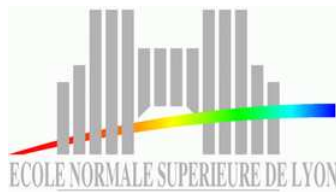


École Normale Supérieure de Lyon
Laboratoire de Sciences de la Terre



Université Charles à Prague
Faculté de Mathématiques et Physique



Thèse de doctorat

**Modèle d'écoulement biphasé en sciences de la Terre :
fusion partielle, compaction et différenciation**

par

Ondřej Šrámek

Directeurs de thèse : Yanick Ricard & Ondřej Čadek

Soutenue le 20 décembre 2007 devant le jury formée de :

Stéphane Labrosse,	Membre/Président
Neil Ribe,	Membre/Rapporteur
Yanick Ricard,	Membre
Harro Schmeling,	Membre/Rapporteur
Jakub Velímský,	Membre

N° d'ordre : 444

N° attribué par la bibliothèque : 07ENSL0 444

THÈSE

en vue d'obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Lyon – École Normale Supérieure de Lyon

spécialité : Sciences de la Terre et Univers

Laboratoire de Sciences de la Terre

École doctorale de Sciences de la Terre

présentée et soutenue publiquement le 20 décembre 2007

par Monsieur Ondřej ŠRÁMEK

Titre :

**MODÈLE D'ÉCOULEMENT BIPHASÉ EN SCIENCES DE LA TERRE :
FUSION PARTIELLE, COMPACTION ET DIFFÉRENCIATION**

Directeurs de thèse : Monsieur Yanick RICARD
Monsieur Ondřej ČADEK

Après avis de : Monsieur Neil RIBE, Membre/Rapporteur
Monsieur Harro SCHMELING, Membre/Rapporteur

Devant la Commission d'examen formée de :
Monsieur Stéphane LABROSSE, Membre/Président
Monsieur Neil RIBE, Membre/Rapporteur
Monsieur Yanick RICARD, Membre
Monsieur Harro SCHMELING, Membre/Rapporteur
Monsieur Jakub VELÍMSKÝ, Membre

Charles University in Prague
Faculty of Mathematics and Physics



Ph.D. Thesis

**Modeling of two-phase flow in geophysics:
partial melting, compaction and differentiation**

by

Ondřej Šrámek

Supervisors: Yanick Ricard & Ondřej Čadek

Department of Geophysics
V Holešovičkách 2
180 00 Praha 8
Czech Republic

2007

Remerciements

La soutenance de cette thèse a conclu plus de cinq ans de ma vie doctorale. Les collaborations et interactions avec un grand nombre de personnes, ainsi que le soutien de beaucoup d'autres m'ont permis de poursuivre mon travail. C'est avec un grand plaisir que j'exprime ici ma gratitude.

Je remercie Yanick Ricard, mon directeur de thèse, pour son conseil et son amitié. Son enthousiasme contagieux pour la science et l'intensité avec laquelle il approche la recherche ainsi que les autres occupations m'ont toujours encouragé dans mes activités. Merci à Jan Matas pour son aide compréhensive qui a facilité ma vie et mon travail en France. Le chemin vers l'accomplissement de cette thèse a traversé une période importante sous la forme de trois années passées à l'Université Yale. Je suis reconnaissant à mon 'advisor' David Bercovici pour les discussions scientifiques, ses conseils professionnels, et son soutien personnel. Merci à Ondřej Čadek, qui m'a suggéré l'idée de poursuivre ma thèse en France et qui a encadré cette thèse en cotutelle à l'Université Charles à Prague.

Merci à tous les personnes que j'ai pu côtoyer pendant ces années dans les trois laboratoires – à Lyon, à Yale et à Prague, qui ont contribué, d'une façon ou de l'autre, à mon développement professionnel, qui ont participé à la création d'un environnement de travail stimulant dans une ambiance amicale. La liste est longue et contient les thésards, les postdocs, les chercheurs et professeurs, ainsi que le personnel de labo.

Je prends cette occasion pour exprimer mes remerciement sincères pour les encouragement et le soutien sans bornes de la part de ma famille, de mes amis et de ma copine Lisa.

Résumé

La fusion partielle et le transport des magmas jouent un rôle majeur dans la formation et l'évolution de la planète Terre. Le transport de la chaleur, la rhéologie de roches et la distribution des éléments chimiques majeurs et mineurs, ainsi que de volatils sont tous affectés par la présence et la migration de magmas. La fusion partielle et l'extraction du magma sont des processus centraux pour la formation de la croûte océanique et sont responsables de l'appauvrissement en éléments incompatibles de la partie mantellique de la lithosphère. La migration de la matière fondue a joué un rôle majeur dans l'évolution dynamique de la Terre primitive et joue encore un rôle fondamental dans le transport de la matière et de la chaleur dans les régions partiellement fondues du manteau plus profond (*e.g.*, à la frontière noyau-manteau).

La séparation du métal plus dense des silicates plus légers est le processus de différenciation le plus extensif au cours de l'évolution de la Terre – et de corps telluriques en général. Ce processus implique aussi la présence de phases différentes, solides et liquides. L'énergie gravitationnelle qui est libérée lors de la différenciation est une source majeure de chaleur, qu'il faut considérer dans l'étude de l'évolution thermique d'une planète croissante. Il est donc fondamental prendre en compte avec exactitude les échanges d'énergie qui ont lieu dans les milieux multiphasés sur de grandes échelles spatiales pour qu'on puisse préciser les échelles temporelles de la différenciation planétaire.

L'analyse théorique et la modélisation numérique sont un outil indispensable de l'étude de la dynamique d'une planète à l'échelle globale. Nous présentons un nouveau modèle général d'écoulement et de déformation d'un milieu biphasé. Il permet un transfert de masse entre les phases (changement de phase) et est une extension des équations récentes de Bercovici *et al.* (2001a). Le modèle offre une description cohérente de la mécanique et thermodynamique un mélange sur l'échelle mésoscopique de deux fluides visqueux par des équations de milieux continus, dans la limite de l'écoulement rampant. La différence de pressions qui existe entre les deux phases est générée i) par la tension superficielle aux interfaces qui est incluse dans le modèle, et ii) par la déformation isotrope (*i.e.*, compaction ou dilatation) des phases individuelles lors de l'écoulement.

Dans toutes les applications géologiques considérées, une des phases (appelée phase 'liquide') est beaucoup moins visqueuse que l'autre (phase 'solide') ce qui simplifie grandement les équations. Dans la modélisation de la différenciation d'une planète tellurique, la phase 'solide' représente les silicates du manteau et la phase 'liquide' est l'alliage métallique du noyau. En fonction de la température le métal peut lui même être soit fondu soit à l'état solide. Il n'y a pas de transfert massique entre les silicates et la phase métallique. Nous étudions d'abord la

compaction dans une couche et dans un corps symétrique sphérique (modèles 1-D). Le code numérique et diverses simulations en deux dimensions sont présentés. Pour une protoplanète de ~ 2000 km du rayon nous obtenons les temps caractéristiques de la ségrégation de l'ordre de 0.1 Ma.

Le traitement cohérent du changement de phase à partir de principes de base de la thermodynamique hors l'équilibre nous permet d'étudier le couplage entre la déformation et la fusion. Nous présentons une analyse de la décompression adiabatique dans un manteau remontant sous une dorsale. La déformation volumique du squelette solide génère une différence dynamique de pressions entre le solide et le liquide : le magma subit une pression inférieure à celle de la matrice qui se compacte. Cet effet devient particulièrement important lors de l'initiation de la fusion et peut décaler la profondeur de la base de la zone de fusion de plusieurs kilomètres. L'effet de la tension superficielle à l'initiation de fusion est aussi discuté et dépend du bilan énergétique des interfaces à l'échelle de grains, et en conséquence de la géométrie du premier liquide. Les vitesses de remontée du magma atteignent au plus dix fois celles de la matrice. La porosité (la fraction volumique du magma) reste faible (quelques %) même à fort taux de fusion, et est d'allure parabolique sur toute la zone fondue.

Summary

Partial melting and migration of melts play an important role in formation and evolution of the Earth. Transport of heat, rock rheology and distribution of major, minor, as well as volatile chemical species are all affected by the presence and migration of magmas. Partial melting and melt extraction are central processes for the formation of the oceanic crust and are responsible for the depletion in incompatible elements of the mantle part of the lithosphere. Migration of molten material played a major role in the dynamical evolution of the early Earth and even now plays a fundamental role in the transport of matter as well as heat in partially molten regions of deeper mantle (*e.g.*, at the core–mantle boundary).

The separation of the denser metal from the lighter silicates is the most extensive differentiation process in the course of Earth’s evolution – and the evolution of terrestrial planetary bodies in general. This process also implies the presence of distinct phases, in solid and liquid states. Gravitational energy which is released upon differentiation is a major source of heat that must be considered when assessing the thermal history of a forming planet. It is therefore essential to properly take into account the energy exchange that takes place in a multiphase medium on a large spatial scale in order to investigate early planetary evolution and to constrain the differentiation time scales.

Theoretical analyses and numerical modeling are essential tools for the study of the planetary dynamics at global scale. We present a new general model of two-phase flow and deformation in a two-phase medium. Our model is a modification of a recent set of equations presented by Bercovici *et al.* (2001a), extended so that it allows for the mass exchange between phases (that is, phase change – melting/solidification). The model offers a self-consistent description of the mechanics and thermodynamics of a mixture of two viscous fluids in the form of continuum mechanical equations, in the limit of a slow creeping flow. The difference in pressures that exists between the two phases is generated i) by the surface tension at the interfaces between the phases which are included in the description, and ii) by the isotropic deformation (*i.e.*, compaction or dilation) of the individual phases upon flow.

In all the geologic applications considered, one of the phases (named the ‘liquid’ phase) is much less viscous than the other phase (the ‘solid’ phase), which largely simplifies the equations. In the modeling of differentiation of a terrestrial planet, the ‘solid’ phase represents the silicates of the mantle and the ‘liquid’ phase is the iron alloy of the core. Depending on temperature, the iron phase can itself be either molten or in its solid state. There is no mass transfer between the silicate and the iron phase. First we study the compaction in a layer and of a spherically symmetric body (1-D models). A numerical code and various simulation in 2-D are then presented. For a proto-planet of a radius of ~ 2000 km, we obtain characteristic

time scales of the core segregation of the order of 0.1 Myr.

The careful treatment of the phase change in the two-phase model, based of the fundamental principles of thermodynamics in a non-equilibrium case, allows us to study the coupling between viscous deformation and melting. We present an analysis of the pressure release melting of an upwelling mantle below a spreading center. The volumetric deformation of the matrix skeleton generates a dynamic pressure difference between the solid and the melt : the magma is submitted to a lower pressure than the compacting solid matrix. This effect is particularly important at incipient melting and can move the base of the melting zone by few km. The effect of surface tension on the initiation of melting is also discussed ; it depends on the energetic balance of the solid–solid and solid–melt interfaces on the grain scale, and consequently on the geometry of the first melt to appear. The magma extraction velocities reach at most ten times the upwelling velocity of the solid. The porosity (melt volume fraction) remains small (few percent) even at high degree of melting, and has a roughly parabolic profile in the entire melting zone.

Table des matières

Remerciements	v
Résumé (en français)	vii
Summary (in english)	ix
1 Introduction	1
1.1 Fusion partielle dans le manteau	2
1.1.1 Situation	2
1.2 Différenciation	6
1.3 Modèle biphasé	12
1.3.1 Milieux multi-phasés : deux approches	13
1.3.2 Construction du modèle biphasé	14
1.3.3 Percolation et loi de Darcy	15
1.3.4 Application des modèles biphasés à la géodynamique	22
1.3.5 Nouveau modèle de Bercovici <i>et al.</i>	26
1.3.6 Changement de phases	29
1.4 Plan	30
2 Équations biphasés	31
2.1 Équations « MK84 »	32
2.2 Équations « ŠRB »	34
3 Phase separation: metal–silicate differentiation	39
3.1 Equations of two-phase compaction	40
3.2 Generalisation for a case where the component can itself be solid or liquid	42
3.3 Dimensionless equations	43
3.4 Compaction in a layer	46
3.5 Compaction of a spherically symmetric body	51
3.6 1D segregation of the core	52
3.7 2-D model	57
3.7.1 Advection schemes	62

3.7.2	Benchmarking the code	66
3.8	Applications	67
3.8.1	Segregation of a proto-core	67
3.8.2	Various mechanisms of metal diapir propagation	69
3.8.3	Energy transfer	74
3.8.4	Threshold of instability	76
3.9	Conclusion	77
	Appendix 3.A Momentum equations	79
	Appendix 3.B Porosity advection scheme	81
	Appendix 3.C Energy conservation	82
4	Modèle biphasé avec la fusion	91
4.1	Introduction	92
4.2	General theory	93
4.2.1	Mass conservation	94
4.2.2	Momentum conservation	94
4.2.3	Energy conservation	97
4.2.4	The equilibrium condition	101
4.2.5	Simplifying assumptions and governing equations	103
5	Solutions simples de couplage fusion/deformation	109
5.1	La fusion d'une sphère	109
5.1.1	Fusion et compaction sphérique sans interaction Darcy	110
5.1.2	Fusion et compaction sphérique avec le terme Darcy	112
6	1-D steady-state melting	123
6.1	1-D steady-state melting	123
6.1.1	Darcy equilibrium: the outer solution	126
6.1.2	Initiation of melting	131
6.1.3	Numerical solutions	135
6.2	Discussion and conclusion	143
7	Notes sur la tension superficielle	147
8	Conclusion	155
8.1	Résumé	155
8.2	Perspectives	156
	Bibliographie	159

Chapitre 1

Introduction

La fusion partielle et le transport des magmas jouent un rôle important dans l'origine et l'évolution de la planète Terre. Le transport de la chaleur, la rhéologie de roches, la composition chimique et la distribution de volatils sont tous affectés par la présence et la migration de magmas. La fusion partielle est le processus central de la formation de la croûte et de l'appauvrissement en éléments incompatibles de la partie mantellique de la lithosphère. Il est possible que des régions partiellement fondues existent dans le manteau plus profond où elles jouent un rôle fondamental dans le transport de la matière et de la chaleur ainsi que dans le fractionnement chimique.

Des modèles théoriques et des simulations numériques de la fusion partielle et de la migration du magma sont des outils indispensables pour étudier la dynamique de zones partiellement fondues et leurs implications pour la dynamique globale. Les modèles d'extraction du magma doivent décrire le processus de la fusion et de la migration du magma par rapport au résidu solide qui lui-même se déforme, ainsi ils sont assez complexes.

La séparation métal–silicate est le processus de différenciation le plus important au cours de l'évolution d'une planète tellurique. Ce processus implique aussi la présence de phases différentes, solides et liquides. L'énergie gravitationnelle qui est libérée lors de la différenciation est une source de chaleur importante. Il est donc fondamental que la modélisation prenne en compte avec exactitude les échanges d'énergie qui ont lieu dans les milieux multiphasés.

1.1 Fusion partielle dans le manteau

1.1.1 Situation

Généralités

L'état de la matière dépend des conditions thermodynamiques et est dicté par un principe de minimum d'énergie. Souvent ces conditions sont spécifiées en termes de température, pression et composition chimique (s'il agit d'une substance à plusieurs composants). Un changement d'état se produit lorsqu'une modification des conditions conduit à une situation énergétiquement instable.

La transition de l'état solide vers l'état liquide peut se faire en général par une hausse de température, par une baisse de pression (pour la plupart de matériaux) ou par un changement de composition favorable à l'état liquide (par exemple par addition de "fondant").

Ces trois mécanismes sont mis en jeu dans la Terre lors de la production du magma. Contrairement à l'expérience de la vie ordinaire où la fusion paraît essentiellement associée à une augmentation de température, la fusion par une baisse de pression est particulièrement important à l'intérieur des planètes à cause des grands gradients de pression lithostatique et des grandes distances parcourues lors des mouvements convectifs. La grande variation de la pression de la surface terrestre à l'interface noyau-manteau produit des transitions de phases solide-solide des minéraux ; l'état de la matière ne change pas mais la structure cristalline est modifiée. Un exemple en est la transition de phase de l'olivine, le minéral le plus abondant du manteau supérieur, de la phase α à la phase β (appelée *wadsleyite*) de plus haute pression qui se produit à 410 km de profondeur, ou encore de ce polymorphe β vers la phase γ (*ringwoodite*) dont les conditions de transition correspondent à une profondeur de 520 km.

Les roches du manteau terrestre ne sont pas des substances pures mais des assemblages de plusieurs minéraux ; la composition de ces minéraux peut être exprimée par une combinaison de formules chimiques plus élémentaires qui représentent une base (des "pôles" ou "end-members") de composants pour une description thermodynamique (Matas, 1999). Outre leur composition majeure, les roches contiennent des éléments et substances en quantités mineures – les éléments traces et les volatils comme l'eau ou le CO₂. Malgré leurs petites concentrations, les volatils modifient de façon importante, certaines propriétés de la roche ; en particulier la viscosité (Karato *et al.*, 1986; Mei & Kohlstedt, 2000a,b) et le solidus (Kushiro *et al.*, 1968; Inoue, 1994). L'ajout de volatils est le mécanisme principal d'initiation de la fusion par changement de composition chimique.

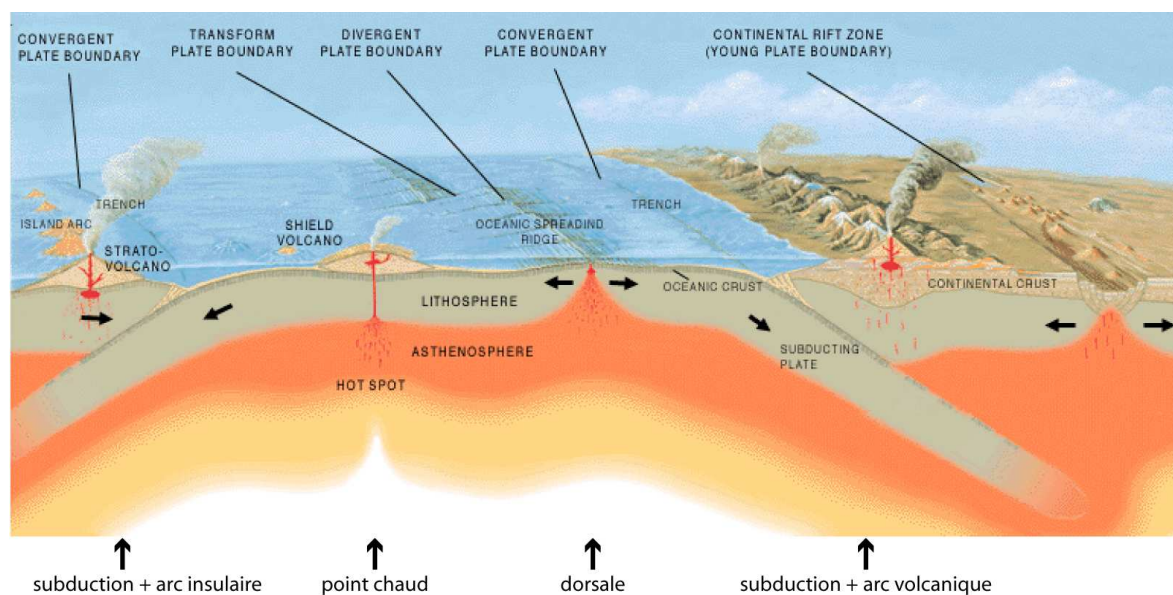


FIG. 1.1 – Ce dessin schématique montre les régions superficielles de fusion partielle liées à la tectonique de plaques – les dorsales et les zones de subduction, aussi qu’un point chaud à l’intérieur d’une plaque. Ces trois régions correspondent aux trois modes de fusion : par décompression, par ajout de fondant, par augmentation de température. Figure modifiée après Jose F. Vigil (USGS).

Magmatisme peu profond

La production du magma la plus importante dans la Terre est liée à la formation des plaques tectoniques depuis les dorsales. La quantité du magma basaltique générée sous les dorsales est estimée à 18 km^3 par an (Crisp, 1984; Schubert *et al.*, 2001, Tableau 1.1). Les dorsales marquent la limite dite divergente entre deux plaques, caractérisée par un mouvement d’écartement. L’espace libéré par ce mouvement est continuellement rempli par la matière qui monte du manteau plus profond. Cette montée est rapide devant les temps de la diffusion thermique et ceux des constantes radioactives des éléments qui chauffent le manteau, elle est donc au premier ordre, adiabatique. Lors de la décompression adiabatique, la température ambiante devient supérieure à la température du solidus de la roche mantellique et une fusion partielle se produit (Figure 1.1). Le magma basaltique est plus léger que le résidu solide, il monte, s’accumule et se re-solidifie près de surface, et ainsi crée une nouvelle croûte océanique. Le résidu solide appauvri constitué de dunite, harzburgite ou lherzolite (dans l’ordre décroissant d’appauvrissement ou de "déplétion") forme la partie mantellique de la lithosphère. C’est l’idée principale du « tapis roulant des planchers océaniques » (*sea floor spreading*; Dietz, 1961; Hess, 1962) qui a mené vers la formulation de la théorie de la tectonique des plaques quelques années plus tard.

D’autres régions de la Terre au magmatisme important comprennent les arcs insulaires et

localité	magmatisme [km ³ /an]		
	volcanisme	plutonisme	magmatisme total
dorsales	3	18	21
zones de subduction	0.4–0.6	2.5–8	2.9–8.6
océans intraplaque	0.3–0.4	1.5–2	1.8–2.4
continents intraplaque	0.03–0.1	0.1	0.13–0.2
magmatisme total			26–34

TAB. 1.1 – Taux global de production du magma près de la surface de la Terre moyenné sur les derniers 180 Ma. Le tableau distingue le magmatisme plutonique (magma solidifié en profondeur avant d’atteindre la surface) et volcanique (lave éruptée à la surface). Modifié après Crisp (1984).

les arcs volcaniques dans les zones de subduction. Les zones de subductions représentent les limites convergentes entre les plaques tectoniques. Le magmatisme y est causé par l’apport de matériaux fondants lors de la subduction. La couche supérieure de la lithosphère océanique contient les minéraux hydratés. Ces minéraux deviennent instables à cause d’une hausse de pression et de température lors de la subduction. L’eau, les groupements hydroxyles ou l’hydrogène sont libérés, abaissent le solidus des roches et permettent la fusion. Le magma typiquement andésitique monte et érupte en formant les arcs volcaniques (Figure 1.1).

Les points chauds sont des endroits où l’activité volcanique à la surface de la Terre qui ne sont pas associés à la tectonique de plaques. Le volcanisme de points chauds est une manifestation à la surface de la fusion partielle causée par une anomalie thermique dans les têtes de panaches mantelliques dont les racines se trouvent dans le manteau profond. L’anomalie thermique associée aux points chauds est typiquement de 200 K (*e.g.*, Sleep, 2006) mais il est possible que la fusion soit aussi favorisée par une source plus riche en volatils (Schilling *et al.*, 1980; Bonatti, 1990; Nichols *et al.*, 2002). Les points chauds se trouvent dans les régions océaniques où ils produisent le magma basaltique, ainsi que sur les continents où l’interaction avec la croûte continentale donne le magma rhyolitique (riche en silice).

Magmatisme plus profond

En plus du magmatisme superficiel, plusieurs régions de fusion partielle sont proposées dans les parties plus profondes du manteau, notamment à la limite supérieure de la zone de transition et dans la couche D’’ en bas du manteau. Bercovici & Karato (2003) essaient de réconcilier les arguments géodynamiques pour une convection en une couche, avec un mixage efficace et les arguments géochimiques qui favorisent un réservoir avec une composition distincte dans le manteau inférieur. Ils proposent qu’une couche partiellement fondue se forme juste au dessus de la zone de transition (Figure 1.2). La fusion peut se produire lorsque le manteau ambiant monte de la zone de transition dans le manteau supérieur au-dessus de 410 km.

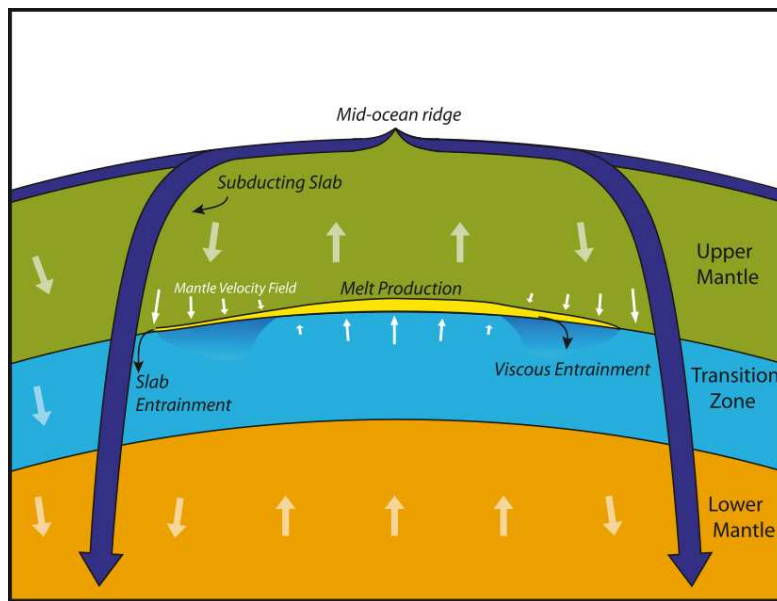


FIG. 1.2 – Schéma du « *transition zone water filter model* » de Bercovici & Karato (2003). La fusion se produit lors de la montée du manteau ambiant à travers l'interface à 410 km. Le magma riche en éléments incompatibles est plus dense que le manteau supérieur mais moins dense que les roches de la zone de transition. Il forme une couche mince le long de l'interface à 410 km. Le liquide est réintroduit dans la zone de transition près des plaques subductantes. Figure issue de Leahy & Bercovici (2007).

