnye, hogy gyors és határfeltételektől nem függ, valamint a határfeltételek változása esetén csupán módosított iterációs paraméterekkel kell végezni a számítást. A módszer hátránya az, hogy nagyon érzékeny az iterációs paraméterekre, így azokat pontosan kell megválasztani a megfelelő megoldás elérése érdekében (Räss et al., 2022).

A módszer bevezet a fizikai idő-lépésen belül egy „pszeudo-idő" iterációt. A cél az, hogy ebben a pszeudo-idő iterációs körben konvergáljanak a parciális differenciálegyenletek, és elegendően kicsi (közel nulla) maradékkal rendelkezzenek. Ebben az esetben, az egyenletek stacionárius megoldása – egy adott tolerancia mellett – teljesül a pszeudo-időben, és a modell tovább léphet a következő fizikai időlépésre (Räss et al., 2022). Így garantálja a módszer, hogy a megmaradási törvények (tömeg- és impulzusmegmaradás) fizikailag helyes megoldást adjanak (a modellben megjelenő eltérések nagyon kicsik lesznek). A dolgozatban bemutatott referencia modell esetén az alábbi feltételnek kell teljesülnie, hogy egy fizikai időlépésen belül a konvergenciát elfogadjuk: (ahol n a pixelek száma, r_i pedig a reziduálok pixelekként)

$$\sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} {r_i}^2} < 10^{-4} \tag{30}$$

Ebből látszik, hogy a hiba a reziduálok abszolút mérettől függ leginkább (Räss et al., 2022). A hibák nagysága a fizikai időben való előrehaladással általában csökkenek, így egyre kevesebb pszeudo-időbeli iteráció után éri el a modell a kívánt pontosságot.

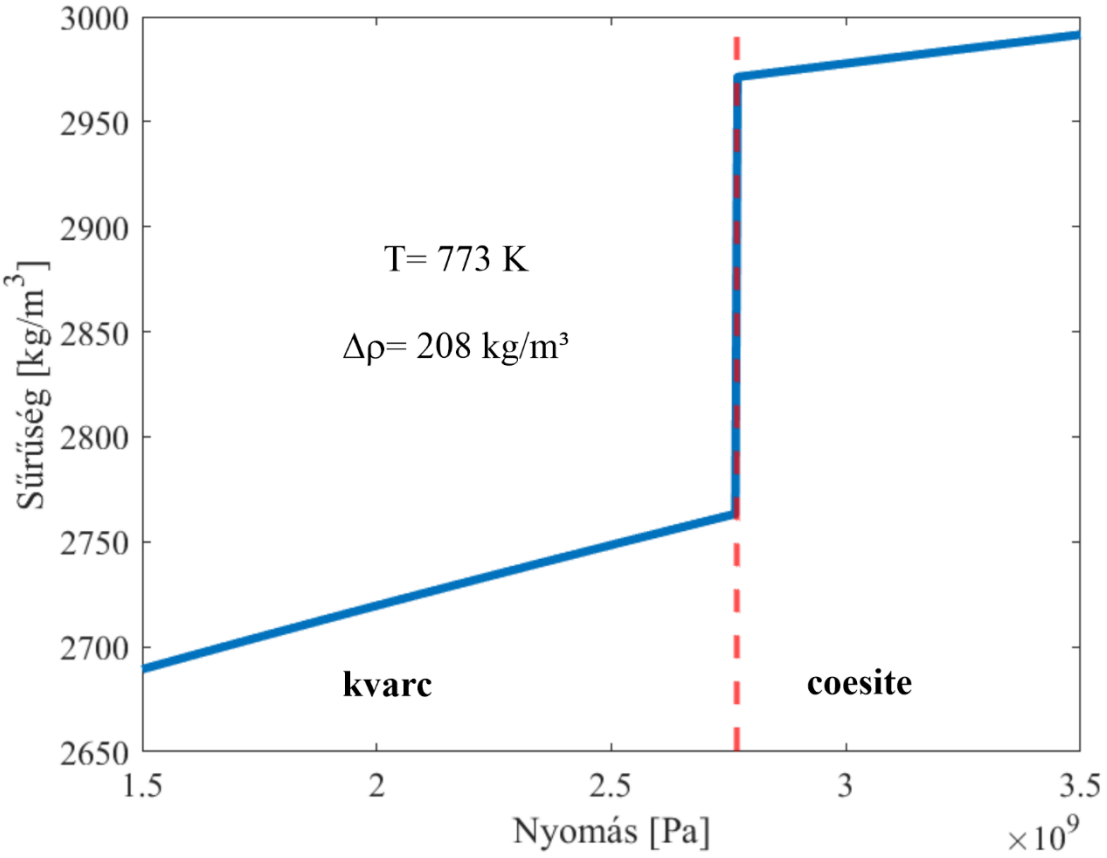
5. Eredmények

5.1. Termodinamikai adatok és fizikai paraméterek

A modellezéshez a kvarc-coesite átalakulás termodinamikai adatait a Perple_X (Connolly, 2005, 2009) szoftverből nyertem ki. Ehhez a hp62ver.dat adatbázist használtam (Holland és Powell, 1998). Ezekből a nyomás és a hőmérséklet függvényében kinyerhető az ásványtani fázisa a SiO_2-nek (1. ábra), melyből ki lehet exportálni egy sűrűség-nyomás adatbázist adott hőmérsékletre (4. ábra).

A modell fizikai paramétereit úgy állítottam fel, hogy egy nagy valószínűséggel megvalósuló helyzetet szemléltessen, azaz tipikus, szubdukciós környezetre jellemző kezdőértékeket használtam. Feltételeztem, hogy a rendszer hőmérséklete 773 K (500 °C), amely jellemző lehet nagy mélységben egy viszonylag hideg, szubdukált lemezre (pl. Holt és Condit, 2021). Ez térben és a folyamat során nem változik, a keletkező hőt elhanyagoltam (a modell mérete kicsi, így nincs jelentős variancia, valamint nem keletkezik nagy mennyiségű hő). A hőmérséklet meghatározta a kvarc-coesite fázisátalakulás nyomását és a sűrűségek változását (4. ábra). Ez

egybecseng a (14)-es termodinamikai egyenlettel, mely szerint izoterm esetben a nyomás és a sűrűség együtt változik.



4. ábra: A kvarc-coesite átalakulás a sűrűség-nyomás diagramon 773 K hőmérséklet esetén a Perple_X szoftver adatai alapján (Conolly, 2005, 2009). Az ásványtani átalakulás során a sűrűség igen jelentősen, több, mint 200 kg/m^3-rel változik.

Ezenkívül fontos paraméter a deformációs sebesség, amely az alapmodell esetén $10^{-12}\frac{1}{s}$. Ez a deformációs sebesség például akkor jöhet létre, ha tektonikus mozgások esetén általános, 3 cm/év nagyságú sebesség-differencia egy 1000 méter vastag nyírózónán keresztül oszlik el. A deformációs sebesség, a hőmérséklet és az anyagi minőség (ásványfázis) függvényében határoztam meg a viszkozitást (31). Az egyszerű modellfelépítés végett elhanyagoltam a viszkozitás változását az átalakulás során, azaz a modellem izoviszkózus. Mivel egyelőre a fázisátalakulás lefolyását szeretném reprodukálni, ezt meg lehet tenni. A valóságban a viszkozitás függ az ásványfázistól, valamint szerepet játszanak az elasztikus paraméterek is. Olyan esetben a reológiai változásokat is lehet vizsgálni.

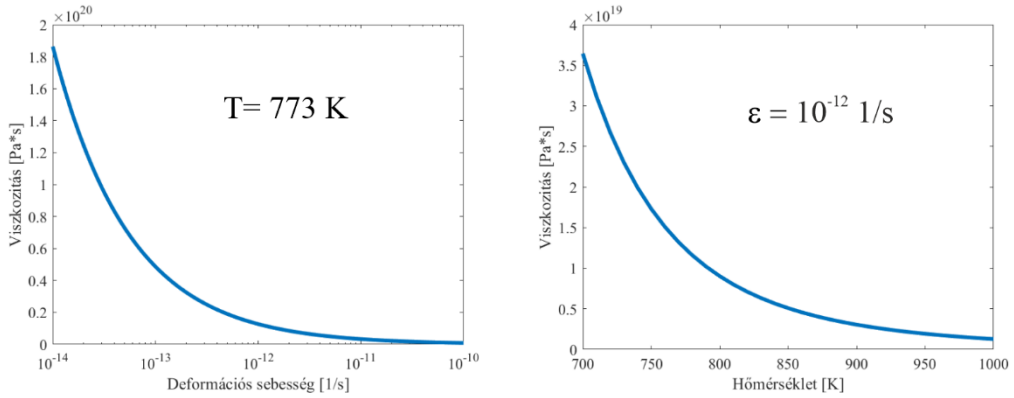
Mivel ismerjük az anyagi minőséget és a hőmérsékletet, így a viszkozitás ismert függvénye a deformáció mértékének: a két bemeneti paraméter nem független egymástól, hanem számos anyagi állandó felhasználásával kifejezhetőek (31) (pl. Spooner et al., 2022).

