arXiv:2611.31131v1 [physics.flu-dyn] 23 Nov 2026

将反应性孔隙波建模为脱水板片中的流体释放过程

Liudmila Khakimova[1], Konstantin Huber[2],Yury Y. Podladchikov[1],Johannes C. Vrijmoed[2],Boris Antonenko[2], 和 Timm John[2]
[l]洛桑大学地球科学研究所，瑞士[2]柏林自由大学地质科学研究所，
德国
通讯作者： Liudmila Khakimova(liudmila.khakimova@unil.ch)

摘要。俯冲蛇纹岩的脱水作用会释放水流体，这些流体必须从板片中高效抽取。本文提出一种完全耦合的二维流体–力学–化学模型，用于描述变形和脱水蛇纹岩中的反应性孔隙波。模型通过针对氧化镁–氧化亚铁–一氧化硅$_2$–H_2O系统的吉布斯自由能最小化实现热力学闭合，并纳入水相中溶解的一氧化硅$_2$ 。我们利用来自米尔迪塔蛇绿岩（阿尔巴尼亚）的蛇纹岩天然多尺度成分分布图，设定初始一氧化硅$_2$ 和氧化亚铁非均质性。模拟表明，这些内在的化学变化会在脱水过程中触发孔隙度和流体流动的自发局部化，无需预先设定通道几何形态。通道化源于去压实、流体压力累积、浮力驱动流，以及与一氧化硅$_2$贫乏的含水流体渗入和橄榄石形成相关的交代反应之间的耦合作用。由此形成的富流体通道向上传播，并发展成类似天然脉体系统的连通网络。研究结果表明，成分非均质蛇纹岩中的反应性孔隙波为聚焦流体流动、增强脱水俯冲板片中的流体抽取提供了一种可靠机制。

1 引言

俯冲带是地球上最具活力的系统之一，海水蚀变洋岩石圈在此下沉进入地幔。它们连接地球的外生与内生储库，并对全球化学与能量收支产生重大影响。随着俯冲板块升温，含水矿物逐渐变得不稳定并释放其结合水。板片以每年数厘米的速度下沉，因此需要高效的流体抽取机制，以防水分完全流失至深部地幔（Van Keken 等，2011；Plümper 等，2017）。因此，板片脱挥发分作用的效率对于在地质时间尺度上维持地球挥发分储库的整体稳定性至关重要。俯冲

岩石会强烈限制普遍的达西型流动，使这种分散式流体释放效率低下（Connolly and Podladchikov, 1998; Plümper et al., 2017）。相反，通道化流动被广泛认为是流体以高通量穿过板片的主要机制（Zack and John, 2007; John et al., 2012; Plümper et al., 2017; Taetz et al., 2018; Tian et al., 2019; Piccoli et al., 2021）。

随着脱水变质作用逐步进行，俯冲板片密度增大，而释放出的流体会改变其流经岩石的物理和化学性质。流体–岩石相互作用可使矿物组合发生叠加改造、促进变形、改变地震波速度，并形成化学蚀变带（John et al., 2004; Gao et al., 2007; Rondenay et al., 2008; Spandler et al., 2011; Chen et al., 2019; Zertani et al., 2019; Kaatz et al., 2022; Yamato et al., 2022）。板片脱水过程中释放的流体可到达地幔楔，并可能与地幔楔地震活动及熔融成因直接相关（例如 McGary et al., 2014; Halpaap et al., 2019; White et al., 2019; Yoshida et al., 2023）。这些交代流体所携带的化学物质被认为造就了弧岩浆独特的化学特征（例如 Elliott, 2003; John et al., 2012; Spandler and Pirard, 2013; Chen et al., 2019; Plank and Manning, 2019; Li et al., 2020）。

近期的数值研究表明，内在的化学非均质性和反应性流动能够强烈影响脱水作用的起始，并促进相互连通的脉网络演化（Huber 等，2022年，2024年）。然而，脱水反应发生在微米至毫米尺度上，而更大尺度的重力效应则控制着流体分异（Plümper 等，2017年），前提是多孔介质与自由流体发生相互作用（两相流）。引入两相效应会导致多孔介质发生浮力驱动的变形：压实会排出流体并降低孔隙度，而去压实则允许流体聚集并向上迁移。

流体排出可以通过多种机制发生。在脆性条件下，流体超压可能超过岩石的抗拉强度并诱发水力压裂，从而形成瞬态的高渗透性通道，以容纳快速排流（Miller 等，2003年；Bons 等，2012年；Yoshida 等，2023年）。在更具韧性的条件下，流体运移可能受孔隙度波控制；孔隙度波是黏弹塑性岩石中由流体超压驱动的局部高孔隙度自维持区（Connolly and Podladchikov，1998年；Miller 等，2003年；Räss 等，2014年；Wilson 等，2014年；Räss 等，2018年）。在此类波的前缘，流体超压会诱发去压实，从而促进向上传播；在后缘，压力下降会诱发压实，使孔隙闭合。岩石流变学对波形态具有一阶控制作用：去压实弱化是指去压实比压实更容易发生，它会促进通道化不稳定性和拉长的孔隙结构形成（Connolly and Podladchikov，2007年，2015年；Yarushina 等，2015年；Räss 等，2019年；Yarushina 等，2020b）。这些机制日益被用于解释自然界中的渗透性结构，例如沉积盆地中的流体烟囱（Räss 等，2018年；Yarushina 等，2022年）、与 CO_2 储存相关的流体逸出管（Johnson 等，2024年），以及在推断的古俯冲带中观测到的、规模达千米的高压交代系统的岩石学特征（Piccoli 等，2021年）。

俯冲带中的流体流动从根本上说是反应性的（John 等，2004年；Spandler 等，2011年；van der Straaten 等，2008年；Ague 和 Nicolescu，2014年；Ague 等，2022年；Manning 和 Frezzotti，2020年）。化学非均质性会影响脱水流体的成分，而由于流体相和固相持续尝试达到热力学平衡，成分变化会直接反馈于反应进程和流体化学。反应性流动可以改变岩石基质的矿物学、整体成分、孔隙度和渗透率（例如，Huber 等，2022年；Bras 等，2023年；Schmalholz 等，2024年、2026年）。矿物反应会改变固体密度，而溶解–沉淀反应则可能显著改变流体密度（John 等，2012年）。要捕捉这些耦合过程，最终更完整地理解以下各者之间的反馈，需要

板片脱水、板片内地震活动和弧岩浆作用，需要建立整合热力学、质量输运与力学的模型（例如，Bessat 等，2022；Khakimova 和 Podladchikov，2024年；Khakimova 等，2025年b；Porkoláb 等，2025年）。

本文提出的模型是朝着综合描述岩石变形、流体迁移和元素输运迈出的重要一步。与以往方法相比，该模型包含两项关键进展。首先，利用热力学查找表，将力学与热力学数据充分耦合；这些查找表追踪相关 P–T–X 空间中的流体与岩石化学、矿物反应、密度变化和体积响应。其次，模型通过纳入源自天然岩石样品的成分分布图，明确考虑了真实的化学非均质性（Huber 等，2024）。尽管对如此陡峭且空间变化的成分梯度进行建模在数值上颇具挑战，但数值格式的最新改进使模拟能够高效运行，无需高性能计算设施（Khakimova 等，2025a）。

将充分耦合的水力-力学-化学（HMC）模型与天然岩石成分相结合，为研究岩石脱水过程中孔隙度的动态演化开辟了新途径。这一综合方法使我们能够探究化学非均质性、反应性流动、力学过程和重力过程如何相互作用并形成通道化流体通道。这是理解俯冲带中的流体释放、地震活动和岩浆生成的关键一步。

2 模型公式

我们考虑一种单相超临界双组分流体渗入可变形且具有化学反应性的黏弹性多孔介质。该系统包含四种化学组分：{H_2O，SiO_2,MgO，FeO}。其中，MgO 和 FeO 被归类为不动组分，在该系统相关的压力、温度和浓度范围内，它们始终结构性地结合在固体基质中。其余组分 H_2O 和 SiO_2, 属于迁移组分，可在固相与流体相之间分配，因此参与平流和扩散输运以及化学质量交换。

下面给出控制该封闭系统的方程组。这些方程根据各相及各化学组分的质量和动量守恒定律推导而来，并在经典热力学框架内建立。在弱形式下假设局部热力学平衡，并遵循 Yarushina 和 Podladchikov（2015年）的方法，可得到确保耦合水力—力学—化学（HMC）模型满足热力学一致性的本构关系。推导自洽连续介质尺度方程的方法源自 Landau 和 Lifshitz（1987年）提出的经典原理，并在近期研究中得到系统拓展（Bessat 等，2022；Yarushina 等，2023；Khakimova 和 Podladchikov，2024；Schmalholz 等，2023、2024、2026）。模型公式中使用的符号和缩略语定义完整列表见表1。

2.1 守恒定律与本构关系

我们从流固耦合系统的总质量守恒开始，

$$\frac{\partial \rho^t}{\partial t} = -\nabla_i \left[\left(v_i^f - v_i^s \right) \rho^f \phi + v_i^s \rho^t \right], \tag{1}$$

表1. 符号及其简写定义。

符号	含义	Unit
P^s, P^f	固体和流体压力	Pa
P^t	总压力， $P^f\varphi + P^s(1-\varphi)$	Pa
τ^s, τ^f	固体和流体偏应力张量	Pa
τ^t	总偏应力张量， $\tau^f\varphi + \tau^s(1-\varphi)$	Pa
v^s v^f	固体和流体质点速度	$\mathrm{m\,s^{-1}}$
q	达西通量， $\varphi(v^f - v^s)$	$\mathrm{m\,s^{-1}}$
K^s, K^f	固体和流体体积模量	Pa
G	剪切模量	Pa
η_s	固体基质剪切黏度	Pa s
η_φ	多孔岩石体积（压实）黏度	Pa s
k/η_f	渗透率与流体黏度之比	$\mathrm{m^2\,Pa^{-1}s^{-1}}$
R	去压实弱化因子	–
φ	孔隙度	–
ρ^s ρ^f	固体和流体质量密度	$\mathrm{kg\,m^{-3}}$
ρ^t	总密度， $\rho^f\varphi + \rho^s(1-\varphi)$	$\mathrm{kg\,m^{-3}}$
C^{f,SiO_2}	流体中一氧化硅$_2$ 组分的质量浓度	–
$C^{s,k}$	固体中组分 $k = \{$一氧化硅$_2$,氧化镁，氧化亚铁$\}$ 的质量浓度	–
$C^{s,\ im}$	固体基质中不动（不反应）部分的质量浓度， $C^{s,\ MgO} + C^{s,\ FeO}$	–
$\rho C^{t,\ SiO_2}$	系统中每单位体积内一氧化硅$_2$ 组分的质量， $\rho^f\varphi C^{f,\ SiO_2} + \rho^s\ (1-\varphi)\ C^{s,\ SiO_2}$	千克 米$^{-3}$
$\rho C^{t,\ k}$	系统中每单位体积不动组分的质量 $k = \{$氧化镁，氧化亚铁$\}$， $\rho^s(1-\varphi)C^{s,\ k}$	千克 米$^{-3}$
T	饱和岩石温度	K
δ_{ij}	克罗内克δ函数	–
$\frac{d^s}{dt}$	相对于固相的物质导数， $\frac{\partial}{\partial t} + v_i^s\nabla_i$	–
$\frac{d^f}{dt}$	相对于流体相的物质导数， $\frac{\partial}{\partial t} + v_i^f\nabla_i$	–
$\frac{d^\nabla\tau_{ij}}{dt}$	固体基质的雅曼应力率	Pa s^{-1}
ω_{ij}	固体速度梯度的反对称部分， $\omega_{ij} = \frac{1}{2}(\nabla_j v_i^s - \nabla_i v_j^s)$–	$\mathrm{s^{-1}}$

其中，上标 s 和 f 分别表示固相与流体相，下标 i 指空间坐标$i = (x,\ y,\ z)$，重复指标采用爱因斯坦求和约定。总质量密度 ρ^t定义为$\rho^t = \rho^f\phi + \rho^s(1-\phi)$，表示两相系统单位体积内的总质量。