Cette profondeur marque la transition de phases solide–solide entre wadsleyite (β -olivine ; la phase haute pression) et (α -)olivine. La solubilité de l'eau dans la wadsleyite est d'un ordre de magnitude plus grand que dans l'olivine. Si la concentration d'eau dans la zone de transition excède la faible solubilité du manteau supérieur, la roche devient sursaturée lors de la transition et se débarrasse de son eau par fusion (*dehydration melting*). Les éléments incompatibles sont retenus dans la couche magmatique à 410 km et ainsi extraits des magmas de dorsales. Le passage beaucoup plus rapide de la matière sous les points chauds permettrait à ceux-ci de transporter une partie de leurs éléments "profonds" jusqu'à la surface. Ce modèle est actuellement raffiné et testé (Karato *et al.*, 2006; Leahy & Bercovici, 2007) et fait l'objet de débats agités (*e.g.*, Hirschmann, 2006).

La présence de magma dans la partie la plus profonde du manteau a été proposée comme une explication des fortes anomalies des vitesses sismiques (*ultralow velocity zone*, ULVZ) dans la couche D''=20 (Williams & Garnero, 1996; Lay *et al.*, 1998, 2004, Figure 1.3). Hernlund & Tackley (2007) ont récemment étudié les implications dynamiques d'une couche partiellement fondue à la base du manteau et ont conclu que le mécanisme pour générer l'ULVZ doit être plus compliqué qu'une simple fusion partielle d'un manteau ordinaire. Cette couche pourrait être héritée des temps Hadéen et de la formation du noyau. En effet Labrosse *et al.* (2007) proposent la présence de deux océans magmatiques, l'un proche de la surface et l'autre proche

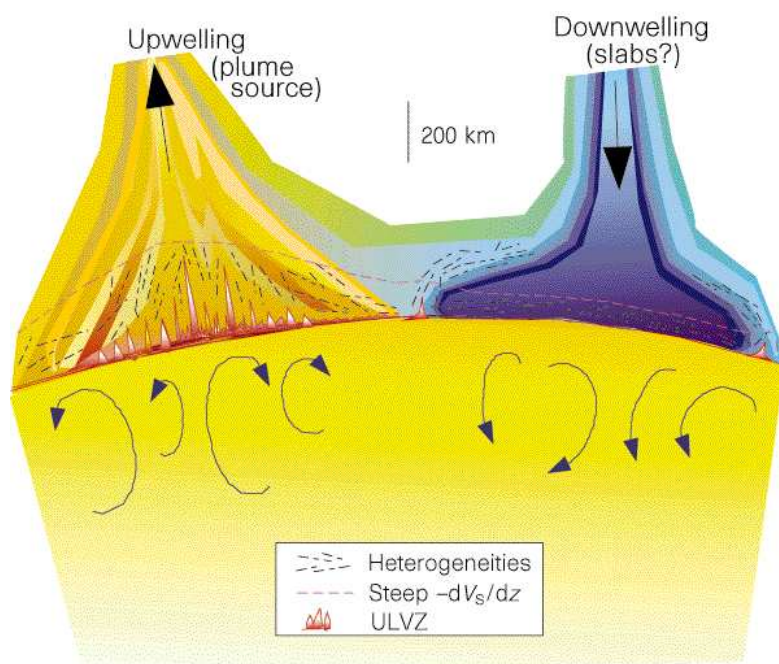


FIG. 1.3 – La fusion partielle est proposée comme une cause possible de la structure complexe et des hétérogénéités chimiques de l’ULVZ dans la couche D’’ (Lay *et al.*, 1998).

du noyau, créés lors de la ségrégation du noyau. L’océan profond, riche en fer, conduirait à la présence actuelle, résiduelle de magma dans l’ULVZ. La découverte de la phase haute pression post-perovskite avec une transition proche de la limite noyau–manteau (Murakami *et al.*, 2004; Oganov & Ono, 2004; Tsuchiya *et al.*, 2004) offre une autre direction de recherche.

1.2 Différenciation

La Terre a un noyau métallique entouré par un manteau silicaté. Une telle structuration de premier ordre est aussi probable dans les autres planètes telluriques. Il est facile d’expliquer cette structure à deux couches principales par minimisation de l’énergie gravitationnelle : avec les quantités des phases métalliques et silicatées données, la configuration avec le métal plus dense au centre, minimise l’énergie gravitationnelle. Par contre le mécanisme et échelle de temps de la différenciation qui s’est produite quand la Terre était jeune, ne sont pas clairs.

Pour comprendre les conditions dans le Système Solaire lors de la formation des planètes il est utile de récapituler nos connaissances sur la formation du Système Solaire et en particulier, des planètes telluriques. Le modèle standard de la formation de planètes émane largement des travaux de Safronov (1969), Levin (1972), Greenberg *et al.* (1978), et Wetherill (1985). Des articles de synthèse sont présentés par exemple par Wetherill (1980, 1990); Ahrens (1990) et

dans les monographies « Origin of the Earth » (Newsom & Jones, 1990) et « Origin of the Earth and Moon » (Canup & Righter, 2000).

Le Soleil s'est formé d'une instabilité gravitationnelle dans un nuage interstellaire dense avec un faible moment angulaire. Une portion du gaz et de la poussière a formé autour du Soleil, un disque aplati qui contenait l'essentiel du moment angulaire – la nébuleuse solaire. Près de l'orbite terrestre dans la nébuleuse oblate les températures suffisamment faibles permettaient la cristallisation des grains de silicates de fer et de magnésium et du fer métallique mais pas celle des volatils. Les planétésimaux rocheux croissaient soit par cohésion (sans aide de la gravité) soit par les instabilités gravitationnelles jusqu'à une taille de plusieurs kilomètres. Les corps plus grands – les embryons planétaires de la taille de la Lune ou Mercure (10^{22} – 10^{23} kg) se formaient par collisions et fusion des planétésimaux (Greenberg *et al.*, 1978). Les modèles indiquent que les corps de $\sim 10^{23}$ kg pouvaient se former en ~ 0.1 Ma (Wetherill, 1990). Comme la taille des corps accumulés croissait et que leur nombre diminuait, les probabilités de rencontre baissaient. En conséquence la fusion de ces corps devenait plus épisodique. L'accrétion planétaire jusqu'à son état actuel (en termes de nombre et de masse de planètes dans le Système Solaire) a pris de l'ordre de 10–100 Ma (Wetherill, 1985, 1986, 1988).

L'accumulation finale est caractérisée par les impacts géants lorsque les protoplanètes établies ont subi des impacts par des corps dont la masse était une fraction important de la masse de ces protoplanètes elles mêmes. Un impact d'un objet de la taille de Mars sur la proto Terre peut expliquer la formation de la Lune (Wetherill, 1985; Stevenson, 1987), ainsi que la perte de l'atmosphère originelle de la Terre (Cameron, 1983).

Ce scénario de la formation de planètes est largement accepté et est en conformité avec diverses observations de géochimie et sciences planétaires, notamment les abondances solaires en éléments réfractaires majeurs et mineurs des planètes, des météorites et des autres corps du Système Solaire, les observations de cratères à la surface de corps planétaires comme témoins des forts impacts, et aussi les observations astronomiques de la naissance de systèmes stellaires à partir des disques d'accrétion (Ahrens, 1990).

Pendant cette étape du Système Solaire, lors de la formation des planètes, des sources de chaleur importantes opéraient qui sont négligeables actuellement :

1. Chauffage par les éléments radioactifs à courte demi-vie

Pendant quelques millions d'années après la condensation des premiers solides, dans la nébuleuse solaire, les planétésimaux ont pu être chauffés par la décroissance d'un certain nombre de radioactivités "fossiles". Ces radioactivités ont des demie-vies très courtes, si bien que les nucléides "parents" ont disparu et seule la présence des éléments "fils" permettent d'inférer leur présence initiale. Parmi les éléments qui ont pu

jouer un rôle fondamental figurent ^{26}Al (demi-vie $t_{1/2} \sim 7 \cdot 10^5$ ans, produisant ^{26}Mg) et ^{60}Fe ($t_{1/2} \sim 1.5 \cdot 10^6$ ans produisant ^{60}Ni) (Hutcheon & Hutchison, 1989; Shukolyukov & Lugmair, 1993; Carlson & Langmuir, 2000). Il est probable que la production de chaleur radiogénique a été suffisante pour initier la fusion dans les planétésimaux (Yoshino *et al.*, 2003).

2. Chauffage par les impacts

En négligeant les vitesses relatives à l'infini, l'attraction gravitationnelle d'un planétésimal par une planète conduit à une énergie cinétique par unité de masse $E_c/m = v^2/2$ qui est, après la substitution de la vitesse de libération $v \sim \sqrt{2GM/R}$, égale à $GM/R = gR = (4/3)\pi\bar{\rho}GR^2$ (m est la masse du planétésimal, R , M et $\bar{\rho}$, le rayon, la masse et la densité de la planète impactée, $G = 6.67 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \text{ kg}^{-1} \text{ s}^{-2}$ est la constante universelle de gravitation de Newton; Monteux *et al.*, 2007). Les impacts sont très loin d'être élastiques et la plupart de l'énergie est déposée et distribuée à grande profondeur dans la planète impactée (Benz *et al.*, 1986, 1987). Une planète de rayon moitié de celui de la Terre donne une énergie d'impact de $4 \cdot 10^7 \text{ J/kg}$ tandis que la fusion ne nécessite que $< 3 \cdot 10^6 \text{ J/kg}$. De plus les vitesses relatives sont probablement non négligeables (chauffage plus intense par un facteur 2–4).

La fraction d'énergie cinétique de l'impacteur qui se transforme en énergie thermique est typiquement $f_1 \sim 0.3$ et la portion de masse de la planète qui est ainsi chauffée est $f_2 \sim 9$ fois la masse d'impacteur (*e.g.*, Monteux *et al.*, 2007). Si nous prenons une densité de l'impacteur égale à celle de la planète et négligeons l'expansivité thermique et la compressibilité, l'augmentation de température causée par l'impact est

$$\Delta T_{\text{impact}} = \frac{4\pi}{3} \frac{f_1}{f_2} \frac{G\bar{\rho}R^2}{C}. \quad (1.1)$$

Ce ΔT_{impact} ne dépend pas de la taille de l'impacteur; il est proportionnel au carré du rayon de la planète impactée. Pour une capacité calorifique de $C = 1000 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ et $\bar{\rho} = 4000 \text{ kg m}^{-3}$ est égale 100 K pour une protoplanète du rayon $R \sim 1600 \text{ km}$.

Dès que leur rayon atteint le millier de kilomètres, les proto-planètes chauffées par la surface peuvent avoir un ou des océans magmatiques à la surface (Tonks & Melosh, 1993; Senshu *et al.*, 2002; Benz & Cameron, 1990). Le scénario d'océan magmatique est supporté par des contraintes géochimiques sur l'abondance des éléments modérément sidérophiles dans le manteau (Li & Agee, 1996; Rubie *et al.*, 2003).

3. Chaleur d'accrétion

C'est un mode de chauffage par simple concentration, accumulation de masse. Cette énergie est libérée pendant l'arrivée d'un objet par rapport à la configuration où tous les morceaux de cet objet sont infiniment dispersés dans l'espace. Autrement dit, cette

énergie équivaut à la quantité de travail nécessaire pour disperser un objet en transportant chacun de ses éléments à l'infini et en luttant contre les forces de gravité. C'est donc aussi l'énergie apportée par les impacts. Il est certainement abusif de considérer que toute cette énergie est équivalente en une chaleur interne de la planète puisqu'une partie de l'énergie d'impact est probablement perdue lors de l'impact par radiation thermique à la surface et dans l'atmosphère. Une partie reste aussi stockée sous forme d'énergie élastique (nécessaire pour comprimer la matière de sa pression initiale nulle à la pression auquel elle est soumise dans la planète finale).

Pour faire une estimation du premier ordre regardons l'énergie gravitationnelle (*gravitational binding energy*). Mathématiquement cette énergie est une conséquence de la dépendance en $1/r$ de l'énergie gravitationnelle $\delta E_g = -G\delta m_1\delta m_2/r$ entre deux masses δm_1 et δm_2 situés à une distance r . Pour un corps de forme quelconque qui occupe une région spatiale Ω et dont la densité $\rho(\mathbf{r})$ varie, l'énergie gravitationnelle E est calculée par

$$E = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \int_{\Omega} G \frac{\rho(\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}'')}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}''|} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' \quad (1.2)$$

Pour un corps à symétrie sphérique d'un rayon R , le calcul se simplifie en

$$E = 4\pi \int_0^R G \frac{\rho(r)M(r)}{r} r^2 dr = 16\pi^2 G \int_0^R \rho(r) \left(\int_0^r \rho(r')r'^2 dr' \right) r dr \quad (1.3)$$

Pour un corps sphérique uniforme cette énergie est simplement

$$E_{unif} = \frac{16}{15}\pi^2 G \rho^2 R^5 = \frac{3}{5} \frac{GM^2}{R}, \quad (1.4)$$

où M est la masse totale. Pour la Terre actuelle ($R = 6.37 \cdot 10^6$ m, $M = 5.97 \cdot 10^{24}$ kg) $E_{unif} = 2.2 \cdot 10^{32}$ J ou $3.8 \cdot 10^7$ J par kg de la Terre. Si toute cette énergie était utilisée à chauffer la planète la température augmenterait de ΔT ,

$$\Delta T = \frac{4\pi}{5} \frac{G\bar{\rho}}{C} R^2, \quad (1.5)$$

soit 38000 K (en prenant comme capacité calorifique par unité de masse $C = 1000$ J kg⁻¹ K⁻¹). Toute cette chaleur n'a pas été dissipée; une partie a été perdue de façon radiative lors de l'impact, une partie est simplement stockée de façon réversible sous forme d'énergie élastique.

4. Chaleur de différenciation

La chronologie de la formation du noyau a été contrainte par le système radioactif ¹⁸²Hf-¹⁸²W. Ce système de radioactivité fossile a une demie-vie 9 Ma. Ces deux éléments sont

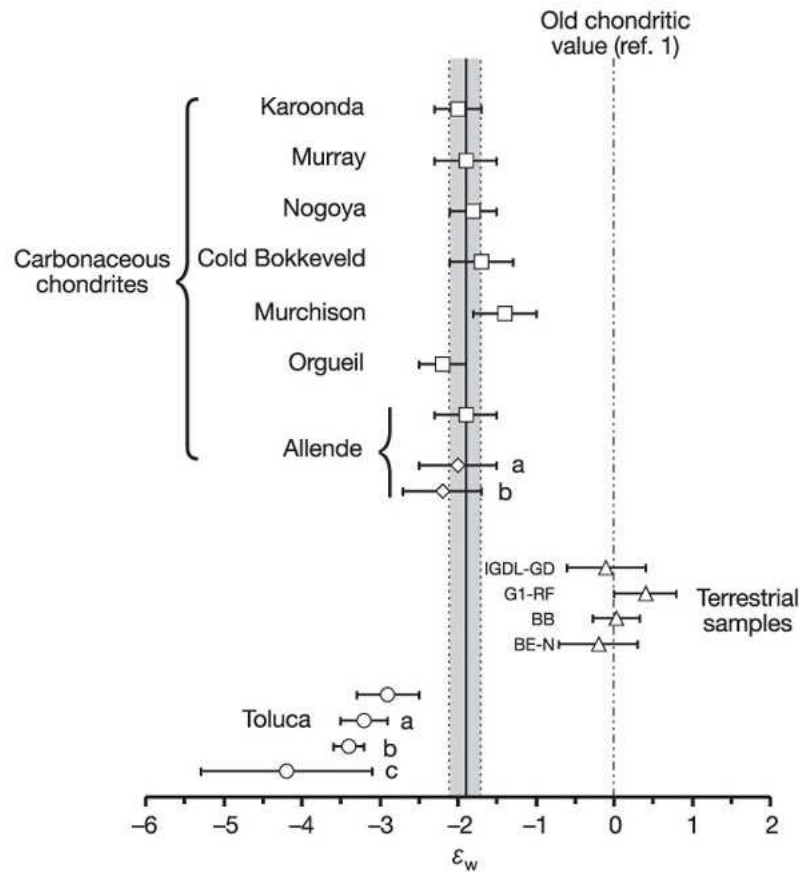


FIG. 1.4 – D’après (Kleine *et al.*, 2002), Figure 1. Le rapport ^{182}W - ^{183}W en notation ϵ montre la présence d’un enrichissement en ^{182}W dans le manteau terrestre par rapport aux chondrites carbonées. Les météorites de fer (restes de paléo-noyaux ?) montrent un déficit indicatif d’une formation avant la décroissance de ^{182}Hf .

réfractaires mais l’hafnium est lithophile (préfère les silicates), le tungstène, sidérophile (préfère le noyau métallique). Si l’on compare un objet indifférencié (une chondrite) et un manteau différencié, ces deux corps auront le même rapport ^{182}W - ^{183}W si le noyau a été formé après la décroissance de l’hafnium, sinon le manteau aura un rapport plus élevé (la formation du noyau aura "lessivé" le tungstène mais laissé l’hafnium qui aura régénéré le tungstène ^{182}W). Les premiers travaux ne voyaient pas clairement un fractionnement (Lee & Halliday, 1995) mais les données récentes (Figure 1.4) prouvent une formation du noyau vers 30 Ma après le début de l’accrétion (Kleine *et al.*, 2002; Yin *et al.*, 2002; Kleine *et al.*, 2004).

La différenciation de la Terre en noyau et manteau s’est donc produite simultanément avec l’accrétion ou juste après (Stevenson, 1981; Wetherill, 1985; Stevenson, 1990). Les mécanismes de cette ségrégation (percolation, instabilité de Rayleigh-Taylor, diapirs) seront discutés plus loin (Stevenson, 1990; Honda *et al.*, 1993; Rushmer *et al.*, 2000; Solomatov, 2000). Pour estimer l’énergie libérée lors de la ségrégation du noyau nous

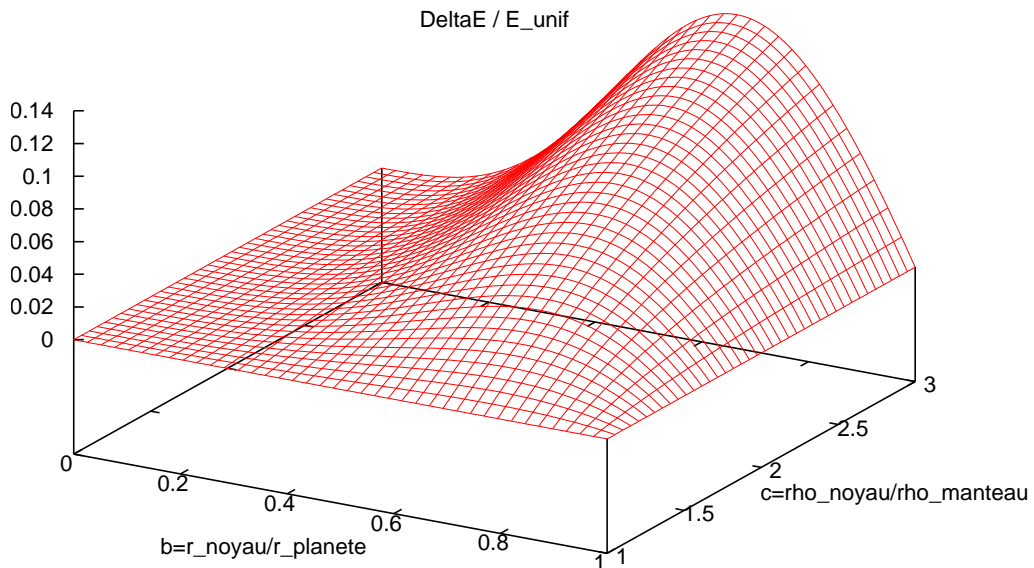


FIG. 1.5 – Fonction $\Delta E / E_{unif} = f(b, c)$ (équation 1.6) en fonction du rayon du noyau normalisé $0 \leq b \leq 1$ (b est le rayon du noyau par rapport au rayon de la planète) et de la densité du noyau normalisée $1 \leq c < 3$ (c est le rapport de densité noyau/manteau). $\Delta E / E_{unif} = 0$ si $b = 0$ (pas de noyau), $b = 1$ (pas de manteau) ou $c = 1$ (pas de différence de densité entre noyau et manteau).

pouvons, encore une fois, employer le calcul de l'énergie gravitationnelle E (1.2–1.4). La différenciation pendant laquelle l'alliage métallique de fer, plus dense que les silicates du manteau, se concentre, augmente l'énergie gravitationnelle d'une quantité $\Delta E = E_{diff} - E_{unif}$.

Pour $\rho_{noyau} = c\rho_{manteau}$ et $V_{noyau} = b^3 V_{totale}$ on obtient

$$\frac{\Delta E}{E_{unif}} = \frac{1}{2}(c-1)b^3(1-b) \frac{1+b+2b^2(c-1)}{[1+b^3(c-1)]^2}. \quad (1.6)$$

Cette énergie s'annulerait, bien sûr, si le manteau et le noyau avaient la même densité, $c = 1$, si la Terre ne possédait pas de noyau, $b = 0$ ou pas de manteau, $b = 1$ (Figure 1.5). Avec $b = 1/2$, $c = 2$: $\Delta E / E_{unif} = 4/81$. Par exemple, la Terre se serait échauffée de 1600 K lors de la formation de son noyau, si son noyau a été formé après son accrétion. D'après l'équation 1.5, cet échauffement croît comme R^2 et aurait donc atteint 400 K si le noyau s'était formé lorsque la terre avait la moitié de son rayon actuel. Contrairement à l'énergie d'accrétion uniforme qui a peut-être été rayonnée dans l'espace plutôt que dissipée dans le manteau, l'énergie de différenciation du noyau a du essentiellement servir à chauffer la Terre interne.

La séparation du métal et des silicates implique probablement des mécanismes différents selon la taille de la planète et par conséquent, la magnitude de sa gravité, son état thermique

et selon la profondeur (pression). La séparation a pu évoluer continûment mais des événements majeurs voire catastrophiques sont aussi possibles (comme par exemple la fracture d'une zone interne indifférenciée par le métal plus dense, avec un mouvement de degré 1; Stevenson, 1981, 1990).

Les processus de ségrégation étaient alimentés par les nouvelles dépositions de la matière des impacteurs riches en fer, différenciés ou indifférenciés, à la surface de la planète. L'énergie des impacts, partiellement convertie en chaleur continuait à échauffer les couches supérieures de la planète. La chaleur latente de la phase métallique est de $\sim 270 \text{ kJ kg}^{-1}$ et celle de la fraction silicaté de $\sim 400 \text{ kJ kg}^{-1}$ (Ghosh & McSween, 1998). Vu la quantité de chaleur fournie par les impacts (équation 1.1), il est probable que pendant les périodes de haute fréquence des collisions une partie de la planète était fondue, partiellement ou entièrement (Tonks & Melosh, 1993). Dans le cas d'une fusion totale, la séparation des phases par la chute de gouttes métalliques dans le liquide silicaté est très rapide (Rubie *et al.*, 2003).

Cependant, la phase métallique fond à une température plus basse de plusieurs centaines degrés que les silicates (Agee *et al.*, 1995; Fei *et al.*, 1997; Ghosh & McSween, 1998). Il est donc possible qu'il y ait des périodes pendant lesquelles le métal est fondu mais où la température du solidus des silicates n'est pas atteinte. La ségrégation se ferait par la migration du liquide métallique à travers de la matrice silicatée. Une possibilité est la percolation par un réseau à l'échelle des grains (Yoshino *et al.*, 2003). Une autre possibilité est la migration de grands diapirs métalliques à travers des silicates par des instabilités de type Rayleigh-Taylor (Stevenson, 1990).

La modélisation de la ségrégation noyau–manteau dans les planètes croissantes présente un défi majeur. Les modèles doivent prendre en compte l'existence de plusieurs phases – les états solide et liquide des phases métallique et silicatée, et doivent permettre le changement de phases (fusion/solidification) en fonction de l'évolution thermique. La redistribution des masses au cours de la différenciation libère une énergie gravitationnelle importante (équation 1.6) qui se dissipe en chaleur et présente un terme fondamental du bilan d'énergie. Enfin, différence de densité entre le métal et le silicate est de l'ordre des densités elles même, ce qui nécessite de garder la densité moyenne variable dans les équations (*i.e.*, cela empêche la simplification habituelle de l'approximation de Boussinesq).