$$\eta = \frac{2^{\frac{1-n}{n}}}{3^{\frac{1+n}{2n}}} \cdot A^{\frac{-1}{n}} \cdot \varepsilon^{\frac{1}{n}-1} \cdot e^{\frac{Q}{nRT}} \tag{31}$$

Az állandókat száraz kvarca ismerve a deformációs sebességből meghatározható a kvarc viszkozitása, hiszen a modell izoterm, azaz a hőmérséklet állandó. Ranalli és Murphy (1987) adatai alapján száraz kvarcra az állandók így alakulnak:

- $A = 2{,}51 \cdot 10^{-24}\ Pa^{-n} \cdot s^{-1}$
- $n = 2{,}4$
- $Q = 1{,}56 \cdot 10^{5}\ \frac{J}{mol}$

n > 1 esetén ez a képlet nem newtoni reológia esetén igaz, és jó becslést ad a különböző fizikai állapotokban a kvarc viszkozitására. Ebben az esetben az alapmodell adataira ($T = 773\ K, \varepsilon = 10^{-12}\frac{1}{s}$) a viszkozitás $4{,}86 \cdot 10^{19}\ Pa \cdot s$ lesz (31).



5. ábra: A viszkozitás deformációs sebesség- (balra) és hőmérsékletfüggése (jobbra) száraz kvarc esetén (Spooner et al., 2022; Ranalli és Murphy, 1987).

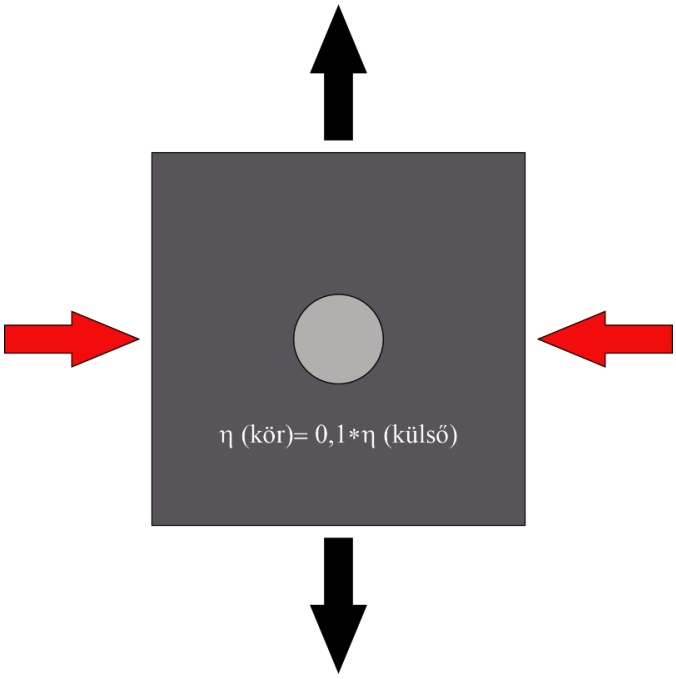
5. 2. Referenciamodell

5.2.1. Modellgeometria, kezdeti feltételek, határfeltételek

A modellezést egy 0,1 méter oldalú négyzeten végzem. Ezen belül definiálok egy 0,005 méter sugarú, kör alakú viszkozitás-anomáliát. A viszkozitás-anomália szükségszerű, hiszen teljesen homogén közegben a deformáció is teljesen homogén, megakadályozva ezzel a tektonikus nyomás-anomáliák és az esetleges metamorf reakciók kialakulását. A modell közepén elhelyezkedő körben a viszkozitás a tizede a (31)-ből adódó kvarcra jellemző értéknek, tehát egy gyenge zónát reprezentál.

A kezdeti feltétel szerint a nyomás értéke a modell teljes területén 2,760 GPa, ami 8 MPa-lal kisebb, mint a kvarc-coesite fázisátalakulás beindulásának nyomása. Ennek az a célja, hogy viszonylag csekély nyomás-növekedésre beindulhasson a fázisátalakulás, ugyanakkor lehessen követni a rendszer fázisátalakulás előtti viselkedését is. Kezdetben a sűrűség az egész modellben állandó, a kvarcra az adott nyomáson jellemző érték.

Az ellipszoid alakú viszkozitás-anomáliák esetén a kialakuló nyomás perturbációra összenyomhatatlan közegben még analitikus megoldás is létezik (pl. Moulas et al., 2014), így ilyen egyszerű kezdeti feltételek mellett a numerikus eredmények könnyen validálhatók. Az egyszerű modell- és anomália-geometria miatt a referencia modell kifejezetten általánosnak tekinthető, a kialakuló nyomás perturbációk pedig összevethetők az összenyomhatatlan közegek analitikus megoldásával, ezzel hozzájárulva az eredmények validációjához.

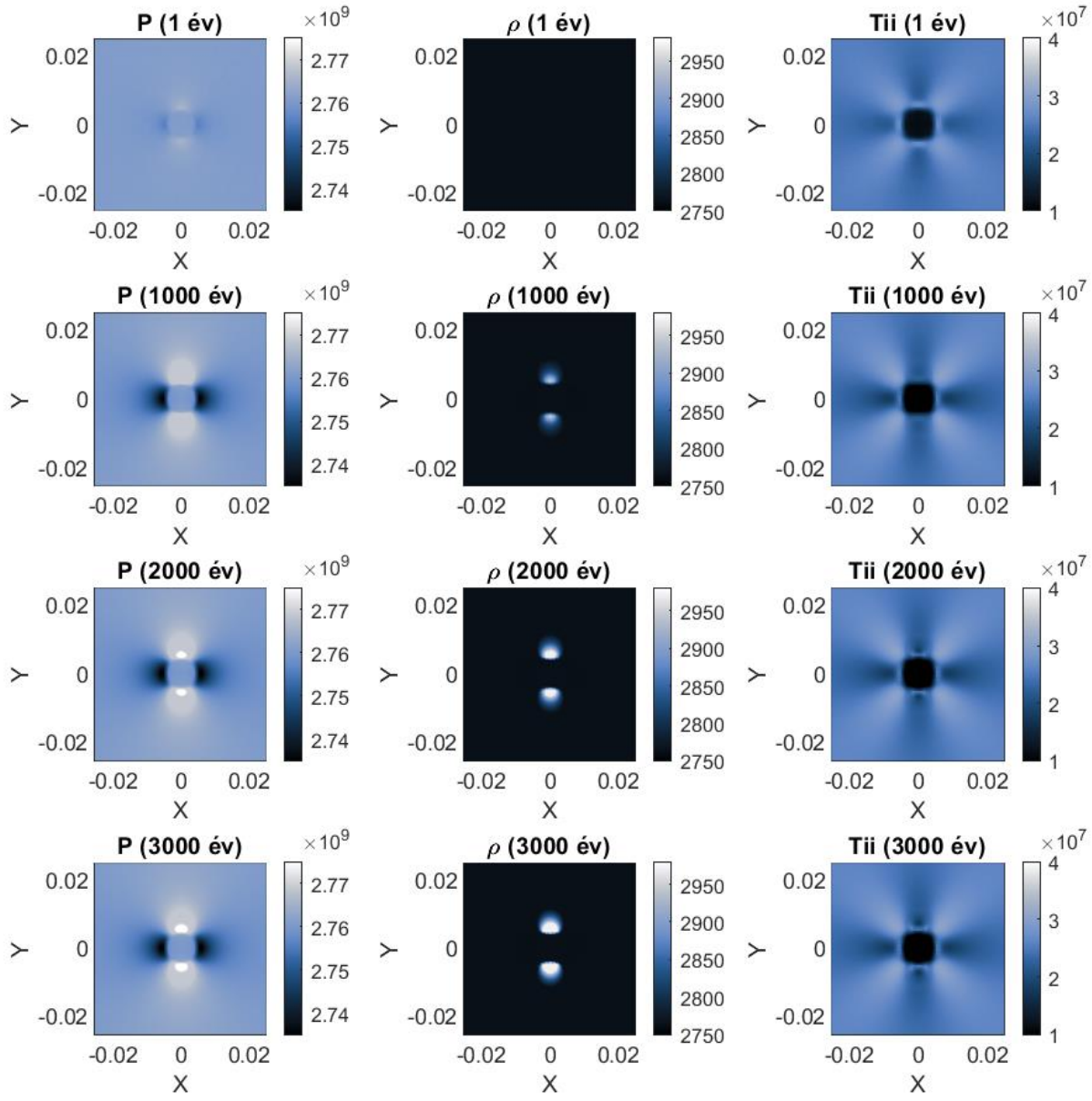


6. ábra: A modell geometriája és a tiszta nyírásos (*pure shear*) deformációs mező. A kezdeti inhomogenitást biztosító, és ezért a fázisátalakulás beindulásához szükséges viszkozitás-anomáliát a modell közepén található kör jelzi.