假设氧化镁和氧化亚铁是不动的，且不能分配到流体相中，则它们的质量在固体基质中守恒。因此，单位体积内不动固体的质量守恒方程可写为（无源项）：

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho^s(1-\varphi)C^{s,im}\right] = -\nabla_i\left[v_i^s\rho^s(1-\varphi)C^{s,im}\right], \tag{2}$$

其中，简写符号 $C^{s,\ \mathrm{MgO}} + C^{s,\ \mathrm{FeO}} = C^{s,\ \mathrm{im}}$ 表示固体基质中非挥发组分的质量浓度，该组分由不动组分氧化镁和氧化亚铁构成。

忽略扩散通量时，迁移组分一氧化硅的质量守恒方程可写为

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\rho C^{t,SiO_2}\right] = -\nabla_i\left[v^f\,\phi\rho^f\,C^{f,SiO_2} + v^s\,(1-\phi)\rho^s\,C^{s,SiO_2}\right], \tag{3}$$

其中，$C^{f,\ SiO_2}$ 和 $C^{s,\ SiO_2}$ 分别是一氧化硅在流体相和固相中的质量浓度，而 $\rho C^{t,\ SiO_2}$ 是系统单位体积内组分一氧化硅的总质量，其定义见表1。

流体动量守恒由达西定律表示为

$$\phi\left(v_i^f - v_i^s\right) = -\frac{k}{\eta^f}\left(\nabla_i P^f + g_i\rho^f\right) \tag{4}$$

其中 k 为渗透率，且 η^f 流体黏度。渗透率通过卡曼-科泽尼关系与孔隙度相关 ip

$$k = k^0\left(\frac{\phi}{\phi^0}\right)^3 \tag{5}$$

其中，k^0 和 ϕ^0 分别为背景渗透率和背景孔隙度。

总动量守恒表示为

$$\nabla_j\left(-P^t\delta_{ij} + \tau_{ij}^t\right) - g_i\rho^t = 0. \tag{6}$$

将偏应力张量与固体速度场梯度联系起来的本构关系，对应于Maxwell黏弹性流变学:

$$\frac{1}{2G}\frac{d^\nabla\tau_{ij}}{dt} + \frac{\tau_{ij}}{2\eta^s} = \frac{1}{2}\left(\nabla_j v_i^s + \nabla_i v_j^s\right) - \frac{1}{3}\left(\nabla_k v_k^s\right)\delta_{ij}, \tag{7}$$

其中，G —剪切模量，η^s —固体基质剪切黏度，d^∇/dt —雅曼导数，τ_{ij} —偏应力张量，以及 v_i^s—固体速度分量。

体积黏度 η^φ 与孔隙度成反比，并在流体超压区域降低 R 倍，以体现去压实弱化（Connolly and Podladchikov，1998年、2007年；Räss 等，2019年；Yarushina 等，2020b）；此处通过双曲正切函数将其参数化:

$$\eta_\varphi = \eta_c\frac{\phi_0}{\phi}\left[1 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{R} - 1\right)\left(1 + \tanh\left[\frac{P^f - P^t}{\lambda}\right]\right)\right], \tag{8}$$

其中， λ 为过渡带陡峭度；在参考孔隙度 ϕ_0 和 $P^t \gg P^f$ 下的参考体积压实黏度 η_c 为:

$$\eta_c = \frac{\eta_s}{C\,\phi_0}, \tag{9}$$

其中， C 是一个流变常数，用于量化剪切黏度与参考体积压实黏度之比。

采用所选的流变关系，流体相和固相的弹性压缩率可写为（Yarushina 和 Podladchikov，2015年）:

$$\frac{K^f}{\rho^f}\frac{d^f\rho^f}{dt} = \frac{d^f P^f}{dt}, \tag{10}$$

$$\frac{K^s}{\rho^s}\frac{d^s\rho^s}{dt} = \frac{d^s P^s}{dt}, \tag{11}$$

其中， K^f 和 K^s 分别为流体相和固相的体积模量， d^f/dt 和 d^s/dt 表示分别针对流体相和固相取的物质导数。

利用流体压力、固体压力和总压力之间的关系

$$P^t = \varphi P^f + (1-\varphi)P^s, \tag{12}$$

方程（11）可改写为

$$\frac{K^s}{\rho^s}\frac{d^s\rho^s}{dt} = \frac{1}{1-\varphi}\left(\frac{d^s P^t}{dt} - \varphi\frac{d^s P^f}{dt} + \frac{P^t - P^f}{1-\varphi}\frac{d^s\varphi}{dt}\right). \tag{13}$$

为使控制方程组闭合，我们采用一个由固体基质黏性压实推导出的孔隙度演化方程（Yarushina 和 Podladchikov，2015年）。假设多孔骨架的体积变形受黏性流变控制，则孔隙度演化与固体速度场的散度直接相关，其形式如下:

$$\frac{d^s\varphi}{dt} = \frac{P^f - P^t}{\eta^\varphi}, \tag{14}$$

其中， η^φ 是多孔介质的体积黏度。

在本文所考虑的二维构型中，控制系统包含 13 个方程和 15 个未知量： P^f、 P^t、 $\rho C^{t,\,\mathrm{SiO_2}}$、 v_x^f、 v_y^f、 v_x^s、 v_y^s、 τ_{xx}、 τ_{yy}、 τ_{xy}、 φ、 ρ^f、 ρ^s、 $C^{s,\,\mathrm{im}}$，以及 $C^{f,\,\mathrm{SiO_2}}$。在我们的实现中，我们求解:

1）流体压力 P^f 的总质量守恒方程 (1);

2）不动固体的质量守恒方程（2），对应总压力 P^t;

3）可动一氧化硅$_2$ 组分的总质量守恒方程（3），对应 $\rho C^{t,\,\mathrm{SiO_2}}$;

4–5）流体动量平衡（4），对应流体速度的两个分量 v_x^f 和 v_y^f;

6–7）总动量平衡（6），对应固体速度的两个分量 v_x^s 和 v_y^s;

8–10）用于偏应力张量三个独立组分 τ_{xx}、 τ_{yy} 和τ_{xy} 的麦克斯韦黏弹性流变方程 (7)；

11) 采用黏性压实闭合关系（（14））的孔隙度演化方程，该方程由 Malvoisin 等（2015）称为“经典形式”，并由 Yarushina 等（ 2023 ）在后续研究中讨论，用于更新孔隙度 φ；

12) 流体密度 ρ^f 的流体可压缩性关系（10）； 13) 固体密度 ρ^s 的固体可压缩性关系（13）。

尽管如此，系统尚未闭合，因为仍需额外的闭合关系来指定 $C^{s,\,\mathrm{im}}$ 和 $C^{f,\,\mathrm{SiO_2}}$。为完整起见，我们也在本节列出流体和固体状态方程（上文列出的最后两个方程），以确保与 Yarushina 和 Podladchikov（2015）针对流体力学—力学耦合系统提出的模型公式保持一致。然而，由于我们将模型扩展为流体—力学—化学耦合系统，因此不采用先前的本构定律；相反，相密度（以及浓度 $C^{s,\,\mathrm{im}}$ 和 $C^{f,\,\mathrm{SiO_2}}$）直接通过热力学平衡计算获得。这些量提供所需的热力学闭合，并通过下一节所述的查找表加以实现。

2.2 热力学闭合关系

由于控制系统仍然是不适定的，即未知数多于独立方程，我们通过采用查找表策略来闭合该公式。

在这种方法中，无法显式求解的热力学量通过吉布斯自由能最小化预先计算，并以离散条目的形式存储在多维数组中。每个表条目对应一次吉布斯能最小化的结果，随后从中提取所有平衡量。因此，这些表充当本构关系，根据守恒方程直接获得的变量，为未知变量提供函数映射。

与解析本构定律不同，查找表方法提供了直接从热力学平衡计算中获得的离散映射。在数值模拟过程中，通过对表列数据进行多维插值来恢复所需的热力学量。在本研究中，查找表给出了流体相二氧化硅浓度 $C^{f,\,\mathrm{SiO_2}}$、不动固相的浓度 $C^{s,\,\mathrm{im}}$，以及固体相和流体相的本征密度 ρ^s 和 ρ^f:

$$C^{f,\mathrm{SiO_2}} = C^{f,\mathrm{SiO_2}}\left(\tilde{C}^{s,\mathrm{SiO_2}}, \tilde{C}^{s,\mathrm{MgO}}, P^f, T\right), \tag{15}$$

$$C^{s,\mathrm{im}} = C^{s,\mathrm{im}}\left(\tilde{C}^{s,\mathrm{SiO_2}}, \tilde{C}^{s,\mathrm{MgO}}, P^f, T\right), \tag{16}$$

$$\rho^s = \rho^s\left(\tilde{C}^{s,\mathrm{SiO_2}}, \tilde{C}^{s,\mathrm{MgO}}, P^f, T\right), \tag{17}$$

$$\rho^f = \rho^f\left(\tilde{C}^{s,\mathrm{SiO_2}}, \tilde{C}^{s,\mathrm{MgO}}, P^f, T\right), \tag{18}$$

其中，方程（17）和（18）取代了此前用于流体力学系统的本构密度关系（方程（10）和（13））。此处，所有列表量均表示为固体基质中组分质量浓度的函数，

即 $C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}$和 $C^{s,\ \mathrm{MgO}}$、流体压力 P^f及温度 T。请注意，在本研究中，我们假设系统处于等温条件，并在恒定温度下进行所有计算。

3 数值实现与建模设置

该控制系统构成一个完全耦合的水力–力学–化学问题，其中流体流动、变形和反应性质量传输同时演化。求解此类系统需要将传输求解器与热力学平衡计算相耦合。

在热力学预处理阶段，按照 Connolly (2005)，计算并制成表格，供传输模型使用的方程 (15)-(18) 中的函数。在传输求解器的每个时间步，均通过对预先计算的多维查找表进行插值，求得这些函数（方程 (15)-(18)）的值。查找表本身是在预处理步骤中生成的：针对组成–压力–温度空间中每个网格点，在相关状态变量范围内通过吉布斯自由能最小化（采用线性规划）进行计算。该过程得出平衡相组合及其性质，并将其作为传输求解器的本构关系。

为将以物理单位计算的热力学数据与 HMC传输求解器一致地耦合，并确保数值稳健性，我们引入一组量纲独立的尺度，其依据是域长度 L_x、剪切黏度 η^s以及单位体积浮力 $\Delta\rho g$，其中 $\Delta\rho = \rho^s - \rho^s$。这些选择定义了长度、压力和时间的基本尺度，并据此缩放所有其他有量纲变量。随后，相应地对控制方程进行无量纲化，并使用这些参考尺度对代码中的所有物理变量重新归一化。平衡计算所得的所有热力学量也都按相应尺度重新缩放，从而确保耦合公式的量纲一致性和数值稳定性。

3.1 热力学查找表

查找表通过吉布斯能量最小化计算得出，即依据热力学平衡条件进行计算。热力学计算使用 ThermoLab（ Vrijmoed and Podladchikov，2022年）进行，并采用 Holland and Powell (2011) 的热力学数据集；水流体性质则使用 Pitzer and Sterner (1994) 的状态方程计算。考虑的潜在固相包括叶蛇纹石、水镁石、滑石、斜方辉石、橄榄石和石英。除石英外，所有固相的组成都可以随 Fe/Mg比而变化，因为 Fe^{2+} 和 Mg^{2+} 可以占据等价的晶体学位点。为考虑这些混合效应，除水镁石采用理想混合定律外，所有镁铁硅酸盐均使用 Evans and Frost (2021) 的溶液模型。在水相中，溶解二氧化硅以热力学组分 SiO_2(aq) 表示，即一种中性单体溶解二氧化硅组分，它反映溶解二氧化硅的总体含量，但不区分单个水合络合物。

