



Geo-Science Education Journal

Jan-Jun 2016 Volume 1 (2) ISSN: 2450-7229

journals.mahuber.com/

email@geoledujour@gmail.com

-Huber Publisher-

Editor-in-Chief Miłosz Andrzej Huber

Maria Curie –Skłodowska University, Lublin, Poland

Redaction residence: Miłosz Andrzej Huber, 22
Bartla st, 30-389 Kraków, Poland.

Co-Editors (Thematic Editors)

Tomasz M. Karpiński –biological sciences
University of Medical Sciences, Poznań, Poland

Galina Zhigunova – earth sciences
Murmansk State Humanitary University, Russia

Statistic Editor

Olga Jakovleva, Lublin, Poland

Language Editor

Davor Kredic, *Chicago, USA*

Scientific Editorial Board

Artem Mokrushin, *Apatity, Russia*

Victoria Pantyley, *Atlanta, USA/Lublin, Poland*

Alex Rocholl, *GFZ Potsdam, Germany*

Nikolai Kozlov, *Murmansk State Technical
University, Apatity Russia.*

Sándor Kele, *Hungarian Academy of Sciences,
Budapest, Hungary.*

List of Peer-Reviewers

[http://www.journals.mahuber.com/index.php/gsej/pages /view/reviewers](http://www.journals.mahuber.com/index.php/gsej/pages/view/reviewers)

Author Guidelines

<http://www.journals.mahuber.com/index.php/gsej/about /submissions>

More information

<http://www.journals.mahuber.com/index.php/gsej>

DISCLAIMER

The Publisher and Editors cannot be held responsible for errors and any consequences arising from the use of information contained in this journal; the views and opinions expressed do not necessarily reflect those of the Publisher and Editors, neither does the publication of advertisements constitute any endorsement by the Publisher and Editors of the products advertised.

Cover: <http://openwalls.com/image?id=20115>, Licence Creative Commons Attribution 3.0 Unported (CC BY 3.0)

Copyright: © The Author(s) 2016. Geo-Science Education Journal © 2016 M.A.Huber. All articles and abstracts are openaccess, distributed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial 4.0 International License, which permits unrestricted, non-commercial use, distribution and reproduction in any medium, provided the work is properly cited.

Modern Recharge in Eastern Sahara: Inferences from GRACE, TRMM and Land Surface Model

Mohamed Ahmed

Department of Geology, Faculty of Science, Assiut University, Assiut 71516, Egypt
e-mail: ahmed.mohamed.aun@gmail.com

ABSTRACT

Gravity Recovery and Climate Experiment (GRACE), and climatic model (CLM 4.5) outputs were conducted over the southern part of the Nubian Sandstone Aquifer System (NSAS) (area: 825×103 km²) in Sudan and Chad to estimate the natural recharge rate. The Nubian Sandstone Aquifer System (NSAS) is shared by Egypt, Libya, Chad, and Sudan, and is one of the largest (area: $\sim 2 \times 106$ km²) groundwater systems in the world. Findings from the study include: (1) average annual precipitation was estimated at 77.5 mm (65 km³/yr); (2) recharge rate was estimated at 2.79 ± 0.99 km³/yr; given the annual extraction rate ($\sim 0.407 \pm 0.10$ km³/yr), recharge rate amounted to 3.2 ± 1.00 km³/yr; and (3) the east-west trending Uweinat Aswan uplift impedes south-to-north groundwater flow and replenishment from the recharge area in the south. A cost-effective integrated approach is developed to estimate the modern recharge in the southern part of the NSAS during the period from January 2003 to December 2012.

KEYWORDS: GRACE, TRMM, CLM, Sudan, Chad, Groundwater recharge.

1. INTRODUCTION

Estimation the current rate of groundwater recharge [1] is essential for efficient groundwater resource management in

arid and semi-arid zones, and is often the key to economic development. Moreover, it represents an essential component in the understanding of hydrogeologic settings for the aquifers. Many studies have been proposed to assess recharge with physical and chemical techniques, as well as with modeling [2-5]. These methods, however, are difficult to apply to regional scale studies, and may have a low confidence of model parameters when estimating recharge at a regional scale.

Several studies have used the monthly solutions of the Earth's gravity field produced by the Gravity Recovery and Climate Experiment (GRACE) mission [6] to detect mass variations at and below the surface of the Earth [7]. Global scale water mass variabilities have been estimated [8, 9] based on GRACE data. It has been used successfully to estimate basin-scale water balance [10, 11] and to quantify water mass storage variations [12]. For instance, regional water storage variabilities were estimated in several river basins [10, 11, 13-17]; regional anthropogenic effects were investigated [12, 18-20]; the time-dependent water partitioning in Africa watersheds were studied with other traditional data sets [21]; the anthropogenic induced variations in water availability across Africa was detected [20]; and the human contribution to groundwater depletion in the Middle East were estimated [22] based on additional data such as land surface models and well observations.

Based on isotopic composition studies (^{14}C and ^3H), North Western Sahara Aquifer System in north Africa has revealed to a modern recharge [23]; however, it was considered nonrenewable. [24] estimated the modern recharge in this aquifer based on GRACE-derived terrestrial water storage, GLDAS-derived soil moisture, and groundwater.

In the current study, GRACE, TRMM data and CLM 4.5 outputs have successfully and efficiently been applied to estimate the region-wide recharge across the southern part of the NSAS.

2. MATERIAL AND METHODS

2.1. Geological and Hydrogeological Description of the Area

The study area represents the southern part of the NSAS, located in northern Sudan and northeastern Chad, where the Average Annual Precipitation (AAP) exceeds an arbitrary threshold of 10 mm/yr, defining its northern border. This aquifer is formed by three basins: the Kufra Basin in Libya, northeastern Chad, and northwestern Sudan; the northern Sudan platform; and the Dakhla Basin in Egypt. The aquifer consists mainly of continental sandstones and intercalations of shale and clays of shallow marine and deltaic origin [25]. The aquifer is bound by basement outcrops to the south, east, and west, and to the north by the saline-freshwater interface. The study area is mostly filled by continental sandstones, which continue northward to the 25th latitude. North of the 25th latitude, the aquifer is confined under marine shale and clay of the Campanian Mut Formation, and the Campanian to the Lower Paleocene Dakhla Formation in the Dakhla Basin [25]. Figure 1 shows the spatial distribution of the recharge area in the NSAS.

2.2. Data and Analysis Methods

Tropical Rainfall Measuring Mission (TRMM) data was used to estimate the AAP over the

study area, and to delineate the recharge zone exceeding AAP of ~ 10 mm. GRACE data were used to estimate the total water storage (TWS) variation. To obtain groundwater storage (GWS) variation, contributions from soil moisture and river storage were estimated from a land surface model and then removed from the GRACE TWS.

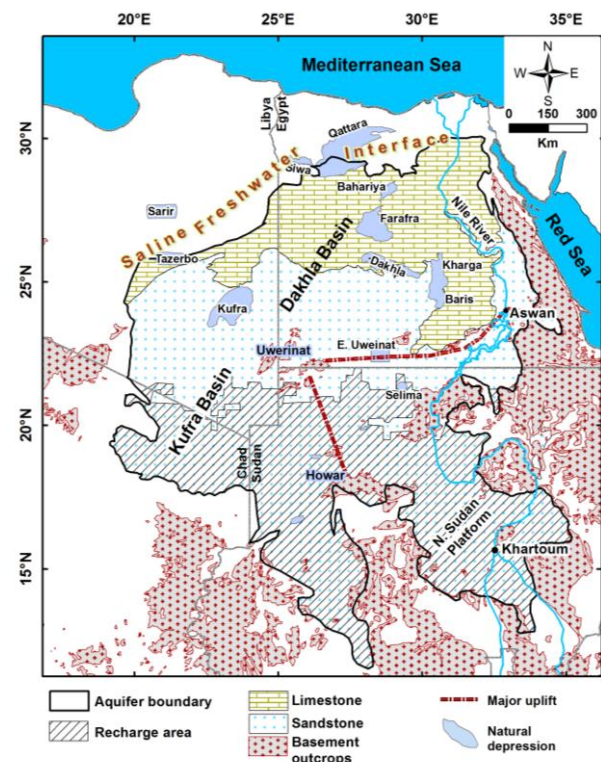


Fig. 1. Location map showing the distribution of study area in the northern Sudan platform and southern part of the Kufra Basin

The theoretical trend of groundwater storage was determined from the annual extraction rate in case of zero natural recharge throughout the investigated period.