A modellt numerikusan egy 200 x 200-as rácshálón oldom meg, tiszta nyírásos (*pure shear*) kinematikai kezdeti feltételt használok, ahol – a szubdukciós zónákra jellemzően – rövidülés horizontális, az extenzió vertikális (6. ábra). Valamint a modell szélein a sebesség időben állandó, nem frissül az iterációs lépések során, így egy konstans kinematikai határfeltételt képez.

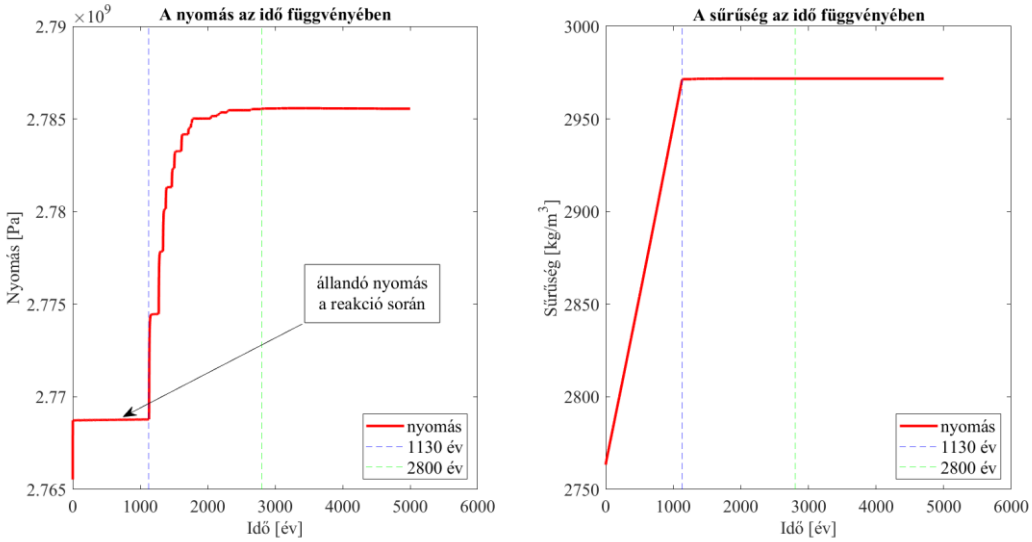
5.2.1. Az referenciamodell eredményei

Az modellben a tiszta nyírás hatására a viszkozitás-anomália körül feszültség-perturbációk alakulnak ki, amelyek a feszültségtenzor izotróp ($\boldsymbol{\sigma_m}$, vagy másképpen nyomás, P) és anizotróp ($\boldsymbol{\tau}$, deviatórikus feszültség) komponenseit is érintik. A modellben meghatározott kezdeti nyomás a kör alakú anomália vertikális oldalain megnő (tektonikus túlnyomás jön létre), míg a horizontális oldalain csökken (nyomásárnyékos zóna alakul ki, 7. ábra). A tektonikus túlnyomás által érintett területen a nyomás hamar eléri az átalakulás nyomását, így elindul a kvarc-coesite fázisátmenet, ami lokális sűrűség-növekedésben nyilvánul meg (7. ábra). A termodinamikai adatok alapján akkor történik meg a teljes átalakulás, ha a sűrűség eléri a 2971 kg/m^3 értéket; ez 1130 év után történik meg a referencia modellben.



7. ábra: A referencia modell esetében a nyomás, sűrűség és nyírófeszültség 1, 1000, 2000 és 3000 év után (színskála: Crameri, 2018a, 2018b). Minden fizikai mennyiség SI mértékegységben van ábrázolva. Az átalakulási zóna jobb láthatósága kedvéért csupán a modell középső negyede van ábrázolva, azon kívül nem is történnek érdemi változások. A viszkozitás-anomália körül alakul ki egy, a kezdőértékhez képest nagyobb és egy kisebb nyomású zóna. A nagyobb nyomású zónában nagyjából 1000 év alatt végbemegy a kvarc-coesite átalakulás, azután pedig fokozatosan nő a coesite mennyisége (a reakció zóna területe növekszik).

A nyírófeszültségek maximuma túlnyomásos és nyomásárnyékos zónák között, a minimuma pedig a kisebb viszkozitású kezdeti anomália területén jelentkezik. A nyírófeszültség nagysága időben jórészt változatlan (7. ábra), mivel a modellben a metamorf átalakulás – a minél egyszerűbb modell kedvéért – nem jár viszkozitás-változással (tehát a keletkező coesite viszkozitása megegyezik a kvarc viszkozitásával), valamint a deformációs sebesség sem változik jelentősen. A nyírófeszültség egyedül az átalakulási zónában változik (7. ábra), annak köszönhetően, hogy a feszültségtenzor izotróp komponense (nyomás) folyamatosan növekszik. Az erőegyensúlyból (Stokes-egyenletek, 18, 19) adódik, hogy ezzel párhuzamosan a deviatórikus feszültségek (a nyírófeszültség invariáns, T_{II} komponensei, (28)) pedig csökkennek.

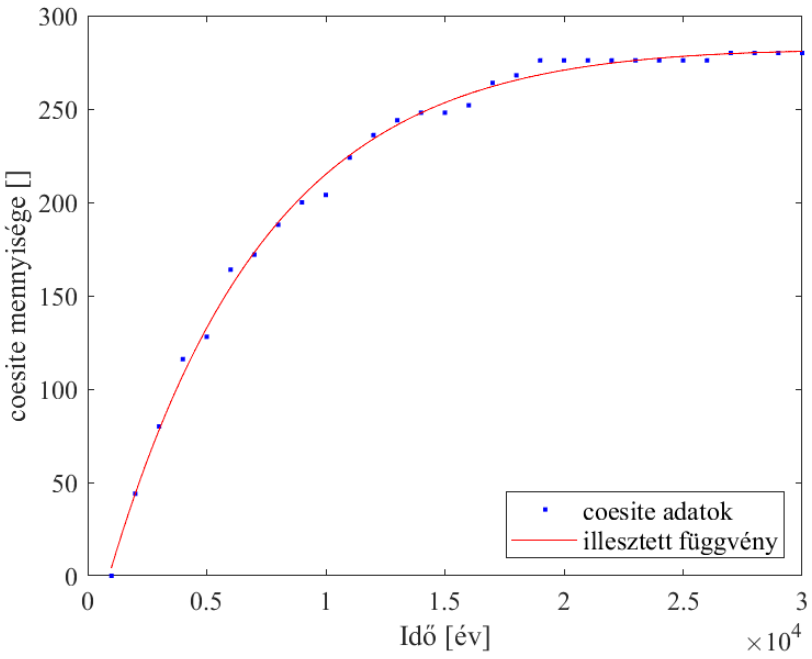


8. ábra: A sűrűség és a nyomás maximumának időbeli változása az alapmodellben.

A fázisátalakulás létrejötte alatt a maximális nyomás állandó, viszont utána állandó sűrűségen gyorsan emelkedik, amíg el nem éri az egyensúlyi állapotot (8. ábra). A maximális

nyomás és sűrűség körülbelül 2800 év után nem nő tovább (8. ábra). Ezzel szemben reakció zóna, vagyis a coesite mennyisége, tovább nő (9. ábra).

A coesite az anomália két vertikális oldalán keletkezik (7. ábra), és a mennyisége eleinte időben gyorsan nő, azaz folyamatosan növekszik a két reakció zóna mérete (9. ábra). Az eredmények azonban mutatják, hogy adott kezdeti anomália geometria és fizikai paraméterei mellett nem keletkezhet akármennyi coesite. A coesite mennyiségére egy exponenciális görbét lehet illeszteni, vagyis a mennyiségét a hosszú távon beálló egyensúlyi nyomás-eloszlás határozza meg. (9. ábra).



9. ábra: A coesite mennyiségének (pixelszám szerint) időbeli változása 30 000 évig az alapmodellben és az erre illesztett exponenciális függvény. A coesitet ebben az esetben úgy definiálom, hogy a modell egységének a sűrűsége meghaladja a termodinamikai adatokban a coesite-hez tartozó minimális sűrűséget (2971 kg/m^3).