需要注意的是，为简化处理，我们忽略了基于与固相相互作用的流体相中氧化亚铁和氧化镁的溶解度。因此，热力学平衡计算得出 $C^{f,\mathrm{MgO}} = 0$ and

$C^{f,\mathrm{FeO}} = 0$。因此，这些量不纳入闭合关系，也未列入由多元函数 (15)-(18) 表示的查找表中。

在本研究中，使用 ThermoLab 对流体饱和系统进行相平衡计算，其中查找表以仅固相组成 $\tilde{C}^{s,SiO_2}$ 和 $\tilde{C}^{s,MgO}$作为参数，这些组成以独立组分 SiO_2 和氧化镁的归一化质量浓度表示：

$$\tilde{C}^{s,SiO_2} = \frac{C^{s,SiO_2}}{C^{s,SiO_2} + C^{s,MgO} + C^{s,FeO}} \tag{19}$$

and

$$\tilde{C}^{s,MgO} = \frac{C^{s,MgO}}{C^{s,SiO_2} + C^{s,MgO} + C^{s,FeO}} \tag{20}$$

我们的传输求解器演化完整（湿）系统的变量，因此跟踪：（i）每单位总体积中 SiO_2 的总质量，$\rho C^{t,\mathrm{SiO_2}}$其中包括固相承载的二氧化硅和溶解二氧化硅；以及（ii）每单位总体积流体相中溶解二氧化硅的质量，$\rho^f \varphi C^{f,\mathrm{SiO_2}}$。为获得查找表所需的固相组成，我们首先计算每单位总体积固相中所含 SiO_2的质量，即 $\rho C^{t,\mathrm{SiO_2}} - \rho^f \varphi C^{f,\mathrm{SiO_2}}$。随后，我们用兼容 ThermoLab 的描述中所表示的固相总质量对其进行归一化；该固相总质量等于每单位总体积固相中所含 SiO_2 的质量与固体基质中不动（不反应）部分的质量之和。在所研究的系统中，非反应固体组分为氧化镁和氧化亚铁，我们将二者的合并质量浓度定义为 $C^{s,im} = C^{s,\mathrm{MgO}} + C^{s,\mathrm{FeO}}$，其对应的每单位总体积不可移动固体质量为 $\rho^s(1-\varphi)C^{s,im}$。因此，求解器中使用的 SiO_2 干系统固相质量浓度形式为：

$$\tilde{C}^{s,SiO_2} = \frac{\rho C^{t,SiO_2} - \rho^f \varphi C^{f,SiO2}}{\rho C^{t,SiO_2} - \rho^f \varphi C^{f,SiO2} + \rho^s (1-\varphi) C^{s,im}}, \tag{21}$$

同样，氧化镁的干系统固相质量浓度可通过将固相氧化镁质量 $\rho^s(1-\varphi)C^{s,\mathrm{MgO}}$ 除以相同的干系统总质量进行归一化得到，即

$$\tilde{C}^{s,MgO} = \frac{\rho^s (1-\varphi) C^{s,MgO}}{\rho C^{t,SiO_2} - \rho^f \varphi C^{f,SiO2} + \rho^s (1-\varphi) C^{s,im}}. \tag{22}$$

这确保了输运与热力学求解器之间的完全兼容性。

3.2 传输求解器

为求解耦合的控制方程组，我们在矩形时空网格上采用显式有限差分格式，并结合迭代无矩阵伪瞬态方法（Frankel，1950；Räss 等，2022）。空间离散采用守恒交错网格公式（Virieux，1986），该公式等价于有限体积方法（Dormy 和 Tarantola，1995），并确保质量与动量的局部守恒。该方法区分了用于压力与速度求解器的伪时间迭代，以及物理时间步进（例如相密度、单位体积质量分数及相关物理量），从而确保强耦合 HMC 系统的数值稳定性和高效收敛。每次迭代所需的热力学闭合量通过使用 MATLAB 中的 interpn() 函数对预先计算的查找表进行多维插值获得。

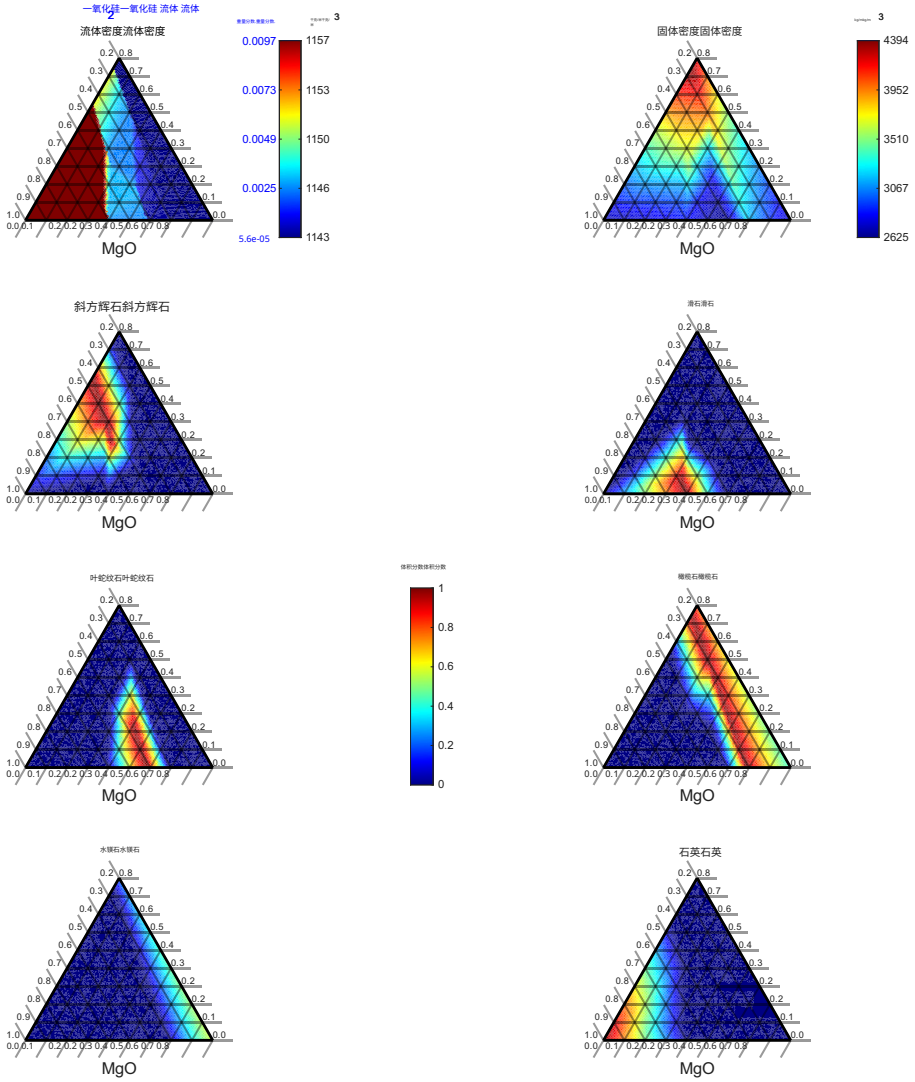

图1. 使用 Thermolab（Vrijmoed 和 Podladchikov，2022年）计算的 550°C 和 3 GPa 条件下的热力学查找表表示。三元图显示了流体和固相密度、流体成分，以及斜方辉石、滑石、叶蛇纹石、橄榄石、水镁石和石英的体积分数，这些参数均为干燥体系中固相浓度 SiO_2,氧化镁和氧化亚铁的函数。流体密度和流体成分在组成空间中呈现相同的拓扑结构；对应数值由色标标示。矿物体积分数的三元图共用一个色标，以便直接比较各相丰度。

3.3 建模设置

3.3.1 热力学数据

图1展示了从热力学查找表中提取的代表性数值，包括水流体和整体固相的成分，以及斜方辉石、滑石、叶蛇纹石和橄榄石的模态丰度；这些数值是在恒定温度550°C和压力3 GPa下计算的。查找表中每个节点的整体成分均以三元图表示，用以展示相关组成空间中矿物组合的分布。

查找表是在由压力、温度和系统整体成分定义的五维网格上计算得出的。在完整的氧化亚铁-氧化镁-一氧化硅$_2$ (FMS)组成空间中，压力范围为0.5至4.0 GPa，温度范围为300至700°C。研究假设存在过量的H_2O，以确保岩石形成含水程度最高的矿物组成。

图1显示，在压力恒定时，流体密度主要取决于溶解二氧化硅浓度（$C^{f,\ SiO_2}$），因此遵循流体成分的拓扑结构。这两个量主要随整体一氧化硅$_2$ 含量变化，并呈现两个平台，分别对应系统一氧化硅$_2$ 含量较低时受水镁石限制的流体成分，以及一氧化硅$_2$ 含量较高时受石英限制的流体成分。固体密度与固体H_2O含量相关，因为无水相的密度高于含水相。

3.3.2 模型配置

该模型建立在一个二维计算域上，用于表示具有预设化学成分、并与孔隙流体（H_2O–SiO_2）处于热力学平衡的流体饱和多孔岩石；温度为 550 °C，总压力为 3.0GPa。下文将考虑两组互补的模拟：（i）具有饱和岩石恒定初始成分的合成配置，用于分离控制流体力学与化学反馈的机制；（ii）基于米尔迪塔蛇绿岩（阿尔巴尼亚）中未进入俯冲带的蛇纹岩成分分布图的天然配置（Huber 等，2024），从而实现直接的地质学解释。计算域为一个方形区域，在水平方向（x）和垂直方向（y）上的无量纲范围分别为 101×101，其中 y 表示深度。

初始孔隙度场被设定为域下边界处的高斯形扰动，代表一个局部化的富流体源区或储库。该配置引入了空间局部化的孔隙度异常，从而促进流体的集中运移（图 2）。

除孔隙度扰动外，初始条件还包括在域的下边界施加的固相二氧化硅浓度高斯形扰动 $C^{s,\ SiO_2}$。在这一受扰动的边界区域内，规定的 $C^{s,\ SiO_2}$ 取值经过选择，使其与流入的低二氧化硅含量流体处于热力学平衡，但与周围的饱和岩石不处于平衡。这种施加的化学非平衡会触发边界处的矿物反应和相变，从而模拟化学未饱和孔隙流体的流入，并启动计算域内的反应运移。