1.3 Modèle biphasé

Nous avons discuté deux processus importants pour la dynamique planétaire qui possèdent un caractère biphasé. Afin d'étudier la dynamique de ségrégation planétaire et de la fusion partielle il faut un modèle théorique qui décrive l'écoulement dans un mélange à deux phases

distinctes.

1.3.1 Milieux multi-phasés : deux approches

Du point de vue théorique il y a deux approches principales à la description d'un milieu à deux phases. La première consiste à écrire un système d'équation de conservation dans chaque région uniphasique et de compléter le modèle en écrivant des conditions limites à l'interface entre les deux phases (*e.g.*, Ladyzhenskaya, 1985; Pozrikidis, 1992; Tanzosh *et al.*, 1992). Dans ce cas, on parle parfois de modèles à multiples domaines.

L'inconvénient de cette approche est la nécessité de connaître et de suivre au cours du temps la position de l'interface, ce qui est une tâche souvent difficile voire infaisable. En effet, la complexité de l'interface a souvent tendance à augmenter dramatiquement durant la déformation. Cette approche a permis d'étudier la déformation d'anomalies de densité ou de viscosité isolées (*e.g.*, Manga & Stone, 1995b,a; Manga, 1996a,b; Manga *et al.*, 1998).

L'alternative est de décrire le milieu biphasé comme un mélange de deux phases qui sont présentes partout dans l'espace avec des concentrations (fractions volumiques) qui varient continûment et où l'interface n'est représentée que par sa densité volumique (quantité de surface par unité de volume). Avec cette description la connaissance de la configuration spatiale des phases à l'échelle microscopique est perdue et il n'est plus nécessaire de suivre la position de l'interface. Cette approche qui utilise les théories classiques de moyennage (*classical averaging theory*; par exemple Drew & Passman, 1998) est un choix possible si la taille de la région d'intérêt est beaucoup plus grande que la dimension spatiale caractéristique des structures monophasiques (*i.e.*, la taille de grains, le diamètre de tubes). Dans cette thèse nous allons utiliser cette deuxième approche.

Bien que nous allons développer la description théorique dans le cadre de la géodynamique mantellique, la problématique des milieux biphasés s'applique à un grand nombre de phénomènes naturels et industriels. Comme exemples, nous pouvons mentionner les alliages métalliques, les milieux granulaires, les phénomènes atmosphériques, le transport d'eau, de pétrole ou de gaz en milieux poreux, la mécanique des sols et des sédiments, la dynamique des glaciers et de la glace marine, et en général toutes les situations où deux phases de la matière coexistent, et en particulier lorsque l'interface entre phases est difficile à définir ou est trop complexe pour que l'on puisse espérer la décrire précisément.

1.3.2 Construction du modèle biphasé

Par « modèle biphasé » nous voulons dire un système d'équations suffisant pour décrire la dynamique et l'évolution temporelle d'une région de composition biphasé. Nous cherchons des équations sous la forme d'équations différentielles partielles, communes dans la mécanique des milieux continus, qui expriment les lois de conservations complétées par les relations constitutionnelles et autres relations phénoménologiques nécessaires. Lorsque nous allons considérer un problème spécifique, la région d'intérêt sera spécifiée ainsi que les conditions aux limites et les conditions initiales.

Il est évident qu'un modèle de milieux biphasés sera plus compliqué qu'un modèle monophasique. Par exemple, il faut écrire deux équations indépendantes de conservation de la masse, deux équations de conservation de la quantité de mouvement. Il faut quantifier l'échange de l'impulsion (interaction mécanique) entre les phases qui se déplacent à des vitesses différentes et il faut avoir une relation qui décrit l'échange de la matière entre les phases (*i.e.*, un taux de changement de phases).

Aux échelles atomiques et moléculaires, la matière est discontinue. La masse est concentrée dans les noyaux des atomes tandis que des espaces foncièrement vides s'étalent entre les noyaux. La mécanique des milieux continus néglige cette discontinuité fondamentale avec une justification raisonnable : les objets d'étude de la mécanique des milieux continus sont des systèmes aux échelles spatiales beaucoup plus grandes que les distances inter-atomiques ; dans ce cas on peut approximer la matière microscopiquement discontinue par un milieu dont les paramètres et propriétés varient continûment dans l'espace. Avec un milieu continu biphasé il faut étendre cette approximation à une échelle plus large dite "mésoscopique".

À l'échelle de l'échantillon minéralogique les phases occupent des régions distinctes et sont clairement séparées par une interface dont l'épaisseur est négligeable.

Nous cherchons un système d'équations qui décrit le milieu continu biphasé en écrivant les lois de conservations habituelles, nommément, les conservations de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Pour nos applications il n'est pas nécessaire de savoir la configuration des phases à l'échelle spatiale microscopique et son évolution temporelle. Nous nous contentons d'écrire les équations pour les quantités moyennées dans le cadre de la théorie classique de moyennage (Drew & Passman, 1998). Les moyennes sont calculées dans un volume de contrôle qui est suffisamment grand pour contenir un grand nombre des grains ou/et de pores de chaque phase mais toujours assez petit pour qu'on puisse utiliser l'approximation d'un milieu continu. Il faut ainsi que les quantités moyennées ne varient pas trop à l'échelle du volume de contrôle. Cette approche a été discutée en détail par Drew (1971), Drew & Segel (1971a,b).

Considérons un mélange biphasique et appelons une phase « le solide » et l'autre « le liquide » (bien qu'en fait, chacune de nos phases puisse être un liquide visqueux). Nous pouvons délimiter un volume de contrôle de forme convenable ; par exemple, le cube de la Figure 1.6. Les deux couleurs représentent les deux phases. À chaque point à l'intérieur du cube, soit le liquide, soit le solide est présent. Nous introduisons une fonction de distribution $\theta(\mathbf{r}, t)$ qui est égale à 1 si le liquide est présent au point \mathbf{r} à l'instant t , et à 0 si le solide s'y trouve.

Le contenu en liquide du mélange biphasé à chaque point est quantifié par la porosité, la fraction volumique de la phase liquide. La porosité au point \mathbf{r} est une quantité moyenne obtenue par l'intégration sur le volume de contrôle $V_{\mathbf{r}}$, qui est centré à \mathbf{r} , de la fonction de distribution, ainsi

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{V_{\mathbf{r}}} \int_{V_{\mathbf{r}}} \theta(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}'. \quad (1.7)$$

Les autres quantités moyennées qui décrivent les milieux biphasés (*e.g.*, les vitesses, les pressions, les tenseurs de contrainte) sont définies par une intégrale sur le volume de contrôle où dans l'intégrale figure la “vraie” quantité à l'échelle microscopique multipliée par la fonction de distribution pour la phase considérée. Cette intégrale est normalisée par la fraction volumique de cette phase dans le volume. Par exemple, la vitesse moyennée du liquide \mathbf{v}_f s'écrit

$$\mathbf{v}_f(\mathbf{r}, t) = \frac{\int_{V_{\mathbf{r}}} \theta(\mathbf{r}', t) \tilde{\mathbf{v}}_f(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}'}{\int_{V_{\mathbf{r}}} \theta(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}'} = \frac{1}{\phi(\mathbf{r}, t) V_{\mathbf{r}}} \int_{V_{\mathbf{r}}} \theta(\mathbf{r}', t) \tilde{\mathbf{v}}_f(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}', \quad (1.8)$$

où $\tilde{\mathbf{v}}_f(\mathbf{r}', t)$ est la vitesse à l'échelle de pores liquides.

Pour certaines quantités le calcul des valeurs moyennées devient plus compliqué – par exemple pour le tenseur de contrainte visqueuse qui nécessite le calcul de la moyenne du gradient de vitesse. Les détails du processus de moyennage sont discutés par exemple dans Ganesan & Poirier (1990) et Ni & Beckermann (1991), et pour le modèle spécifique présenté plus loin ils sont décrits dans Bercovici *et al.* (2001a).

1.3.3 Percolation et loi de Darcy

L'image la plus simple et le mécanisme de base de la migration du magma dans le manteau est la percolation du magma à travers la matrice solide poreuse. Cette image de la percolation provient à l'origine de l'hydrologie et reflète l'observation de Henry Darcy faite lorsqu'il travaillait au système d'alimentation en eau de la ville de Dijon (Darcy, 1856; Brown, 2002).

Darcy étudiait la filtration de l'eau au travers de couches de sable (Figure 1.7). Il a empiriquement abouti à une relation entre le débit de filtration Q (volume d'eau filtré par

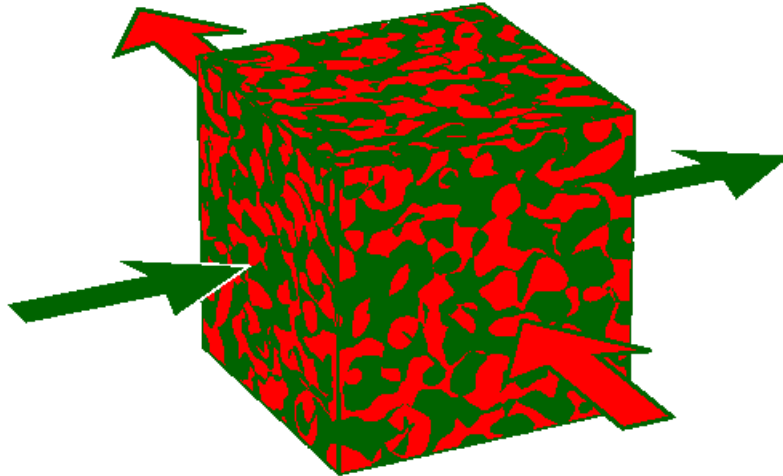


FIG. 1.6 – Volume de contrôle. Les équations de conservation sont obtenues en quantifiant les échanges de masse, d’impulsion et d’énergie qui ont lieu dans un volume de contrôle arbitraire, fixe dans l’espace. Modifié après Bercovici *et al.* (2001a).

unité de temps) à travers une couche filtrante d’épaisseur L et la baisse de pression d’eau lors du filtrage. Dans le cas simple où la décharge du filtre est à la pression atmosphérique, cette différence de pression est simplement proportionnelle à la hauteur h de la colonne d’eau au-dessus du filtre. Darcy a trouvé que

$$Q = AK \frac{h}{L}, \quad (1.9)$$

où A est la surface perpendiculaire au courant et K est la conductivité hydraulique. Une forme plus générale de la *loi de Darcy* – et plus utile ici (forme que Darcy n’a jamais écrite), est en terme de la *vitesse de Darcy* \mathbf{v}_D , la perméabilité de la matrice k , la viscosité dynamique du liquide μ , et le gradient de pression dans le liquide ∇P ,

$$\mathbf{v}_D = -\frac{k}{\mu} \nabla P. \quad (1.10)$$

Cette dernière équation est vectorielle et le signe moins dit que liquide va vers les pressions les plus basses. La vitesse de Darcy est simplement égale à Q/A , c’est donc une vitesse moyennée sur le profil perpendiculaire, qui ne correspond pas à la vitesse réelle du liquide dans les pores. La perméabilité k est liée à la conductivité hydraulique K par $K = \rho g k / \mu$ où ρ est la densité du liquide et g est l’accélération de la gravité.

Dans le domaine de l’hydrologie et surtout du filtrage de l’eau, le forçage du flux et l’existence d’un réseau perméable sont évidents – une pression hydrostatique élevée est créée au fond d’une colonne d’eau et les sables et les autres milieux granulaires ou fracturés des

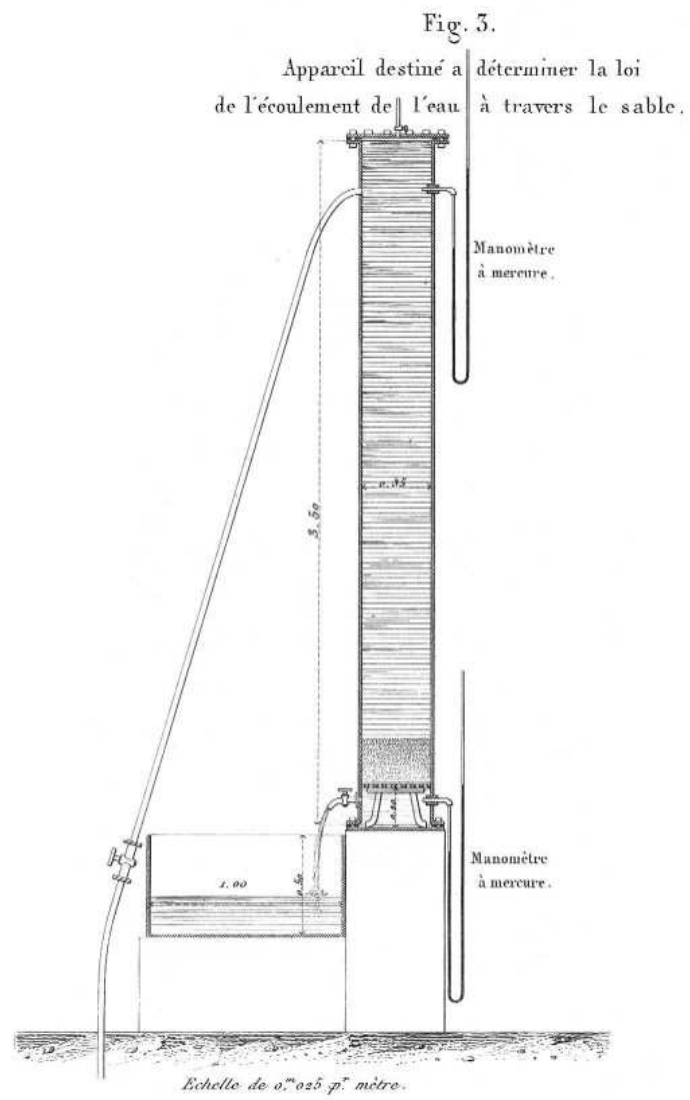


FIG. 1.7 – Appareil utilisé par Henry Darcy (1856) pour déterminer les lois de l'écoulement de l'eau à travers les sables.

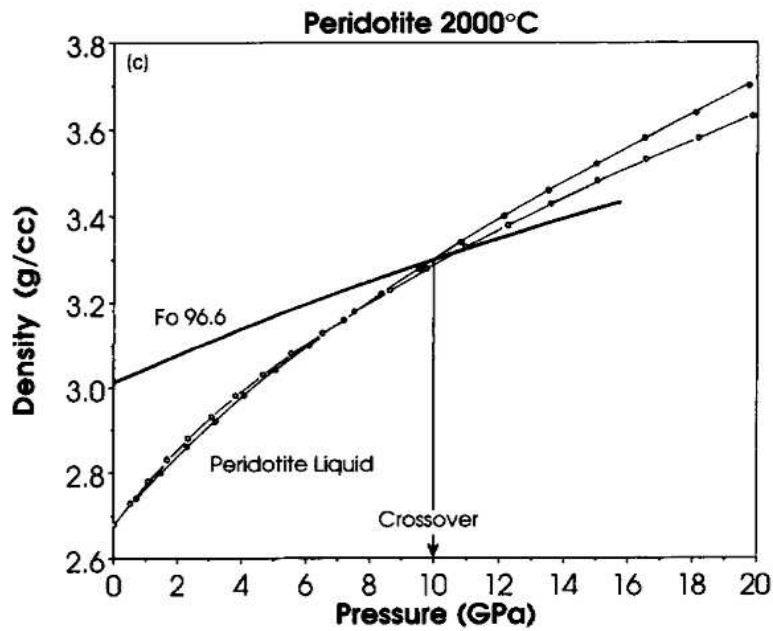


FIG. 1.8 – Courbes de compression pour un liquide peridotitique et pour l’olivine dans la phase solide (olivine magnésienne ou Forstérite, la courbe la moins pentue). Le croisement des courbes où les densités du liquide et du solide sont égales se produit à une pression de 10 GPa, qui correspond à la profondeur de 300 km. Figure issue de Agee & Walker (1993).

sols laissent suffisamment de vides entre les grains ou d’espaces entre des fissures pour qu’un réseau interconnecté d’eau puisse se former. Regardons les systèmes magmatiques.

Densité des magmas

La raison primaire du mouvement du magma par rapport à la matrice est la différence de densité entre le magma et la roche solide. Le magmatisme sous les dorsales se marque par la fusion partielle de la peridotite, la roche représentative du manteau supérieure composée surtout d’olivine et de pyroxènes. La densité du magma basaltique générée est inférieure à la densité de la peridotite de $400\text{--}600\text{ kg m}^{-3}$ à la pression ambiante et à la température du solidus. L’incompressibilité (*bulk modulus*) du liquide est plus petite que celle du solide par un ordre de magnitude à peu près, donc la différence de densité entre les phases diminue avec la profondeur. Au-dessous d’une certaine profondeur le magma est plus dense que la roche solide (Figure 1.8). Les valeurs de profondeur de ce croisement de densités (*density crossover*) proposées dans plusieurs travaux varient entre 150–300 km (Stolper *et al.*, 1981; Rigden *et al.*, 1984; Agee & Walker, 1993; Agee, 1998). À plus grande profondeur, le magma, s’il existe, a donc tendance à s’enfoncer au travers de la matrice solide.

Interconnectivité des magmas

La nucléation du premier magma à l'échelle de grains n'est pas très bien comprise. Néanmoins il est clair que pour des raisons énergétiques le premier liquide se forme entre les grains solides sous la forme de gouttelettes ou de films intragrannulaires.

La formation du réseau interconnecté pendant la fusion dépend du bilan d'énergies de surface sur les interfaces solide–solide et solide–liquide et de la quantité du liquide présent. Le bilan d'énergies des interfaces peut convenablement s'exprimer par l'angle de mouillage (*dihedral angle*), qui est l'angle enserré entre les faces de grains, mouillées par le liquide, à une jonction entre trois grains (voir Figure 1.9a pour une illustration). L'angle de mouillage ϕ_d est lié aux énergies de surface de l'interface solide–solide γ_{ss} et solide–liquide γ_{sl} par

$$\frac{\gamma_{ss}}{2\gamma_{sl}} = \cos \frac{\phi_d}{2}. \quad (1.11)$$

Si $\phi_d < 60^\circ$ le liquide forme facilement un réseau interconnecté le long de jonctions triples entre les grains. À la limite de $\phi_d = 0$ le mouillage total se produit où un film de liquide sépare les grains. Si $\phi_d > 60^\circ$ des poches isolées du liquide ne se connectent que si la quantité de liquide est suffisamment élevée (*e.g.*, Schmeling, 1985; von Bargen & Waff, 1986).

Pour les matériaux du manteau terrestre intrinsèquement anisotropes à l'échelle des grains, l'analyse devient plus compliquée. Pourtant l'angle de mouillage reste souvent une bonne mesure pour jauger l'interconnectivité du liquide (Cmíral *et al.*, 1998). Les expériences sur le système olivine–magma basaltique (Waff & Bulau, 1979; Riley & Kohlstedt, 1991; Beeman & Kohlstedt, 1993; Holness, 2006) donnent des valeurs de l'angle de mouillage dans la gamme 20–50°, peut-être encore plus petites ($\lesssim 10^\circ$ dans Cmíral *et al.*, 1998).

Pour le fer liquide et ses alliages (*i.e.*, Fe–S), les études expérimentales indiquent que l'angle de mouillage est plus grand que 60° (Shannon & Agee, 1998; Terasaki *et al.*, 2005, 2007). La phase métallique à faible fraction volumique ne formera donc pas un réseau interconnecté. Mais un tel réseau pourra se former si la fraction du métal liquide est suffisamment grande. Yoshino *et al.* (2003, 2004) ont quantifié le *seuil de percolation* dans des expériences où ils mesurent la conductivité électrique. La conductivité de la phase métallique est beaucoup plus grande que celle des silicates et une fois le métal connecté, la conductivité électrique de l'échantillon augmente de plusieurs ordres de magnitude; ils trouvent un seuil de porosité (fraction de la phase métallique) de $\sim 5\%$. Ces résultats sont confirmés par Roberts *et al.* (2007) qui utilisent l'imagerie rayons-X et observent un réseau interconnecté de métal au-dessus d'un seuil de porosité de 4–6%. La proportion du fer dans le planétésimaux aussi que dans la Terre primitive devait être beaucoup plus grande que ce seuil de $\sim 5\%$ (dans la Terre actuelle il y a 15% de Fe en volume). Avec les conditions de haute température, dans jeune Système Solaire

la percolation semble donc un mécanisme viable de différenciation.

Perméabilité

La flottabilité du magma et le réseau interconnecté des veines magmatique permettent au magma de monter. La facilité de ce mouvement à travers de la matrice solide est exprimée par la perméabilité de la matrice. Pour estimer la perméabilité il faut avoir un modèle géométrique du réseau liquide et supposer un type d'écoulement. Avec une approximation de tubules cylindriques de magma de diamètre d qui forment un réseau cubique autour des grains d'une taille b (la porosité ϕ est donc égale à $3\pi d^2/(4b^2)$; Figure 1.10) et en supposant que le flux du magma dans les tubes correspond à un écoulement de Poiseuille, la perméabilité k s'exprime en fonction de la porosité ϕ et la taille de grains b comme $k = b^2\phi^2/a$, où a est un facteur géométrique égal à 72π avec nos approximations.

En pratique on exprime les relations entre porosité et perméabilité sous la forme

$$k(\phi) = k_0\phi^n \quad (1.12)$$

où k_0 est proportionnel au carré de la taille de grains avec une constante de proportionnalité sans dimensions, de l'ordre de 10^{-2} – 10^{-3} qui dépend de la géométrie du réseau de pores (l'inverse de cette constante est parfois appelée la *tortuosité* du réseau), et où la puissance n est typiquement entre 2 et 3; $n = 3$ correspond à un réseau de films liquides connectés (Schmeling, 2000). Les études expérimentales trouvent souvent $n > 3$ (*e.g.*, Faul (1997) pour le magma silicaté ou Roberts *et al.* (2007) pour le fer liquide dans la matrice silicaté). Parfois ϕ est remplacé par $\phi - \phi_s$ dans (1.12), où ϕ_s est un seuil de porosité au-dessous duquel les poches du liquide restent isolées (Ahern & Turcotte, 1979; Turcotte & Phipps Morgan, 1992).

Au delà de la loi de Darcy

Dans le système magma–matrice solide à l'intérieur de la Terre les deux phases subissent des gradients de pression hydrostatiques (ou lithostatique) importants. La déformation du solide lors de la migration du magma génère une pression dynamique qui contribue à la pression totale. Une simple loi de Darcy qui suppose une matrice rigide n'est pas suffisante pour décrire la dynamique et l'évolution de systèmes magmatiques. Sans une matrice déformable (compactable) aucun magma ne pourrait être extrait.

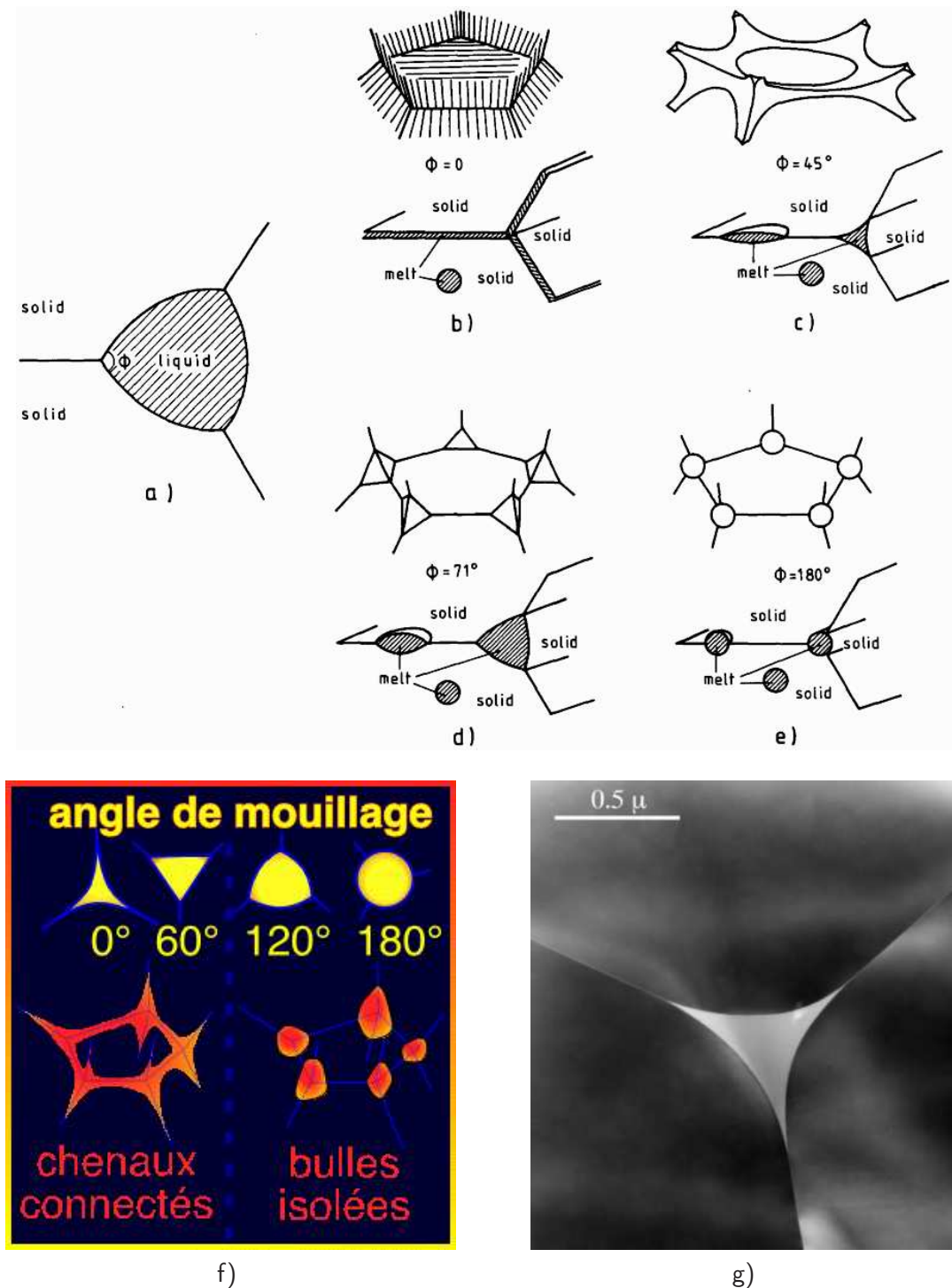


FIG. 1.9 – Illustration de l'interconnectivité du réseau liquide en fonction de l'angle de mouillage. a) définition de l'angle de mouillage ϕ_d dans une jonction triple entre les grains solides; b) le mouillage total se produit si $\phi_d = 0^\circ$ et le liquide forme un film entourant les grains; c) Si $0^\circ < \phi_d < 60^\circ$ le liquide forme un réseau interconnecté de tubules le long des jonctions triples de grains; d–e) si $\phi_d > 60^\circ$ le liquide est concentré dans les poches ou bulles (180° , e) isolées; g) micrographie TEM d'une jonction triple contenant du liquide entre trois grains d'olivine. Figures extraites de Schmeling (1985) (a–e), Cmíral *et al.* (1998) (g).