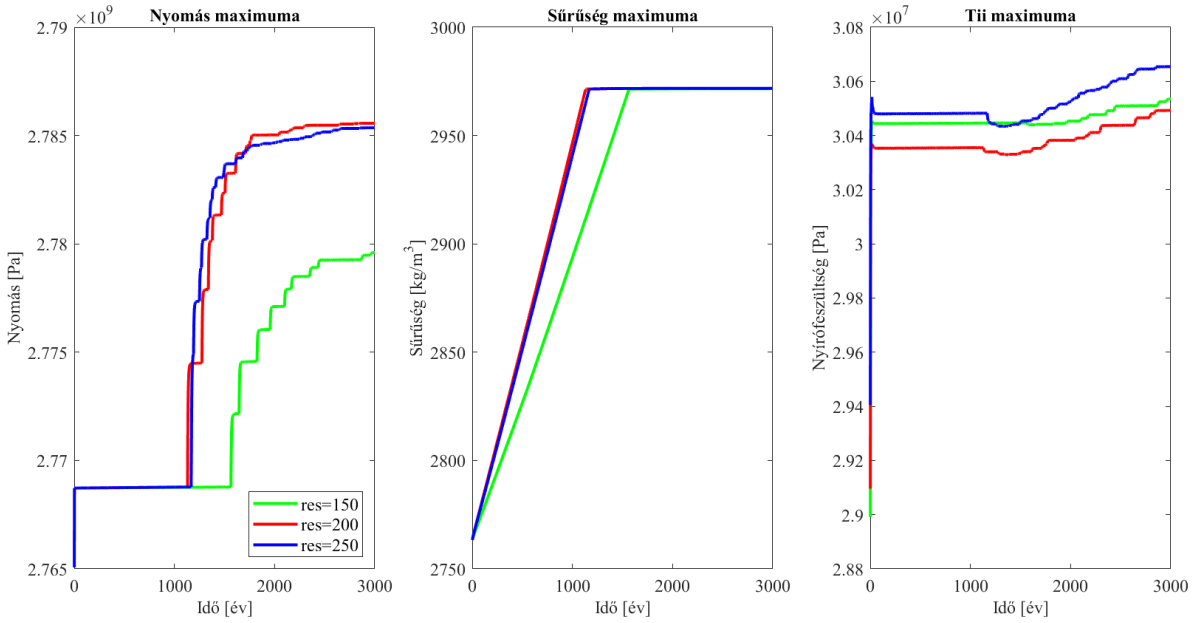
5.3. Paramétertesztek

A paramétertesztek elsődleges szerepe a bemutatott referencia modell érzékenységének bemutatása kulcsparaméterek módosításának függvényében. Numerikus modellek esetében különösen fontos a numerikus felbontás tesztelése, valamint a pszeudo-tranziens módszer esetében lényeges az úgynevezett toleranciateszt elvégzése is. Ez a két teszt nagyban hozzájárul a modell validációjához, azaz igazolja, hogy a modellezéshez használt paraméterek elegendően pontos eredményt adnak. Ehhez mindkét esetben egy kisebb és egy nagyobb felbontásra, illetve tolerancia értékre is lefuttattam a modellt. Szintén kulcsparaméter a modellben a kezdeti- és

határfeltételként alkalmazott deformációs sebesség, ezért ennek a paraméternek nagyságrendbeli változásai esetén is lefuttattam a modellt.

5.3.1. Felbontásteszt

A felbontásteszt során azt vizsgáltam, hogy a modellem mennyire érzékeny a gridháló sűrűségére. Az alapmodell 200 x 200-as felbontása mellett modelleztem egy 150 x 150-es és egy 250 x 250-es esetet is. Az eredményből látszódik, hogy míg 150-es felbontás mellett a nyomásmaximum időbeli változásában jelentős eltérés mutatkozik, ellenben a 250-es felbontás már nagyon hasonló eredményeket mutat a referencia modell 200-as felbontásához viszonyítva (10. ábra).



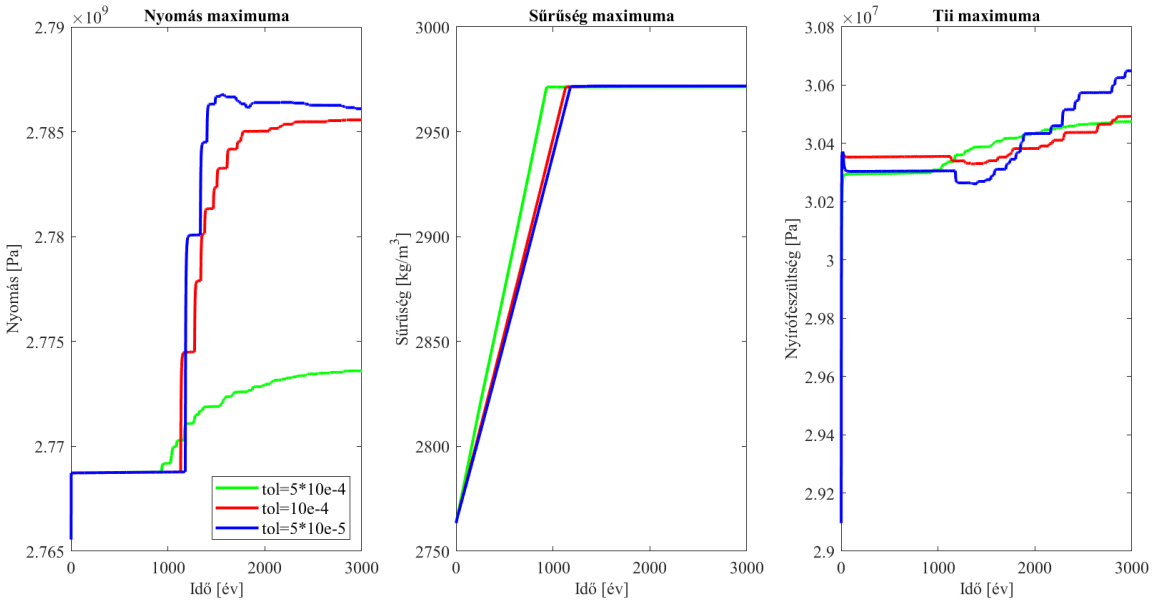
10. ábra: A nyomás, a sűrűség és a nyírófeszültség maximuma az idő függvényében ábrázolva 3 különböző felbontás esetén. Az ábráról látszódik, hogy a 200-as és a 250-es felbontás szinte teljesen megegyezik.

Mivel a felbontás növelésével a kulcsparaméterek időbeli fejlődése nem változik érdemben, kijelenthető, hogy a vizsgált modellgeometria mellett az általam használt felbontás elegendően pontos eredményt ad. Azonban az is látszik, hogy érdemben kisebb felbontást a lényegesen romló pontosság miatt nem érdemes használni, hiába gyorsítja meg a modellek futási idejét.

5.3.2. Toleranciateszt

A numerikus megoldás hibája a reziduálok abszolút méretétől függ, ez jellemzi a pszeudo-időben a megoldás pontosságát. A referenciamodellemben ezt az értéket 10^{-4}-nek választottam. A modellezést elvégeztem egy kisebb ($5*10^{-5}$) és egy nagyobb ($5*10^{-4}$) toleranciaszintre is, hogy megvizsgáljam, elegendően pontos eredményt mutat-e a referencia szimuláció. Ez alapján

látszódik, hogy a pontosság további növelése nem okoz érdemi változást a nyomás és a sűrűség maximumának időbeli fejlődésében, tehát a referencia modell tolerancia értéke elfogadható (11. ábra).



11. ábra: A nyomás, a sűrűség és a nyírófeszültség maximuma az idő függvényében $5*10^{-4}$-es, 10^{-4}-es és $5*10^{-5}$-es tolerancia mellett. Látszódik, hogy az alapmodellhez képest a toleranciaszint csökkentésével érdemi változást nem kapunk.

5.3.3 Deformációs sebesség teszt

Az modellezett rendszer egyik fő paramétere a deformációs sebesség, mely jellemzi a különböző nyírózónákat. A laboratóriumi kísérletekből alapján is kimutatható (Richter et al., 2016), hogy a kvarc-coesite ásványtani fázisátalakulást egyik legjobban befolyásoló paraméter a deformációs sebesség. Ugyanígy erre utalnak a teoretikus összefüggések, melyek mutatják, hogy a deformációs sebesség nagyban befolyásolja a viszkozitást és a deviatórikus feszültséget is (26, 31).

A deformációs sebesség teszt esetében a referenciamodellen kívül 4 különböző értékre végzek modellezést, melynek a célja az, hogy lefedje a Földön a szubdukciós zónákban előforduló deformációs sebességeket. Így végzek számítást 10^{-10}- 10^{-14} 1/s közötti értékekre.