系统受到方向向下的重力场作用。在二维构型中，计算域还受到背景水平走滑剪切变形的影响，其幅度与浮力驱动的作用相当

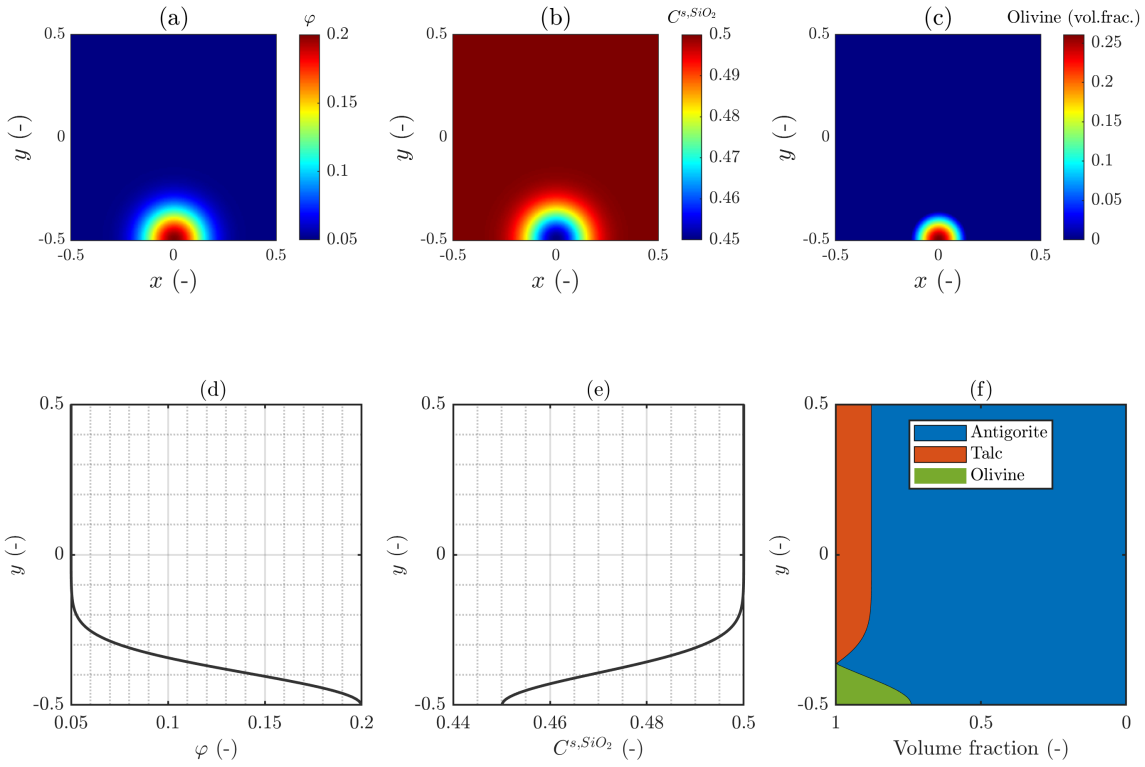

图 2。HMC模型配置（初始条件）：在下边界施加孔隙度和固相二氧化硅浓度的高斯形扰动$C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}$以表示将 H_2O–SiO_2 流体局部注入多孔介质。注入流体的温度设定为 550°C，并在浮力作用下上升穿过计算域。(a) 初始孔隙度分布。(b) 固体基质中的初始 SiO_2 浓度分布。(c) 初始橄榄石体积分数分布。(d) 沿二维模型中 y方向中央垂直切片显示的初始孔隙度分布。(e) 沿二维模型中 y方向中央垂直切片显示的固体基质中 SiO_2 的初始浓度分布。(f) 沿二维模型中 y方向中央垂直切片显示的岩石初始矿物组成。相应矿物相的体积分数沿计算域中 y方向的中央垂直切片显示。

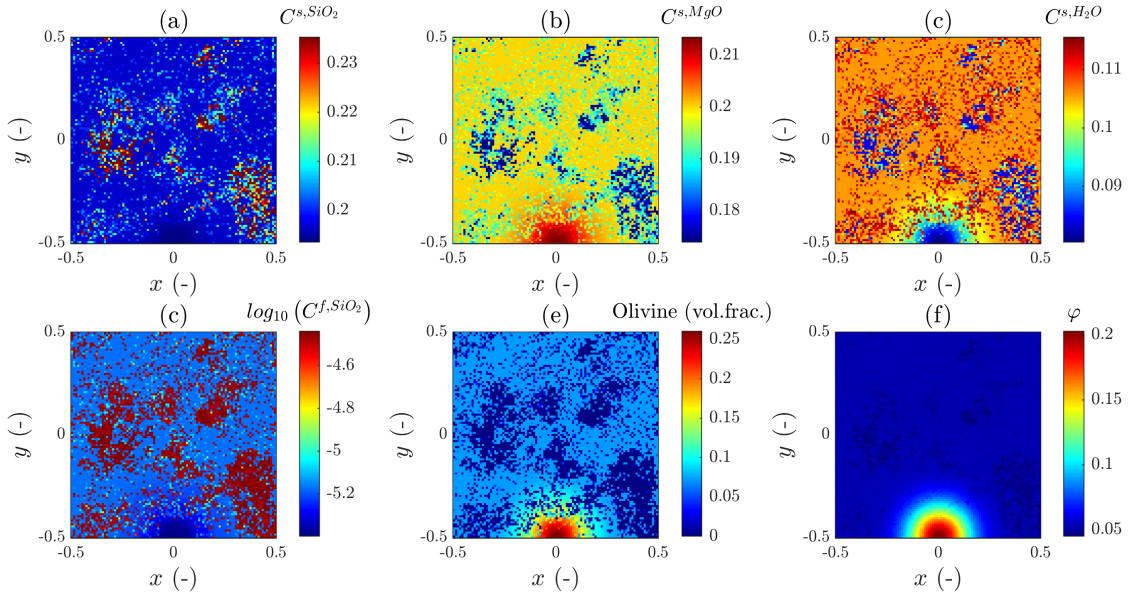

图 3. 基于天然数据集构建的 HMC模型配置，采用了米尔迪塔蛇绿岩（阿尔巴尼亚）蛇纹岩的成分分布图（厘米尺度）（Huber 等，2024）：在下边界施加孔隙度和固相二氧化硅浓度的高斯形扰动 $C^{s,\ SiO_2}$ 以表示向多孔介质中局部注入 H_2O–SiO_2 流体。注入流体的温度设定为 550°C，并在浮力作用下向上穿过计算域。初始分布：（a）固体基质中的 SiO_2 浓度；（b）固体基质中的 MgO浓度；（c）固体中的储存流体；（d）流体中的 SiO_2 浓度；（e）橄榄石体积分数；（f）孔隙度。

力，从而能够研究变形、流体流动和反应之间的耦合作用。力学问题在所有计算域边界上采用无滑移边界条件（速度为零）求解。对于流体流动问题，所有计算域边界上的流体压力均设为总压力。

数值模拟总共推进 1000 个时间步，足以捕捉耦合水-力-化学过程的演化。模拟中采用的无量纲参数经过选择，以确保伪瞬态求解方案具有数值稳定性和高效的收敛性。

此外，我们还模拟了天然数据集中的反应性孔隙波的形成与传播。我们使用来自尚未进入俯冲带的米尔迪塔蛇绿岩（阿尔巴尼亚）的蛇纹岩成分分布图（Huber 等，2024），将其作为模拟的初始条件。这种方法使我们能够再现天然成分非均质性，并研究天然数据集中的 HMC 过程。计算域中固相 SiO_2,MgO、FeO 浓度、橄榄石体积分数和孔隙度的初始分布如图 3 所示。

4 结果与讨论

我们系统地研究了在二氧化硅不饱和 H_2O-SiO_2 流体渗入具有复杂矿物组成的变形与反应多孔岩石过程中产生的机械与化学耦合失稳。

图4总结了二维水力-力学-化学模拟结果，展示了在饱和矿物基质中（去）压实与脱水反应的耦合作用下，反应性孔隙波如何形成和演化。从力学角度看，施加的孔隙度扰动触发了水力-力学失稳，导致流体流动发生压实驱动的聚焦，这一点可由垂向达西通量的演化得到证明（图4e–h）。在早期阶段，这种聚焦表现为一系列局部化脉冲；随着演化持续，更多脉冲形成并相互作用，最初间歇性的聚焦逐渐组织成持续的通道状高渗透率输运通道。这种从脉冲式聚焦到通道化流动的转变，反映在相应的孔隙度演化中（图4(a-d)）。这一行为与早期关于可变形多孔介质中孔隙波动力学和压实驱动流动局部化的理论与数值研究结果一致（Connolly and Podladchikov，1998年、2007年；Yarushina 等，2015年；Räss 等，2018；Yarushina 等，2022年；Schmalholz 等，2026年）。

从化学角度看，注入二氧化硅不饱和流体会驱动初始处于流体饱和状态的矿物基质发生脱水反应，从而产生显著的成分差异和相变。反应引起的固相组成变化（图 5(c)）与机械作用引起的（去）压实之间由此形成的反馈，控制着反应性孔隙波的起始与演化（图 5(a)）及其相关的局部化模式。事实上，与以往水力—力学模型的一个主要区别在于，本模型将变形岩石中的流体流动与热力学一致的矿物反应相耦合，并采用经天然数据验证的热力学查找表（Huber 等，2022年）。触发的脱水反应促进橄榄石形成（图 4(i-l)）；我们还证明，富橄榄石区在空间上与机械（去）压实形成的高孔隙度、高渗透率通道相吻合（图 6）。预测的橄榄石形成模式与以往的反应运移研究结果一致（Plümper等，2017年；Huber 等，2022年；Schmalholz 等，2023年），但本模型还考虑了矿物反应、变形与流动局部化之间的耦合；我们的结果表明，这种耦合对于控制橄榄石形成的位置至关重要。

在所有模拟中，我们均考虑固体骨架的麦克斯韦黏弹性流变的黏性极限，此时变形由剪切黏度 η^s 和体积（压实）黏度 η^φ 控制（Connolly 和 Podladchikov，1998年；Yarushina 等，2023）。

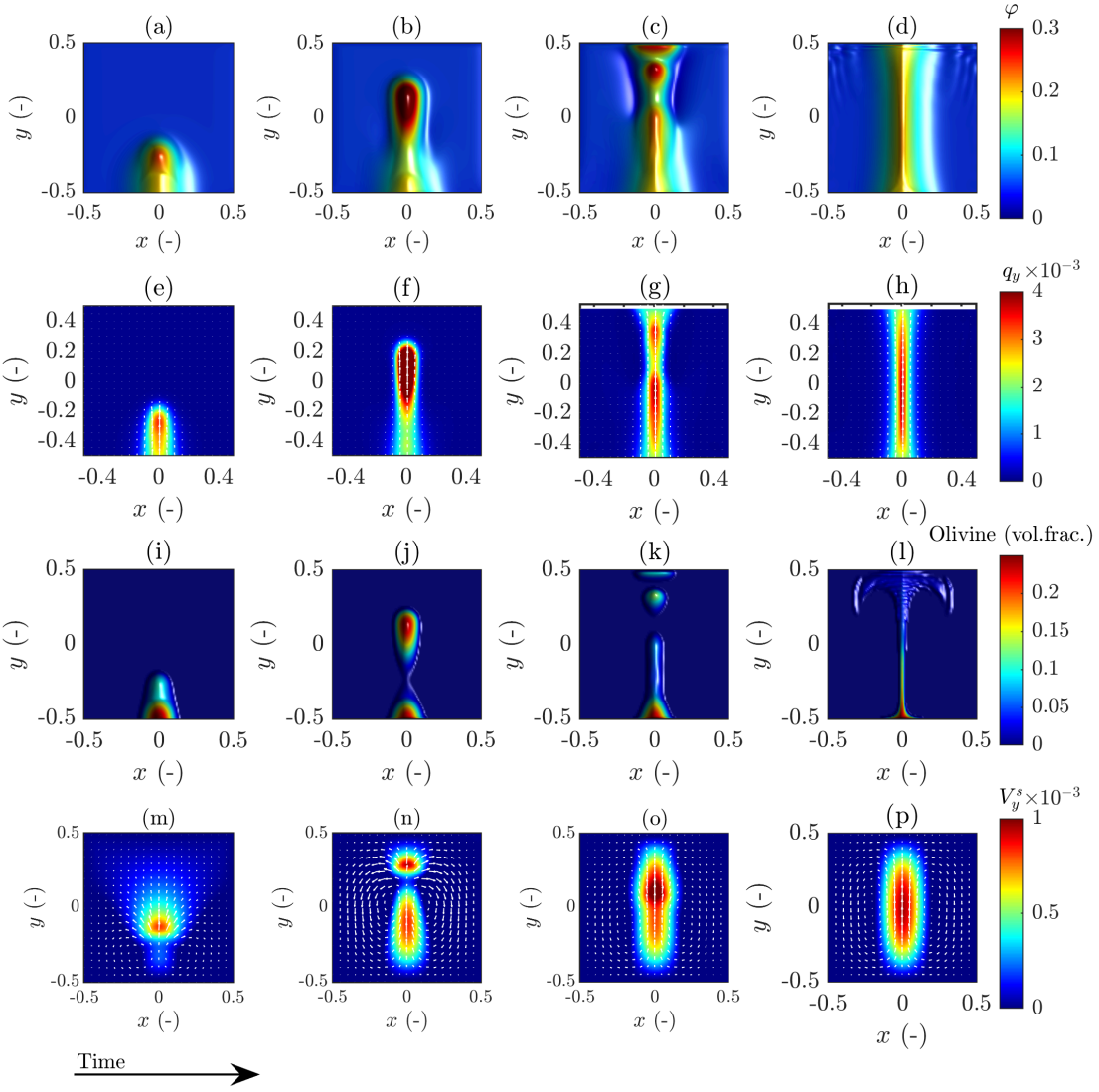

图 4. 合成数据集在不同时间步下的 HMC 建模结果，展示了由耦合的（去）压实与脱水与水化过程驱动的反应性孔隙波的演化，并最终在二维中形成特征性的类通道结构。热力学数据对应于阿尔巴尼亚米尔迪塔蛇绿岩中尚未进入俯冲带的蛇纹岩。黏度比固定为 $\eta^s/\eta^\varphi = 50$，去压实弱化为 $R = 1000$。初始模型配置在孔隙度和固相二氧化硅浓度中加入高斯形扰动 $C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}$ 并在下边界施加扰动，以表示 H_2O– SiO_2 流体局部注入多孔介质，以及其在浮力作用下随后向上迁移。每列对应一个不同的时间步（1、5、15、100），展示模拟场随时间的演化：（a–d）孔隙度 φ；（e–h）垂向达西通量$q_y = \varphi\left(v_y^f - v_y^s\right)$；（i–l）橄榄石体积分数；以及（m–p）垂向固相速度 v_y^s。