2.2.1. TRMM Data

TRMM was launched in 1997 as a joint mission between the National Space Development Agency (NASDA) of Japan and NASA, as part of the Earth Observing System (EOS: 26,27. TRMM data was acquired (1998 to 2015) with near-global coverage (50°N to 50°S) at a spatial resolution of $0.25^{\circ} \times 0.25^{\circ}$, and with a temporal resolution of three hours. TRMM data were processed to generate the

total monthly rainfall images from the TRMM data taken every three hours over the study area.

Average Annual Precipitation (Fig. 2) over the entire aquifer was generated. It shows a progressive increase toward the south in precipitation over the study area from ~10 mm in its northern border to more than 1,000 mm close to its southern border, with the highest rainfall over the southern highlands. The Average Annual Precipitation over the North Western Sahara Aquifer System is low, which varies from less than 10 mm at its southern border in the desert region to more than 400 mm at its northern border close the Mediterranean coast; however, the aquifer is receiving a modest natural recharge estimated at $1.4 \pm 0.90 \text{ km}^3/\text{yr}$ by [24]

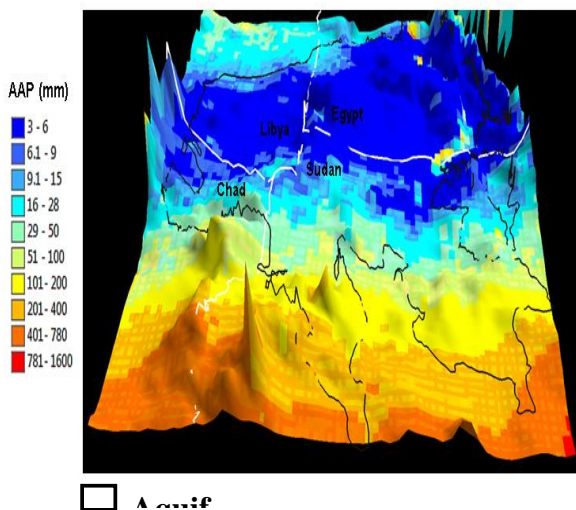


Fig. 2. 3D diagram showing the average annual precipitation (mm) generated from TRMM data (2003-2012).

2.2.2. GRACE Data

GRACE monthly gravity field solutions from the GRACE database provided by the University of Texas Center for Space Research were used in this study. Those fields are derived as monthly sets of spherical harmonics (Stokes) coefficients available on the GRACE website. These coefficients can be used to estimate monthly changes in mass stored on or near the Earth's surface, integrated over regions of a few hundred km or larger in scale [7]. Release 05

Stokes coefficients truncated to maximum degree 60 were used in this study.

GRACE data were processed following methods mentioned in [19, 20]. The time variable component of the gravity field is obtained by removing the long-term mean of the stock coefficients for each of the monthly values to obtain the temporal variations in these coefficients. The mean can be estimated by simply constructing the average of all the monthly fields used in the analysis. The mean field is removed because it is dominated by the static density distribution inside the solid Earth [7]. The systematic correlated errors in the GRACE gravity field coefficients were reduced by applying destriping filters [28]. The results have been smoothed by applying a Gaussian smoothing function with a 350 km radius [7].

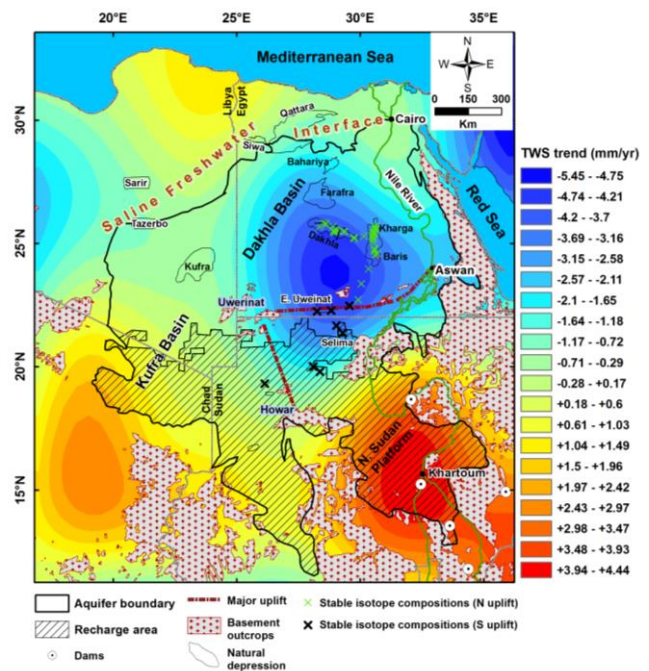


Fig. 3. 2003-2012 secular TWS trend map (mm/yr) over the aquifer. Also shown are isotopically groundwater samples north and south of the uplift and recharge area and the dams in the study area.

Mass grids of equivalent water thickness were generated, and the trend images were then extracted by simultaneously fitting a trend and seasonal terms to the GRACE data (Fig. 3). The trend data were then statistically analyzed using parametric techniques (Student t-test) to identify areas that have statistically significant

trends at 95% and 65% levels of confidence (Fig. 4).

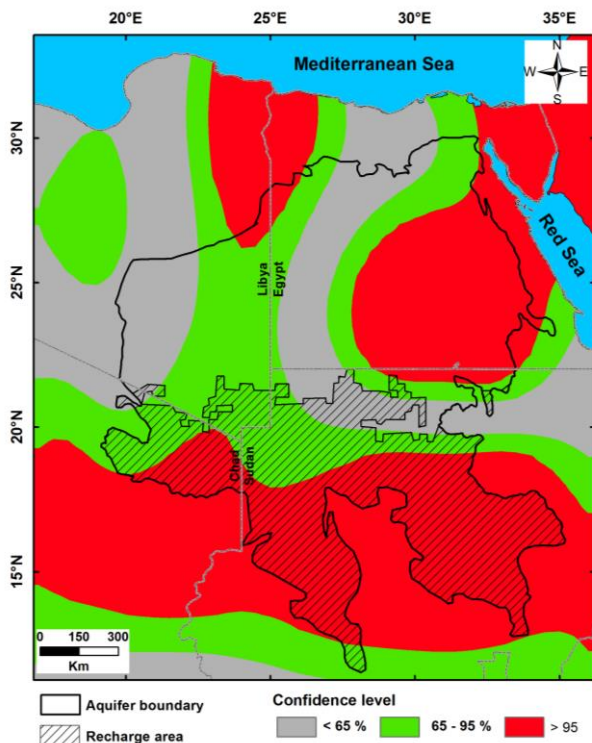


Fig. 4. Distribution of areas with significant trend values at <65%, 65-95%, and >95% levels of confidence for GRACE data.

After reducing the systematic correlated errors in the GRACE data, random errors were then minimized by applying a Gaussian filter with a half-width corresponding to 100 km [7]. The residual gravity coefficient anomalies for each month were then used to compute total water storage following the procedures described by [7]. The trend in GRACE-derived TWS was then calculated by simultaneously fitting a trend and seasonal terms to the TWS time series. The associated lost signal over the study area was restored to recover the mass change estimate for the region [29]. A scale factor of 1.14 was calculated and applied in this work following the procedures described in [19]. Errors associated with the calculated trend values were then estimated following the approach advanced by [30].

2.2.3. Land Surface Model

GRACE allows us to assess the temporal variations of TWS, which cumulates

all the surface, soil water, and groundwater storage variations. The GRACE data have no vertical resolution, and it is impossible to use it alone to determine the amount of mass variability that comes from surface water, soil water, or subsoil layers (groundwater). As my aim is to estimate the variations in groundwater storage, it is necessary to remove estimates of the other water storage components.