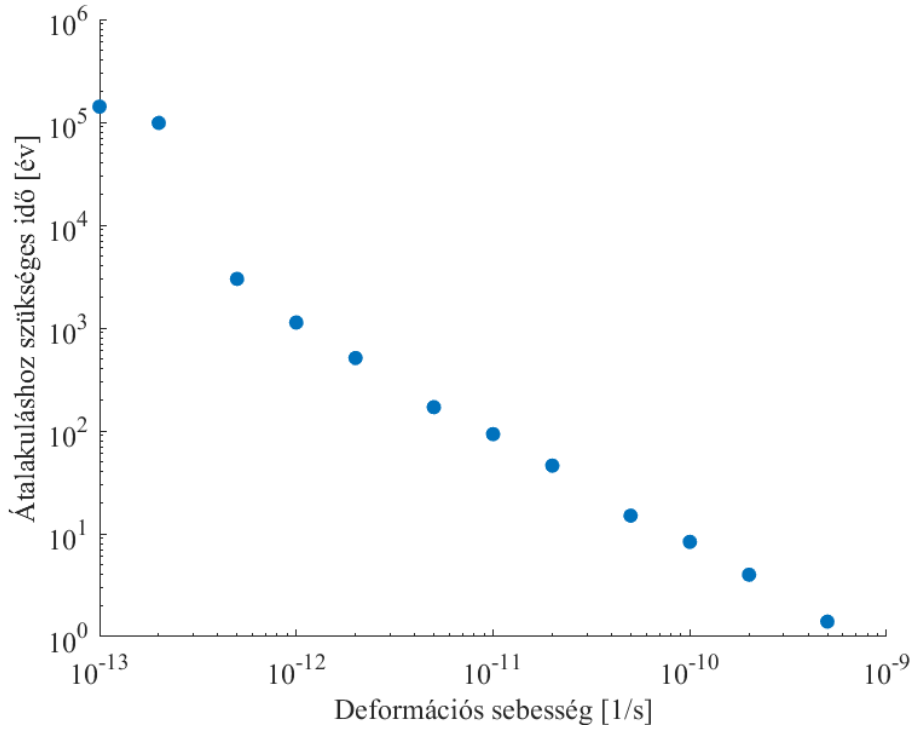
A különböző deformációs sebességek esetén a folyamatok jelentősen eltérő időskálán történnek, viszont a jelenségek nagyon hasonlóak. Éppen ezért a modellezésben is más fizikai időlépést alkalmazok (hasonlóan nagyságrendeket változik az időlépés is). Ezek alapján a fázisátalakulás létrejöttéhez szükséges időtartamok között is jelentős különbségek vannak (2.

táblázat). A 10^{-14} 1/s-os deformációs sebesség mellett nem is megy végbe az átalakulás, mivel az adott modell geometriában és paraméterek mellett a beálló egyensúlyi nyomás maximuma a túlnyomásos zónákban sem éri el a fázisátalakulás beindulásához szükséges nyomás értéket. Egy magasabb viszkozitású kőzet (például nem tiszta kvarc, hanem kvarc tartalmú gneisz) esetén viszont a kialakuló nagyobb nyomásperturbációk miatt várhatóan ilyen deformációs sebesség mellett is létrejöhetne az átalakulás.

2. táblázat: A kvarc-coesite átalakuláshoz szükséges idő különböző deformációs sebességek esetén. Az átalakulás létrejöttének definíciója, hogy egy pixelben a sűrűség meghaladja a 2971,3 kg/m^3-es értéket.

Deformációsebesség [1/s]	**A fázisátalakulás létrejöttéhez szükséges idő [év]**	**Elért maximális sűrűség [kg/m^3]**
10^{-10}	8,34	2976
10^{-11}	93,1	2973
10^{-12}	1 130	2971,8
10^{-13}	142 000	2971,3

A fázisátmenet létrejöttéhez gyors deformációk esetén geológiai időskálán kevés idő kell, szinte pillanatszerűen történnek meg (2. táblázat). Ezzel ellentétben 10^{-13} 1/s-os deformációs sebességek esetén a szükséges idő már összemérhető a szubdukciós zónákra jellemző karakterisztikus idővel.



12. ábra: A különböző deformációs sebességek mellett a fázisátalakuláshoz szükséges idő log-log skálán ábrázolva.

A deformációs sebességek és az átalakuláshoz szükséges idő kapcsolatát vizsgálva következik, hogy $5 \cdot 10^{-13}$ $\frac{1}{s}$-os deformációs sebességnél gyorsabb deformáció esetén log-log skálán jó közelítéssel egyenesre illeszkednek a fázisátalakulás végbemeneteléhez szükséges idők. Eszerint, ha egy nagyságrenddel nő a deformációs sebesség, nagyjából 12-szeresére nő a fázisátalakulás végbemenetelének sebessége (12. ábra). Viszont ennél lassabb deformáció esetén már az adatok nem illeszkednek erre az egyenesre, a fázisátalakulás sebessége erőteljesebben csökken. Az, hogy ezek a pontok miért nem illeszkednek egy egyenesre (12. ábra), illetve, hogy milyen viszkozitás-modell esetén mekkora deformációs sebesség mellett jön létre a fázisátalakulás, további kutatási kérdéseket vet fel.

A legfőbb fizikai paraméterek (nyomás és sűrűség) időbeli és térbeli alakulása nagyon hasonló a különböző deformációs sebességű modellekben, csupán az átalakulás sebességében térnek el jelentősen. Minden modellben megjelenik egy sűrűségmaximum, amelyben egyensúlyra áll be a modell. Ez minél nagyobb a deformációs sebesség, annál magasabb nyomáson következik be. A közeg kompresszibilitásának köszönhetően a magasabb egyensúlyi nyomás pedig néhány kg/m^3-el nagyobb egyensúlyi sűrűséget eredményez (2. táblázat).

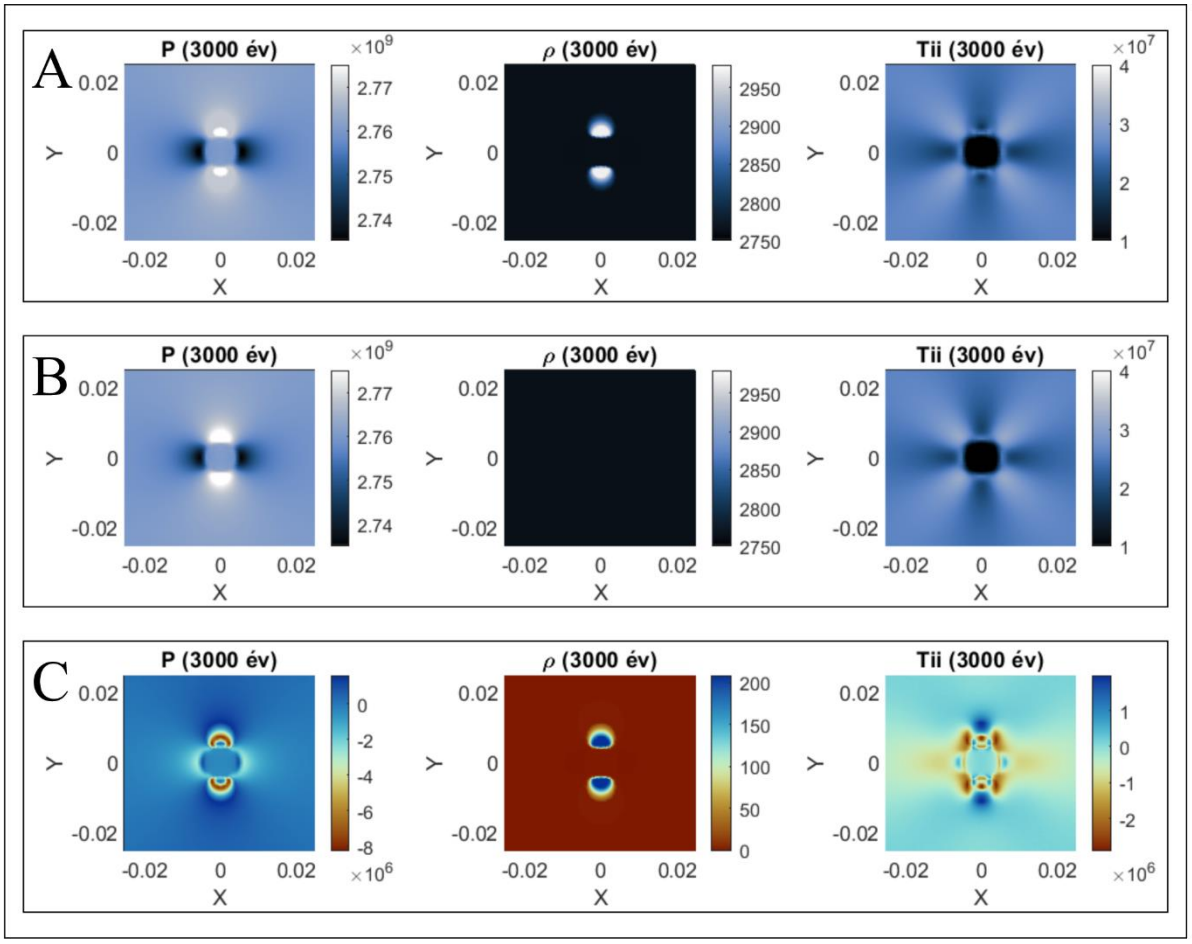
6. Diszkusszió

6.1 A modell megbízhatósága

Modellemben összenyomható Stokes-egyenletrendszert vizsgáltam két dimenzióban termodinamikai adatok alapján. Az általam felállított modellben egy gyengeségi (alacsony viszkozitású) zóna található, mely körül a deformáció hatására tektonikus túlnyomás alakul ki, és ezeken a területeken indul meg a SiO_2 fázisátalakulás.