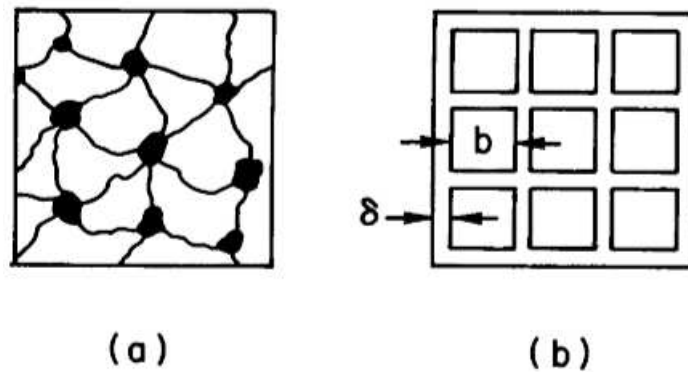


FIG. 1.10 – Schéma d'un réseau liquide dans un milieu poreux (a) et diagramme d'un réseau idéalisé pour quantifier la perméabilité; les tubules cylindriques de diamètre δ forment un réseau cubique avec une longueur de séparation b . Graphique extraite d'Ahern & Turcotte (1979).

1.3.4 Application des modèles biphasés à la géodynamique

Les premiers modèles de milieux biphasés dans la domaine de la dynamique terrestre datent des années soixante-dix. Frank (1968) a suggéré l'importance de la migration du magma pour le transport de la chaleur dans le manteau terrestre. Sleep (1974) a présenté un modèle de l'interaction mécanique entre deux phases, complété par une simple équation de la chaleur (advection-diffusion en régime permanent sans autres termes pour la température). Un modèle similaire mais qui comprend la fusion a été développé par Turcotte & Ahern (1978) et Ahern & Turcotte (1979). McKenzie (1984) a formulé un modèle plus général d'une roche partiellement fondue où les équations de mécanique sont complétées par la conservation de l'énergie et qui permet aussi de suivre l'évolution de la composition isotopique en éléments traces.

Ce modèle décrit le transport d'un liquide à travers une matrice solide beaucoup plus visqueuse. L'interaction mécanique entre les phases correspond à l'écoulement du liquide dans un milieu poreux représenté par le solide, *i.e.*, à la percolation de type Darcy. En plus, une déformation visqueuse de la matrice solide est permise et se produit sous la forme d'une compaction ou d'une dilatation du solide. Grâce à sa généralité et son exposition détaillée le modèle de McKenzie est à la base de la plupart de travaux suivants qui traitent des zones partiellement fondues, migration et ségrégation du magma, et déformation concomitante du solide. Tandis que le modèle présenté dans l'appendice A de McKenzie (1984) est très général, l'auteur se limite dans les applications à des situations simples : la compaction sans fusion dans les géométries à une dimension et la fusion sans compaction où le liquide et le solide montent à la même vitesse (*batch melting*) d'une façon isentropique.

Richter & McKenzie (1984) ont étudié l'évolution dynamique et chimique d'une couche partiellement fondue. Ribe a examiné la compaction dans la zone de fusion (Ribe, 1985a) et la

composition du melt dans un système binaire, caractérisé soit par une solution solide soit par un eutectique (Ribe, 1985b). Une analyse assez détaillée du modèle de McKenzie est présentée dans une série d'articles de Spiegelman (1993a,b,c).

Modèle de dorsales

Il n'est pas surprenant que ce soit l'effort pour comprendre la dynamique des rides océaniques qui ait motivé les modèles biphasés en géophysique et que les dorsales aient été les premiers objets d'application de ces modèles. Les analyses avec les modèles simples à une dimension (McKenzie, 1984; Ribe, 1985a,b; McKenzie & Bickle, 1988) ont montré comment la fusion partielle de 10–15 % en moyenne du manteau montant et l'extraction du magma plus léger près de surface crée la croûte océanique d'une épaisseur voisine de 7 km.

Les observations des dorsales montrent que la zone néo-volcanique est très étroite : moins de 2 km pour les rides à grande vitesse d'écartement et au plus, 10–12 km, pour les rides lentes. La question principale dans les modèles à deux dimensions de la dynamique sous les dorsales (dont les premiers ont été développés par Phipps Morgan, 1987; Spiegelman & McKenzie, 1987; Ribe, 1988; Scott & Stevenson, 1989; Buck & Su, 1989) a été par quel mécanisme le magma est focalisé sous les rides.

Une possibilité est que la montée du manteau lui même soit localisée dans une zone étroite sous la dorsale. Les mécanismes proposés sont une rétroaction entre la flottabilité du magma (et du solide résiduel après la fusion) et la circulation mantellique (Rabinowicz *et al.*, 1987; Scott & Stevenson, 1989), ou une rétroaction entre la réduction de la viscosité du solide lorsque le magma est présent et la fusion (Buck & Su, 1989). Scott & Stevenson (1989) ont présenté des simulations numériques de la circulation sous une dorsale. Ils négligent la compaction du solide aussi que les gradients de pression non-hydrostatiques dans la loi de Darcy. La localisation de la circulation près de la dorsale (de quelques dizaines de kilomètres; Figure 1.11) qu'ils obtiennent est cependant insuffisante pour qu'elle puisse expliquer les observations.

Il est raisonnable de supposer que l'étendue de montée passive du manteau sous les rides et en conséquence la largeur de la zone de fusion partielle est plus grande que quelques (dizaines de) kilomètres. Dans ce cas il faut imaginer un mécanisme de migration latérale du magma vers la dorsale. C'est à dire que la circulation du magma est focalisée, tandis que le mouvement du solide n'est pas trop affecté par cette localisation. Spiegelman & McKenzie (1987) ont étudié l'écoulement biphasé où la matrice suit un simple écoulement passif ("corner flow") dans une géométrie idéalisée d'une dorsale (Figure 1.12). Avec les solutions analytiques à porosité constante et sans fusion (ainsi, sans compaction) ils proposent que ce soit le gradient de pression lié aux contraintes de cisaillement de la matrice dans le coin qui pousse le magma

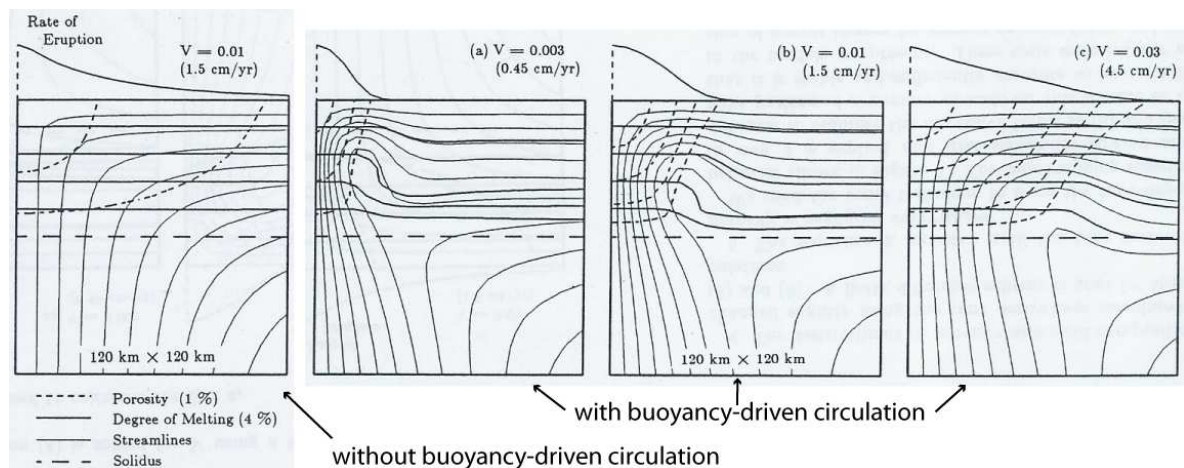


FIG. 1.11 – Lignes de courant pour le solide (trait plein fin) dans le modèle de la circulation sous une dorsale de Scott & Stevenson (1989). Les isolignes du degré de fusion et de la porosité et le taux d'emplacement du magma sont aussi montrés. L'écoulement se focalise car la réduction de densité est liée tout à la fois à la présence de magma et à la déplétion du solide.

vers la dorsale. Mais ce mécanisme exige une viscosité du solide assez élevée ($\sim 10^{21}$ Pa s).

D'autres mécanismes proposés incluent la formation de la perméabilité anisotropique par suite du cisaillement (Phipps Morgan, 1987) et la création d'une frontière imperméable au magma, par solidification, le long d'une isotherme inclinée vers la dorsale (Sparks & Parmentier, 1991). Les variations de la structure sous une dorsale le long de l'axe de la dorsale ont été examinées avec les modèles en trois dimensions (par exemple Parmentier & Phipps Morgan, 1990; Choblet & Parmentier, 2001). Turcotte & Phipps Morgan (1992) donnent une revue critique des modèles de dorsales.

Autres applications

Quoique la motivation principale du modèle de McKenzie (1984) ait été le magmatisme sous les dorsales, il est généralement applicable à un vaste spectre de problèmes d'écoulements différentiels entre un solide et un liquide. Iwamori *et al.* (1995) ont utilisé le modèle pour une analyse de la production du magma par montée de la matière mantellique. Rabinowicz *et al.* (2001) ont modifié les équations pour décrire les systèmes avec une grande concentration du liquide pour des applications aux chambres magmatiques. Schmeling (2000) a présenté un modèle de convection avec fusion et l'a appliqué aux panaches mantelliques (Schmeling, 2006). Aharonov *et al.* (1995) et Aharonov *et al.* (1997) présentent un modèle d'écoulement réactif où la fusion est remplacée par une réaction de dissolution/précipitation entre le liquide et le solide. Avec ce modèle ils modélisent la focalisation du magma dans un réseau de conduits durant la compaction de la matrice (Spiegelman *et al.*, 2001).

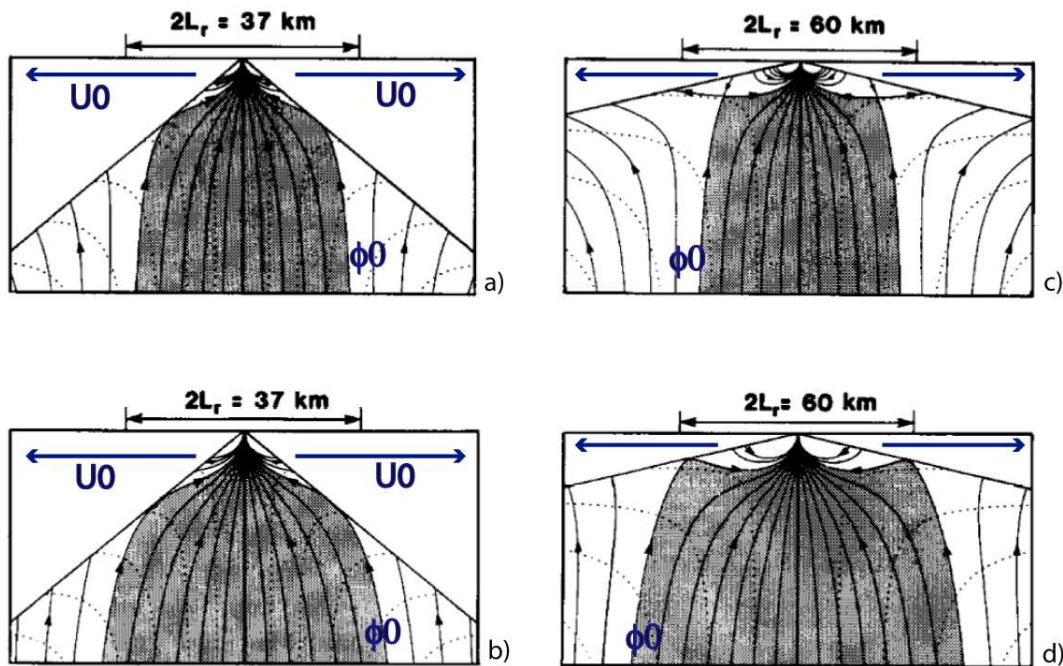


FIG. 1.12 – Les lignes de courant pour le magma (trait plein) et le solide (tirets) dans le modèle de dorsale de Spiegelman & McKenzie (1987). La vitesse horizontale de magnitude U_0 est prescrite dans les blocs triangulaires et la porosité est constante ϕ_0 au-dessous. Le région d'où le magma est focalisé dans la dorsale est teint en gris. a) $U_0 = 1$ cm/an, $\phi_0 = 1\%$; b) $U_0 = 1$ cm/an, $\phi_0 = 2.4\%$; c) $U_0 = 7.5$ cm/an, $\phi_0 = 1.5\%$; d) $U_0 = 7.5$ cm/an, $\phi_0 = 3.6\%$.

Ondes solitaires

Les équations biphasées permettent des solutions sous la forme de propagation d'ondes solitaires. Il s'agit d'ondes isolées et localisées dont la vitesse de propagation dépend de l'amplitude. Ces ondes gardent leurs formes pendant les interactions mutuelles (lorsqu'une onde en rattrape une autre dont l'amplitude est plus petite; Figure 1.13).

La première observation scientifique d'une onde solitaire à été faite en 1834. Un ingénieur naval écossais John Scott Russell a observé une onde de surface excitée par un bateau dans un canal entre Glasgow et Edinburgh. Russell a poursuivi les expériences en laboratoire où il a trouvé les caractéristiques principales de ces ondes, qu'il a nommées « the great waves of translation » (Russel, 1844, Figure 1.14).

Sur la scène biphasée Scott & Stevenson (1984) ont montré l'existence des ondes solitaires magmatique par analyse des équations biphasés; ils ont proposé l'utilisation du concept de « magmon ». Ils ont rapporté les observations en laboratoire d'ondes solitaires dans une colonne d'un liquide visqueux entouré par un liquide plus dense et plus visqueux (Scott *et al.*, 1986).

Une analyse détaillée des ondes solitaires dans le cadre biphasé, à une dimension, est don-

née par Barcilon & Richter (1986). Une analyse de la stabilité de ces ondes et des simulations en deux ou trois dimensions (Scott & Stevenson, 1986; Barcilon & Lovera, 1989; Spiegelman, 1993b) indiquent que les ondes solitaires à une dimension sont instables par rapport aux perturbation 2-D, de la même façon, les perturbations 3-D déstabilisent les ondes à deux dimensions (Figure 1.15). L'effet de la tension de surface entre le magma et le solide qui tend à déstabiliser la propagation du magmon a été discuté par Ricard *et al.* (2001), Hier-Majumder *et al.* (2006).

1.3.5 Nouveau modèle de Bercovici *et al.* (2001a)

McKenzie suppose que la viscosité du liquide est négligeable par rapport à celle du solide. L'interface entre les phases n'a pas de propriétés intrinsèques et en conséquence le modèle ne prend pas en compte les effets de surface. Dans une série d'articles Bercovici *et al.* (2001a,b) et Ricard *et al.* (2001) ont revisité le modèle continu des milieux biphasés à partir des principes de base de la thermodynamique et de la mécanique de milieux continus.

Ce nouveau modèle décrit un mélange de deux fluides visqueux mais il diffère du modèle de McKenzie par plusieurs aspects.

1. Le rapport des viscosités entre les deux phases est arbitraire ; la viscosité d'une phase ne doit pas forcément être beaucoup plus petite que de l'autre. En fait cette liberté du choix des valeurs de viscosités donne au système d'équations une symétrie (plus précisément une invariance par permutation des phases) qui peut être exploitée lors du développement du modèle. Il suffit ainsi d'écrire la conservation de la masse ou de l'impulsion d'une seule phase, par exemple f en proportion ϕ pour en déduire la conservation de la masse ou de l'impulsion de l'autre phase par permutation de f en m et de ϕ en $1 - \phi$.
2. L'interface entre les phases est pris en compte. Elle possède une énergie de surface et une force agit sur le mélange biphasé qui vient de la tension de surface. En conséquence les pressions dans le liquide et dans le solide sont différentes.
3. Une des motivations de ce nouveau modèle a été de créer un formalisme qui inclut non seulement la compaction mais aussi l'endommagement. Dans ce modèle l'endommagement se produit par déposition de l'énergie sur l'interface qui se manifeste comme la génération, l'accroissement et la propagation de micro-fissures et micro-cavités (Bercovici *et al.*, 2001a,b; Bercovici & Ricard, 2003) et comme le changement de la taille des grains (Bercovici & Ricard, 2005). L'endommagement est un mécanisme capable de localiser la déformation dans la lithosphère, donc il offre un modèle plausible de la génération et du maintien des plaques tectoniques.

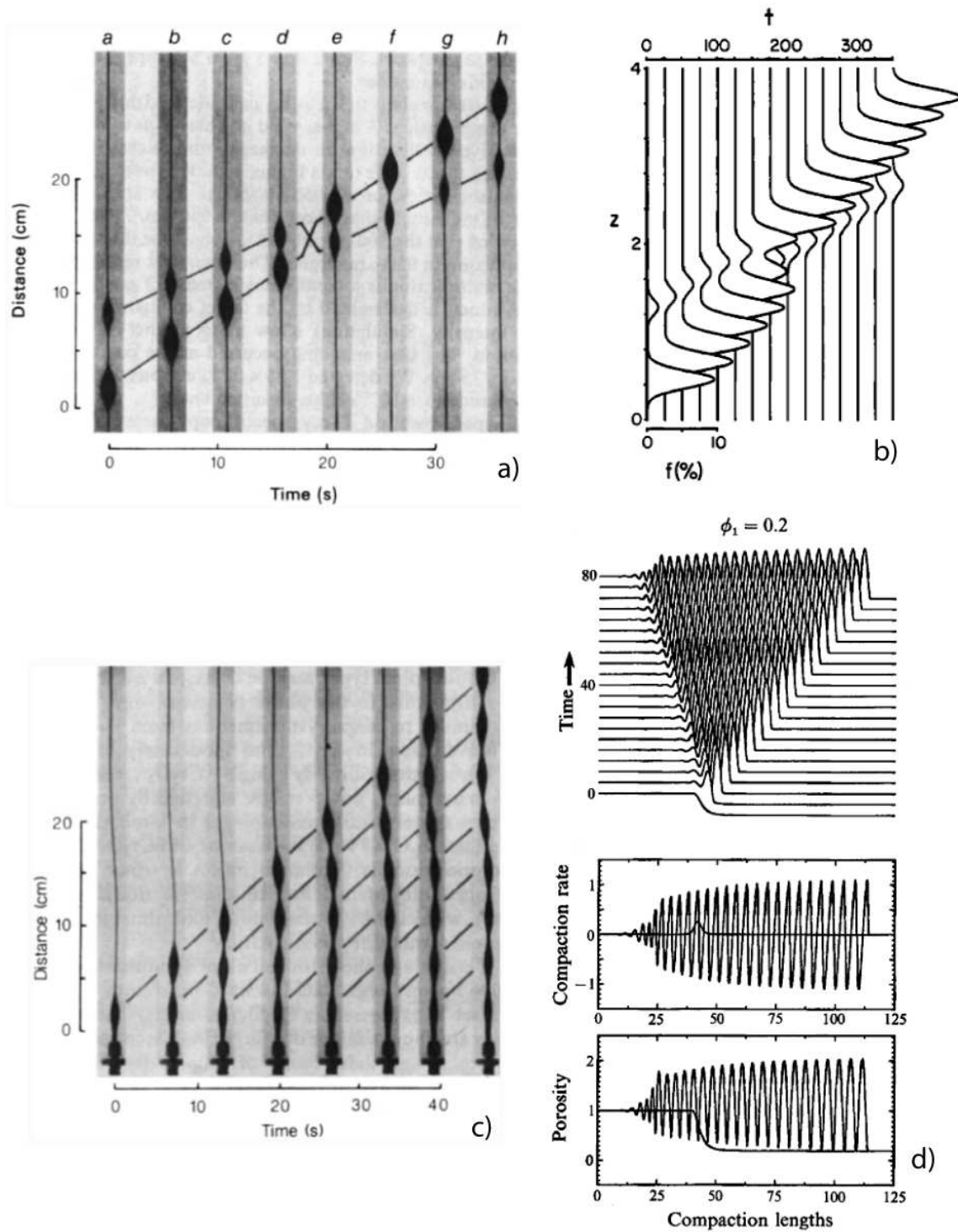


FIG. 1.13 – Observation (a) et simulation (b) de l'interaction de deux ondes solitaires; observation (c) et simulation (d) de la formation d'une série d'ondes solitaires. Après Scott & Stevenson (1984); Scott *et al.* (1986); Spiegelman (1993b).

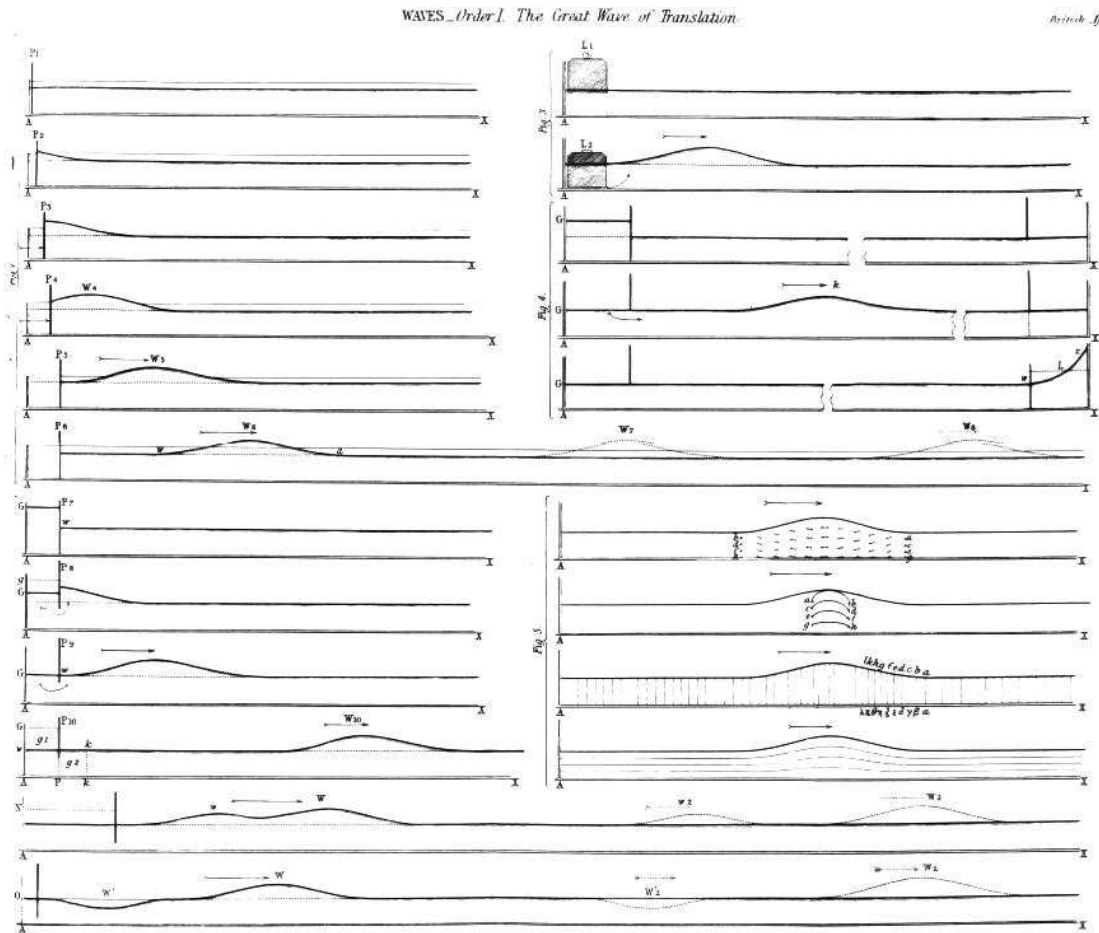


FIG. 1.14 – Diagramme d'après Russel (1844) de ses expériences sur « les grandes ondes de translation ». Sur ce graphique sont représentées l'excitation d'une onde par déplacement horizontal d'une plaquette ou par introduction rapide d'un poids, la propagation d'une onde isolée sans changement de forme, la dépendance de la vitesse de propagation avec l'amplitude, et la rencontre de deux ondes d'amplitudes et de vitesses différentes.