Water storage components excluding groundwater storage were calculated as a monthly output from a global, gridded land surface model. Community Land Model [31] version 4.5 was used in this work. CLM4.5 includes terrestrial hydrological processes such as interception of precipitation by the vegetation canopy; fall, infiltration, surface, and subsurface runoff; snow and soil moisture evolution; evaporation from soil and vegetation; and transpiration [31]

3. RESULTS AND DISCUSSION

The gridded land surface model outputs were used and expressed as anomalies from their average value over the same period as the GRACE solution, and were combined with GRACE to obtain estimates of changes in the groundwater storage (GWS) by subtracting soil moisture (SMS) and river storage (RS) from the GRACE-derived total water storage (TWS). The anthropogenic changes in groundwater were added to best estimate the recharge rate over the study area.

The groundwater storage variation over the investigated study was estimated according to the following equation:

$$\Delta GWS = \Delta TWS - (\Delta SMS + \Delta RS) \quad \text{Eq. 1}$$

The secular trend map over the aquifer shows a positive signal localized over the southern part of the aquifer at the Khartoum area and the southwestern boundary of the Kufra Basin. It also shows a negative signal over the northern part localized over the Dakhla Basin, which reflects the heavy extraction rates from the aquifer (Fig. 3). The average annual cycle of

rainfall (TRMM) anomalies were calculated by averaging the monthly values over the 10 years of the study period (AAP: 77.5 mm).

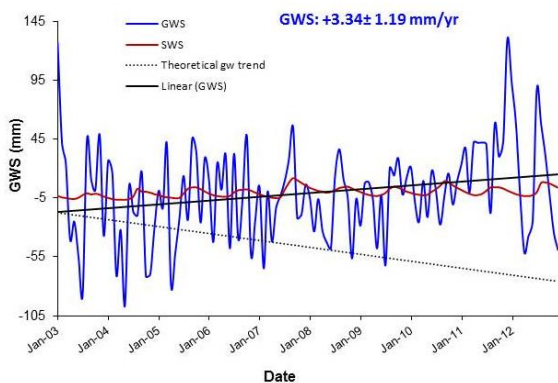


Fig. 5. Time series and secular trends for TWS over the study area.

Figure 5 shows the GRACE-derived TWS time series anomalies and secular trends averaged over the study area ($+3.94 \pm 1.19$ mm/yr). This equates to an annual volume increase of approximately $\sim 3.29 \pm 0.99$ km³/yr during the study period. The CLM4.5-derived SMS trend was calculated at 0.49 mm/yr, and the trend of CLM4.5-derived RS was calculated at 0.11 mm/yr. The trend in GWS variations (Fig. 6) was estimated at 3.34 ± 1.19 mm/yr, as the residual after subtracting the surface water storage (SWS; Fig. 6) is equal to the SMS trend (0.49 mm/yr) and RS (0.11 mm/yr) components from the GRACE-derived TWS trend using equation 1. Positive GWS trend equates to an annual volume increase of approximately $\sim 2.79 \pm 0.99$ km³/yr. The observed increase in TWS with time over the investigated area is probably related to the increase in the AAP over this area. The AAP over the study area throughout the investigated period is high (2003-2012: 75.8 mm) compared to the preceding period (1979-2001; CMAP: 70.8 mm) based on the Climate Prediction Center (CPC) Merged Analysis of Precipitation (CMAP) data. The actual yearly withdrawal rates from the investigated area in Sudan and Chad are 0.406 km³/yr and 0.001 km³/yr,

respectively [32]. The theoretical trend of groundwater extraction (0.407 km³/yr) in case of zero natural recharge was calculated at -0.49 ± 0.12 mm/yr (Fig. 6) assuming 25% error.

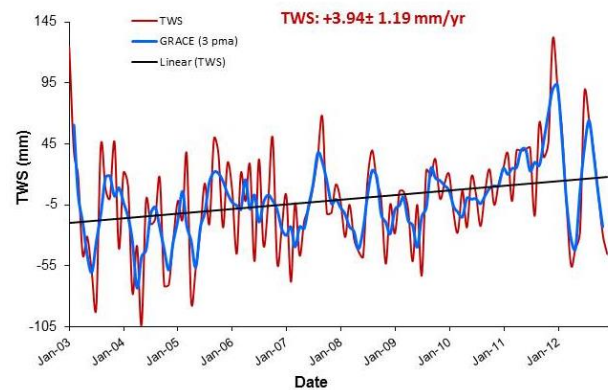


Fig. 6. Time series and secular trends for GWS; Also shown time series for SWS and theoretical trend for groundwater extraction over the study area.

The difference between the GRACE-derived GWS trend and the theoretical trend is related to the natural recharge by adding water to the system through precipitation. The recharge rate was estimated using equation 2:

$$R_n + R_a = \Delta GWS + (Q_n + Q_a) \quad \text{Eq. 2}$$

The artificial recharge (R_a) was assumed zero because there are no major ongoing artificial projects in the aquifer, and Natural discharge (Q_a) was assumed zero as well. Equation 2 is reduced to equation 3, which is used to calculate the recharge rate:

$$R_n = \Delta GWS + Q_a \quad \text{Eq. 3}$$

Using the GRACE-derived GWS trend (3.34 ± 1.19 mm/yr) and the theoretical groundwater extraction trend (-0.49 ± 0.12 mm/yr), the natural recharge rate was estimated at 3.83 ± 1.20 mm/yr using equation 3. This indicates that the investigated area is receiving a recharge rate of 3.83 ± 1.20 mm/yr (3.2 ± 1.00

km³/yr) during the study period. This rate represents ~5% of the average annual precipitation over the study area. Similar recharge rates (4-8 mm/yr; 33) were reported from the Central Sudan Rift Basin based on groundwater flow modeling in the Central Sudan Rift Basins. Recharge rate extracted using isotopic methods was at ~6-7% of precipitation [34] over the African aquifers. The surface water trend for dams and reservoirs in Sudan (Fig. 3) couldn't be estimated due to lack information on water volume change with time. The effect of replenishment of groundwater flow from the recharge area in Sudan doesn't appear in the northern part of the aquifer, and is obstructed by a major east-west trending Uweinat-Aswan basement uplift. The differences in the isotopic compositions of groundwater on either side of the uplift (north-average $\delta^{18}\text{O}$: $-10.7\text{‰}\pm 0.9\text{‰}$, average δD : $-80.8\text{‰}\pm 3.9\text{‰}$; south-average $\delta^{18}\text{O}$: $-8.6\text{‰}\pm 1.4\text{‰}$, average δD : $-40.8\text{‰}\pm 5.6\text{‰}$; [19], Fig. 3) support this suggestion.

4. CONCLUSIONS

The GRACE-derived total water storage, CLM-derived soil water storage, and anthropogenic effects were applied to estimate the modern recharge of the southern part of NSAS over the period between 2003 and 2012. The results indicate the study area is receiving an appreciable average annual precipitation of 77.5 mm (65 Km³/yr). The average annual recharge rate was estimated at 3.83 ± 1.20 mm/yr (3.2 ± 1.00 km³/yr), approximately 5% of the average annual precipitation over the study area. The east-west trending Uweinat-Aswan basement uplift obstructs the northward groundwater flow from the south, and the replenishment of groundwater does not appear north of the uplift. Finally, global coverage of temporal GRACE solutions has been available for the past 12 years, and plans are underway for the

development of GRACE Follow-On and GRACE-II missions. I suggest that within the next few years, GRACE will probably become the most practical, informative, and cost-effective tool for monitoring the recharge of aquifer systems across the globe.

ACKNOWLEDGEMENT

The author would like to thank the Center for Space Research, University of Texas at Austin for providing GRACE database that is available at <http://www.csr.utexas.edu/grace/>

TRANSPARENCY DECLARATION

The author declares no conflicts of interest.