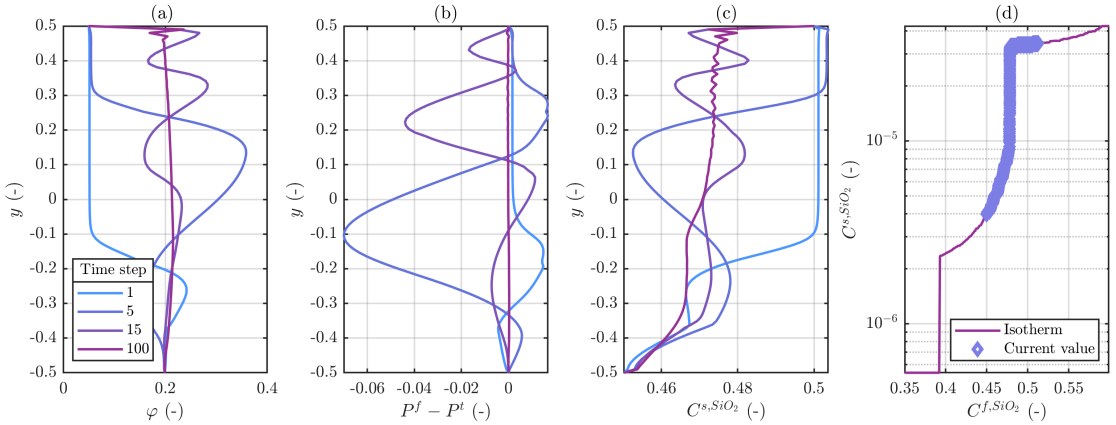

图5. 二维模型沿 y-方向的中央垂直切片上，不同时间步（见图例）的合成数据集HMC建模结果（图4）。**(a)** 孔隙度演化 φ；**(b)** 压力差 $P^f - P^t$；**(c)** 固相二氧化硅浓度$C^{s,\ SiO_2}$；**(d)** 将热力学查找表数据与反应运移模拟期间观测到的状态联系起来的等温线。图(d)中，紫色曲线表示平衡等温线，呈现流体相和固相中一氧化硅$_2$ 浓度之间的关系。菱形标记表示模拟期间采样的状态，箭头标示出与模拟期间计算域内流体成分相对应的平衡关系。

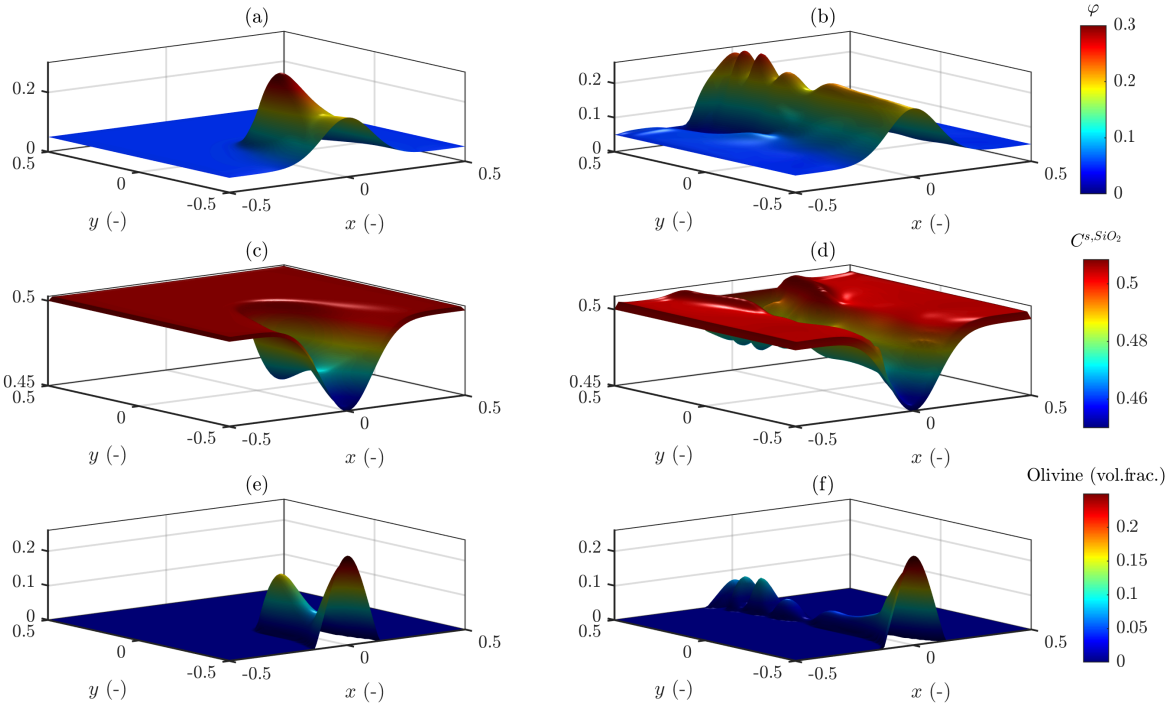

图 6. 针对阿尔巴尼亚米尔迪塔蛇纹岩的二维合成数据集，在不同时间步下的 HMC 模拟结果。每一列对应一个不同的时间步（2、25），展示了（a–b）孔隙度、（c–d）固相二氧化硅浓度 $C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}$ 以及（e–f）橄榄石体积分数的时间演化。二氧化硅含量降低的流体渗入会使流入区的固相二氧化硅浓度降低 $C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}$ 从而驱动脱水反应并促进橄榄石形成。由此产生的富橄榄石区不仅与固相二氧化硅含量降低的区域相关，还与孔隙度和渗透率增强的区域相关；后者表现为机械诱导的（去）压实通道，并使流体运移集中。

4.1 系统模拟

前述案例表明，反应性孔隙波本质上受力学与化学反馈的序列和强度控制。在模型中，力学不稳定性首先通过（去）压实引发流体聚焦流动，并形成高渗透性结构。随后，这些由力学作用形成的流动通道控制低一氧化硅$_2$ 流体的输运，进而驱动脱水反应及相关的固体成分变化。因此，力学局部化既可能通过维持流体聚焦和非平衡状态来加速反应性孔隙波的演化，也可能通过重新分布应力并封闭反应通道来抑制其演化。

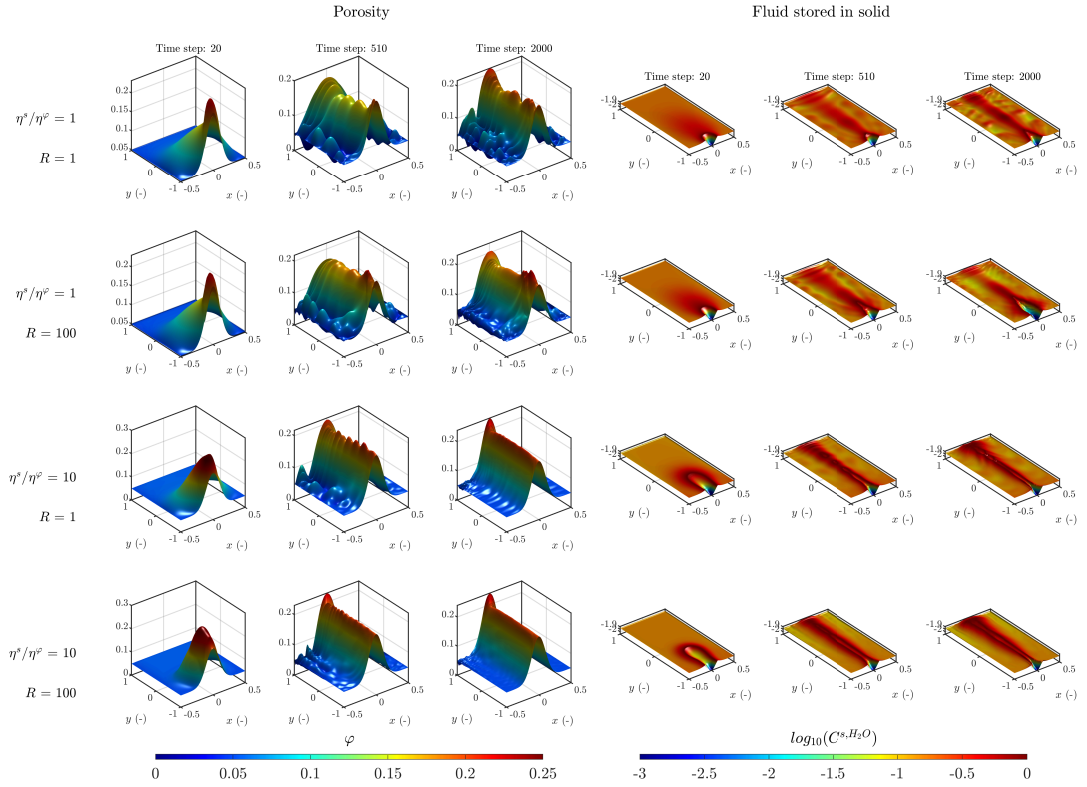

图7。 针对 $\eta^s/\eta^\varphi \in \{1,10\}$ 和 $R \in \{1,100\}$的合成数据集开展系统性HMC模拟的结果，以选定时间步（20、510、2000）的快照形式展示。反应性孔隙波沿 y方向传播，反映出流体向上迁移，以及相关（去）压实和反应前沿的局部化。各面板的排列方式为：黏度比 η^s/η^φ 和去压实弱化因子 R 沿垂直方向变化，而时间则从左到右沿水平方向增加。左侧面板组展示孔隙度 φ的时间演化，右侧面板组则展示固相中相应的水浓度分布，$log_{10}\left(C^{s,\ H_2O}\right)$。

为研究这一问题，我们系统地改变参数，以确定黏度比 η^s/η^φ 和去压实弱化因子 R 如何共同控制二维 HMC 模拟中反应性孔隙波的起始、传播和形态。结果汇总于图7和图8，展示了 $\eta^s/\eta^\varphi \in \{1,10\}$ 和 $R \in \{1,100\}$条件下孔隙度、固体中的含水量、固相一氧化硅$_2$ 浓度以及橄榄石体积分数随时间的演化。

黏度比 η^s/η^φ 量化了固体骨架对剪切变形与体积（去）压实的相对阻力，而去压实弱化因子 R 则通过降低去压实时的有效体积黏度，表征膨胀过程中的弱化（Connolly and Podladchikov, 1998年, 2007年; Räss 等, 2018; Yarushina 等, 2020a）。与早期对去压实弱化的分析类似（Connolly and Podladchikov, 2007年; Räss 等, 2019），增大 η^s/η^φ 和R 会促使孔隙度异常更强烈地局部化，并使流体聚焦更加显著（图 7），这与Wang等（2022）的系统研究结果一致。这种增强的聚焦作用反映在固体中储存的水的分布上