Korábbi tanulmányokban összenyomhatatlan esetben vizsgálták a viszkozitás-anomáliák körül kialakuló feszültség-perturbációkat. Moulas et al. (2014) erre az esetre az analitikus megoldást is megadja. Az analitikus megoldás jelen modellel megegyező feltételek (gyenge viszkozitású ellipszoid anomália és horizontális rövidülés) esetén nagyon hasonló feszültség perturbációt produkál. Mindkét esetben a viszkozitás-anomália vertikális oldalain alakul ki túlnyomásos zóna, valamint a horizontális oldalakon nyomásárnyékos zóna, ami az itt bemutatott numerikus megoldás megbízhatóságát mutatja. Szintén erre a problémára ad numerikus megoldást Halter et al. (2022) is. Ebben a tanulmányban az analitikus megoldáshoz hasonlóan összenyomhatatlan közegre vizsgálják ezt a jelenséget, azaz elhanyagolják az anyagok kompresszibilitását és az ásványtani fázisátalakulásokat.

Az általam bemutatott modellezés nagyon hasonló módszereken alapul, gyakorlatilag csak az a különbség, hogy ebben a modellben a közeg összenyomható. Az összehasonlíthatóság céljából elkészítettem a saját referenciamodellem összenyomhatatlan változatát, hogy vizsgálni tudjam a megjelenő különbségeket. A két megoldás nagyon hasonló nyomás- és nyírófeszültség-anomáliákat eredményez: a megoldások különbsége mindkét esetben néhány MPa nagyságú, amely három, illetve egy nagyságrenddel kisebb a nyomás és a nyírófeszültég abszolút értékeknél (13. ábra). A fő különbség természetesen a sűrűségben jelenik meg, ami az összenyomhatatlan megoldás esetén állandó (13c ábra).



13. ábra: Az összenyomható és az összenyomhatatlan eset összehasonlítása (színskála: Crameri, 2018a; 2018b). Minden esetben csak a modell középső negyede van ábrázolva és a mértékegységek SI-ben vannak. (*A*) A referenciamodell 3000 év elteltével. (*B*) Az összenyomhatatlan eset 3000 év elteltével ugyanolyan kezdőfeltételek mellett, mint a referenciamodell. Az összenyomhatatlan eset időfüggetlen, így azt tetszőleges időpontban tekinthetjük. (*C*) Az összenyomható és az összenyomhatatlan modell különbsége. A nyomáskülönbségek a két esetben nagyságrenddel kisebbek, így szinte teljesen ugyanolyan szerkezű nyomásanomáliák lépnek fel.

A numerikus megoldás fizikai helyességét segíti elő az is, hogy a pszeudo-tranziens megoldás során minden fizikai időlépésben ellenőrzésre kerül a megmaradási egyenletek (kontinuitási, Stokes) maradéka, és csak akkor léphet tovább a modell a következő időlépésre, ha minimális maradékkal rendelkeznek a parciális differenciál-egyenletek (Räss et al., 2022). Így a modellnek alaptulajdonsága, hogy a fizikai egyenleteket nagy pontossággal betartja. A megbízhatósághoz hozzáad még az is, hogy a referenciamodellre elvégzett felbontás- és toleranciatesztek alapján a modell numerikus paramétereinek javításával nem kapunk érdemben különböző eredményt.

6.2 A kvarc-coesite átalakulás reológiai következményei

A kvarc-coesite fázisátalakulás a nagy nyomású szubdukciós környezetek (UHP metamorf fácies) egyik tipikus fázisátalakulása, amely képes lehet nagyobb skálán is lényeges reológiai változásokat okozni (pl. Asano et al., 2021). Ez annak köszönhető, hogy diszlokációs kúszás esetén a kvarcra és coesite-re jellemző anyagi állandók különböznek (3. táblázat), ami eltérő feszültség–deformációs sebesség kapcsolatot eredményez (32): a coesite akár egy nagyságrenddel ellenállóbb lehet a feszültséggel szemben (Asano et al., 2021).

$$\dot{\varepsilon} = \Delta\sigma^n * A * e^{\frac{-Q}{RT}} \tag{32}$$

3. táblázat: A (32)-ben szereplő változók kvarcra és coesite-re (Ranalli és Murphy, 1987; Renner et al., 2001).

Állandó	Értéke száraz kvarcra	Értéke coesitere
preexponenciális állandó (A)	$2{,}51 * 10^{-24}\ Pa^{-n} * s^{-1}$	$\ln A = -3{,}7\ MPa^{-n} * s^{-1}$
aktivációs energia (Q)	$1{,}56 * 10^5\ \frac{J}{mol}$	$2{,}75 * 10^5\ \frac{J}{mol}$
exponenciális kitevő (n)	2,4	3

Ezen felül a kvarc és a coesite elasztikus anyagi állandói is különböznek (pl. Perple_X adatok alapján, Connolly, 2005; Holland és Powell, 1998). Ezekből adódik, hogy amennyiben a kvarc egy része átalakul coesite-té, az jelentősen módosíthatja a szubdukciós környezet reológiai viselkedését (Zhou et al., 2005; Zhang et al., 2013; Asano et al., 2021). Konkrétabban, a kvarcból átalakult coesite körül jelentősen nőhet a feszültség, illetve a deformáció fókusza áttevődhet egy gyengébb kőzettestre. Amennyiben a fő nyírózóna a kvarc-coesite átalakulásnak köszönhetően a szubdukciós zóna egy alsóbb kőzettestében lokalizálódik, lehetségessé válhat a coesite-ben gazdag kéreganyag elválása a szubdukálódó lemezről, és az azt követő exhumációja (Asano et al., 2021). A minél egyszerűbb kezdő modell felállításának célja miatt jelen modellben a fent említett reológiai változások (fázisátalakulásból eredő viszkozitás-változás, elasztikus paraméterek változása) még nincsenek beépítve, ezért a fázisátalakulás

reológiai hatását jelen dolgozatban még nem tudom vizsgálni. A reológiai visszacsatolások implementálása azonban a kezdő modellre építve várhatóan nem ütközik majd nehézségekbe, és a bemutatott modell jó alapként szolgál majd a szubdukciós zónák szerkezeti fejlődésének vizsgálatában is.

A maximális nyomás és sűrűség időbeli változása mutatja, hogy a fázisátalakulás során, amíg a sűrűség el nem éri a maximumot, a nyomás állandó (8. ábra). A fázisátalakulás kezdete előtt, illetve utána ellenben gyorsan növekszik a nyomás, egészen az egyensúlyi állapot beállásáig. Ez a jelenség arra utal, hogy a fázisátalakulás közben, a látens hővel analóg módon, látens mechanikai energia van a rendszerben, ami később – a munkavégzésből fakadóan - nyomásnövekedéssel jelenik meg. Ez megmutatja, hogy egy fázisátalakulás során az ásvány nem csak hőenergiát, hanem mechanikai energiát is leköthet, amellyel hozzájárul különböző nyomáson stabil ásványfázisok együttes előfordulásához a metamorf kőzetekben.

6.3 A kvarc-coesite átalakulás időskálája

A képlékeny nyírózónákban a zóna közepétől a széle felé haladva folyamatosan csökken a deformáció sebessége. Fagereng és Biggs (2019) alapján egy viszonylag gyorsan deformálódó képlékeny nyírózónában általában 10^{-12}-10^{-14} 1/s-os deformációs sebességek fordulnak elő, míg „aszeizmikus lassú csúszás” (*aseismic slow slip*) események közben a deformációs sebesség 10^{-10} 1/s-nál is gyorsabb lehet (pl. Behr és Bürgmann, 2021). A bemutatott fázisátalakulás modell alapján, a szubdukciós zónák gyorsabban deformálódó részein – geológiai léptékben – nagyon gyorsan végbemehet a kvarc-coesite átalakulás (2. táblázat), ezáltal hirtelen beálló reológiai változásokat okozhat. A szubdukált lemezek lassan deformálódó, nyírózónákon kívüli részén, illetve a nyírózónák szélein a deformáció által okozott átalakulás sokkal lassabb, összevethető az alábukás karakterisztikus időskálájával.