REFERENCES

1. Simmers, I., 1997, Recharge of phreatic aquifers in (semi-) arid areas: Rotterdam, Netherlands: A.A. Balkema, p. 277.
2. Scanlon, B.R., Healy, R.W., Cook P.G., 2002, Choosing appropriate techniques for quantifying groundwater recharge: Hydrogeology Journal, v. 10, p. 18–39, doi: 10.1007/s10040-001-0176-2.
3. de Vries, J.J., and Simmers, I., 2002, Groundwater recharge: An overview of process and challenges: Hydrogeology Journal, v. 10, p. 5–17, doi: 10.1007/s10040-001-0171-7.
4. Milewski, A., Sultan, M., Yan, E., Becker, R., Abdeldayem, A., Soliman, F., and Gelil, K.A., 2009, A remote sensing solution for estimating runoff and recharge in arid environments: Journal of Hydrology, v. 373, p. 1–14, doi: 10.1016/j.jhydrol.2009.04.002.
5. Sultan, M., Yousef, A.F., Metwally, S.E., Becker, R., Milewski, A., Sauck, W., Sturchio, N.C., Mohamed, A.M.M., Wagdy, A., El Alfy, Z., Soliman, F., Rashed, M., Becker, D., Sagintayev, Z., 2011, Red Sea rifting controls on aquifer distribution: Constraints from geochemical, geophysical, and remote sensing data: Bulletin of the Geological Society of America, v. 123, p. 911–924, doi: 10.1130/B30146.1.

6. Tapley, B.D., Bettadpur, S., Ries, J.C., Thompson, P.F., and Watkins, M.M., 2004, GRACE measurements of mass variability in the Earth system.: *Science*, v. 305, p. 503–505, doi: 10.1126/science.1099192.
7. Wahr, J., Molenaar, M., and Bryan, F., 1998, Time variability of the Earth's gravity field: Hydrological and oceanic effects and their possible detection using GRACE: *Journal of Geophysical Research*, v. 103, p. 30,205–30,229, doi: 10.1029/98JB02844.
8. Andersen, O.B., Hinderer, J., 2005, Global inter-annual gravity changes from GRACE: Early results: *Geophysical Research Letters*, v. 32, doi: 10.1029/2004GL020948.
9. Brown N.J., Tregoning P., 2010, Quantifying GRACE data contamination effects on hydrological analysis in the Murray–Darling Basin, southeast Australia: *Australian Journal of Earth Sciences*, v. 57, p. 329–335, doi: 10.1080/08120091003619241.
10. Rodell, M., Famiglietti, J.S., Chen, J., Seneviratne, S.I., Viterbo, P., Holl, S., and Wilson, C.R., 2004, Basin scale estimates of evapotranspiration using GRACE and other observations: *Geophysical Research Letters*, v. 31, p. 10–13, doi: 10.1029/2004GL020873.
11. Syed, T.H., Famiglietti, J.S., Chen, J., Rodell, M., Seneviratne, S.I., Viterbo, P., and Wilson, C.R., 2005, Total basin discharge for the Amazon and Mississippi River basins from GRACE and a land-atmosphere water balance: *Geophysical Research Letters*, v. 32, p. 1–5, doi: 10.1029/2005GL024851.
12. Rodell, M., Velicogna, I., and Famiglietti, J.S., 2009, Satellite-based estimates of groundwater depletion in India: *Nature*, v. 460, p. 999–1002.
13. Crowley, J.W., Mitrovica, J.X., Bailey, R.C., Tamisiea, M.E., and Davis, J.L., 2006, Land water storage within the Congo Basin inferred from GRACE satellite gravity data: *Geophysical Research Letters*, v. 33, doi: 10.1029/2006GL027070.
14. Crowley, J.W., Mitrovica, J.X., Bailey, R.C., Tamisiea, M.E., and Davis, J.L., 2008, Annual variations in water storage and precipitation in the Amazon Basin: Bounding sink terms in the terrestrial hydrological balance using GRACE satellite gravity data: *Journal of Geodesy*, v. 82, p. 9–13, doi: 10.1007/s00190-007-0153-1.
15. Xavier, L., Becker, M., Cazenave, A., Longuevergne, L., Llovel, W., and Filho, O.C.R., 2010, Interannual variability in water storage over 2003–2008 in the Amazon Basin from GRACE space gravimetry, in situ river level and precipitation data: *Remote Sensing of Environment*, v. 114, p. 1629–1637, doi: 10.1016/j.rse.2010.02.005.
16. Bonsor, H.C., MacDonald, A.M., 2010, Groundwater and climate change in Africa: review of aquifer properties data: *BGS Internal Report*, v. 30, doi: IR/10/075.
17. Ferreira, V.G., Gong, Z., and Andam-Akorful, S. A., 2012, Monitoring mass changes in the volta river basin using GRACE satellite gravity and TRMM precipitation: *Boletim de Ciencias Geodesicas*, v. 18, p. 549–563, doi: 10.1590/S1982-21702012000400003.
18. Leblanc, M.J., Tregoning, P., Ramillien, G., Tweed, S.O., and Fakes, A., 2009, Basin-scale, integrated observations of the early 21st century multiyear drought in southeast Australia: *Water Resources Research*, v. 45, doi: 10.1029/2008WR007333.
19. Sultan, M., Ahmed, M., Sturchio, N., Eugene, Y., Milewski, A., Becker, R., Wahr, J., Becker, D., and Chouinard, K., 2013, Assessment of the vulnerabilities of the Nubian Sandstone Fossil Aquifer, North Africa: in Pielke, R. A., ed., *Climate Vulnerability. Understanding and Addressing Threats to Essential Resources*, Elsevier Inc., Academic Press, Oxford, v. 5, p. 311–333.
20. Ahmed, M., Sultan, M., Wahr, J., and Yan, E., 2014, The use of GRACE data to monitor natural and anthropogenic induced variations in water availability across Africa: *Earth Science*

- Reviews, v. 136, p. 289–300, doi: 10.1016/j.earscirev.2014.05.009.
21. Ahmed, M., Sultan, M., Wahr, J., Yan, E., Milewski, A., Sauck, W., Becker, R., and Welton, B., 2011, Integration of GRACE (Gravity Recovery and Climate Experiment) data with traditional data sets for a better understanding of the time-dependent water partitioning in African watersheds: *Geology*, v. 39, p. 479–482, doi: 10.1130/G31812.1.
22. Joodaki, G., Wahr, J., Swenson, S., 2014, Estimating the human contribution to groundwater depletion in the Middle East, from GRACE data, land surface models, and well observations: *Water Resources Research*, v. 50, p. 2679–2692, doi: 10.1002/2013WR014633.
23. Al-Gamal S.A., 2011, An assessment of recharge possibility to North-Western Sahara Aquifer System (NWSAS) using environmental isotopes: *Journal of Hydrology*, v. 398, p. 184–190, doi: 10.1016/j.jhydrol.2010.12.004.
24. Gonçalves, J., Petersen, J., Deschamps, P., Hamelin, B., Baba-Sy, O., 2013, Quantifying the modern recharge of the “fossil” Sahara aquifers: *Geophysical Research Letters*, v. 40, p. 2673–2678, doi: 10.1002/grl.50478.
25. Hesse, K.-H., Hissene, A., Kheir, O., Schnaeker, E., Schneider, M., and Thorweih, U., 1987, Hydrogeological investigations of the Nubian Aquifer System, Eastern Sahara: *Berliner geowissenschaftliche Abhandlungen (A)*, v. 75, p. 397–464.
26. Kummerow, C., 1998, Beamfilling errors in passive microwave rainfall retrievals: *Journal of Applied Meteorology*, v. 37, p. 356–370, doi: 10.1175/1520-0450(1998)037<0356:BEIPMR>2.0.CO;2.
27. Huffman, G.J., Bolvin, D.T., Nelkin, E.J., Wolff, D.B., Adler, R.F., Gu, G., Hong, Y., Bowman, K.P., and Stocker, E.F., 2007, The TRMM Multisatellite Precipitation Analysis (TMPA): quasi-global, multiyear, combined-sensor precipitation estimates at fine scales: *Journal of Hydrometeorology*, v. 8, p. 38–55, doi: 10.1175/JHM560.1.
28. Swenson, S., and Wahr, J., 2006, Post-processing removal of correlated errors in GRACE data: *Geophysical Research Letters*, v. 33, p. L08402, doi: 10.1029/2005GL025285.
29. Velicogna, I., Wahr J., 2006, Acceleration of Greenland ice mass loss in spring 2004: *Nature*, v. 443, p. 329–331.
30. Tiwari, V.M., Wahr, J., and Swenson, S., 2009, Dwindling groundwater resources in northern India, from satellite gravity observations: *Geophysical Research Letters*, v. 36, doi: 10.1029/2009GL039401.
31. Oleson, K.W., Lawrence, D.M., Bonan, G.B., Flanner, M.G., Kluzek, E., Lawrence, P.J., Levis, S., Swenson, S.C., and Thornton, P.E., 2013, Technical description of version 4.0 of the Community Land Model (CLM): NCAR Technical Note NCAR/TN-503+STR, National Center for Atmospheric Research, Boulder, CO, p. 422, doi: 10.5065/D6RR1W7M.
32. Ahmed, E., 2013, Nubian sandstone aquifer system: *Merit Research Journal of Environmental Science and Toxicology*, v. 16, p. 114–118.
34. Bonsor, H.C., Mansour, M.M., MacDonald, A.M., Hughes, A.G., Hipkin, R.G., and Bedada, T., 2010, Interpretation of GRACE data of the Nile Basin using a groundwater recharge model: *Hydrology and Earth System Sciences Discussions*, v. 7, p. 4501–4533, doi: 10.5194/hessd-7-4501-2010.