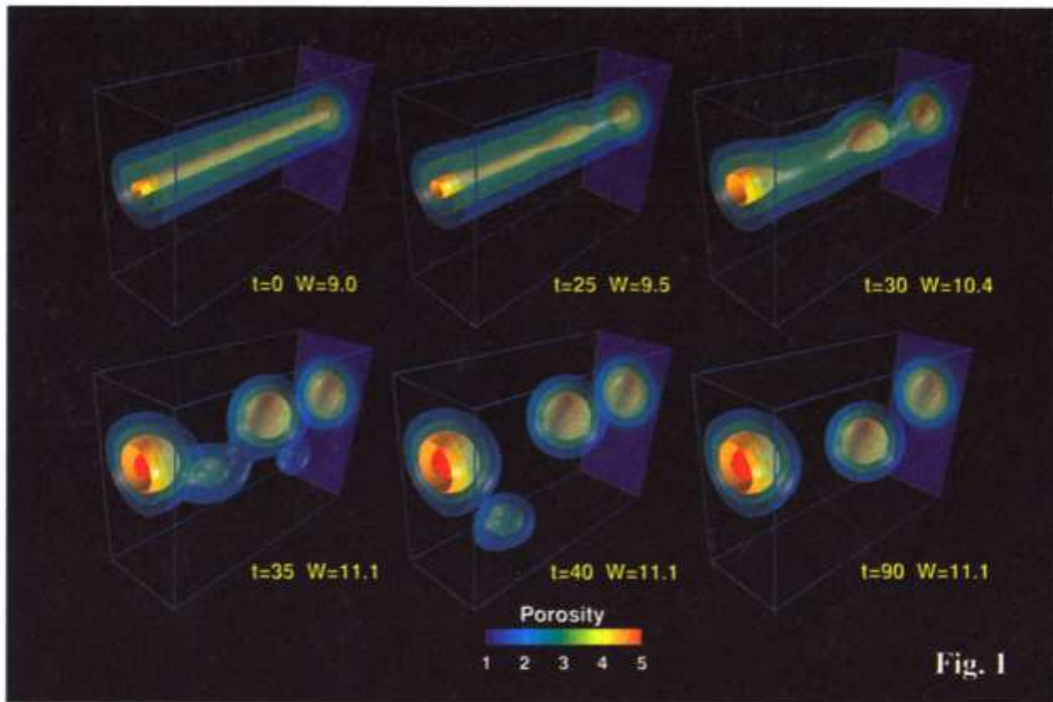


FIG. 1.15 – Évolution et déstabilisation d'un magmon cylindrique en 3-D. Par Wiggins & Spiegelman (1995).

1.3.6 Changement de phases

Les équations proposées par McKenzie (1984) permettent un changement de phases entre le liquide et le solide, mais la quantité qui décrit ce changement – le taux de fusion – n'est pas prédite par son modèle et doit être prescrite. En fait McKenzie (1984) n'offre pas de forme fonctionnelle ni d'équation pour déterminer le taux de fusion (masse de matrice convertie en magma par unité de temps et de volume). Il propose uniquement certaines dépendances simples du *degré de fusion* (*degree of melting*, proportion massique de solide qui a fondu depuis le début de la fusion) avec la température et la pression (ou la profondeur) dans la situation d'une montée isentropique sous les dorsales. Le degré de fusion est la fraction massique du liquide généré par la fusion à une pression et une température donnée dans un état immobile (sans extraction du liquide) après que l'équilibre soit atteint. Il est possible de relier le degré de fusion et le taux de fusion même si le liquide est extrait dans le cas de fusion à l'équilibre (Schmeling, 2000).

La déformation de la matière lors de l'écoulement et de l'extraction du liquide va générer des perturbations locales de pression. Par conséquence, le taux de fusion, qui est une fonction de la pression et de la température (et dans un système multivariant aussi de composition) sera modifié. Un taux de fusion non-uniforme de son côté, conduit à des hétérogénéités de la distribution spatiales du magma donc potentiellement favorise les instabilités de porosité.

Pour que le nouveau modèle biphasé de Bercovici *et al.* (2001a) soit applicable aux problèmes de la fusion partielle et de l'extraction du magma, il faut l'adapter par l'introduction cohérente du changement de phase. Ce modèle généralisé va évidemment retenir les nouveaux aspects présents dans les équations de Bercovici *et al.* (2001a) (différence de pression entre le solide et le liquide, effet de tension superficielle) et s'offrira comme un modèle général pour étudier le couplage entre le changement de phase, l'écoulement biphasé, la déformation visqueuse et les effets de l'interface.

1.4 Plan

Cette thèse présente plusieurs aspects de la modélisation des milieux biphasés en géophysique. Dans le chapitre 2 nous présentons sommairement les équations biphasés de notre modèle que nous comparerons au modèle de McKenzie (1984). Le chapitre 3 s'occupe de la modélisation de la compaction et de la séparation de phases, appliquées à la ségrégation noyau-manteau des planètes telluriques. À côté des simulations en une dimension dans les géométries cartésienne et sphérique, un modèle et un code 2-D cartésien sont présentés. Dans le chapitre 4 les équations biphasées avec un changement de phase sont développées et présentées en détail. Il s'agit de l'adaptation du modèle de Bercovici *et al.* (2001a) au changement de phase dans un système à une composante unique. Le chapitre 5 montre quelques problèmes simples de couplage entre la fusion et la déformation. Le chapitre 6 analyse le couplage entre la compaction et la fusion par dépression à l'état stationnaire. Les effets de la tension superficielle sur la fusion et la migration du magma sont discutés dans le chapitre 7.

Chapitre 2

Équations biphasés

Nous présentons sommairement les modèles biphasés de McKenzie (1984), et de Šrámek *et al.* (2007). Ce dernier est une généralisation du modèle de Bercovici *et al.* (2001a) qui permet un changement de phases. Nous allons nous référer à ces modèles en utilisant les abréviations du Tableau 2.1. Avant d'écrire les équations nous présentons un résumé des points communs et des différences entre ces modèles.

modèle	description
MK84	modèle de McKenzie (1984)
BRS	modèle de Bercovici, Ricard et Schubert (Bercovici <i>et al.</i> , 2001a), raffiné par Bercovici & Ricard (2003)
ŠRB	modèle de Šrámek, Ricard et Bercovici (Šrámek <i>et al.</i> , 2007) ; il s'agit de BRS avec changement de phases

TAB. 2.1 – Les modèles biphasés décrits et les abréviations utilisées dans le texte.

Les points communs dans MK84 et ŠRB

- Les deux modèles décrivent l'écoulement biphasé sous forme d'équations différentielles partielles (courantes dans la mécanique de milieux continus) pour des quantités qui sont moyennées sur l'échelle mésoscopique.
- L'inertie et l'énergie cinétique sont négligées. Cette approximation des écoulements *ram-pants* implique que l'accélération est nulle et que les forces sont toujours en équilibre.
- Les modèles présument l'isotropie de la configuration spatiale de phases sur l'échelle des grains et des pores.
- En termes de rhéologie, les deux phases sont des liquides visqueux (la déformation élastique n'est pas considérée).
- Dans le cas d'une matrice solide indéformable, le liquide le moins visqueux s'écoule suivant une dynamique classique de type Darcy.

Les différences entre MK84 et ŠRB

- En termes de rhéologie, dans MK84 la matrice solide est un liquide compressible dont la relation rhéologique contient deux viscosités (viscosité de compression et viscosité de cisaillement) et la phase liquide est incompressible avec une viscosité négligeable. Dans ŠRB les deux phases sont des liquides visqueux intrinsèquement incompressibles aux viscosités arbitraires. La limite géologique d'une migration du magma avec une viscosité négligeable par rapport à celle du solide sera faite à posteriori.
- MK84 néglige la tension de surface. Dans ŠRB la tension de surface et les effets interfaciaux sont considérés. En fait BRS permettent la déposition de l'énergie de déformation sur l'interface ce qui suggère une possible voie pour étudier l'endommagement, et par conséquence la concentration et l'évolution de l'endommagement mécanique de matériaux. ŠRB se limitent surtout à l'effet de tension de surface sur le changement de phase (*i.e.*, l'effet Gibbs-Thomson) mais l'extension vers des modèles d'endommagement dans l'esprit BRS est possible.
- La considération des interfaces et de la tension de surface implique l'existence d'une différence de pression entre le liquide et le solide. Cette différence de pression a une contribution statique à cause des forces de surface aux interfaces ainsi qu'une contribution dynamique liée à la compression ou dilatation du squelette de chaque phase. Cette différence de pression est donc non-nulle même avec une tension de surface négligeable tant que le milieu biphasé se déforme.
- Dans MK84 le taux de fusion (ou la quantité équivalente qui décrit le transfert massique entre les phases pendant la fusion ou solidification) est une quantité externe (prescrite). Dans ŠRB ce couplage entre l'équation pour le taux de fusion et le modèle d'écoulement est déduit de façon cohérente par la théorie ce qui permet d'étudier l'effet de la déformation dynamique sur le changement de phase. Par contre nous nous restreignons à des changements univariants.

2.1 Équations « MK84 »

Les équations « MK84 » sont développées dans l'appendice A de McKenzie (1984).

La conservation de la masse dans la phase liquide (indice inférieur f) et la phase solide (indice m) s'écrivent

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho_f \phi) + \nabla \cdot (\rho_f \phi \mathbf{v}_f) = \frac{D_m M}{Dt}, \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[\rho_m(1 - \phi)] + \nabla \cdot [\rho_m(1 - \phi) \mathbf{v}_m] = -\frac{D_m M}{Dt}, \quad (2.2)$$

où ϕ est la porosité, ρ_f et ρ_m sont les densités, et \mathbf{v}_f et \mathbf{v}_m sont les vitesses moyennes¹. Les termes sources (membre droit) sont écrits comme la dérivée totale en temps, dans le repère de la matrice, de la masse transférée. La dérivée totale est définie dans l'équation (4.17).

L'écoulement du liquide à travers de la matrice est décrit par

$$-\frac{k(\phi)}{\mu_f}(\nabla P - \rho_f \mathbf{g}) + \phi \Delta \mathbf{v} = 0, \quad (2.3)$$

où P est la pression (une seule pression est définie pour les deux phases), \mathbf{g} est l'accélération de gravité, μ_f est la viscosité dynamique du liquide, et $\Delta \mathbf{v} = \mathbf{v}_m - \mathbf{v}_f$ est la différence de vitesses entre les phases. L'équation (2.3) ressemble à (1.10) et représente la généralisation de la loi de Darcy pour un milieu à grande échelle où la matrice est aussi déformable – le moteur de la percolation du liquide est la déviation de la pression par rapport à la valeur hydrostatique – à la place de la vitesse Darcy \mathbf{v}_D de (1.10), la vraie vitesse moyennée du liquide par rapport au solide $-\Delta \mathbf{v}$ est introduite multipliée par la porosité pour correctement quantifier le taux de flux du liquide.

La déformation du solide est décrite par l'équation de type Navier-Stokes (sans inertie)

$$-(1 - \phi)(\nabla P - \rho_m \mathbf{g}) + \nabla \cdot \underline{\boldsymbol{\sigma}}_m - \frac{\mu_f \phi^2}{k(\phi)} \Delta \mathbf{v} = 0, \quad (2.4)$$

où le tenseur de contrainte visqueuse $\underline{\boldsymbol{\sigma}}_m$ est relié aux vitesses selon une rhéologie adaptée aux liquides compressibles

$$\underline{\boldsymbol{\sigma}}_m = \zeta \nabla \cdot \mathbf{v}_m \mathbf{I} + \mu_m \left(\nabla \mathbf{v}_m + \nabla^T \mathbf{v}_m - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_m \mathbf{I} \right) \equiv \zeta \nabla \cdot \mathbf{v}_m \mathbf{I} + \underline{\boldsymbol{\tau}}_m. \quad (2.5)$$

Les deux paramètres dans (2.5) sont la viscosité de compression ζ et la viscosité de cisaillement (viscosité dynamique) μ_m . \mathbf{I} est le tenseur d'identité. McKenzie multiplie correctement la contrainte $\underline{\boldsymbol{\sigma}}_m$ par $1 - \phi$ dans équation (2.4), mais supprime effectivement le facteur de porosité dans les applications de son modèle. En plus il a été montré (*e.g.*, O'Connell & Budiansky, 1977; Schmeling, 1985) que la viscosité de compression ζ doit avoir une dépendance plus compliquée en fonction de la porosité telle que $\lim_{\phi \rightarrow 0} \zeta(\phi) = +\infty$ (voir aussi Schmeling, 2000). Sans cela, la compaction de la matrice reste possible quand la porosité tend vers zéro et la porosité peut devenir négative (Ricard *et al.*, 2001).

¹La notation est aussi expliquée dans Tableau 4.1 sur la page 106

La conservation de l'énergie s'exprime par

$$\begin{aligned} \rho_f \phi C_f \frac{D_f T}{Dt} + \rho_m (1 - \phi) C_m \frac{D_m T}{Dt} + T \Delta s \frac{D_m M}{Dt} \\ = Q - \nabla \cdot \mathbf{q} + \frac{\mu_f \phi^2}{k(\phi)} \Delta v^2 + \zeta (\nabla \cdot \mathbf{v}_m)^2 + \nabla \mathbf{v}_m : \underline{\boldsymbol{\tau}}_m, \end{aligned} \quad (2.6)$$

où T est la température, C_f et C_m sont les capacités calorifiques par unité de masse, $\Delta s = s_m - s_f$ est la différence d'entropie spécifique entre les phases, Q la puissance des sources volumiques de chaleur, et \mathbf{q} le flux de chaleur ($\mathbf{q} = -k_T \nabla T$ avec k_T la conductivité thermique). Le troisième terme à gauche représente la contribution énergétique du changement de phases ; $-T \Delta s$ est la chaleur latente spécifique qui est multipliée par le taux de transfert massique entre les phases. Dans le membre de droite à coté de la source de chaleur triviale et de la diffusion thermique on trouve trois sources dissipatives :

- à cause du frottement entre les phases qui s'écoulent à des vitesses différentes (le terme proportionnel à Δv^2)
- à cause de la déformation volumique de la matrice (le terme proportionnel à $(\nabla \cdot \mathbf{v}_m)^2$)
- à cause de la déformation cisailante de la matrice (le dernier terme)

Dans l'équation de l'énergie McKenzie inclue les gradients adiabatiques

$$-T \alpha_f \phi \frac{D_f P}{Dt} - T \alpha_m (1 - \phi) \frac{D_m P}{Dt} \quad (2.7)$$

à gauche de (2.6) (son équation A39), bien que pour la phase liquide il utilise la relation rhéologique d'un liquide incompressible.

2.2 Équations « ŠRB »

Les équations « ŠRB » présentées ici sont développées dans la Section 4.2 du Chapitre 4 qui en donne une discussion extensive en particulier de l'équation de l'énergie et des relations phénoménologiques. Quant aux équations mécaniques nous nous référons aux travaux de Bercovici *et al.* (2001a) et Bercovici & Ricard (2003).

Nous présentons les équations dans la limite où la viscosité de la phase liquide est beaucoup plus petite que la viscosité de la phase solide ($\mu_f \ll \mu_m$). Les implications de cette limite sont expliquées au cours de l'exposition. En outre nous négligeons la tension de surface dans les équations de ce paragraphe ($\sigma = 0$), d'abord parce qu'avec cette limite la comparaison de notre modèle (ŠRB) aux équations de McKenzie (MK84) sera plus facile, ensuite parce que dans les prochains chapitres nous utiliserons généralement ce modèle avec ces approximations. La phase liquide représente soit le magma basaltique ($\mu_f \sim 10$ Pa.s) soit le fer liquide ($\mu_f \sim$

0.1 Pas) tandis que la phase solide est la matrice silicatée ou indifférenciée, à l'état solide ($\mu_m \sim 10^{20}$ Pas), donc l'approximation du liquide inviscide est tout à fait raisonnable.

La conservation de la masse dans les deux phases s'écrit

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}_f) = \frac{\Delta \Gamma}{\rho_f}, \quad (2.8)$$

$$-\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot [(1 - \phi) \mathbf{v}_m] = -\frac{\Delta \Gamma}{\rho_m}, \quad (2.9)$$

qui correspond aux équations (2.1) et (2.2) si le taux de fusion $\Delta \Gamma$ est identifié avec la dérivée $D_m M / Dt$ de MK84. Il est souvent pratique d'utiliser une autre forme de conservation de masse obtenue par une combinaison linéaire de (2.8) et (2.9). On peut faire apparaître la divergence du flux de masse barycentrique $\bar{\rho} \bar{\mathbf{v}} = \rho_f \phi \mathbf{v}_f + \rho_m (1 - \phi) \mathbf{v}_m$,

$$\nabla \cdot \bar{\rho} \bar{\mathbf{v}} = \Delta \rho \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (2.10)$$

ou la divergence de la vitesse moyenne $\bar{\mathbf{v}} = \phi \mathbf{v}_f + (1 - \phi) \mathbf{v}_m$,

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}} = \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} \Delta \Gamma, \quad (2.11)$$

ou encore écrire une équation pour l'évolution de la porosité en termes de vitesse moyenne $\bar{\mathbf{v}}$ et de différence de vitesses $\Delta \mathbf{v}$,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla \phi = \nabla \cdot [\phi (1 - \phi) \Delta \mathbf{v}] + \frac{\bar{\rho}}{\rho_f \rho_m} \Delta \Gamma. \quad (2.12)$$

Les équations qui décrivent l'équilibre des forces qui agissent sur chaque phase sont la loi de Darcy généralisée

$$-\nabla P_f + \rho_f \mathbf{g} + \frac{c \Delta \mathbf{v}}{\phi} = 0, \quad (2.13)$$

et l'équation pour la déformation de la matrice

$$-(1 - \phi)(\nabla P_m - \rho_m \mathbf{g}) + \nabla \cdot [(1 - \phi) \boldsymbol{\tau}_m] - c \Delta \mathbf{v} + \Delta P \nabla \phi = 0. \quad (2.14)$$

Contrairement aux équations (2.3) et (2.4) de MK84, dans chaque phase la pression est différente, P_f et P_m . La contrainte déviatorique est

$$\boldsymbol{\tau}_m = \mu_m \left(\nabla \mathbf{v}_m + [\nabla \mathbf{v}_m]^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_m \mathbf{I} \right). \quad (2.15)$$

Il faut souligner que bien que la matrice (ainsi que le liquide) soit intrinsèquement incom-

pressible, la divergence de la vitesse moyenne de la matrice $\nabla \cdot \mathbf{v}_m$ n'est pas identiquement égale à zéro. Ceci reflète le taux de déformation isotrope, *i.e.*, la dilatation (si ce taux est positif) ou la compaction (s'il est négatif) du squelette de la matrice, dont l'importance est illustrée par le fait que certains auteurs donnent à $\nabla \cdot \mathbf{v}_m$ un nom et un symbole spécial (*e.g.*, le « taux de compaction » \mathcal{C} de Spiegelman, 1993a,b,c). Bien que $\underline{\boldsymbol{\tau}}_m$ ne contienne qu'une viscosité μ_m , ce n'est pas un tenseur de contrainte visqueuse d'un liquide incompressible, mais une relation entre la contrainte déviatorique et le taux de déformation duquel la partie isotrope a été soustraite.

La lectrice ou le lecteur peut trouver utile de regarder la forme des équations du mouvement sans que les limites $\mu_f \ll \mu_m$ et $\sigma = 0$ ne soient prises (équations 4.4 et 4.5 sur la page 95). Dans ce cas, la paire des relations pour les phases liquide et solide montre une invariance par permutation des phases : si on échange les indices $f \leftrightarrow m$, remplace ϕ par $1 - \phi$, et multiplie les quantités de différence Δq (*e.g.*, $\Delta \mathbf{v}$, $\Delta \Gamma$, *etc.*) par -1 , on ré-obtient les équations de départ. Cette invariance, absente dans le modèle MK84, non seulement s'est montrée un outil pratique pour la construction du modèle BRS, et conséquemment ŠRB, mais aussi permet à ces modèles un plus grand champ d'applications potentielles.

Dans le cas général, les deux équations 4.4 et 4.5 contiennent un tenseur déviatorique. De plus, un terme qui représente la force exercée sur le mélange biphasé par l'interface est réparti entre les deux équations avec un coefficient de partition ω (équation 4.9). Dans le cas limite présenté ici, la force de l'interface se reflète dans le dernier terme proportionnel à la différence de pression ΔP dans l'équation (2.14).

Le coefficient c qui multiplie $\Delta \mathbf{v}$ dans (2.13) et (2.14) est

$$c = \frac{\phi^2 \mu_f}{k(\phi)}. \quad (2.16)$$

La relation invariante pour c est donnée dans l'équation 4.6.

Dans la suite, nous allons nous servir d'équations de mouvement obtenues par combinaisons linéaires de (2.13) et (2.14), en particulier de l'équation pour les quantités moyennes

$$-\nabla \bar{P} + \nabla \cdot [(1 - \phi) \underline{\boldsymbol{\tau}}_m] + \bar{\rho} \mathbf{g} = 0, \quad (2.17)$$

où $(1 - \phi) \underline{\boldsymbol{\tau}}_m$ joue le rôle de la contrainte moyenne $\bar{\boldsymbol{\tau}} = \phi \underline{\boldsymbol{\tau}}_f + (1 - \phi) \underline{\boldsymbol{\tau}}_m$ puisque la contrainte déviatorique dans le liquide $\underline{\boldsymbol{\tau}}_f$ est négligée par suite de l'approximation $\mu_f \ll \mu_m$, et l'équation pour les quantités de différence

$$-\nabla [(1 - \phi) \Delta P] + (1 - \phi) \Delta \rho \mathbf{g} + \nabla \cdot [(1 - \phi) \underline{\boldsymbol{\tau}}_m] - \frac{c \Delta \mathbf{v}}{\phi} = 0. \quad (2.18)$$

Dans le modèle ŠRB les considérations thermodynamiques sur la production d'entropie et la seconde loi contraignent deux relations phénoménologiques (voir la section 4.2.3). Une est l'équation pour la différence de pression

$$\Delta P = -K_0 \frac{\mu_m}{\phi} \nabla \cdot \mathbf{v}_m, \quad (2.19)$$

où K_0 est un facteur géométrique d'ordre 1.

En connaissant ΔP , on peut comparer les équations de mouvement ŠRB et MK84. Il est évident que les équations (2.13) et (2.14) diffèrent de (2.3) et (2.4). Une identité triviale est obtenue entre (2.3) et (2.13) si on pose $P = P_f$. Une correspondance entre les équations pour la phase solide existe uniquement dans le cas d'une porosité uniforme si on pose $\zeta = K_0 \mu_m / \phi$ (ayant toujours $P = P_f$; Ricard *et al.*, 2001).

L'autre relation phénoménologique est l'équation pour le taux de fusion

$$\Delta \Gamma = -L_{22} \left[(T - T_0) \Delta s + P_f \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} \right]. \quad (2.20)$$

Elle décrit le changement de phase dans un système univariant (*i.e.*, à une composante unique) où la droite de fusion est donnée par la pente $dT/dP_f|_{fus} = -\Delta \rho / (\rho_f \rho_m \Delta s)$ et fixée à la température T_0 à la pression ambiante.