基质，其分布从弥散形态演变为沿高渗透率通道排列的通道状结构。在η^s/η^φ 较低且去压实弱化较弱时，流体流动仍较为弥散。

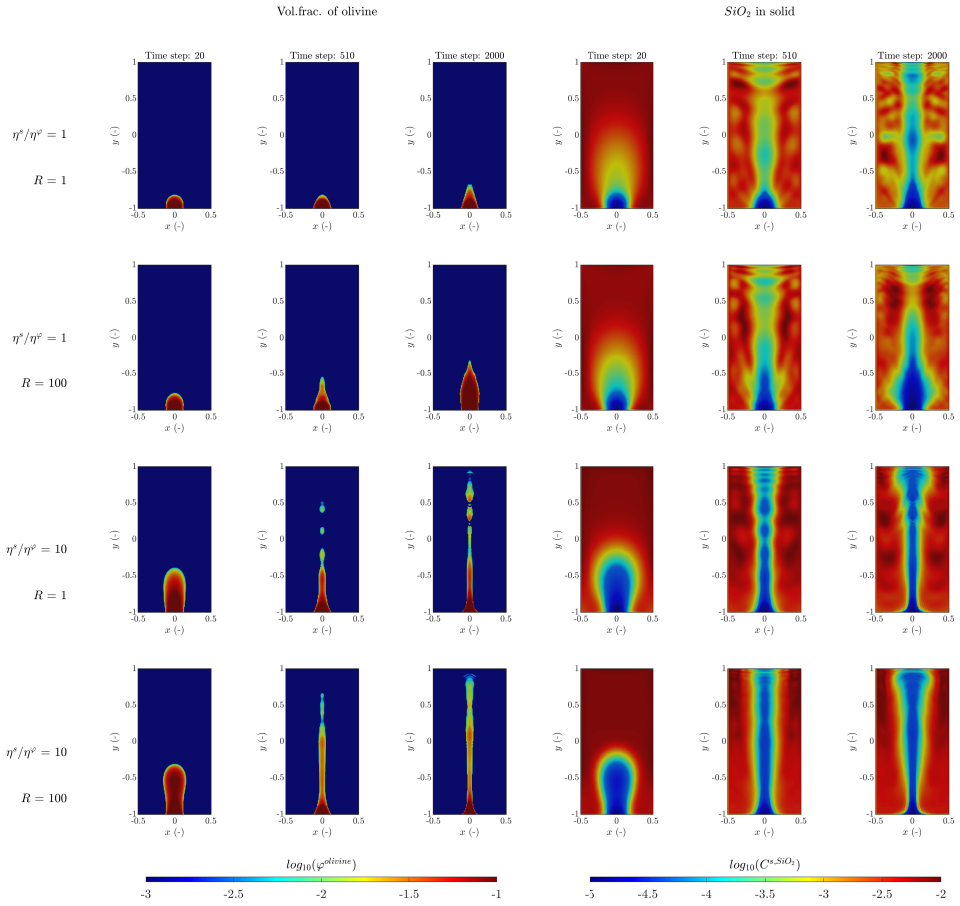

图8. $\eta^s/\eta^\varphi \in \{1,10\}$ 和 $R \in \{1,100\}$合成数据集的系统性 HMC 模拟结果，以选定时间步（20、510、2000）的快照展示。反应性孔隙波沿 y方向传播。各面板的排列方式为：黏度比 η^s/η^φ 和去压实弱化因子 R 沿垂直方向变化，而时间从左向右递增。左列显示橄榄石体积分数随时间的演化，右列则显示固相中一氧化硅$_2$浓度的相应分布， $log_{10}\left(C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}\right)$。

然而，在耦合的 HMC 框架中，这种聚焦并非纯粹由力学作用造成：局部通量维持化学非平衡，加速反应进程，并通过反应引起的固相组成（图8(b)）和矿物相组合（图8(a)）变化，反过来影响孔隙度。图8表明，力学作用形成的高渗透率通道决定了反应前沿的空间分布。橄榄石形成的局部化体现了这一效应，它总是与固相中一氧化硅浓度降低的区域相对应。在低黏度比 η^s/η^φ 且压实减弱作用较弱（R 接近于 1）时，力学聚焦仍然有限，反应前沿实际上受到阻碍：

基质仅发生轻微分解，橄榄石主要呈弥散的前沿状分布，其形成受缓慢的成分再分配控制，而非由聚焦的平流作用控制。

相比之下，在更高的黏度比和更强的去压实弱化条件下，反应性孔隙波会呈现类通道结构的拓扑形态。在这一状态下，活跃的减压实区域内会形成明显的反应前沿，而橄榄石则优先沿着容纳聚焦流体流动的同一类通道化结构形成。

4.2 天然数据集

此外，我们将合成模型配置扩展至具有地质意义的数据，用于描述板片的矿物组成。图9—10展示了天然数据集的二维HMC模拟结果，其中初始模型配置由米尔迪塔蛇绿岩中蛇纹岩的化学图规定（Huber 等，2024），如图3所示。总体动力学行为与合成参考案例（图4）在定性上相似：我们观察到由耦合的（去）压实和脱水与水化过程驱动的反应性孔隙波演化，并在二维空间中形成特征性的类通道结构。这些结构具有更高的孔隙度和渗透率，并能够聚焦流体流动。该行为与对埃罗-托比奥脱水脉网络的渗透率估算一致；这些脉网络充当高效的排水系统，即使在总体孔隙度较低的情况下，也能实现快速的流体渗流（Arias 等，2026）。在所考虑的案例中，反应性孔隙波起始于下边界附近的贫硅区域，并穿过域内二氧化硅含量逐渐升高的部分迁移。与较低二氧化硅含量的聚焦流体流动相关的反应性孔隙波，会与矿物组合和整体成分的空间变化相互作用，从而导致高度非均匀的反应进程和相重新分布。当波穿过该区域时，会驱动一系列脱水反应及相关的相变（Huber 等，2024）。特别是在成分梯度处，该波促进滑石逐步转化为叶蛇纹石，并最终形成橄榄石（图10(e,f)）。

这种行为在数值模型与流体诱发交代作用和反应驱动的通道化等地质过程之间建立了直接联系。初始时，流入的流体相对于周围岩石而言为二氧化硅不饱和；反应运移则通过脱水反应和二氧化硅溶解进行，这些过程发生在流体饱和岩石中因力学减压实而形成的局部类通道结构内。

固相二氧化硅含量的演变进一步支持了这一解释。图 10(c,d) 显示，随着孔隙度波在区域内迁移，固相一氧化硅$_2$ 浓度逐渐降低，这代表二氧化硅不断溶解，并沿集中流动通道从固体基质迁移至流体中。在富硅区域内，斜方辉石是主要的稳定相，另含少量滑石。与低硅流体的相互作用主要通过斜方辉石转变为橄榄石的反应驱动橄榄石形成；此外，在较小程度上也通过滑石转变为叶蛇纹石再转变为橄榄石的反应序列促进橄榄石形成。

值得注意的是，我们的模型预测会形成一条占主导地位的富橄榄石、富流体通道（图4、图8和图9），代表自然界中观察到的更广泛脉网络构造的一个局部段（构建单元）。这一主要通道的空间组织和一级特征，与在意大利Erro-Tobbio地区含水蛇纹岩中记录的反应驱动的通道化一致（图11；Scambelluri 等，1997；Plümper 等，2017；Schmalholz 等，2023；Arias 等，2026）。

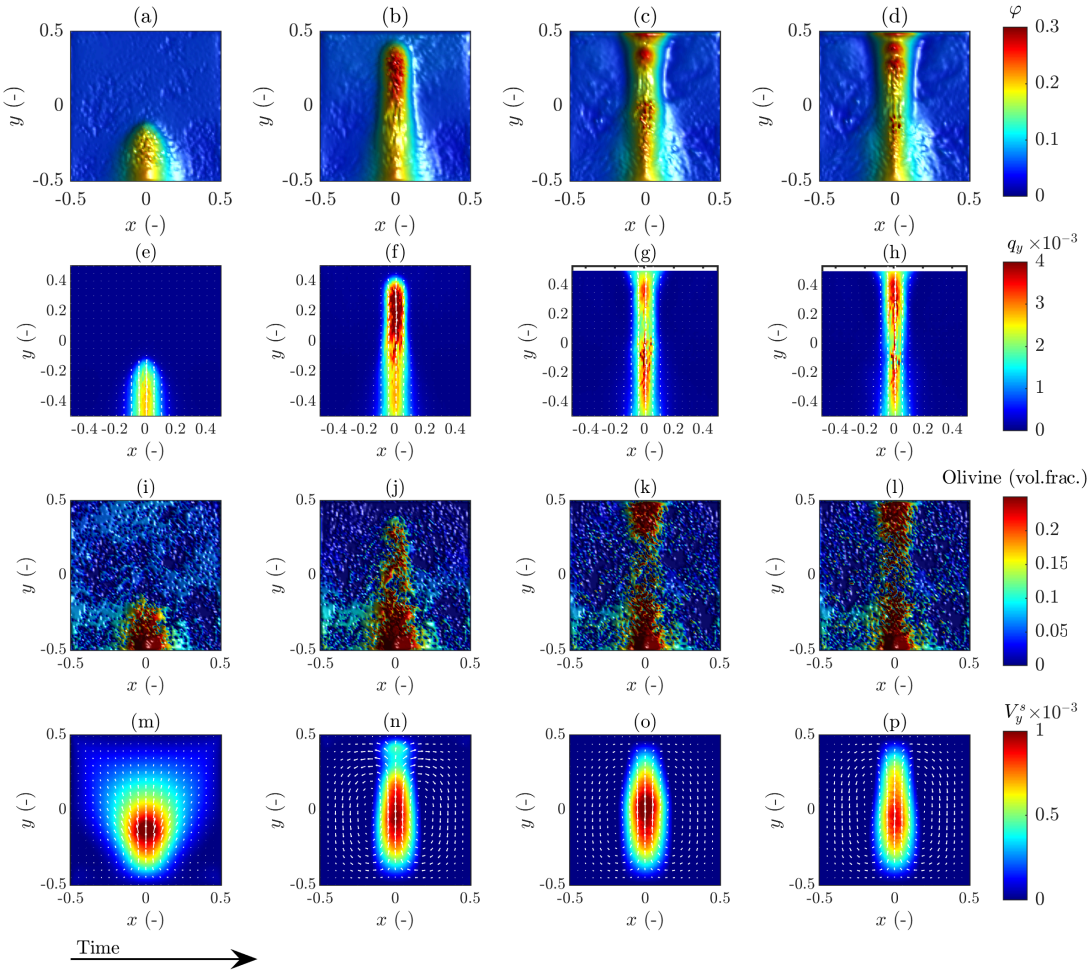

图 9。自然数据集在不同时间步的 HMC 模拟结果：来自米尔迪塔蛇绿岩（阿尔巴尼亚）的蛇纹岩实验室测量厘米尺度化学图（Huber 等，2024）。黏度比固定为 $\eta^s/\eta^\varphi = 50$。初始模型配置包含孔隙度和固相二氧化硅浓度中的高斯形扰动 $C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}$ 施加于下边界，代表将 H_2O–SiO_2 流体局部注入多孔介质，并在浮力作用下随后向上迁移。每列对应一个不同的时间步（1、5、15、100），展示模拟场随时间的演变：(a–d) 孔隙度 φ；(e–h) 垂向达西通量 $q_y = \varphi\left(v_y^f - v_y^s\right)$；(i–l) 橄榄石体积分数；以及 (m–p) 垂向固相速度。