Received: 14 January 2016; **Revised submission:** 03 February 2016;
Accepted: 20 February 2016

Copyright: © The Author(s) 2015. This is an open access article licensed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial 4.0 International License, which permits unrestricted, non-commercial use, distribution and reproduction in any medium, provided the work is properly cited.

<http://journals.mahuber.com/index.php/gsej>

Charakterystyka wybranych przemian chemicznych i fazowych towarzyszących procesom metamorficznym

Huber Miłosz

¹Geology and Lithosphere Protection Department, Earth Science and Spatial Management Faculty, Maria Curie-Skłodowska University, 2cd/108 Krasnicka rd, 20-718 Lublin, Poland, miloh@interia.pl, corresponding author.

ABSTRACT

Metamorphic processes occur in rocks undergoing transformation under the influence of interactions such as pressure, temperature, time, etc. Their characteristics required to penetrate the crystal structure of the building rock and trace the changes leading to certain obvious changes. This is done based on the modeling of lattice transformation and calculations conducted on the models. The proposed mathematical model representation of the lattice as an attractor multidimensional structure of phase space reveals his individual characteristics of the border, and predicts the behavior in conditions where they will be exceeded as a result of external factors describing the space in which they are located. With the crossing of these factors occur reactions presented in this paper, causing the reconstruction of the lattice and the changes that follow highlight the impact of the process of metamorphism in the rock.

Keywords: Mathematic model, chemical processes, crystal, attractor, lattice defects.

1. WSTĘP

Skały jako produkt zmian i oddziaływania środowiska podlegają ciągłym przemianom, co

spowodowane jest zmieniającym się środowiskiem, procesami które oddziałują na nie. Magmatyzm, metamorfizm, wietrzenie, sedimentacja to główne przemiany występujące w skałach. Przemiany te zachodzą jako odpowiedź na środowisko. W procesach magmatycznych dominują procesy endoenergetyczne, dzięki którym dochodzi do kumulacji energii w skale na skutek pracy wykonanej przez ciepło, ciśnienie itp, choć w tym wypadku mamy do czynienia z procesem chłodzenia i spadku ciśnienia. Implikuje to pierwsze przemiany i reakcje pomiędzy minerałami w skale na skutek zmieniającej się sytuacji. Te reakcje są egzoenergetyczne. W przypadku metamorfizmu, dochodzi do zjawisk endoenergetycznych, kiedy wzrasta ciśnienie i temperatura, czyli wtedy gdy dostarczana jest skale energia. Sytuacja się odwraca, kiedy dochodzi do stygnięcia przeobrażonej skały. Następują procesy diaforetyczne, często związane z obniżeniem facji skały. Skały osadowe powstają na skutek abrazji innych skał i ten proces jest egzoenergetyczny, lecz często towarzyszą jemu procesy endoenergetyczne (choć nie dysponują one tak dużą energią, jak w procesach metamorfizmu, czy magmatyzmu), związane z działalnością organizmów żywych i słońca (bezpośrednio, jak i pośrednio w roli inhibitora działalności organizmów żywych, procesów metasomatycznych itp.). Procesy te

wpływają na krystalizację, rekrytalizację, cementację, itp. Ważnymi elementami katalizującymi reakcje są cechy środowiska. W skałach magmowych i metamorficznych dużą rolę odgrywają fluidy, w skałach osadowych są to warunki oksydacyjno – redukcyjne (Eh), oraz warunki kwasowo – zasadowe (pH). Efektem tych przemian jest skała. Ale skała jest zbudowana z minerałów to one najbardziej ilustrują przemiany zachodzące w środowisku.

Minerały zawarte w skałach wykazują swoiste cechy związane z budową wewnętrzną jak i relacje pomiędzy poszczególnymi składnikami. Ich stabilność w zmieniających się warunkach zależna jest od takich czynników jak energia wiązania (trwałość w różnych warunkach temperatury i ciśnienia), rodzaju atomów, cząstek, molekuł wchodzących w skład sieci (w tym podstawienia w węzłach jak i między węzłowe, luki sieciowe itp.) . W budowie minerału ważnym elementem są defekty sieciowe. One zwykle są inicjatorami wzrostu minerału i inhibitorami jego rozpadu – przemiany. Innym czynnikiem jest wewnętrzne uporządkowanie tych minerałów lub ich brak. Entropia, entalpia ma duże znaczenie, bowiem zdarza się że minerał wykonuje pracę porządkowania swej budowy aby w ten sposób zmagazynować energię którą w nadmiarze otrzymuje od zewnątrz , jest to jeden ze sposobów reakcji minerału na otoczenie. Kiedy minerał nie może reagować w ten sposób – dochodzi do przemiany sieci (przemian polimorficznych, np. przejście aragonitu w kalcyt), lub całkowitego jej rozpadu i powstania nowej fazy. Wszystkie te procesy da się wytłumaczyć matematycznie, jako modyfikacja zbiorów rozwiązań w wyniku oddziaływania zmiennych. W obliczeniach tych ważną rolę odgrywa chaos jak i równania dynamiczne.

Poniżej przedstawiono matematyczne podejście do procesów przemian fizycznych chemicznych także do definicji minerału, skały, procesu przemiany metamorficznej i fazowej.

2. MATERIAL AND METHODS

Niniejsze rozważania teoretyczne zostały przedłożone w oparciu o model matematyczny równań różniczkowych oraz próbę określenia ich rozwiązania w zakresie dynamicznych przemian jako dozwolone stabilne przejścia określone mianem atraktorów w procesach dynamicznych obejmujących rozważaną część skały. W dalszej kolejności przedstawiono przykłady zaczerpnięte z literatury i własnych obserwacji dokumentujące poszczególne postulowane zjawiska.

3. REZULTATY

Niech $f(\Psi)$ będzie funkcją (wielowymiarową) stanu materii w mineralu, gdzie składnikami funkcji są zmienne opisujące układ energetyczny, siłę wiązań i położenie poszczególnych atomów w sieci minerału wraz z uwzględnieniem domieszek defektów oraz ich fizycznego stanu, w tym m. in. funkcję Schrödingera $f(\Psi) = \Psi(r_i, s_i, R_g, S_g)$ określającą położenia elektronów w danym atomie. Niech zmiana tej funkcji $\Delta f(\Psi)$ będzie opisana zbiorem zmiennych x zmieniających się w czasie t od x_1 do x_n (n należy do C), w tym również i czasu (t), który jest tu stopniowany wartościami całkowitymi takimi że $n > 0$ ale $n \neq 0$ i t jest ciągle dla x^1 do x^n . Układem dynamicznym jest zatem układ N – autonomicznych równań różniczkowych pierwszego rzędu:

$$\begin{aligned} \frac{dx^{(1)}}{dt} &= F_1(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}) \\ \frac{dx^{(2)}}{dt} &= F_2(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}) \\ &\vdots \\ \frac{dx^{(N)}}{dt} &= F_N(x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^{(N)}) \end{aligned}$$