Amennyiben egy szubdukció 2 cm/év vertikális sebesség-komponenssel halad, egy maximális sebességgel alábukó kőzettest 100 000 év alatt nagyságrendileg 50 MPa litosztatikus nyomás-növekedést ér el, ami jóval meghaladja a 10^{-13} 1/s-os deformációs sebességű modell tektonikus túlnyomását ugyanazon időtartam alatt (2. táblázat). Ebből adódik, hogy ilyen deformációs sebesség mellett a passzív betemetődés (szubdukció) hatékonyabb mechanizmusa lehet a fázisátalakulás beindításának. A referenciamodellben (10^{-12} 1/s-os deformációs sebesség) azonban 1000 év alatt lejátszódik a fázisátalakulás (2. táblázat), ami a becslésből kiindulva mindössze 0,5 MPa litosztatikus nyomás-növekedésre lenne elég, míg a referencia modell tektonikus túlnyomása 25 MPa. Tehát, magas deformációs sebességek esetén maga a deformáció lényegesen hatékonyabb módja a fázisátalakulás beindításának, mint az

alábukás/betemetődés folyamata. A 2. táblázat alapján sejthetjük, hogy 10^{-14} 1/s-os vagy lassabb deformációs sebesség esetén a fázisátalakulás létrejöttéhez – ha egyáltalán létrejöhet ilyen feltételek mellett a deformáció által indukált fázisátalakulás - millió évekre lenne szükség, amely során akár több 10 km-es alábukás is lejátszódhat egy szubdukciós zónában.

6.4 A modell jelentősége és továbbfejlesztési lehetőségei

A bemutatott modell alkalmas egy deformálódó közegben végbemenő kvarc-coesite fázisátalakulás szimulációjára, amelyre a szakirodalomban eddig nem volt példa. A bemutatott modellhez hasonló egyenletrendszert használó, összenyomható (*compressible*) Stokes-megoldások termodinamikai adatokkal való összekapcsolására már vannak példák az elmúlt néhány évből (Yamato et al., 2022, Baïsset et al., 2024). Ezek a tanulmányok demonstrálták a módszer által kínált hatalmas lehetőségeket a metamorf fázisátalakulások és a kőzetdeformáció kapcsolatának jobb megértése szempontjából. A dolgozatban bemutatott modell jelentős továbblépési lehetőséget kínál a magas nyomású szubdukciós környezetek tektonikai fejlődésének modellezésére (pl. Asano et al., 2021), ehhez a fázisátalakulás reológiai visszacsatolásait szükséges még beépíteni az egyenletrendszerbe.

A bemutatott modell demonstrálja a tektonikus túlnyomás jelentőségét, kihatását a metamorf fázisátalakulásokra. Az eredmények alapján gyors deformáció esetén a tektonikus túlnyomás lényegesen hatékonyabb mechanizmusa lehet a fázisátalakulásnak, mint a passzív betemetődés (szubdukció).

A modell egy általános, jelentősen leegyszerűsített rendszert reprezentál, amely tektonikai szempontból elsőrendű becslésekre alkalmas. A pontosabb nyomásbecslés és fázisátalakulási időtartam-becslés érdekében komplexebb, realisztikusabb nyírózóna-geometriákat és a viszkózus mellett elasztikus deformációt is tervezek használni a közeljövőben.

7. Összefoglalás

A kőzetek deformációja és metamorfózisa közötti kölcsönhatások vizsgálata, prediktív modellek fejlesztése a geodinamika egyik fontos kihívása, hiszen ezek a kölcsönhatások nagyban meghatározzák a litoszféra reológiáját és deformációs mechanizmusait a lemeztektonika egyik fő színterén, a nyírózónákban. Kutatásomban a(z) (ultra)magas nyomású szubdukciós környezetekre jellemző kvarc-coesite ásványtani fázisátalakulás modelljét építettem fel deformálódó közegre, termodinamikai adatok alapján.

Az SiO_2 ásványtani fázisátalakulását összenyomható, viszkózus reológia mellett, véges differenciák módszerével modelleztem. A modellben sikerült igazolni a kutatási hipotézist, miszerint a kvarc-coesite fázisátalakulás nem csak passzív betemetődés miatt, hanem deformáció hatására is végbe mehet, és ez a folyamat numerikusan megoldható, modellezhető. A modellben sikerült kimutatni a metamorf fázisátalakulást, amely túlnyomásos zónákban jön létre, valamint sikerült vizsgálni a fázisátalakulás során a fizikai paraméterek változását. A modell megbízhatóságát numerikus felbontás és tolerancia tesztekkel, valamint szakirodalmi összehasonlítással igazoltam.

A coesite időbeli mennyisége a modellben egy exponenciális függvényt követ, tehát az átalakulás egyszer telítődik, azaz a folyamat nem teljes mértékben öngerjesztő. A reakció zónában a nyomás és a nyírófeszültség egymással ellentétesen változik, a nyomás a coesite megjelenésének helyén magasabb, a nyírófeszültségnek pedig a minimuma jelentkezik ott. A maximális nyomás a fázisátalakulás során konstans, előtte és utána viszont gyorsan növekszik.

A fázisátalakulás időtartama a deformációs sebességtől erősen függ. Az eredmények demonstrálják, hogy gyors deformáció esetén a tektonikus túlnyomás lényegesen hatékonyabb mechanizmusa lehet a fázisátalakulásnak, mint a passzív betemetődés (szubdukció). Gyorsan deformálódó szubdukciós nyírózónákban tehát a deformáció hatására a reakció nyomásánál kisebb litosztatikus érték (mélység) mellett is végbe mehet a fázisátalakulás.

A kvarc-coesite fázisátalakulásnak a szubdukciós zónák szerkezeti fejlődésében is lényeges szerepe lehet, mivel a kristálytani átalakulás jelentős reológiai változásokat okoz, ami átalakíthatja a szubdukciós nyírózónák geometriáját, elhelyezkedését. A bemutatott modell reológiai visszacsatolások és realisztikusabb nyírózóna-geometriák beépítése után lehetőség nyújt a szubdukciós zónákban végbemenő komplex deformáció-metamorfózis kölcsönhatások vizsgálatára, ezáltal a szubdukciós zónák tektonikai fejlődésének jobb megértésére.

8. Felhasznált irodalom

Asano, K.; Michibayashi, K.; Takebayashi, T. (2021): Rheological Contrast between Quartz and Coesite Generates Strain Localization in Deeply Subducted Continental Crust. Minerals 11, 842.

Baïsset, M.; Yamato, P.; Duretz, T. (2024): Weakening induced by phase nucleation in metamorphic rocks: Insights from numerical models. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 25.

Behr, W. M.; Bürgmann, R. (2021): What's down there? The structures, materials and environment of deep-seated slow slip and tremor. Philosophical Transactions of the Royal Society A, 379.

Beltrando, M.; Rubatto, D.; Manatschal, G. (2010): From passive margins to orogens: The link between ocean-continent transition zones and (ultra) high-pressure metamorphism. Geology, 38, 559.

Boyd, F. R.; England, J. L. (1960): The quartz-coesite transition. Journal of Geophysical Research. 65, 749.

Brace, W. F.; Kohlstedt, D. L. (1980): Limits on lithospheric stress imposed by laboratory experiments. Journal of Geophysical Research 85, 6248.

Brudzinski, M. R.; Thurber, C. H.; Hacker, B. R.; Engdahl, E. R. (2007): Global prevalence of double Benioff zones. Science, 316, 1472.

Burov, E.; Francois, T.; Yamato, P.; Wolf, S. (2014): Mechanisms of continental subduction and exhumation of HP and UHP rocks. Gondwana Research, 25, 464.

Campanale, F.; Mugnaioli, E.; Folco, L.; Gemni, M.; Lee, M. R.; Daly, L.; Glass, B. P. (2019): Evidence for sobsolidus quart-coesite transformation in impact ejecta from the Australasioan tektike strewn field. Geochimica et Cosmochimica Acta, 264, 105.

Coes, L., Jr. (1953): A new dense crystalline silica. Science, 118, 131.

Connolly, J. A. D. (2005): Computation of phase equilibria by linear programming: A tool for geodynamic modeling and its application to subduction zone decarbonation. Earth and Planetary Science Letters 236, 524.

Connolly, J. A. D. (2009): The geodynamic equation of state: what and how. Geochemistry, Geophysics, Geosystems 10, 10.

Crameri, F. (2018)a: Geodynamic diagnostics, scientific visualisation and StagLab 3.0, Geoscientific Model Development 11, 2541.

Crameri, F. (2018)b: Scientific colour maps. Zenodo

Cundall, A. P. (1976): Explicit finite differnce method in geomechanics, Second International Conference Numerical Methods in Geomechanics, Blacksburg, 1, 132.