L'équation de l'énergie s'écrit

$$\begin{aligned} & \rho_f \phi C \frac{D_f T}{Dt} + \rho_m (1 - \phi) C \frac{D_m T}{Dt} - T \Delta s \Delta \Gamma \\ & = Q - \nabla \cdot \mathbf{q} + \frac{\Delta \Gamma^2}{L_{22}} + c \Delta \mathbf{v}^2 + K_0 \mu_m \frac{1 - \phi}{\phi} (\nabla \cdot \mathbf{v}_m)^2 + (1 - \phi) \underline{\tau}_m : \nabla \mathbf{v}_m. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Le membre gauche est identique à celui de MK84, équation (2.6) (avec l'équivalence de $\Delta \Gamma$ et $D_m M / Dt$). Dans le membre de droite, la source de chaleur liée à la déformation isotrope est multipliée par $K_0 \mu_m (1 - \phi) / \phi$ à la place de ζ de MK84, et la source liée à la déformation déviatorique porte un facteur $1 - \phi$ à la place de 1 de MK84. Nous retrouvons une autre source de chaleur proportionnelle au carré du taux de fusion. Ce terme disparaît si la fusion se produit à l'équ

Chapitre 3

Phase separation: metal–silicate differentiation

In this chapter we use the two-phase model to investigate the dynamics of phase separation. In particular we are motivated by the problem of differentiation and metal–silicate segregation on a planetary scale in the early stages of the Solar System. The differentiation is primarily driven by the density contrast between the lighter silicate component and the denser metallic components (Fe–FeS alloy). The release of gravitational energy by differentiation contributes an important heat source to the energy balance, and therefore the most general model should include the phase change (melting/freezing) of both the metallic and the silicate component. We investigate the case where the silicate component is in the solid state and the metallic component may be molten. Such a situation is a plausible intermediate physical state between the cases of both components in molten state (*i.e.*, the presence of a magma ocean) and a solid–solid phase separation, as the melting temperature of the metallic component is lower than that of the silicates (Agee *et al.*, 1995). There is no transfer of mass between the metallic and the silicate components in our current model.

First we present the equations for compaction, phase separation and two phase convection including the energy equation that must account for the heating by the released gravitational energy (section 3.1). We discuss the modification for a case where the metallic component is either in the solid or in the liquid state (3.2), we then non-dimensionalize the equations (3.3). Calculations of a compaction in a layer (3.4) and self-gravitating spherically symmetric body (3.5) are presented. A 2-D cartesian model is developed (3.7).

3.1 Equations of two-phase compaction

We consider the equations of a two-phase medium. These equations represent the behavior of two different components of largely different viscosities that cannot be converted into each other by a phase change (*i.e.*, water in a rocky matrix or liquid metal in a silicate matrix). We will see later that with minor modifications, these equations can be applied to a more complex case where the fluid phase is liquid metal, and the solid phase a mixture of silicates and solid metal. We want to express these equations in a way that will be appropriate for the development of a numerical code.

Instead of using \mathbf{v}_m and \mathbf{v}_f , we choose to write the equations in terms of \mathbf{v}_m and $\phi\Delta\mathbf{v}$. The equation for the average velocity $\bar{\mathbf{v}}$ (2.11) with zero rate of phase change ($\Delta\Gamma = 0$) states that $\bar{\mathbf{v}}$ has zero divergence,

$$\nabla \cdot \bar{\mathbf{v}} = 0, \quad (3.1)$$

which, by definition of $\bar{\mathbf{v}}$, is equivalent to

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_m = \nabla \cdot (\phi\Delta\mathbf{v}). \quad (3.2)$$

The other mass conservation equation we use is (2.12) with $\Delta\Gamma = 0$

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -\nabla \cdot [\phi\bar{\mathbf{v}} - \phi(1-\phi)\Delta\mathbf{v}], \quad (3.3)$$

where (3.1) was used, which describes the evolution of porosity in time. This equation is therefore an equation of advection where the Lagrangian derivative $\partial/\partial t + \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla$ takes into account the average velocity $\bar{\mathbf{v}}$ and which includes a source term $\nabla \cdot [\phi(1-\phi)\Delta\mathbf{v}]$.

The average pressure \bar{P} is written arbitrarily as a sum of a lithostatic pressure P_l and a pressure deviation Π . The lithostatic pressure is calculated with the matrix density, therefore $\nabla P_l = \rho_m \mathbf{g}$. We have

$$\nabla \bar{P} = \rho_m \mathbf{g} + \nabla \Pi. \quad (3.4)$$

Substitution of \bar{P} from (3.4) into the average momentum equation (2.17) yields

$$-\nabla \Pi + \nabla \cdot (\mu^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_m) - \phi \Delta \rho \mathbf{g} = 0, \quad (3.5)$$

where μ^* stands for $1-\phi$ and $\underline{\boldsymbol{\tau}}_m$ is given by (2.15). Using also (2.19) with $K_0 = 1$ and (3.2), the generalized Darcy's law (2.13) becomes

$$\phi \Delta \mathbf{v} = \frac{\phi^2}{c} \left[\nabla \left(\Pi + \mu_m \frac{1-\phi}{\phi} \nabla \cdot (\phi \Delta \mathbf{v}) \right) + \Delta \rho \mathbf{g} \right]. \quad (3.6)$$

Now we have two scalar equations (3.1, 3.3) and two vector equations (3.5, 3.6) for two scalar quantities (ϕ and Π) and two velocity vector fields (\mathbf{v}_m and $\phi\Delta\mathbf{v}$, with $\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{v}_m - \phi\Delta\mathbf{v}$).

To simply investigate the mechanical separation of phases one can stop here. In order to account for the heating by differentiation (release of potential energy) it is necessary to include the energy equation. For simplicity we take $\rho_f C_f = \rho_m C_m = \bar{\rho C}$ and the energy equation (2.21) with $Q = 0$ and $\Delta\Gamma = 0$ becomes

$$\bar{\rho C} \left(\frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot (T\bar{\mathbf{v}}) \right) = k_T \nabla^2 T + c\Delta\mathbf{v}^2 + \mu_m \frac{1-\phi}{\phi} (\nabla \cdot \mathbf{v}_m)^2 + \mu^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_m : \nabla \mathbf{v}_m, \quad (3.7)$$

where the Fourier law of heat conduction $\mathbf{q} = -k_T \nabla T$ is used and k_T is assumed uniform.

The three quadratic dissipative terms on the right-hand side of equation (3.7) come from the change in potential energy in gravity field upon separation of phases which is dissipated as heat.

We can also account for convective movement due to thermal heterogeneities by relaxing the assumption of individually incompressible phases and letting the matrix and fluid densities vary with temperature according to

$$\rho_m = \rho_m^0 [1 - \alpha_m (T - T_0)], \quad (3.8)$$

$$\rho_f = \rho_f^0 [1 - \alpha_f (T - T_0)], \quad (3.9)$$

where α_f and α_m are the coefficients of thermal expansivity and T_0 is a reference temperature at which the phase densities are ρ_m^0 and ρ_f^0 . Now with Π being a deviation from hydrostatic pressure due to ρ_m^0 , rather than ρ_m (equation 3.4), (3.5) and (3.6) become

$$-\nabla \Pi + \nabla \cdot (\mu^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_m) - \phi \Delta \rho^0 \mathbf{g} - \bar{\rho \alpha} T \mathbf{g} = 0, \quad (3.10)$$

$$\phi \Delta \mathbf{v} = \frac{\phi^2}{c} \left[\nabla \left(\Pi + \mu_m \frac{1-\phi}{\phi} \nabla \cdot (\phi \Delta \mathbf{v}) \right) + \Delta \rho^0 \mathbf{g} + \rho_f^0 \alpha_f T \mathbf{g} \right], \quad (3.11)$$

where $\Delta \rho^0 = \rho_m^0 - \rho_f^0$ and $\bar{\rho \alpha} = \rho_f \alpha_f \phi + \rho_m \alpha_m (1 - \phi)$. On the one hand, $\Delta \rho^0$ may be arbitrarily large compared to $(\rho_m + \rho_f)/2$, on the other hand, we assume that the variation of each phase density with temperature is very small so that a Boussinesq approximation can be done. The T -dependent density variations only appear in the matrix momentum equation ($|\bar{\rho \alpha} T| \ll |\Delta \rho^0|$ but $|\bar{\rho \alpha} T|$ and $|\phi \Delta \rho^0|$ may be the same order). The term in $\rho_f^0 \alpha_f T$ in the Darcy equation could therefore be neglected. The Boussinesq approximation for T -dependent

density also applies to the equations of mass conservation (3.1) and (3.3) which were derived assuming constant and uniform ρ_f and ρ_m .

3.2 Generalisation for a case where the component can itself be solid or liquid

The equations were presented assuming that the metallic phase is liquid (*i.e.*, molten) and that the viscous stress is only supported by the silicate solid matrix. It is also possible to treat the case where the metal is either solid or liquid and moves together with the silicate matrix when solid by considering a temperature dependence of the permeability-related coefficient c such that $c^{-1} = 0$ below the iron melting temperature. Below the melting temperature, all of $\Delta\mathbf{v}$, $\nabla \cdot \mathbf{v}_m$ and $\nabla \cdot \mathbf{v}_f$ are identically equal to zero. In that case the parameter μ^* in front of $\boldsymbol{\tau}_m$ should be equal to 1 instead of $1 - \phi$, and equation (3.10) becomes the usual Navier-Stokes equation for a single-phase continuum with both compositional and thermal forcing.

Now we have a system of equations (3.1), (3.3), (3.7), (3.10) and (3.11), for variables ϕ , Π , T , $\phi\Delta\mathbf{v}$ and \mathbf{v}_m (or $\bar{\mathbf{v}}$; the velocity fields are linked through $\bar{\mathbf{v}} = \mathbf{v}_m - \phi\Delta\mathbf{v}$), and the following behavior of parameters c and μ^* :

- In regions below the melting temperature of iron
 - $c^{-1} = 0$ (or $\delta^2 = 0$ in dimensionless equations below)
 - $\mu^* = 1$
- In regions above the melting temperature of iron
 - c finite (equation 2.16; or $\delta^2 > 0$ in dimensionless equations below)
 - $\mu^* = 1 - \phi$

Three main simplifying assumptions are implicit in this treatment:

1. The viscosities of the pure silicate matrix and the undifferentiated iron–silicate mixture in solid state are assumed equal.
2. The melting or freezing of the metallic phase are treated in a simplified way. The phase change between the liquid and solid state takes place “within one phase”, that is, both liquid and solid iron represent the same “fluid” phase (index f in the equations) and contribute to the porosity ϕ . The terms containing the rate of phase change $\Delta\Gamma$ in the equations presented in section 2.2 thus cannot be used, as that $\Delta\Gamma$ represents the mass transfer $m \leftrightarrow f$ between the two distinct phases m and f of the two-phase continuum.

At each point the metal phase is either completely liquid or completely solid; there is no partially molten iron. The densities of the solid and liquid iron are assumed equal so that no volume change occurs during the iron phase change. This is assumed at all temperatures in accordance with the Boussinesq approximation for T -dependent densities. Note that this assumption implies a melting temperature of iron independent of pressure.

With the above assumptions:

- The average velocity $\bar{\mathbf{v}}$ remains divergence-free (3.1) irrespective of the physical state of the metallic phase (compare with equation 2.11 with a source term), and consequently (3.2) holds.
- The melting or freezing of iron does not change the porosity, therefore (3.3) does not have a source term related to phase change (unlike equation 2.12).

The melting or freezing of the iron phase should still consume/release latent heat $L\Delta\Gamma_{iron} = -T\Delta s\Delta\Gamma_{iron}$. This energy term is neglected on the left hand side of the energy equation (3.7) (compare with equation 2.21). Neglecting the latent heat is an approximation that should be acceptable, at least at first order, when one realizes that for the whole mixture the sensible heat, CT is carried by the two components but the latent heat ϕL is only carried by the metal in proportion ϕ .

Using $\phi = 30\%$, $C = 1200 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $L = 200 \text{ kJ kg}^{-1}$ at low pressure, the latent heat term represents only about a few tens of K. In the numerical simulations that we are doing, it is the total heat transport that matters and not so much the percentage of sensible to latent heat. Certainly latent heat should be included in the future, and this should not affect too much the numerical code except that another variable (the volume fraction of melted iron) will have to be included and monitored. Equilibrium phase change is also assumed, therefore the term corresponding to $\Delta\Gamma^2/L_{22}$ on the right side of 2.21) is identically zero.

3. The adiabatic temperature gradients are neglected in the energy equation. This is in agreement with the Boussinesq approximation made for the T -dependence of the densities.

3.3 Dimensionless equations

As usual in fluid dynamics, the number of parameters can be reduced by a non-dimensionalization of the equations. We introduce a characteristic length scale a . Velocities are scaled with

$V = |\Delta\rho^0|g_0a^2/\mu_m$ where g_0 is a reference magnitude of gravity, time with $\tau = a/V = \mu_m/(|\Delta\rho^0|g_0a)$ and pressures with $\Pi_0 = |\Delta\rho^0|ga$. We assume that the temperature is initially T_0 and we write the temperature as $T_{dim} = T_0 + \theta T_{nondim}$ where the temperature scale $\theta = |\Delta\rho^0|g_0a/(\overline{\rho C})$ is related to the gravitational potential energy that can be released by segregation (we used this temperature normalization because we want to study a system where the temperature variations are only or mostly related to segregation. Of course to study for example two-phase convection of a fluid heated from below the imposed temperature jump ΔT could have been more appropriate to introduce in the equations).

With this scaling the mass conservation equations with the dimensionless quantities remain identical to the dimensional equations (3.1–3.3). The momentum equations become

$$-\nabla\Pi + \nabla \cdot (\mu^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_m) - (s\phi + BT)\frac{\mathbf{g}}{g_0} = 0, \quad (3.12)$$

$$\phi \Delta \mathbf{v} = \delta^2 \phi^2 \left[\nabla \left(\Pi + \frac{1-\phi}{\phi} \nabla \cdot (\phi \Delta \mathbf{v}) \right) + (s + B_f T) \frac{\mathbf{g}}{g_0} \right], \quad (3.13)$$

where the density perturbation coming from the thermal expansivity of the fluid can be neglected in (3.13) against the solid–fluid density difference ($|\rho_f^0 \alpha_f T| \ll |\Delta\rho^0|$ or $B_f \ll |s|$). The energy equation is

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \cdot \nabla T = \frac{\nabla^2 T}{Ra} + \frac{\Delta \mathbf{v}^2}{\delta^2} + \frac{1-\phi}{\phi} (\nabla \cdot \mathbf{v}_m)^2 + \mu^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_m : \nabla \mathbf{v}_m. \quad (3.14)$$

Several dimensionless numbers were introduced in equations (3.12–3.14), namely the Rayleigh number

$$Ra = \frac{\overline{\rho C} |\Delta\rho^0| g_0 a^3}{k_T \mu_m}, \quad (3.15)$$

the square of the dimensionless compaction length

$$\delta^2 = \frac{\mu_m}{ca^2}, \quad (3.16)$$

the buoyancy numbers giving the ratio of thermal to compositional forcing of the flow

$$B = \frac{\overline{\rho \alpha} \theta}{|\Delta\rho^0|} = \frac{\overline{\rho \alpha} g_0 a}{\overline{\rho C}} \quad (3.17)$$

and

$$B_f = \frac{\rho_f^0 \alpha_f \theta}{|\Delta\rho^0|} = \frac{\rho_f^0 \alpha_f g_0 a}{\overline{\rho C}}, \quad (3.18)$$

and the sign of the density difference (this would allow us to study the cases of a fluid phase

silicate density	ρ_m		3200	kg m^{-3}
iron density	ρ_f		7000	kg m^{-3}
heat capacity	C		1000	$\text{J K}^{-1} \text{kg}^{-1}$
thermal conductivity	k_T		3	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
thermal expansion coeff.	α		$2 \cdot 10^{-5}$	K^{-1}
reference temperature	T_0		1100	K
iron melting temperature	T_{melt}		1300	K
silicate viscosity	μ_m		10^{19}	Pa s
solid iron viscosity	μ_m		10^{19}	Pa s
liquid iron viscosity	μ_f		1	Pa s
permeability coeff. (eq. 1.12)	k_0		10^{-8}	m^2
permeability exp. (eq. 1.12)	n		2	
initial porosity	ϕ_0		0.3	
density difference	$ \Delta\rho^0 $	$ \rho_m^0 - \rho_f^0 $	3800	kg m^{-3}
initial average density	$\bar{\rho}_0$	$\rho_f\phi_0 + \rho_m(1 - \phi_0)$	4340	kg m^{-3}
ref. gravity (sph. body)	g_0	$4\pi G\bar{\rho}_0 a/3$	1.9	m s^{-2}
length scale	a		1600	km
velocity scale	V	$ \Delta\rho^0 g_0 a^2/\mu_m$	60	km yr^{-1}
time scale	τ	$\mu_m/(\Delta\rho^0 g_0 a)$	27	yr
pressure scale	Π_0	$ \Delta\rho^0 g_0 a$	12	GPa
temperature scale	θ	$ \Delta\rho^0 g_0 a/(\bar{\rho}C)$	2700	K
dimensional compaction length		$\sqrt{\mu_m/c}$	320	km
Rayleigh number	Ra	$\bar{\rho}C \Delta\rho^0 g_0 a^3/(k_T\mu_m)$	$4 \cdot 10^9$	
compaction length	δ	$\sqrt{\mu_m/(ca^2)}$	0.2	
buoyancy number (mixture)	B	$\bar{\rho}\alpha g_0 a/(\bar{\rho}C)$	0.06	
buoyancy number (liquid phase)	B_f	$\rho_f^0\alpha_f g_0 a/(\bar{\rho}C)$		
sign of density difference	s	$\Delta\rho^0/ \Delta\rho^0 $	-1	

Table 3.1: Parameters and their typical values for models of metal–silicate segregation.

either lighter or denser than the solid phase)

$$s = \frac{\Delta\rho^0}{|\Delta\rho^0|}. \quad (3.19)$$

Equations (3.12) et (3.13) can be combined into one where the pressure Π does not appear,

$$\frac{\phi\Delta\mathbf{v}}{\delta^2\phi^2} = \nabla \cdot (\mu^*\boldsymbol{\tau}_m) + \nabla \cdot \left(\frac{1-\phi}{\phi} \nabla \cdot (\phi\Delta\mathbf{v}) \right) + [s(1-\phi) + (B_f - B)T] \frac{\mathbf{g}}{g_0}, \quad (3.20)$$

where a buoyancy term in $(B_f - B)T$ can be omitted in agreement with the Boussinesq approximation and because $B \sim B_T$.

3.4 Compaction in a layer

We first investigate compaction and phase separation due to gravity in a one-dimensional situation within a horizontal layer of dimensionless thickness 1 where the flow takes place and the variables spatially vary only in vertical or z -direction. We assume that the metallic phase always remains in liquid state (therefore $\mu^* = 1 - \phi$ and c is finite), gravity $\mathbf{g} = -g_0\hat{\mathbf{z}}$ acts in the negative z -direction and is constant and uniform, and we neglect thermal expansivity ($\alpha_f = \alpha_m = 0$). We exclude the thermal evolution and only solve the mechanical equations.

In the coordinate framework of the layer, the (vertical component of the) average velocity is zero

$$\bar{v} = 0, \quad \text{and therefore} \quad v_m = \phi\Delta v. \quad (3.21)$$

Equation (3.20) becomes

$$\frac{\phi\Delta v}{\delta^2\phi^2} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{(1 + \frac{4}{3}\phi)(1 - \phi)}{\phi} \frac{\partial}{\partial z} (\phi\Delta v) \right] - s(1 - \phi), \quad (3.22)$$

which is, for a known porosity $\phi(z)$ at a given time, an ordinary differential equation of order 2 for $\phi\Delta v$.

An analytical solution

$$\phi\Delta v = -s\delta^2\phi_0^2(1 - \phi_0) \left[1 + \frac{\sinh\left(\frac{1}{h}\right)\sinh\left(\frac{z}{h}\right)}{\cosh\left(\frac{1}{h}\right) + 1} - \cosh\left(\frac{z}{h}\right) \right], \quad (3.23)$$

is found in the case of uniform porosity $\phi(z) = \phi_0$ with boundary conditions $\phi\Delta v = 0$ at $z = 0$ and $z = 1$, where the length scale h is related to the compaction length δ and the porosity ϕ_0 by

$$h^2 = \delta^2\phi_0 \left(1 + \frac{4}{3}\phi_0\right) (1 - \phi_0). \quad (3.24)$$

This solution can be used to check the numerical solver.

The numerical algorithm is as follows. For a given porosity we calculate $\phi\Delta v$ from equation (3.22) using a tridiagonal solver with homogeneous boundary conditions prescribed at the two spatial limits ($\phi\Delta v = 0$ at $z = 0$ et $z = 1$). Then $\phi\Delta v$ is used to advance porosity in time by equation (3.3) with $\bar{v} = 0$ written in the form

$$\frac{\partial}{\partial t}(1 - \phi) = -\frac{\partial}{\partial z}[(1 - \phi)\phi\Delta v], \quad (3.25)$$

which is an advection equation for $1 - \phi$ with non-uniform advection velocity of nonzero divergence $\phi\Delta v$. The need for accurate advection of porosity requires some care with solving

(3.25); the advection schemes are discussed in section 3.7.1. We use a second order, time implicit, conservative, shock preserving, numerical scheme, that we adapted from the superbee method (Sweby, 1984; Roe, 1985).

Figures 3.1 and 3.2 show the evolution of porosity ϕ and the Darcy velocity $\phi\Delta v$ which is equal to the matrix velocity v_m calculated with a dimensionless compaction length $\delta = 0.2$. The initial porosity is uniform and equal to $\phi_0 = 0.3$. The corresponding animations can be found at <http://geo.mff.cuni.cz/~sramek/movies/>.

Figure 3.3 shows the evolution of the average porosity $\langle\phi\rangle_{diff}$ in the bottom ϕ_0 -fraction of the layer; the initial value of $\langle\phi\rangle_{diff}$ is therefore ϕ_0 and $\langle\phi\rangle_{diff}$ equal to 1 corresponds to complete differentiation, where pure iron phase ($\phi = 1$) in the bottom part of the layer is overlain with pure silicate phase ($\phi = 0$).

The average porosity in the bottom part of the layer initially increases in roughly linear manner until $\langle\phi\rangle_{diff}$ reaches around 0.8 at dimensionless time of approximately 100 (or 27 kyr). The growth of $\langle\phi\rangle_{diff}$ then slows down, $\langle\phi\rangle_{diff}$ reaches 0.9 at $t = 153$, 0.95 at $t = 270$ and 0.98 at $t = 725$. The later stages of differentiation are characterized by a small amount (few %) of the iron phase being trapped in the top layer and slowly moving downward in the form of travelling porosity waves.

Similar results of 1-D compaction in a confined layer using the equations MK84 (section 2.1) with a constant bulk viscosity were obtained by McKenzie (1984) and Richter & McKenzie (1984).

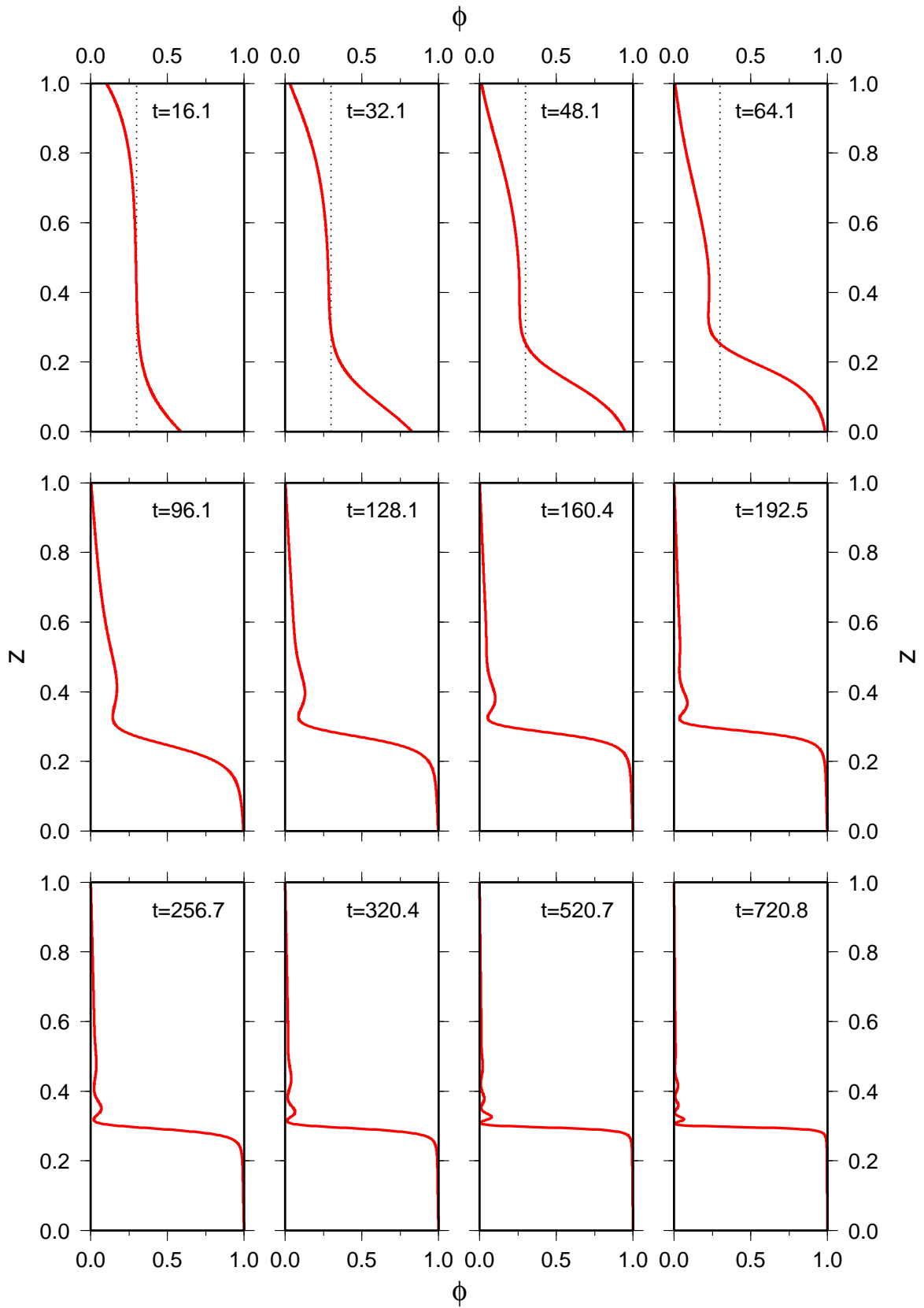


Figure 3.1: Evolution of porosity in a flat horizontal layer at constant gravity. The initial uniform porosity is $\phi_0 = 0.3$. Calculated with the compaction length $\delta = 0.2$, on a grid with 1000 points, with the *superbee* advection scheme and the Courant number $\max |\phi \Delta v| \Delta t / \Delta x = 0.4$.