Który zapisujemy: $x_{n+1} = M(x_n)$

Jeżeli układ ten jest zbieżny, to znaczy, że ma granicę (dążąc do danego punktu, który nazwiemy punktem przyciągania zbioru, lub asymptoty, przestrzeni opisanej funkcją w 3D) to taki zbiór rozwiązań tego

układu nazwiemy atraktorem. Atraktoem zatem będzie układ dozwolonych stanów skupienia materii, którego rzutem w przestrzeni (3D) jest takie jej skupienie (wraz z domieszkami, defektami) które nazywamy minerałem, w którym poszczególne atomy podczas jego kreacji wraz z domieszkami i defektami sieci zajmują dozwolone miejsca będąc jednym z rozwiązań równań w atraktorze ściśle związanym z panującymi warunkami i dynamiką tych warunków podczas powstawania minerału. Atraktor w takim rozumieniu będzie zbiorem wszystkich możliwych wystąpień minerału wraz z jego defektami i podstawieniami które mogą powstać w danych warunkach. Każde kolejne warunki modyfikują zbiór rozwiązań i projekcję przestrzenną, jaką jest minerał, jeśli występuje ona w polu opisanym przez atraktor. Gdy zmieniające się warunki spowodują modyfikację atraktora, wtedy zachodzą w mineralu przemiany fazowe i sieciowe, jako odpowiedź na zmianę atraktora.

W tym miejscu należy zaznaczyć podobne rozumowanie pojęcia skały, jako atraktora, którego jednym z elementów równań są minerały.

Przykładem atraktora jest zapis procesów stochastycznych zachodzących przy rozpadzie nuklidu radioaktywnego oddziaływujący na skałę (powstawanie halo pleochroicznego na około cyrkonu np. w biotycie). Innym przykładem jest poniższy atraktor Henona, opisanym wzorem:

$$\left. \begin{aligned} x^{(1)}_{n+1} &= A - (x^{(1)}_n)^2 + Bx^{(2)}_n \\ x^{(2)}_{n+1} &= x^{(1)}_n \end{aligned} \right\}$$

gdzie $A=1,4$, $B=0,3$

który policzono : $x_{\text{nowy}}=y+1 - 1,4x^2$, $y_{\text{nowy}}=0,3x$, zaczynając od $x_0= 0,1$, wynik ponad 30 tys. iteracji (powtórzeń zamieszczam poniżej na figurze 1).

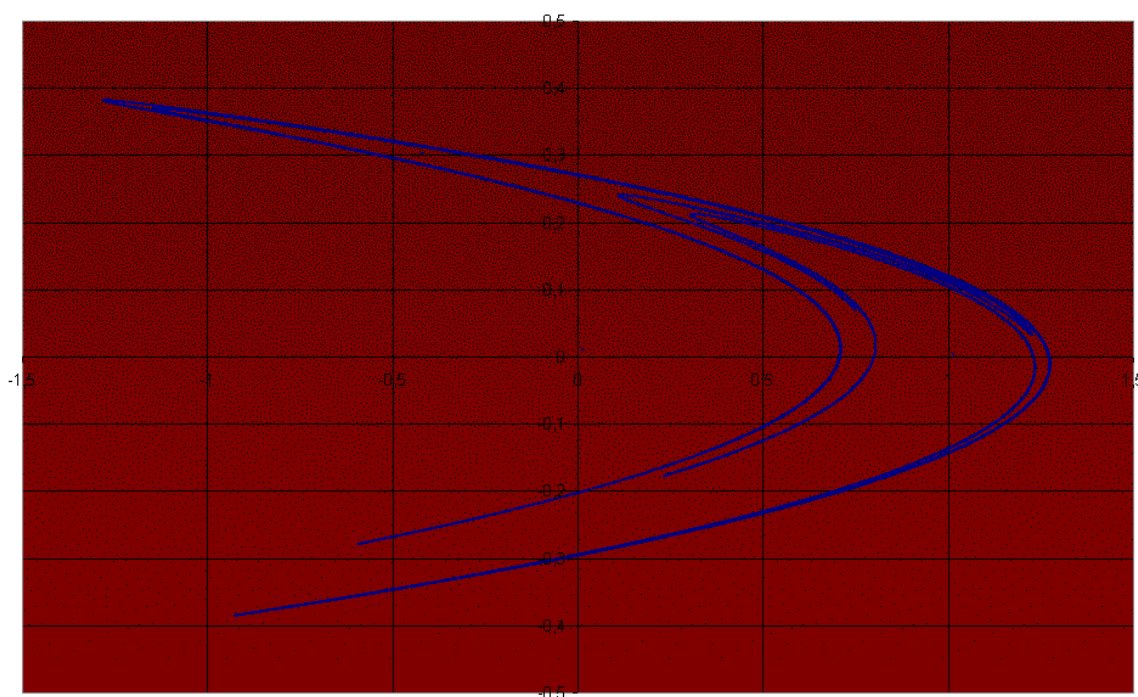


Figura 1. Wykres Atraktora Henona dla 30 tysięcy iteracji.

Proces metamorficzny polega na zmianie granicy ciągów zmiennych co wpływa na atraktor dozwolonych stanów skupienia materii, modyfikując

go i czyniąc w nowych warunkach wzbronionymi nietrwałe konfiguracje (za czym idzie przemiana fazowa, chemiczna), jednocześnie otwierając nowe

pola trwałości konfiguracji nietrwałych w poprzednich warunkach, które przyciągając zbiory opisujące konfigurację materii dążą do przemian zachodzących w skale. Jest to niewątpliwie przebudowa skał, minerałów powstająca pod wpływem zmieniających się warunków fizycznych, chemicznych których to fazy mineralne stają się meta lub niestabilne.

Procesem przemiany fazowej nazwiemy modyfikację atraktora dozwolonych stanów materii, lecz w sposób nie zmieniający formuły chemicznej. To jest zmiana sposobu prezentacji związku

chemicznego, który reaguje na nowe otoczenie zmieniając sposób relacji pomiędzy atomami w minerale, ale nie zmieniając formuły cząsteczkowej.

Proces przemiany chemicznej powoduje przebudowanie atraktora dozwolonych stanów materii poza obszar trwałości fazy w nowych warunkach, czego efektem jest przebudowa chemiczna struktury substancji (co powoduje powstanie nowego minerału). Jest to rozpad lub przebudowa formuły cząsteczkowej danego minerału, dzięki czemu powstają nowe minerały.