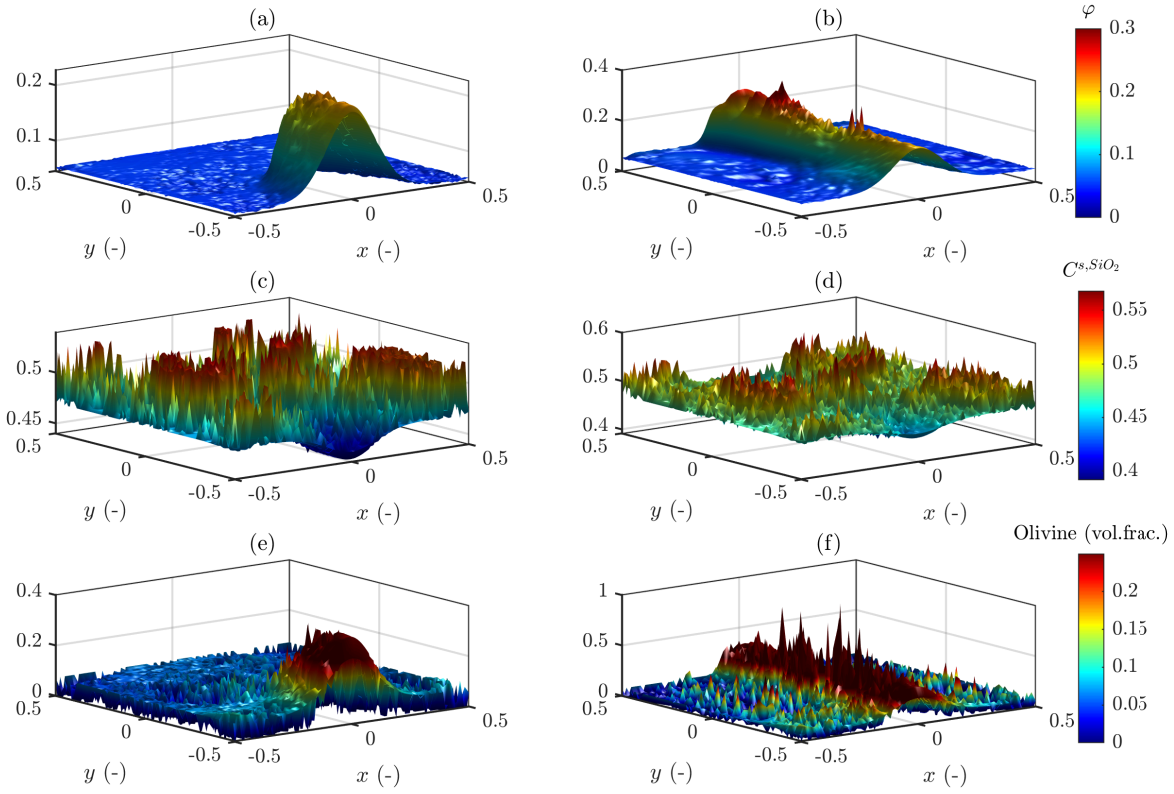

图10。天然数据集在不同时间步下的 HMC 建模结果：取自米尔迪塔蛇绿岩（阿尔巴尼亚）的蛇纹岩实验室测量厘米尺度化学图（Huber 等，2024）。黏度比固定为 $\eta^s/\eta^\varphi = 50$。每列对应不同的时间步（2、20），展示了以下参数随时间的演变：（a–b）孔隙度、（c–d）固相二氧化硅浓度 $C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}$ 以及（e–f）橄榄石体积分数。二氧化硅含量较低的流体渗入会降低流入区的固相二氧化硅浓度 $C^{s,\ \mathrm{SiO_2}}$ 从而驱动脱水反应并促进橄榄石形成。由此形成的富橄榄石区不仅与固相二氧化硅含量较低的区域相关，也与孔隙度和渗透率较高的区域相关；这些区域表现为受力学作用诱发的（去）压实通道，并使流体运移集中于此。

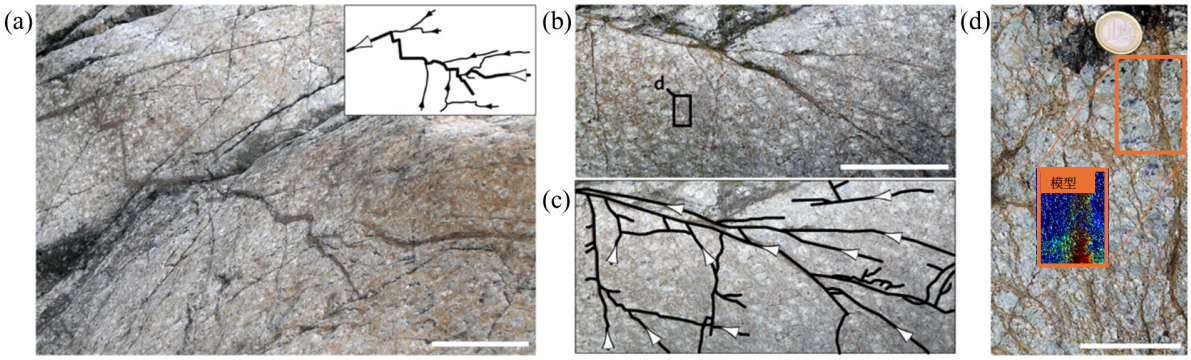

图11. 意大利 Erro-Tobbio 地区蛇纹岩脱水作用形成的榴辉岩相橄榄石脉网络照片（改编自 Plümper 等，2017）。脱水过程中脉体形成的现象在不同尺度上普遍可见，如图中从左至右逐步放大的视图所示。(a)中的插图和(c)图突出显示了脉网络的通道化特征；箭头表示推断的优先流体逸出路径。比例尺：(a、b) 50 cm；(d) 5 cm；(b)和(c)图的比例尺相同。(d)图突出显示了模拟的主要富橄榄石通道与天然样品中观察到的主要通道之间的对应关系。

5 结论

我们提出了一种水力—力学—化学（HMC）二维模型，并结合了与阿尔巴尼亚米尔迪塔蛇绿岩蛇纹岩相对应的热力学数据。通过将基于实验室的元素分布图作为初始条件纳入模型，该模型能够捕捉真实的矿物学非均质性，并可与天然系统直接对比。我们的数值模拟结果表明，在低 SiO_2 H_2O–SiO_2 流体渗入过程中，变形且正在脱水的蛇纹岩基质中会自发形成富流体、高渗透率通道。通道化源于力学去压实、聚焦流体流动和矿物组合反应驱动变化之间的耦合反馈。具体而言，固体基质中二氧化硅的耗减促进了脱水反应和橄榄石的持续形成，而橄榄石形成在空间上与高孔隙度和高渗透率区域相关。这些类通道结构从最初局部形成的反应性孔隙波演化而来，并组织成持久的运移路径，从而有效聚焦流体迁移。初步数值模拟再现了一个主要富橄榄石通道的一阶特征，其与 Erro Tobbio 观测到的通道相似；这表明，耦合的水力—力学—化学反馈可在脱水过程中形成此类局部运移路径。尽管目前的模拟结果未显示完整的分支脉网络结构，但这些结果记录了富流体结构在原本低孔隙度的岩石基质中的动态形成，并支持一种统一解释：更大尺度的通道网络可能由此类主要通道段在不同尺度上反复发育并相互作用而形成。这类网络为含水岩石中的流体抽取和运移提供了一种高效且动态持续的机制，因此可能在调控俯冲带环境中的流体释放、交代作用和质量传递方面发挥关键作用。通过明确考虑渗入流体中溶解的 SiO_2，我们的框架为将脱水和交代作用过程中反应、变形围岩内的流体聚焦与富石英脉的形成联系起来提供了

一致的依据；富石英脉是造山环境中二氧化硅运移的普遍指示标志。

致谢。 本研究由德国研究基金会（DFG）通过 CRC 1114项目资助“复杂系统中的尺度级联”，项目编号235221301，项目（C09）——“多尺度岩石脱水作用动力学”提供资助。

参考文献

Ague, J. J. 和 Nicolescu, S.：俯冲带中由流体介导反应释放的二氧化碳，《自然地球科学》，7，355–360，2014年。Ague, J. J., Tassara, S., Holycross, M. E., Li, J.-L., Cottrell, E., Schwarzenbach, E. M., Fassoulas, C. 和 John, T.：板片来源的脱挥发分流体被俯冲变沉积岩氧化，《自然地球科学》，15，320–326，2022年。Arias, A., Eberhard, L., Beinlich, A., John, T., Kotowski, A. 和 Plümper, O.：运用热力学和生成式人工智能量化脱水蛇纹岩中的脉网络渗透率，《地球物理研究杂志：固体地球》，131，e2025JB032776，2026年。Bessat, A., Pilet, S., Podladchikov, Y. Y. 和 Schmalholz, S. M.：反应性孔隙波引发的熔体迁移与化学分异，《地球化学、地球物理学、地球系统》，23，https://doi.org/10.1029/2021GC009963，2022年。Bons, P. D., Elburg, M. A. 和 Gomez-Rivas, E.：构造脉体的形成及其显微构造综述，《构造地质学杂志》，43，33–62，2012年。Bras, E., Yamato, P., Schmalholz, S. M., Duretz, T. 和 Podladchikov, Y. Y.：流体流动通过反应诱导孔隙度使干燥且不透水的麻粒岩榴辉岩化：水化学建模的启示，《地球与行星科学快报》，617，118256，2023年。Chen, S., Hin, R. C., John, T., Brooker, R., Bryan, B., Niu, Y. 和 Elliott, T.：俯冲地壳的钼地球化学特征记录了下伏板片蛇纹岩脱水引发的反应性流体流动，《自然·通讯》，10，4773，https://doi.org/10.1038/s41467-019-12696-3，2019年。Connolly, J.：通过线性规划计算相平衡：一种用于地球动力学建模的工具及其在俯冲带脱碳研究中的应用，《地球与行星科学快报》，236，524–541，https://doi.org/10.1016/j.epsl.2005.04.033，2005年。Connolly, J. A. D. 和 Podladchikov, Y. Y.：延性多孔介质中的去压实弱化与通道化不稳定性：对软流圈熔体分异的启示，《地球物理研究杂志》，112，B10 205，https://doi.org/10.1029/2005JB004213，2007年。Connolly, J. A. D. 和 Podladchikov, Y. Y.：孤立孔隙度波的解析解：非线性黏性与黏塑性岩石中的动态渗透率和流化，《地球流体》，15，269–292，https://doi.org/10.1111/gfl.12110，2015年。Connolly, J. A. D. 和 Podladchikov, Yu. Yu.：黏弹性岩石中的压实驱动流体流动，《地球动力学学报》，11，55–84，https://doi.org/10.1080/09853111.1998.11105311，1998年。Dormy, E. 和 Tarantola, A.：采用有限体积法进行弹性波传播的数值模拟，《地球物理研究杂志：固体地球》，100，2123–2133，1995年。Elliott, T.：板片示踪剂，《美国地球物理联合会地球物理专著》，138，23–46，2003年。Evans, K. A. 和 Frost, B. R.：俯冲带中的去蛇纹石化是否是岛弧氧化的来源：现实检验，《石油学杂志》，62，egab016，https://doi.org/10.1093/petrology/egab016，2021年。Frankel, S. P.：偏微分方程迭代求解方法的收敛速率，《计算数学》，4，65–75，1950年。Gao, J., John, T., Klemd, R. 和 Xiong, X.：俯冲过程中钛–铌–钽的活动性：来自天山（中国西北部）榴辉岩中含金红石脱水分异体和脉体的证据，《地球化学与宇宙化学学报》，71，4974–4996，https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.gca.2007.07.027，2007年。Halpaap, F., Rondenay, S., Perrin, A., Goes, S., Ottemöller, L., Austrheim, H., Shaw, R. 和 Eeken, T.：地震追踪流体从板片源区到地幔楔汇区的路径，《科学进展》，5，eaav7369，2019年。Holland, T. J. B. 和 Powell, R.：改进并扩展的内部一致热力学数据集：涵盖岩石学相关相，并纳入新的固体状态方程，《变质地质学杂志》，29，333–383，https://doi.org/10.1111/j.1525-1314.2010.00923.x，2011年。