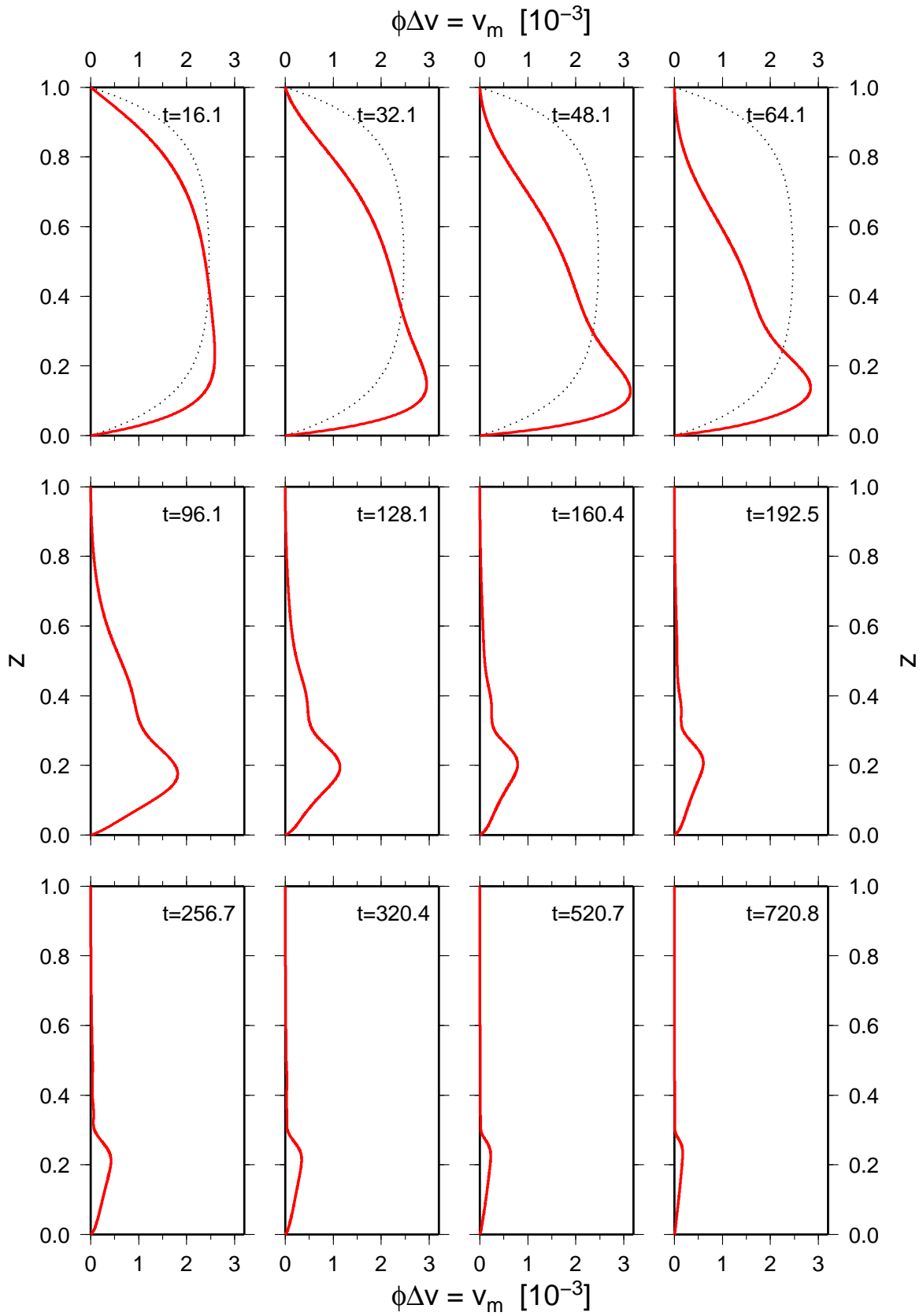


Figure 3.2: Evolution of the Darcy velocity $\phi\Delta v$, equal to the matrix velocity v_m , in a flat horizontal layer at constant gravity. Same parameters ($\phi_0 = 0.3$, $\delta = 0.2$) as in Figure 3.1.

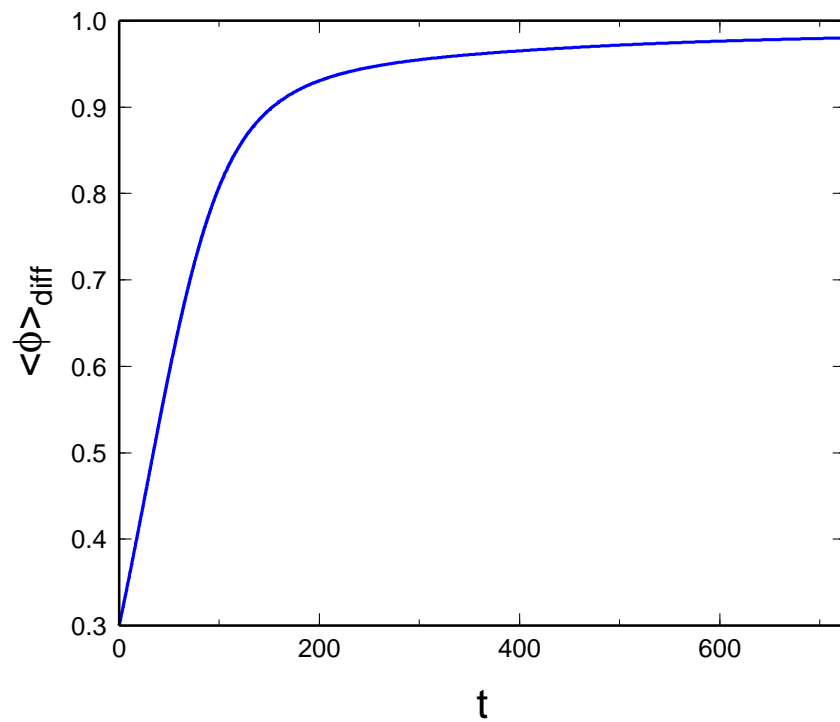


Figure 3.3: Evolution of the average porosity $\langle \phi \rangle_{diff}$ in the bottom ϕ_0 -fraction of the layer. Initial porosity ϕ_0 is uniform equal to 0.3. The value of $\langle \phi \rangle_{diff} = 1$ corresponds to complete differentiation. The parameters of the calculation are given in the caption of Figure 3.1.

3.5 Compaction of a spherically symmetric body

In a spherically symmetric case where movements are constrained to the radial (r -) direction and all spatially variable quantities only vary with the radius r , the mass continuity (3.1) in spherical polar coordinates becomes

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \bar{v}) = 0, \quad (3.26)$$

which gives $\bar{v} = A/r^2$, and a solution that is not singular at the origin must have $A = 0$. Therefore (3.21) ($\bar{v} = 0$) remains valid.

We need to calculate $\nabla \cdot [(1 - \phi)\underline{\tau}_m]$ which is present in equation (3.20), in a spherically symmetric case. The deviatoric viscous stress tensor is

$$\underline{\tau}_m = \frac{2}{3} \mu_m r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_m}{r} \right) \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

The only nonzero element of the vector $\nabla \cdot [(1 - \phi)\underline{\tau}_m]$ is the radial component

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [(1 - \phi)\underline{\tau}_m] \Big|_{rad} &= \frac{\partial}{\partial r} [(1 - \phi)\tau_{rr}] + \frac{1 - \phi}{r} (2\tau_{rr} - \tau_{\vartheta\vartheta} - \tau_{\varphi\varphi}) \\ &= \frac{4}{3} \mu_m \frac{\partial}{\partial r} \left[(1 - \phi)r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_m}{r} \right) \right] + 4\mu_m (1 - \phi) \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_m}{r} \right) \\ &= \frac{4}{3} \mu_m \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1 - \phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_m) \right] + 4\mu_m \frac{v_m}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r}. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Equation (3.20) becomes

$$\frac{\phi \Delta v}{\delta^2 \phi^2} = \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{(1 + \frac{4}{3}\phi)(1 - \phi)}{\phi} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \phi \Delta v) \right] - sg(1 - \phi), \quad (3.29)$$

where $g = g(r, t)$ is the magnitude of the acceleration of gravity which acts toward the center and varies with radius and evolves in time as the differentiation proceeds. It is scaled with the surface value g_0 (used to calculate the various scaling and dimensionless parameters in Table 3.1), therefore $g = 1$ at the surface ($r = 1$).

An analytical solution in the case of uniform porosity $\phi(r) = \phi_0$, therefore uniform average density and $g = r$, with boundary conditions $\phi \Delta v = 0$ at $r = 0$ and $r = 1$ is

$$\phi \Delta v = -s\delta^2 \phi_0^2 (1 - \phi_0) \left[r - \frac{1}{r} \frac{\cosh\left(\frac{r}{h}\right) - \frac{h}{r} \sinh\left(\frac{r}{h}\right)}{\cosh\left(\frac{1}{h}\right) - h \sinh\left(\frac{1}{h}\right)} \right], \quad (3.30)$$

where the length scale h is defined in (3.24).

The numerical algorithm is similar to the one employed in the previous problem with a horizontal layer. We solve (3.29) using a tridiagonal solver. Then we update the porosity. The equation of porosity evolution (3.3) in spherically symmetric case and $\bar{v} = 0$ writes

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} [r^2 \phi (1 - \phi) \Delta v], \quad (3.31)$$

which can be written as an advection equation for $1 - \phi$

$$\frac{\partial}{\partial t} (1 - \phi) = - \frac{\partial}{\partial r} [(1 - \phi) \phi \Delta v] - \frac{2}{r} (1 - \phi) \phi \Delta v \quad (3.32)$$

with advection velocity $\phi \Delta v$ and a source term $-2(1 - \phi) \phi \Delta v / r$.

After each porosity update, the dimensionless gravity g has to be recalculated from

$$g(r) = \frac{3}{r} \left(1 - \phi_0 \frac{\Delta \rho}{\rho_m} \right)^{-1} \int_0^r \left(1 - \phi(r') \frac{\Delta \rho}{\rho_m} \right) r'^2 dr'. \quad (3.33)$$

Figures 3.4, 3.5 and 3.6 show the evolution of porosity ϕ , the Darcy velocity $\phi \Delta v$ (which is equal to the matrix velocity v_m) and the gravity g calculated with a dimensionless compaction length $\delta = 0.2$ and with initial uniform porosity $\phi_0 = 0.3$. The radius of the metallic core after complete segregation is $\phi_0^{1/3} \sim 0.7$ of the total radius. Again, the corresponding animations can be found at <http://geo.mff.cuni.cz/~sramek/movies/>.

3.6 1D segregation of the core

Figure 3.7 shows the evolution of average porosity $\langle \phi \rangle_{diff}$ calculated over a centered spherical volume that is a ϕ_0 -fraction of the total volume (*i.e.*, over the “entirely differentiated core” volume); the initial value of $\langle \phi \rangle_{diff}$ is ϕ_0 and $\langle \phi \rangle_{diff} = 1$ indicates complete differentiation. The progress of differentiation with time is very similar to the case with a layer (Figure 3.3). The times at which $\langle \phi \rangle_{diff}$ reaches 0.8, 0.9, 0.95 and 0.98 are 99, 165, 307 and 951, respectively.

At $t = 0$ the dimensional fluid velocity is typically of the order of the Darcy velocity, $v_D = \phi \Delta \rho g k_0 / \mu_f$, and the core growth time is of the order of a / v_D . This is about 100 in dimensionless units and Figure 3.7 agrees near $t = 0$ with this estimate. For $t > 100$ the efficiency of core formation decreases as the equivalent bulk viscosity of the matrix increases as $1/\phi$. In any case the dimensional time of the core formation remains very short, of the order of 10 kyr.

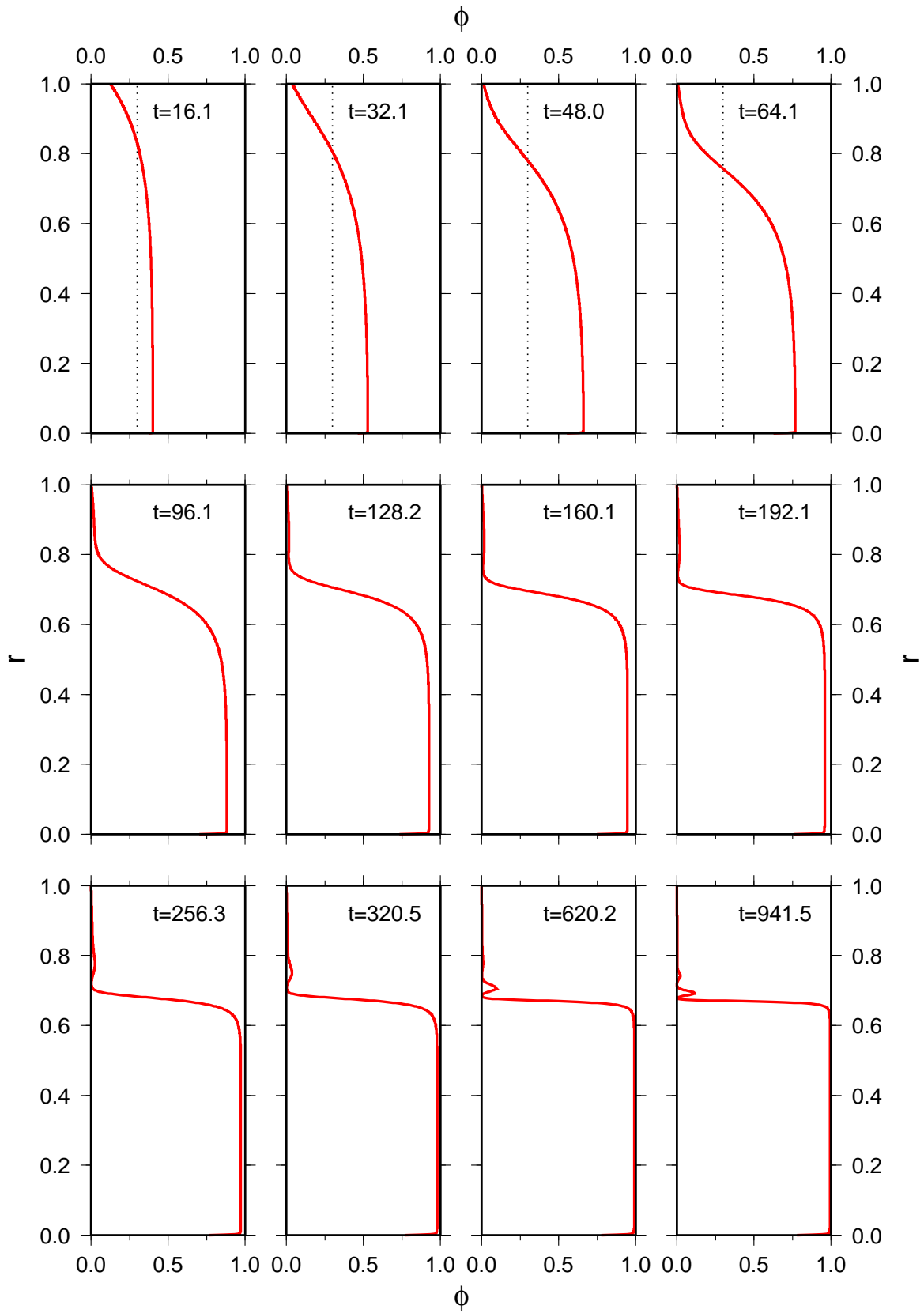


Figure 3.4: Evolution of porosity in a spherically symmetric body. The initial uniform porosity is $\phi_0 = 0.3$. Calculated with the compaction length $\delta = 0.2$, on a grid with 1000 points, with the *superbee* advection scheme and the Courant number $\max |\phi \Delta v| \Delta t / \Delta x = 0.4$.

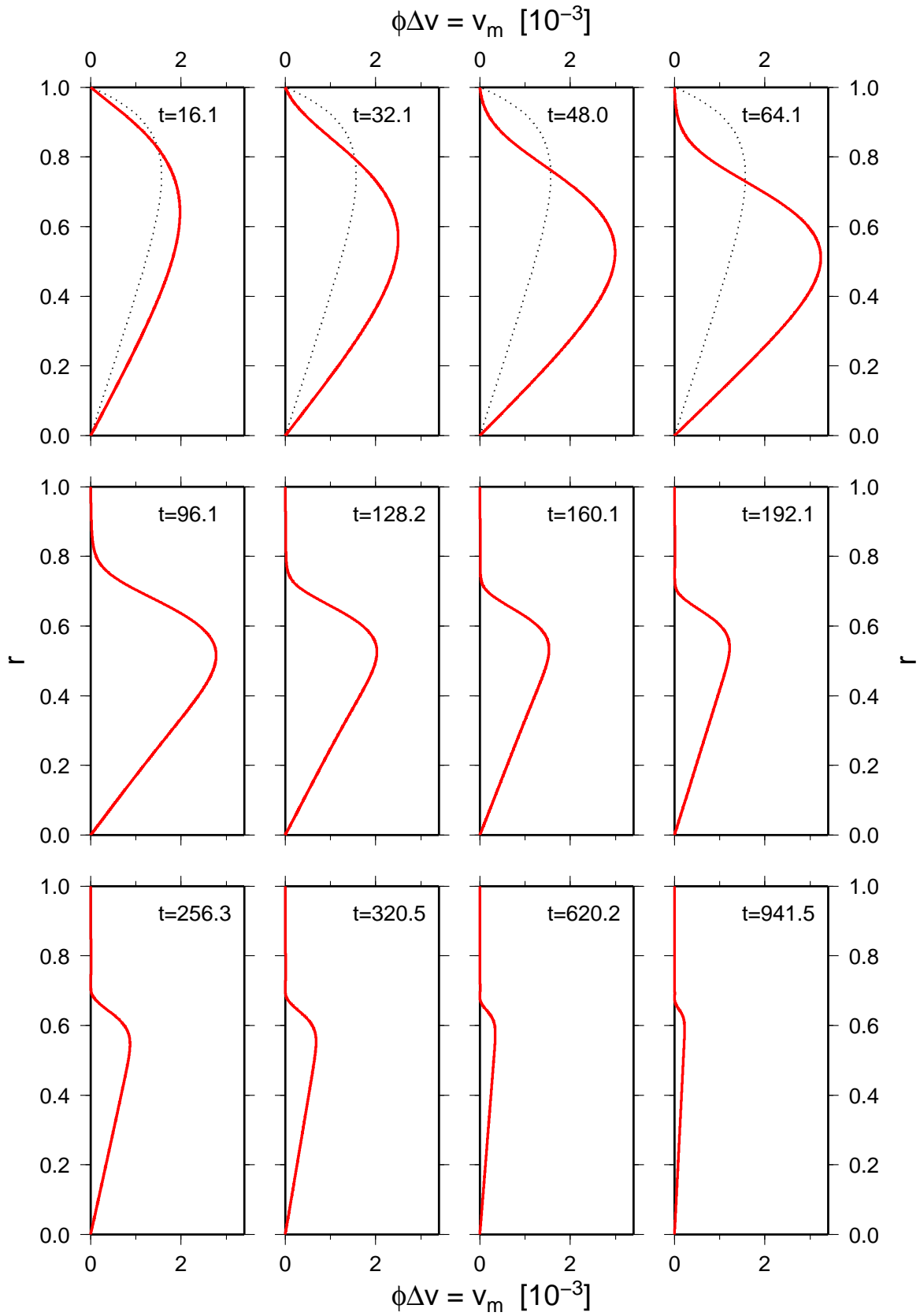


Figure 3.5: Evolution of the Darcy velocity $\phi\Delta v$, equal to the matrix velocity v_m , in a spherically symmetric body. Same parameters ($\phi_0 = 0.3$, $\delta = 0.2$) as in Figure 3.4.

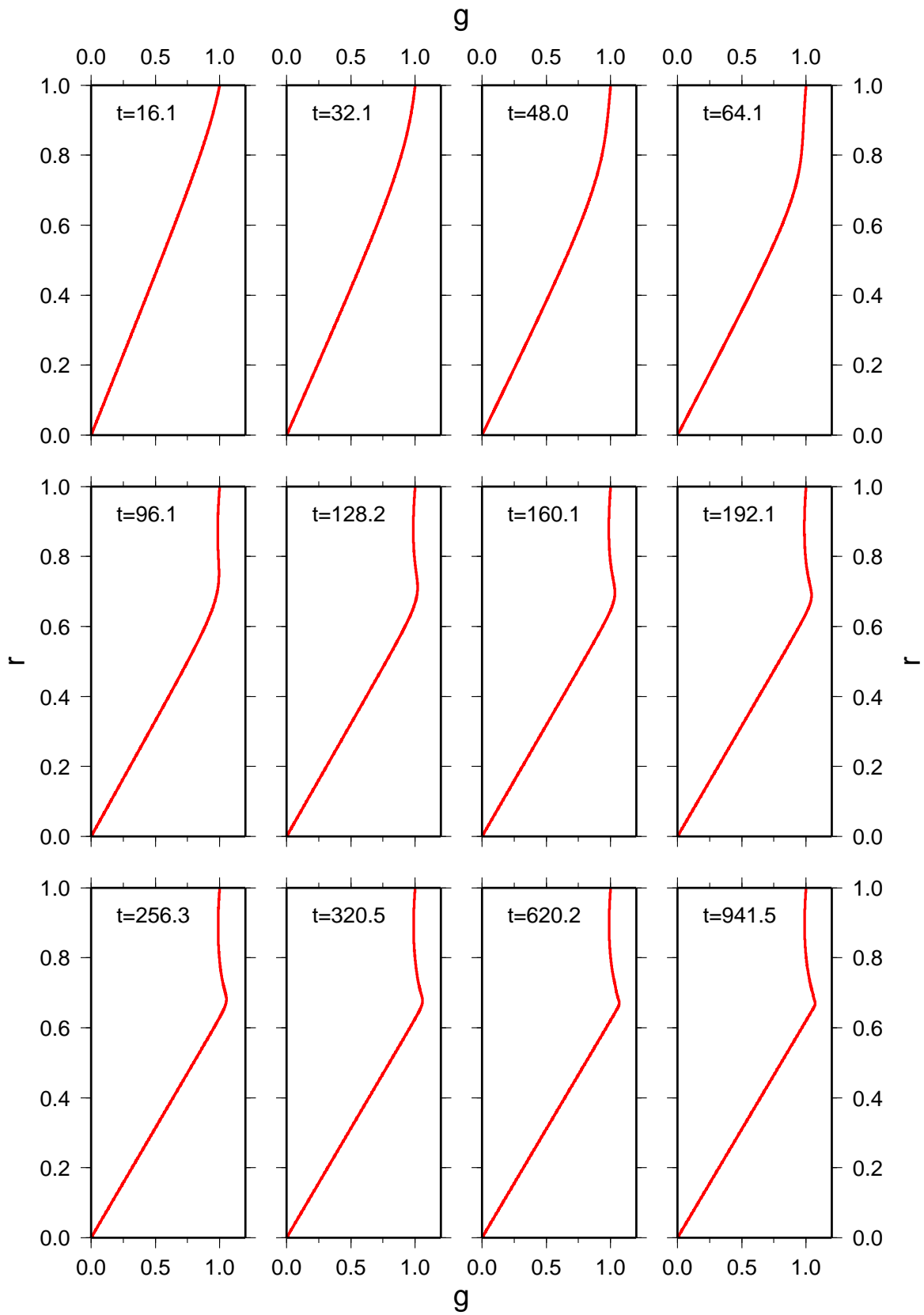


Figure 3.6: Evolution of gravity g in a spherically symmetric body. Same parameters ($\phi_0 = 0.3$, $\delta = 0.2$) as in Figure 3.4.