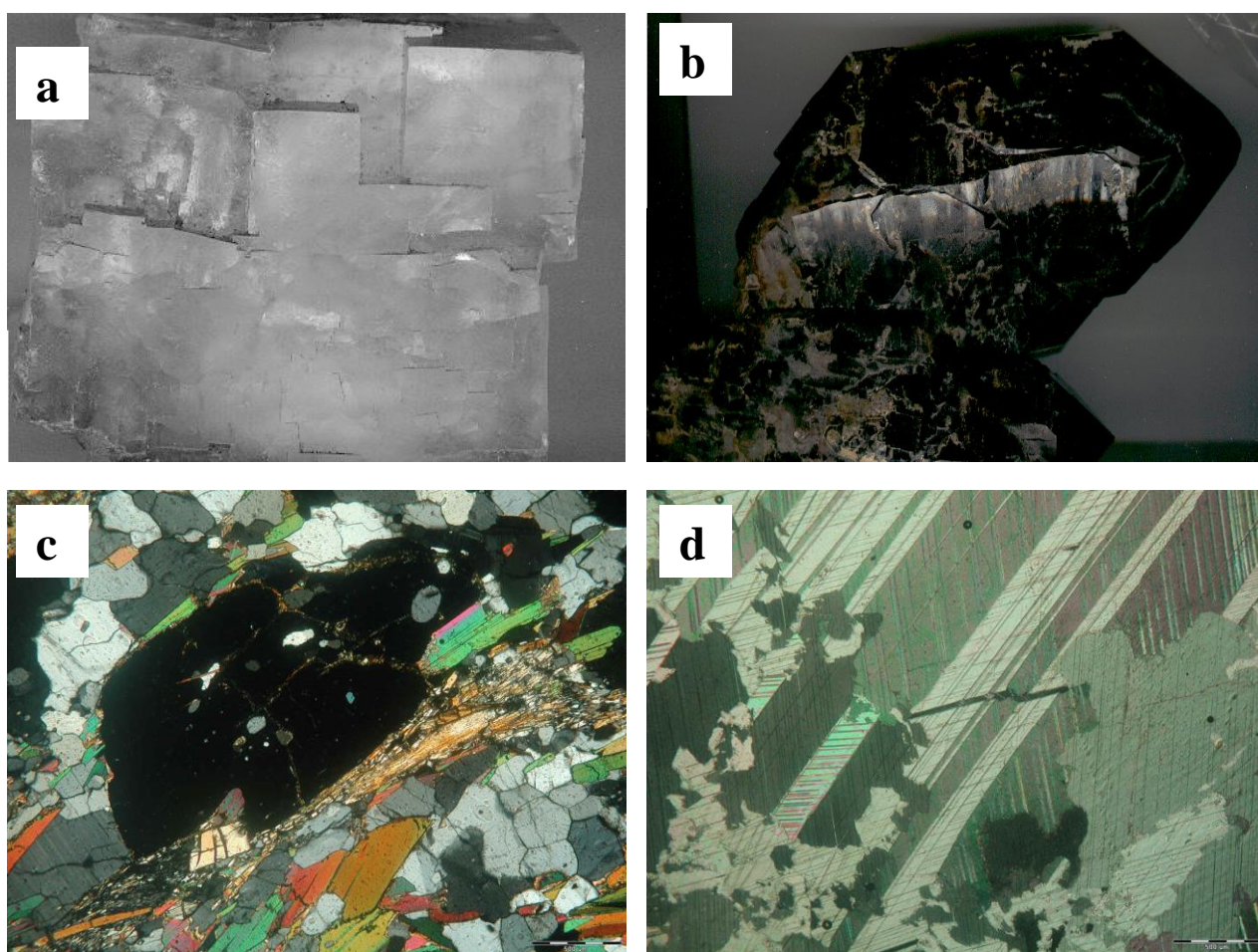


Figure 2. Przykłady typowych przemian fazowych: Pochłanianie mniejszych kryształów przez większy w halicie –a, Ten sam przykład w kwarcu –b, Deformacja granatu w strefie ścicia i krystalizacja sillimanitu, relikty w granacie –c, Budowa sektorowa węglanów –d.

4. DYSKUSJA

Przemian fizykochemicznych jako odpowiedzi na zmianę atraktorów jest wiele. Poniżej przedstawiam tylko najważniejsze grupy tych

przemian, które w dalszej części referatu zilustruję przykładami..

Najważniejszymi grupami tych przemian są:

1. Przebudowa sieci krystalicznej (zmiana upakowania cząstek) –powstaje nowa faza.

2. Migracja defektów sieciowych kryształach:
 - a. Przemieszczanie względnie zanikanie defektów (konstruktywne –udoskonalenie sieci i destruktywne –zarodkowanie nowej fazy)
 - b. Tworzenie się nowych defektów (najczęściej ze skutkiem destruktywnym dla minerału).
 - c. Problem domen, sektorów itp.
 - d. Wpływ łupliwości, spękań, defektów na migrację fluidów i neoblastezę.

3. Dyfuzja jonów i rola filmu intergranularnego.
4. Stan fizykochemiczny sieci jako funkcja stanu dozwolonego skupienia materii (temperatura, ciśnienie, agresywność innych związków).
5. Entropia i entalpia (uporządkowanie i chaos a procesy endo i egzotermiczne).
6. Rozpad minerału i powstanie neoblastów.
7. Funkcja czasu (inhibitor i katalizator reakcji).

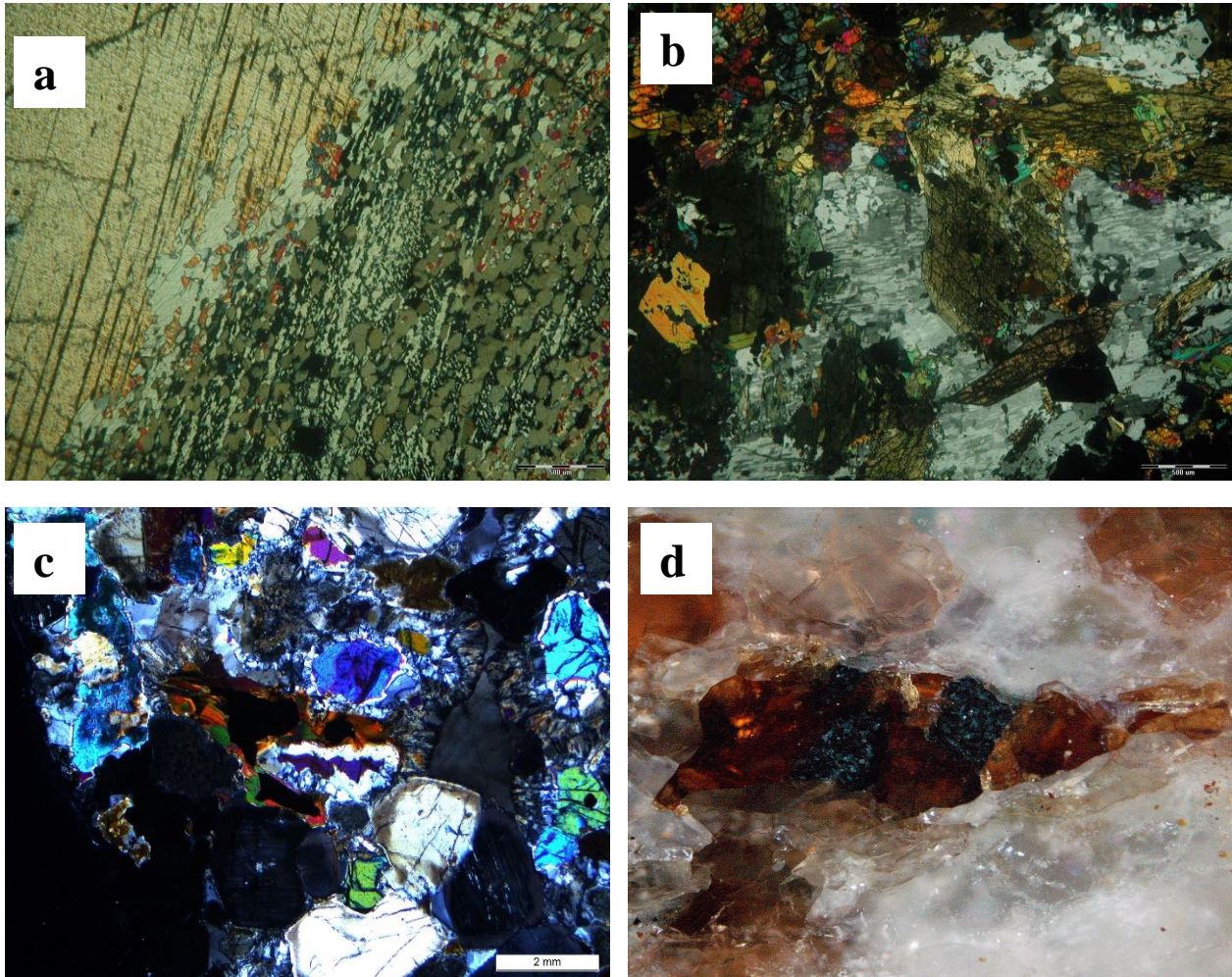


Figure 2. Mikrofotografie przedstawiające przykładowe reakcje w skałach metamorficznych: Amfibolizacja piroksenów –a, Amfibolizacja piroksenów, biotytyzacja amfiboli, chlorytyzacja biotytów –b, Korony reakcyjne na oliwinie w sfenityzowanym gabrze –c, Przykład reliktyw i nowych faz: Rutyl i ilmenit obrośnięty tytanitem –d.