Huber, K., Vrijmoed, J. C. 和 John, T.：脱水蛇纹岩中由反应性流体流动形成橄榄石脉，《地球化学、地球物理学与地球系统》，23，e2021GC010 267，https://doi.org/10.1029/2021GC010267，2022年。Huber, K., John, T., Vrijmoed, J. C., Pleuger, J. 和 Zhong, X.：尺度不变脱水过程导致俯冲板片脉冲式流体释放，《地球与行星科学快报》，644，118924，https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.epsl.2024.118924，2024年。John, T., Scherer, E. E., Haase, K. 和 Schenk, V.：俯冲板片中流体诱发榴辉岩化期间的微量元素分馏：微量元素和Lu-Hf-Sm-Nd同位素体系，《地球与行星科学快报》，227，441–456，2004年。John, T., Gussone, N., Podladchikov, Y. Y., Bebout, G. E., Dohmen, R., Halama, R., Klemd, R., Magna, T. 和 Seitz, H.-M.：快速脉冲式流体流动穿过俯冲板片，为火山弧供给流体，《自然·地球科学》，5，489–492，https://doi.org/10.1038/ngeo1482，2012年。Johnson, J. R., van Noort, R., Rahman, J., Wang, L. H. 和 Yarushina, V.：沉积盆地二氧化碳封存注入速率的影响：聚焦流体流动的多学科分析，42，2024年。Kaatz, L., Reynes, J., Hermann, J. 和 John, T.：渐进式榴辉岩化和剪切带形成过程中流体如何渗入干燥地壳岩石：名义上无水矿物中水含量的启示，《矿物学与岩石学贡献》，177，1–20，2022年。Khakimova, L. 和 Podladchikov, Y.：变形与反应多孔岩石中的多组分流体流动模拟，32，2024年。Khakimova, L., Schmalholz, S. 和 Podladchikov, Y.：岩石圈中化学驱动岩石水合与脱水的反应运移模型，载于：欧洲地球科学联盟大会会议摘要，第EGU25–12977页，2025年a。Khakimova, L., Yarushina, V. 和 Podladchikov, Y.：矿物封存二氧化碳中化学变化驱动的岩石-流体相互作用高性能模拟，载于：SPE油藏表征与模拟会议暨展览，第D011S002R004页，SPE，2025年b。Landau, L. D. 和 Lifshitz, E. M.：《流体力学：第6卷》，第6卷，爱思唯尔，1987年。Li, J.-L., Schwarzenbach, E. M., John, T., Ague, J. J., Huang, F., Gao, J., Klemd, R., Whitehouse, M. J. 和 Wang, X.-S.：从板片视角揭示并量化俯冲带硫循环，《自然·通讯》，11，514，2020年。Malvoisin, B., Podladchikov, Y. Y. 和 Vrijmoed, J. C.：反应性多孔介质流体流动中密度和孔隙度变化与流体压力变化的耦合：局部热力学平衡，《地球化学、地球物理学、地球系统》，16，4362–4387，https://doi.org/10.1002/2015GC006019，2015年。Manning, C. 和 Frezzotti, M.：俯冲带流体。《元素》，16，395–400，2020年。McGary, R. S., Evans, R. L., Wannamaker, P. E., Elsenbeck, J. 和 Rondenay, S.：雷尼尔山下方熔体和流体从俯冲板片到地表的通道，《自然》，511，338–+，https://doi.org/10.1038/nature13493，2014年。Miller, S. A., van der Zee, W., Olgaard, D. L. 和 Connolly, J. A. D.：脱水反应的流体压力反馈模型：实验、建模及其在俯冲带中的应用，《构造物理学》，370，241–251，https://doi.org/10.1016/S0040-1951(03)00189-6，2003年。Piccoli, F., Ague, J. J., Chu, X., Tian, M. 和 Vitale Brovarone, A.：榴辉岩相条件下俯冲期间板片内高渗透性通道形成的野外证据，《地球化学、地球物理学、地球系统》，22，e2020GC009520，https://doi.org/10.1029/2020GC009520，2021年。Pitzer, K. S. 和 Sterner, S. M.：适用于从零到极端压力范围的H_2O和二氧化碳状态方程，《化学物理学杂志》，101，3111–3116，https://doi.org/10.1063/1.467624，1994年。Plank, T. 和 Manning, C. E.：俯冲碳，《自然》，574，343–352，2019年。Plümper, O., John, T., Podladchikov, Y. Y., Vrijmoed, J. C. 和 Scambelluri, M.：俯冲带中的流体逸出受形成通道的反应性孔隙度控制，《自然·地球科学》，10，150–156，https://doi.org/10.1038/ngeo2865，2017年。

Porkoláb, K., Moulas, E., and Schmalholz, S. M.：叶蛇纹石脱水过程中反应进程、变形与应力场演化之间相互作用的建模：对中深源地震活动的启示，《地球物理研究快报》，52，e2024GL113 865，2025年。Räss, L., Yarushina, V. M., Simon, N. S., and Podladchikov, Y. Y.：烟囱、通道、通道流还是导水构造——来自数值模拟的解释及其对二氧化碳封存的启示，《能源学报》，63，3761–3774，https://doi.org/10.1016/j.egypro.2014.11.405，2014年。Räss, L., Simon, N. S. C., and Podladchikov, Y. Y.：地下储层中流体逸出管道的自发形成，Sci Rep，8，11 116，https://doi.org/10.1038/s41598-018-29485-5，2018年。Räss, L., Duretz, T., and Podladchikov, Y. Y.：在二维和三维中解析水力–力学耦合：去压实弱化导致孔隙流体自发通道化，《国际地球物理学杂志》，218，1591–1616，https://doi.org/10.1093/gji/ggz239，2019年。Räss, L., Utkin, I., Duretz, T., Omlin, S., and Podladchikov, Y. Y.：评估加速伪瞬态方法的稳健性与可扩展性，Geosci. Model Dev.，15，5757–5786，https://doi.org/10.5194/gmd-15-5757-2022，2022年。Rondenay, S., Abers, G. A., and Van Keken, P. E.：俯冲带变质作用的地震成像，《地质学》，36，275–278，2008年。Scambelluri, M., Piccardo, G. B., Philippot, P., Robbiano, A., and Negretti, L.：深俯冲阿尔卑斯蛇纹岩中由再循环海水形成的高盐度流体包裹体，《地球与行星科学快报》，148，485–499，1997年。Schmalholz, S. M., Moulas, E., Räss, L., and Müntener, O.：韧性剪切过程中的蛇纹岩脱水与橄榄石脉形成：关于二维数值模拟中孔隙度生成、密度变化和瞬态弱化的认识，《地球物理研究杂志：固体地球》，128，e2023JB026 985，https://doi.org/10.1029/2023JB026985，2023年。Schmalholz, S. M., Khakimova, L., Podladchikov, Y., Bras, E., Yamato, P., and John, T.：（去）水化前缘向零渗透率岩石中的传播，《地球化学、地球物理学、地球系统》，25，e2023GC011422，2024年。Schmalholz, S. M., Cingari, S., Khakimova, L., Moulas, E., and Podladchikov, Y. Y.：压实驱动流体流动中微量元素分异过程的通道化与滞缓，《地球物理研究快报》，53，e2025GL119610，2026年。Spandler, C. and Pirard, C.：从俯冲板片到岛弧地壳的元素再循环：综述，《岩石圈》，170，208–223，2013年。Spandler, C., Pettke, T., and Rubatto, D.：西阿尔卑斯Monviso变质蛇绿岩榴辉岩相脉体的内部与外部流体来源：对俯冲带流体流动的启示，《岩石学杂志》，52，1207–1236，https://doi.org/10.1093/petrology/egr025，2011年。Taetz, S., John, T., Bröcker, M., Spandler, C., and Stracke, A.：与俯冲板块界面高孔隙流体压力脉冲相关的快速板片内流体流动事件，《地球与行星科学快报》，482，33–43，https://doi.org/10.1016/j.epsl.2017.10.044，2018年。Tian, M., Katz, R. F., Rees Jones, D. W., and May, D. A.：俯冲板片的脱挥发分作用，第二部分：挥发分通量与储存，《地球化学、地球物理学、地球系统》，20，6199–6222，2019年。van der Straaten, F., Schenk, V., John, T., and Gao, J.：榴辉岩的蓝片岩相再水化（天山，中国西北部）：对俯冲通道中流体–岩石相互作用的启示，《化学地质学》，255，195–219，https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2008.06.037，2008年。Van Keken, P. E., Hacker, B. R., Syracuse, E. M., and Abers, G. A.：俯冲工厂：4. 全球俯冲板片中随深度变化的H_2O通量，《地球物理研究杂志：固体地球》，116，2011年。Virieux, J.：非均质介质中的P-SV波传播：速度–应力有限差分法，《地球物理学》，51，889–901，1986年。Vrijmoed, J. C. and Podladchikov, Y. Y.：Thermolab：用于开放系统非线性输运过程的热力学实验室，《地球化学、地球物理学、地球系统》，23，e2021GC010 303，https://doi.org/10.1029/2021GC010303，2022年。

Wang, L. H., Yarushina, V. M., Alkhimenkov, Y., and Podladchikov, Y.：受物理启发的伪瞬态方法及其在具有地质复杂性的聚焦流体流动模拟中的应用，《国际地球物理学杂志》，229，1–20，2022年。White, L. T., Rawlinson, N., Lister, G. S., Waldhauser, F., Hejrani, B., Thompson, D. A., Tanner, D., Macpherson, C. G., Tkalˇci´c, H., and Morgan, J. P.：地球最深处的地震震群追踪初生弧火山下方的流体上升，《地球与行星科学快报》，521，25–36，2019年。Wilson, C. R., Spiegelman, M., van Keken, P. E., and Hacker, B. R.：俯冲带中的流体流动：固体流变学与压实压力的作用，《地球与行星科学快报》，401，261–274，https://doi.org/10.1016/j.epsl.2014.05.052，2014年。Yamato, P., Duretz, T., Baïsset, M., and Luisier, C.：反应诱发的体积变化触发榴辉岩相条件下的脆性破坏，《地球与行星科学快报》，584，117 520，2022年。Yarushina, V., Podladchikov, Y., and Wang, L.：剪应力作用下多孔岩石中（去）压实与孔隙度波的模型，《地球物理研究杂志：固体地球》，125，e2020JB019 683，2020a。Yarushina, V. M. and Podladchikov, Y. Y.：多孔黏弹塑性介质的（去）压实：模型公式，《地球物理研究杂志：固体地球》，120，4146–4170，2015年。Yarushina, V. M., Podladchikov, Y. Y., and Connolly, J. A. D.：多孔黏弹塑性介质的（去）压实：孤立孔隙波，《地球物理研究杂志：固体地球》，120，4843–4862，https://doi.org/10.1002/2014JB011260，2015年。Yarushina, V. M., Podladchikov, Y. Y., and Wang, L. H.：剪应力作用下多孔岩石中（去）压实与孔隙度波的模型，JGR Solid Earth，125，https://doi.org/10.1029/2020JB019683，2020b。Yarushina, V. M., Wang, L. H., Connolly, D., Kocsis, G., Fæstø, I., Polteau, S., and Lakhlifi, A.：可能由孤立孔隙波引起的聚焦流体流动构造，《地质学》，50，179–183，https://doi.org/10.1130/G49295.1，2022年。Yarushina, V. M., Podladchikov, Y. Y., and Wang, H.：论多孔介质中耦合流动、化学反应与变形的本构方程，《地球物理研究杂志：固体地球》，128，e2023JB027725，2023年。Yoshida, K., Oyanagi, R., Kimura, M., Plümper, O., Fukuyama, M., and Okamoto, A.：瞬态流体排泄进入浅部地幔楔的地质记录，Sci. Adv.，9，eade6674，https://doi.org/10.1126/sciadv.ade6674，2023年。Zack, T. and John, T.：俯冲板片中反应性流体流动与微量元素迁移性的评估，《化学地质学》，239，199–216，https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2006.10.020，2007年。Zertani, S., John, T., Tilmann, F., Motra, H. B., Keppler, R., Andersen, T. B., and Labrousse, L.：榴辉岩化与变形过程对俯冲大陆地壳地震学性质的改造，《地球物理研究杂志：固体地球》，124，9731–9754，2019年。