Fagereng, Å.; Biggs, J. (2019): New perspectives on ‘geological strain rates’ calculated from both naturally deformed and actively deforming rocks. Journal of Structural Geology, 125, 100.

Fossen, H. (2010): Structural Geology, Cambridge University Press

Frankel, S. P. (1950): Convergence rates of iterative treatments of partial differential equations, Mathematical Tables and Other Aids to Computation, 4, 65.

Halter, W. R.; Macherel, E.; Schmalholz; S. M. (2022): A simple computer program for calculating stress and strain rate in 2D viscous inclusion-matrix systems. Journal of Structural Geology, 160, 104617.

van Hinsbergen, D. J. J.; Torsvik, T. H.; Schmid, S. M.; Matenco, L. C.; Maffione, M.; Vissers, R. L. M.; Gürer, D.; Skapman, W. (2020): Orogenic architecture of the Mediterranean region and kinematic reconstruction of its tectonic evolution sincet he Triassic. Gondwana Research. 81, 79.

Hirth, G.; Tullis, J. (1994): The brittle-plastic transition in experimentally deformed quartz aggregates. Journal of Geophysical Research: Solid Earth. 99 1173.

Holland, T. J. B.; Powell, R. (1998): An internally consistent thermodynamic data set for phases of petrological interest. Journal of Metamorphic Geology. 16, 309.

Holt, A. F.; Condit, C. B. (2021): Slab temperature evolution over the lifetime of a subduction zone. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, *22*.

Jolivet, L.; Faccenna, C.; Goffe, B.; Burov, E.; Agard, P. (2003): Subduction tectonics and exhumation of high-pressure metamorphic rocks in the Mediterranean orogens. American Journal of Science, 303, 353.

Kelemen, P. B.; Hirth, G. (2012): Reaction-driven cracking during retrograde metamorphism: Olivine hydration and carbonation, Earth and Planetary Science Letters, 345–348, 81.

Li, Z. H.; Gerya, T. V.; Burg, J. P. (2010):), Influence of tectonic overpressure on *P–T* paths of HP–UHP rocks in continental collision zones: thermomechanical modelling. Journal of Metamorphic Geology, 28, 227.

Liou, J. G.; Zhang, R.; Ernst, W. G. (1994): An introduction to ultrahigh-pressure metamorphism. Island Arc, 3, 1.

Moulas, E.; Podladchikov, Y.; Kostopoulos, D. (2013): The Problem of Depth in Geology: When Pressure Does Not Translate into Depth. Petrology. 21, 527.

Moulas, E.; Burg, J. P.; Podladchikov, Y. (2014): Stress field associated with elliptical inclusions in a deforming matrix: Mathematical model and implications for tectonic overpressure in the lithosphere. Tectonophysics, 631, 37.

Perrillat, J. P.; Daniel, I.; Lardeaux, J. M.; Cardon, H. (2003): Kinetics of the Coesite–Quartz Transition: Application to the Exhumation of Ultrahigh-Pressure Rocks. Journal of Petrology. 44, 773.

Plümper, O.; Wallis, D.; Teuling, F.; Moulas, E.; Schmalholz, S. M.; Amiri, H.; Müller, T. (2022): High-magnitude stresses induced by mineral-hydration reactions. Geology, 50, 1351.

Porkoláb, K. (2021): Burial-exhumation cycles in the continental crust derived from Mediterranean field studies and numerical modelling, Phd thesis, Utrecht University

Ranalli, G.; Murphy, D. (1987): Rheological stratification of the lithosphere. Tectonophysics 132, 281.

Räss, L.; Utkin, I.; Duretz, T.; Omlin, S.; and Podladchikov, Y. (2022): Assessing the robustness and scalability of the accelerated pseudo-transient method, Geoscientific Model Development, 15, 5757.

Ren, D. (2022): Study on the Phase Transition from Quartz to Coesite under High Temperature and High Pressure. Minerals 12, 963.

Reuber, G.; Kaus, B. J. P.; Schmalholz, S. M.; White, R. W. (2016): Nonlithostatic pressure during subduction and collision and the formation of (ultra)high-pressure rocks. Geology, 44, 343.

Richter, B.; Stünitz, H.; Heilbronner, R. (2016): Stresses and pressures at the quartz-to-coesite phase transformation in shear deformation experiments. Journal of Geophysical Research: Solid Earth. 121, 8015.

Renner, J.; Stöckhert; B., Zerbian; A., Röller, K.; Rummel, F. (2001): An experimental study into the rheology of synthetic polycrystalline coesite aggregates. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 106, 19411.

Rowe, D. C.; Griffith, W. A. (2015): Do faults preserve a record of seismic slip: A second opinion. Journal of Structural Geology. 78, 1.

Sági, T.; Szakmány, Gy.; Józsa, S.; Spránitz, T. (2022): Gyakorlati ismeretek metamorf kőzetek vizsgálatához. Eötvös Loránd Tudományegyetem

Schaffrinna, T.; Milman, V.; Winkler, B. (2024): Pathway for a martensitic quartz–coesite transition. Scientific Reports. 14, 3760.

Schmalholz, S. M.; Moulas, E.; Plümper, O.; Myasnikov, A. V.; Podladchikov, Y. (2020): 2D hydro-mechanical-chemical modeling of (de)hydration reactions in deforming heterogeneous rock: The periclase-brucite model reaction. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 21.

Schmalholz, S. M.; Moulas, E.; Räss, L.; Müntener, O. (2023): Serpentinite dehydration and olivine vein formation during ductile shearing: Insights from 2D numerical modeling on porosity generation, density variations, and transient weakening. Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 128.

Schmalholz, S. M.; Podladchikov, Y. (2013): Tectonic overpressure in weak crustal-scale shear zones and implications for the exhumation of high-pressure rocks, Geophysical. Research. Letters., 40, 1984

Spooner, C.; Scheck-Wenderoth; M., Cacace; M., Anikiev, D. (2022): How Alpine seismicity relates to lithospheric strength. International Journal of Earth Sciences, 111, 1201.

Yamato, P.; Duretz, T.; Baïsset, M.; Luisier, C. (2022): Reaction-induced volume change triggers brittle failure at eclogite facies conditions. Earth and Planetary Science Letters, 584, 117520.

Warren, C. J. (2013): Exhumation of (ultra-)high-pressure terranes: Concepts and mechanisms. Solid Earth, 4, 75.

Zhang, Z.; Deng, Y.; Chen, L.; Wu, J.; Teng, J.; Panza, G. (2013). Seismic structure and rheology of the crust under mainland China. Gondwana Research, 23, 1455.

Zhou, Y.; He, C.; Song, J.; Ma, S.; Ma, J. (2005): An experiment study of quartz-coesite transition at differential stress. Chinese Science Bulletin. 50, 446.

9. Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Porkoláb Kristófnak a hatalmas segítségért, a számos konzultációért, javítási ötletért. Az ő ilyen nagyfokú segítsége nélkül nem készülhetett volna el ilyen minőségben ez a dolgozat.

Függelék

A tudományos diákköri kutatásomban felhasznált programkód (a referenciamodell adataival), a Perple_X szoftverből kiexportált adatsor, valamint a színskála megtekinthető az alábbi linken:

FUGGELEK

Saját eredmények

- Felállítottam az ásványtani fázisátalakulás matematikai modelljét newtoni reológia és izoterm és izoviszkózus közelítések mellett.
- A matematikai modellt az általam definiált határfeltételek mellett numerikusan véges differenciák módszerének segítségével megoldottam.
- Ehhez MATLAB programozási környezetben kódot fejlesztettem.
- A használt termodinamikai adatokat Perple_X szoftverből a hp62ver.dat adatbázisból kinyertem; meghatároztam a megfelelő viszkozitásokat.
- A referenciamodellhez felbontás és toleranciatesztet végeztem.
- A deformációs sebességekre paramétertesztet végeztem.
- Összenyomhatatlan esetre is elvégeztem a modellezést.
- Eredményeimet ábrázoltam, értelmeztem.
- Eredményeimet diszkutáltam, azokból következtetéseket vontam le.

Eltérés a másik Országos Tudományos Diákköri Dolgozathoz képest

Az Országos Tudományos Diákköri Konferencia Fizika, Földtudományok, Matematika szekciójába két dolgozattal neveztem, melyek teljesen eltérő témájúak. A másik dolgozatom címe: *Az Első Katonai Felmérés tartományi térképeinek rendszere: a hálózati észak irányok és feltételezett kijelölésük*. A másik OTDK dolgozatom esetében témavezetőm Timár Gábor, az ELTE Természettudományi Kar Geofizikai és Űrtudományi Tanszék tanszékvezető egyetemi tanára. A két dolgozat témájában és módszerében is teljesen eltérő.