Przykłady reakcji do poszczególnych punktów zostały omówione poniżej:

1. Przejście brookit –rutyl (TiO_2) przy temperaturze około 7000C. Przejście to zmienia sposób ułożenia jonów $[\text{TiO}_6]^{8-}$ w strukturze krystalicznej. Innym przykładem jest przejście aragonitu –kalcyt (zachodzące np. w procesach diagenetycznych). Ułożenie kationów Ca^{2+} względem anionów $[\text{CO}_3]^{2-}$

w kalcycie i aragonicie różni się nieznacznie, jednak zmienia strukturę krystaliczną (układ krystalizacji). 2a- przemieszczanie się defektów –ewentualnie zanikanie ich –przykład wzrost kryształu kosztem pochłaniania innych, np. kwarc, halit itp. Migracja ta prowadzi między innymi do pochłaniania mniejszych kryształów w ciele większego i „obrastania” ich jedną fazą. Na granicy tych faz następuje sukcesywne

przemieszczanie jonów powodujące w ostateczności zanikanie faz mniejszych kosztem większej fazy (Fig 2a,b).

2b –tworzenie się nowych defektów –np. w mylonitach, gdzie dochodzi do stresu, oraz w strefach rotacji. Siły dynamiczne działające na skałę i sieć krystaliczna w trakcie ścinania skały prowadzą do niekompensowanych defektów sieciowych w efekcie dochodzi do kruszenia się kryształów, ich deformacji oraz powstawania aktywnych powierzchniowo warstw granicznych. W efekcie prowadzi to do krystalizacji nowych faz kosztem starszych. Przykładem może być m.in. powstanie deformacji granatu w strefie ścinania i krystalizacja sylimanitu w łupku amfibolowym (fig 2c).

2c. Migracja defektów liniowych może tworzyć tzw. zespół granicy niskokatowej, która objawia się powstaniem budowy domenowej i sektorowej o odmiennej orientacji optycznej często objawiającej się w takich minerałach jak plagioklasy i myrmekity, budowa domenowa kalcytu, zbliżniaczenia magnetytu (fig 2d). W plagioklazach w trakcie tworzenia się budowy sektorowej występuje zjawisko diadochii heterowalentnej.

2d- Naturalne powierzchnie łupliwości, spękania przyczyniają się do powstawania nowej fazy kosztem starej która rozwija się stopniowo w strefie aktywnej warstwy kryształu. Przykładem są strefy amfibolizacji piroksenów, epidotyzacji amfiboli i inne procesy zachodzące w procesie diaforezy (fig 3a,b).

3-Dyfuzja jonów oraz krystalizacja w stanie suchym mają miejsce przede wszystkim w procesie rekrytalizacji metamorficznej. W tym czasie dochodzi do wymiany jonowej umożliwiającej tworzenie się nowych faz. Przykładem są wszelkiego rodzaju korony reakcyjne gdzie dochodzi do krystalizacji nowej fazy kosztem starej wraz z przemieszczeniem się jonów pomiędzy kryształami w skałe (fig 3c).

4. Wpływ ciśnienia, temperatury oraz innych czynników w sposób istotny wpływa na wytworzenie się nowej fazy kosztem starej. Jest to bodziec do przeprowadzenia przemian fazowych. W wielu przykładach dobrze jest to widoczne *post factum* gdzie widoczne są relikty faz pierwotnych które wskazują proces przejścia jednej fazy w drugą (fig 3d)

5. Proces uporządkowywania struktury kryształów znany jest z inżynierii materiałowej (hartowanie, wygrzewanie) oraz w geologii gdzie przykładem jest znana tryklinizacja skałeni alkalicznych, przejście sanidyn –mikroclin –ortoklaz

6. Rozpad kryształu może wynikać z przemian fazowych w wyniku których dochodzi do rekrytalizacji składników jako inne odrębne fazy. Przykładowa reakcja: Chlorytoid =almandyn + korund + H₂O (przejście z facji zieleńcowej do amfibolitowej).

7. Funkcja czasu określa stopień trwania danych reakcji. Bywa niesprzyjające warunki mogą zachodzić w zbyt krótkim czasie, co przyczynia się do niecałkowitego przereagowania faz w skałe. Przykładem są dwa skrajne rodzaje metamorfizmu: uderzeniowy i regionalny. Ten pierwszy trwa krótki czas i zwykle po za strukturami szokowymi, nie wyrządza wielkich zmian w skałe (szczególnie magmowej) z kolei metamorfizm regionalny nawet jeśli jest niskiej facji zawsze pozostawi w skałach zapis istnienia w postaci paragenez mineralnych.

5. KONKLUZJE

Wykazane powyżej procesy dynamiczne związane z przebudową sieci krystalicznej stanowią fundamentalne znaczenie w zrozumieniu zjawisk zachodzących w omawianych kryształach. Procesy te, charakterystyczne dla ciał stałych, poddanych nieustannym zmiennym warunkom fizykochemicznym przyczyniają się do ciągłych przemian w skałach od wysokotemperaturowych i ciśnieniowych, panujących na ogół we wnętrzu Ziemi do niskotemperaturowych i niskociśnieniowych, charakterystycznych zwykle dla skał osadowych na powierzchni Ziemi. Mechanizm tworzenia się tych przemian stanowi podstawę zrozumienia reakcji w nim zachodzących, oraz rekonstrukcji zdarzeń, które miały miejsce w zbadanych skałach. W wielu przypadkach w zrozumieniu złożonych procesów pomagają informacje zebrane doświadczalnie w ramach inżynierii materiałowej w warunkach laboratoryjnych. Analizowane skały są w zasadzie zawsze wynikiem wielu nałożonych na siebie różnorodnych procesów które miały miejsce w przyrodzie dlatego w każdym przypadku określenie i

interpretacja zdarzeń wymaga indywidualnego podejścia do badanego materiału

TRANSPARENCY DECLARATION

The author declares no conflicts of interest.

REFERENCES

1. Barkera A. J. „Introduction to metamorphic textures and microstructures”, Blacie Academic & professional 1994r
2. Blicharski Marek „Przemiany fazowe” Skrypt nr. 1173, wyd AGH 1990
3. Bojarski Z. i in. „Krystalografia” PWN 1996
4. Bolewski A. i In. „Mineralogia Ogólna” Wyd. Geologiczne 1990
5. Deen Jerzy i In. „Chemia ciała stałego” PWN 1975
6. Gleick Jamek „Chaos” Wyd Zysk i S-ka 1996
7. Heflik W. „Metamorfizm w świetle niektórych badań fizykochemicznych” , wyd. AGH 1993
8. Holliday Dawid Resnick Robert „Kizyka” PWN 1996
9. Ibah H., Lüth H. „Fizyka ciała stałego” PWN 1996
10. Kittel Charles „Wstęp do fizyki ciała stałego” PWN 1999
11. Kosewicz Arnold M. „Mechanika fizyczna nieidealnych krystalicznych ciał stałych” Wyd. UW r 2000
12. Kozłowski K. Ryka W. „Petrologia skał magmowych” UŚ 1981
13. Kretz Relph “Metamorphic crystalization” Wyd. John Willey 1994, Canada
14. Kuderewicz Jacek „Fraktale i chaos” WT 1993
15. Majcherczyk Tadeusz „Badanie fizycznych własności skał” Skrypt nr. 1175, wyd AGH 1989
16. Miashiro Akiho „Metamorphic petrology” New York, Oxford University Press 1994
17. Nusse Helena E., Yorke Jamek A. „Dynamika badania numeryczne” PWN 1998
18. Ott Edward „Chaos w układach dynamicznych” WNT 1997
19. Pajdowski L. „Chemia Ogólna” PWN 1997r.
20. Ryncarz Tadeusz “Zarys Fizyki Górnotworu” Śląskie Wyd. Tchn. 1993
21. Shmulowich K. I. et all. “Fluids in the crust” Chapman & Hall UK 1995
22. Żaba J. „Petrologia skał metamorficznych” UŚ 1986.

Received: 22 February 2016; **Revised submission:** 26 February 2016;
Accepted: 13 March 2016

Copyright: © The Author(s) 2015. This is an open access article licensed under the terms of the Creative Commons Attribution Non-Commercial 4.0 International License, which permits unrestricted, non-commercial use, distribution and reproduction in any medium, provided the work is properly cited.

<http://journals.mahuber.com/index.php/gsej>