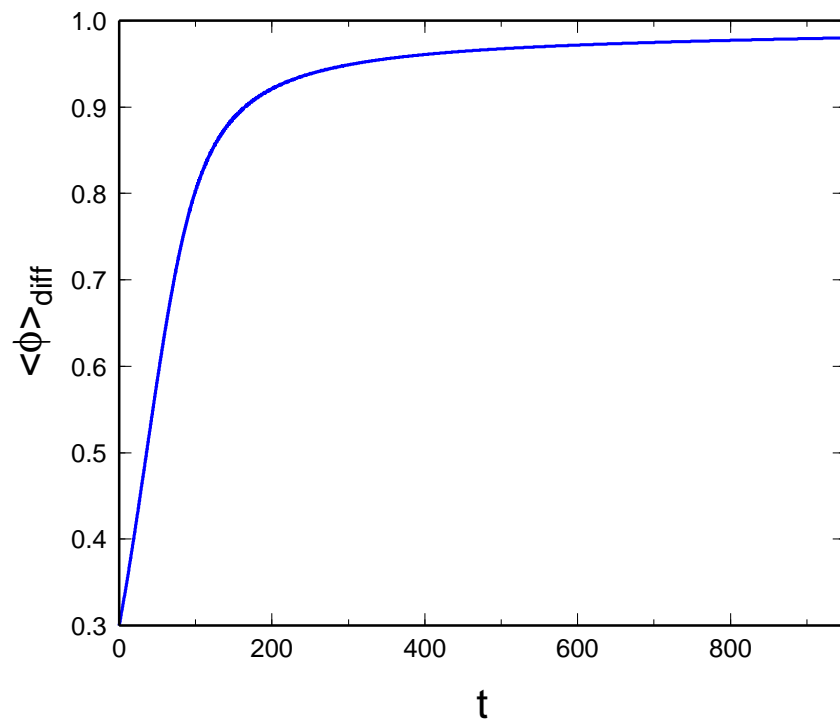


Figure 3.7: Evolution of the average porosity $\langle \phi \rangle_{diff}$ calculated over a centered spherical volume that is a ϕ_0 -fraction of the total volume. The initial uniform porosity ϕ_0 is equal to 0.3. The value of $\langle \phi \rangle_{diff} = 1$ corresponds to complete differentiation. The parameters of the calculation are given in the caption of Figure 3.4.

3.7 2-D model

Of course during differentiation, a planet does not necessarily keep a radial structure. In order to address the potential problem of interaction between convection and compaction, we present a numerical model of two-phase convection and phase separation in two-dimensional case in Cartesian geometry. The spatial variation of all quantities, and therefore the flow is constrained to the (x, z) -plane. We include also the evolution of temperature according to equation (3.7). In 2D, we cannot take into account the self-gravitation (*i.e.*, the fact that gravity changes during differentiation) and we simply assume gravity to be uniform and constant.

We decompose the matrix velocity \mathbf{v}_m into incompressible and irrotational parts \mathbf{v}_1 and \mathbf{v}_2 and introduce two scalar functions Ψ_1 and Ψ_2 such that

$$\mathbf{v}_m = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 = \nabla \times (\Psi_1 \hat{\mathbf{y}}) + \nabla \Psi_2 = \left(-\frac{\partial \Psi_1}{\partial z} + \frac{\partial \Psi_2}{\partial x}, \frac{\partial \Psi_1}{\partial x} + \frac{\partial \Psi_2}{\partial z} \right); \quad (3.34)$$

Ψ_1 is therefore the stream function of the incompressible flow field and Ψ_2 is the velocity potential of the irrotational part of the flow (see Figure 3.8). The convective flow is tangent to the level lines of Ψ_1 . The compaction flow is perpendicular to the level lines of Ψ_2 . The matrix velocity (and the Darcy velocity; 3.1) divergence is only related to Ψ_2 through Poisson's equation

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_m = \nabla \cdot (\phi \Delta \mathbf{v}) = \nabla \cdot \mathbf{v}_2 = \nabla^2 \Psi_2. \quad (3.35)$$

With a first guess of the compressible velocity field, taking the curl of (3.12), where $\nabla \cdot [\mu^* \boldsymbol{\tau}_2(\mathbf{v}_2)]$ is considered as a known load (and will be updated by iterations), one gets

$$\mu^* \nabla^4 \Psi_1 + \mathcal{F}(\Psi_1) = \left(s \frac{\partial \phi}{\partial x} + B \frac{\partial T}{\partial x} \right) g_z - \left(s \frac{\partial \phi}{\partial z} + B \frac{\partial T}{\partial z} \right) g_x + \mathcal{G}(\Psi_2). \quad (3.36)$$

The two operators \mathcal{F} and \mathcal{G} are

$$\mathcal{F}(\Psi_1) = 2 \nabla \mu^* \cdot \nabla \nabla^2 \Psi_1 + \tilde{\nabla}^2 \mu^* \tilde{\nabla}^2 \Psi_1 + 4 \frac{\partial^2 \mu^*}{\partial x \partial z} \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x \partial z}, \quad (3.37)$$

and

$$\mathcal{G}(\Psi_2) = 2 \left(\frac{\partial \mu^*}{\partial z} \frac{\partial}{\partial x} \nabla^2 \Psi_2 - \frac{\partial \mu^*}{\partial x} \frac{\partial}{\partial z} \nabla^2 \Psi_2 - \frac{\partial^2 \mu^*}{\partial x \partial z} \tilde{\nabla}^2 \Psi_2 + \tilde{\nabla}^2 \mu^* \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x \partial z} \right), \quad (3.38)$$

where

$$\tilde{\nabla}^2 = \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (3.39)$$

The operators \mathcal{F} and \mathcal{G} cancel when the viscosity μ^* is uniform. The equation (3.36) is

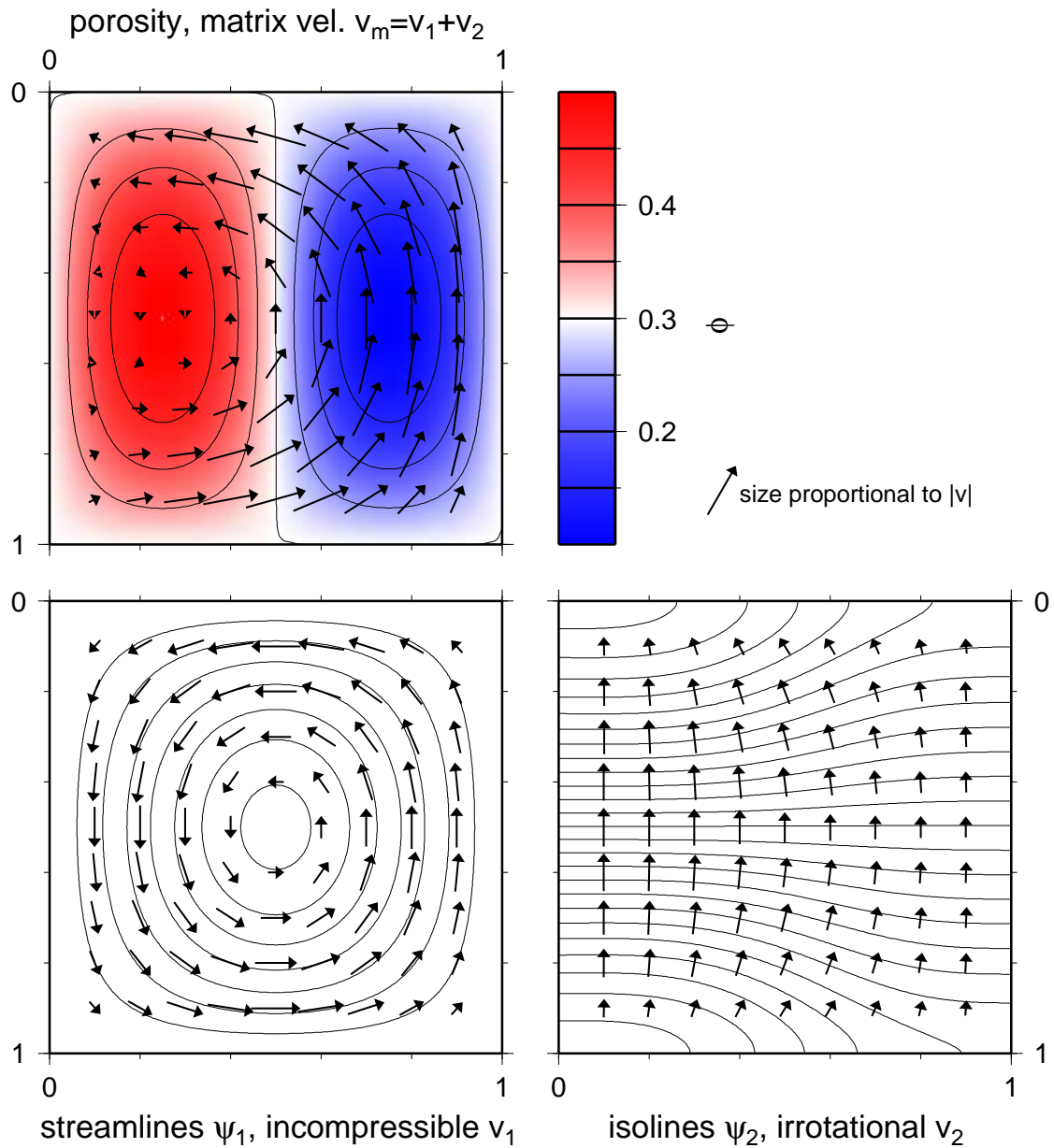


Figure 3.8: The incompressible convective flow (bottom left panel) and the irrotational (or potential) compaction flow (bottom right) driven by the compositional density heterogeneity due to the porosity distribution shown in the top panel. The fluid phase is denser ($\rho_f > \rho_m$). Isolines of ϕ , Ψ_1 and Ψ_2 as well as velocity vectors are shown. The incompressible matrix velocity \mathbf{v}_1 is parallel to the streamlines (isolines of Ψ_1); the irrotational matrix velocity \mathbf{v}_2 is perpendicular to the isolines of potential Ψ_2 . The total matrix velocity vector field $\mathbf{v}_m = \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2$ is shown in the top panel.

solved for Ψ_1 by putting all the finite difference expressions of the operator $\nabla^4 + \mathcal{F}$ into a single large matrix that is exactly inverted.

Knowing Ψ_1 and Ψ_2 , we then compute the pressure gradient from (3.12):

$$\frac{\partial \Pi}{\partial x} = -\mu^* \frac{\partial}{\partial z} \nabla^2 \Psi_1 + \frac{4}{3} \mu^* \frac{\partial}{\partial x} \nabla \cdot (\phi \Delta \mathbf{v}) - (s\phi + BT)g_x + (\boldsymbol{\tau}_m \cdot \nabla \mu^*)_x, \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial z} = +\mu^* \frac{\partial}{\partial x} \nabla^2 \Psi_1 + \frac{4}{3} \mu^* \frac{\partial}{\partial z} \nabla \cdot (\phi \Delta \mathbf{v}) - (s\phi + BT)g_z + (\boldsymbol{\tau}_m \cdot \nabla \mu^*)_z. \quad (3.41)$$

The Darcy equation (3.13) is then solved iteratively (inner loop iteration) by relaxation using a tridiagonal solver on alternate directions, following

$$\begin{aligned} \left(1 - \delta^2 \phi^2 \left[\frac{4}{3} \mu^* \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1 - \phi}{\phi} \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \right) (\phi \Delta v_x) \\ = \delta^2 \phi^2 ([s(1 - \phi) + (B_f - B)T] g_x + \mathcal{S}_x), \\ \left(1 - \delta^2 \phi^2 \left[\frac{4}{3} \mu^* \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1 - \phi}{\phi} \frac{\partial}{\partial z} \right) \right] \right) (\phi \Delta v_z) \\ = \delta^2 \phi^2 ([s(1 - \phi) + (B_f - B)T] g_z + \mathcal{S}_z), \end{aligned} \quad (3.42)$$

where the two source terms are

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_x &= -\mu^* \frac{\partial}{\partial z} \nabla^2 \Psi_1 + \frac{4}{3} \mu^* \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} (\phi \Delta v_z) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1 - \phi}{\phi} \frac{\partial}{\partial z} (\phi \Delta v_z) \right) \\ &\quad - 2 \frac{\partial \mu^*}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x \partial z} - \frac{2}{3} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{1}{3} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial z^2} \right) + \frac{\partial \mu^*}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial z^2} + 2 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x \partial z} \right), \\ \mathcal{S}_z &= +\mu^* \frac{\partial}{\partial x} \nabla^2 \Psi_1 + \frac{4}{3} \mu^* \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} (\phi \Delta v_x) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1 - \phi}{\phi} \frac{\partial}{\partial x} (\phi \Delta v_x) \right) \\ &\quad + \frac{\partial \mu^*}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial z^2} + 2 \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x \partial z} \right) + 2 \frac{\partial \mu^*}{\partial z} \left(\frac{\partial^2 \Psi_1}{\partial x \partial z} - \frac{1}{3} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial x^2} + \frac{2}{3} \frac{\partial^2 \Psi_2}{\partial z^2} \right). \end{aligned} \quad (3.43)$$

In the two source terms, Ψ_2 is supposed known, Ψ_1 is the solution of (3.36) and $\phi \Delta \mathbf{v}$ is updated from the previous iteration. In (3.42), the driving forces of the right side are related to the density difference between the two phases and also to the pressure gradients (implicitly in \mathcal{S}_x and \mathcal{S}_z and also in the differential operators on the left of 3.42) that are essential to focuss the liquid phase toward the regions of matrix divergence (Spiegelman & McKenzie, 1987).

The divergence of the total matrix velocity is then computed and a new estimate of Ψ_2 is obtained by solving Poisson's equation (3.35). This process is iterated until the convergence of the mechanical equations (outer loop iteration). Porosity and temperature are then updated using (3.3) and (3.7).

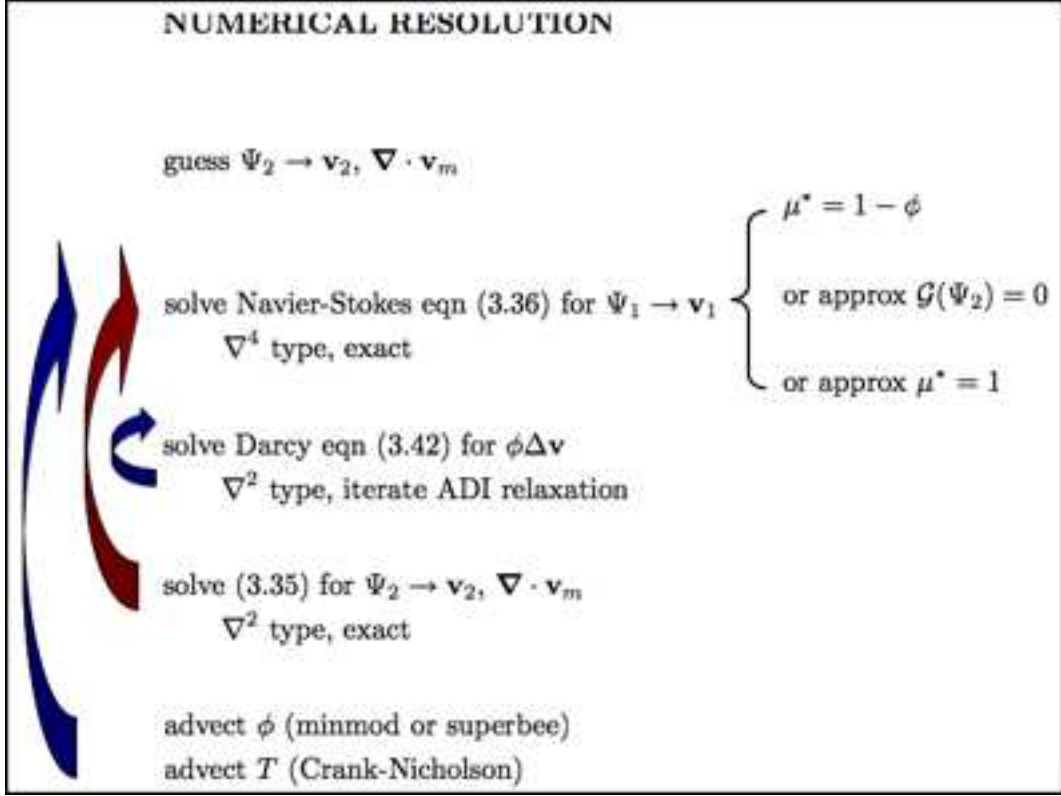


Figure 3.9: Flowchart of the numerical resolution in 2-D. The iteration loop represented by the red arrow is dropped if the approximation 1 ($\mathcal{G}(\Psi_2) = 0$) or approximation 2 ($\mu^* = 1$) are made. Approximation 2 suppresses all lateral viscosity variations which increases significantly the code velocity. These viscosity variations are accounted for in the incompressible field in approximation 1.

The choice of boundary conditions is somewhat problematic. Ideally one would like to ascribe conditions directly on the average velocity and total stresses. This would couple the boundary conditions of (3.36), (3.42) and (3.35). For simplicity, we implement separately the boundary conditions for the incompressible and compressible components of \mathbf{v}_m . We use free slip (hence a zero normal velocity and a zero shear stress) conditions for both \mathbf{v}_1 and \mathbf{v}_2 (and thus implicitly for \mathbf{v}_f).

The flowchart of the numerical resolution is shown in Figure 3.9. The time of execution of the program can be decreased by orders of magnitude if one assumes $\mu^* = 1$. In this case the term $\mathcal{G}(\Psi_2)$ is zero. This decouples the equation (3.36) for Ψ_1 from the solution of Ψ_2 and avoid the outer loop iterations at each time step (red arrow in Figure 3.9). Moreover, the term $\mathcal{F}(\Psi_1)$ in the same equation is also zero which allows to compute and store the matrix corresponding to the inverse of Navier-Stokes operator, ∇^4 just once. A more accurate approximation is to keep a nonzero $\mathcal{F}(\Psi_1)$ (*i.e.*, to account for lateral viscosity variations in the incompressible flow) but neglect $\mathcal{G}(\Psi_2)$ (*i.e.*, the coupling between the incompressible and compressible flows). This corresponds to prescribing a variable viscosity $\mu_1^* = 1 - \phi$ to

the viscous stress $\underline{\boldsymbol{\tau}}_1$ which comes from the incompressible velocity field \mathbf{v}_1 , but a constant viscosity $\mu_2^* = 1$ to $\underline{\boldsymbol{\tau}}_2$ coming from the irrotational velocity \mathbf{v}_2 . This approximation avoids the outer loop iterations but the Navier-Stokes operator, $\nabla^4 + \mathcal{F}$, has to be computed at each time step. This approximation is very similar to that done by Schmeling (2000) in what he calls the ‘‘compaction Boussinesq approximation’’.

The approximations are summarized below.

Full solution

- Both $\mathcal{F}(\Psi_1)$ and $\mathcal{G}(\Psi_2)$ are kept.
- $\mu^* = 1 - \phi$
- The solutions of Ψ_1 and Ψ_2 are coupled, and the matrix of the operator $\nabla^4 + \mathcal{F}$ has to be calculated several times in each time step until the combined solution for Ψ_1 and Ψ_2 converges.

Approximation 1

- $\mathcal{G}(\Psi_2)$ is put equal to zero, but $\mathcal{F}(\Psi_1)$ is kept.
- This corresponds to writing $\mu^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_m = \mu_1^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_1 + \mu_2^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_2$, where $\underline{\boldsymbol{\tau}}_1 = \underline{\boldsymbol{\tau}}_1(\mathbf{v}_1)$ and $\underline{\boldsymbol{\tau}}_2 = \underline{\boldsymbol{\tau}}_2(\mathbf{v}_2)$, in the momentum equation (3.12) and the energy equation (3.14), with $\mu_1^* = 1 - \phi$ and $\mu_2^* = 1$.
- The solutions of Ψ_1 and Ψ_2 are decoupled, but the matrix of the operator $\nabla^4 + \mathcal{F}$ has to be calculated once for each time step because \mathcal{F} , which depends on $\partial\mu_1^*$, evolves.

Approximation 2

- Both $\mathcal{F}(\Psi_1)$ and $\mathcal{G}(\Psi_2)$ are put equal to zero.
- This corresponds to having $\mu^* = 1$.
- The solutions of Ψ_1 and Ψ_2 are decoupled, and the matrix of the operator $\nabla^4 + \mathcal{F}$ is only calculated once.

The variables are discretized in finite difference equations on a grid where Ψ_1 is evaluated at the grid cell corners and Ψ_2 , ϕ and T at centers of the cells. The vertical (z -) components of the velocities \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 , \mathbf{v}_m , \mathbf{v}_f , $\bar{\mathbf{v}}$ and $\phi \Delta \mathbf{v}$ are calculated in the middle of the horizontal cell faces, the horizontal (x -) velocity components are evaluated in the middle of the vertical sides; see Figure 3.10. This grid insures that all the spatial derivatives are second order accurate. The grid is supplemented with one row of ‘‘ghost’’ cells around the boundaries that facilitate the implementation of the boundary conditions.

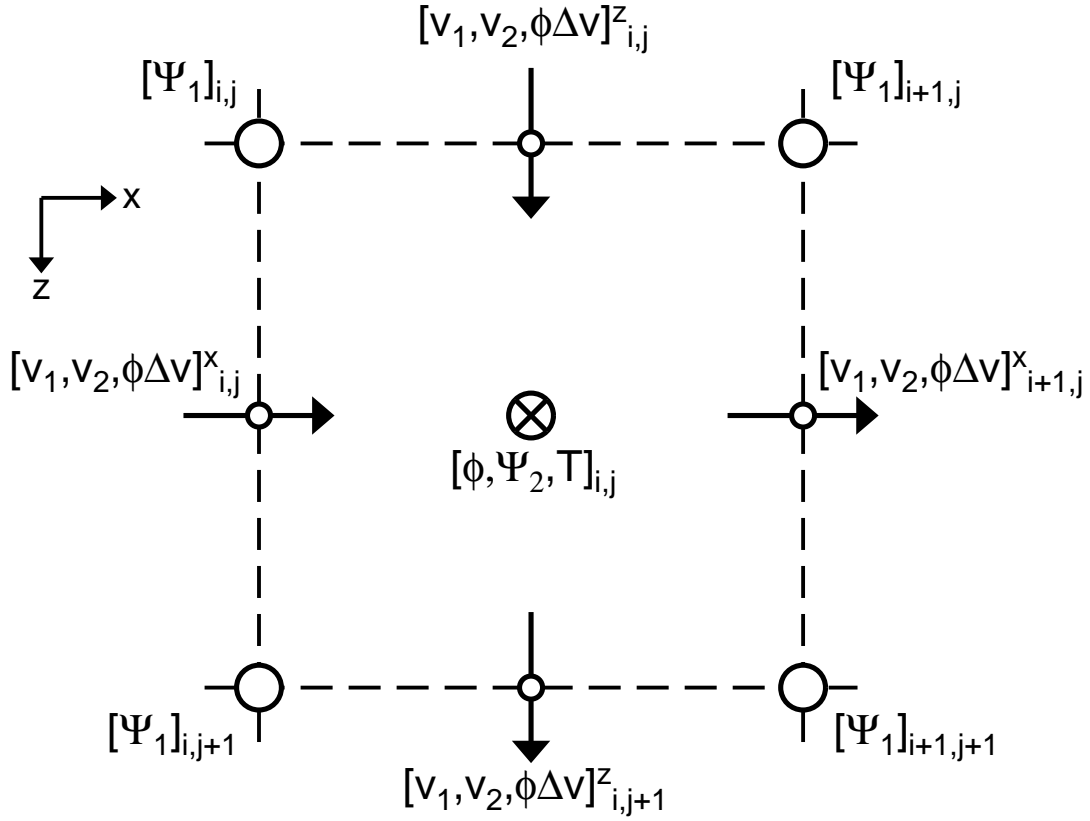


Figure 3.10: An inner grid cell of the 2-D Cartesian grid. Porosity ϕ , potential Ψ_2 , pressure Π and temperature T are calculated at the center of the cell; stream function Ψ_1 is calculated at the corner points; the incompressible and irrotational velocities \mathbf{v}_1 and \mathbf{v}_2 as well as the Darcy velocity $\phi \Delta \mathbf{v}$ are calculated in the middle of the cell faces – x -components on the vertical faces and z -components on the horizontal faces.

The last step of the numerical algorithm consists of advancing the porosity and the temperature in time using the advection equation with a source term (3.3) for porosity evolution and the advection-diffusion equation with source terms (3.14) for temperature. The numerical treatment of the time stepping is discussed in the following section.

3.7.1 Advection schemes

The advection of porosity requires an accurate non-oscillatory numerical scheme that is conservative and has negligible numerical dissipation. The scheme should be able to handle extreme porosity variations or shocks. We briefly discuss a second order, time implicit, conservative, shock preserving, numerical scheme adapted from the so called “total variation diminishing (TVD) flux limiting schemes” (*e.g.*, Sweby, 1984; Pietrzak, 1998) that we use. These (TVD flux limiting) schemes supplement a low (first) order scheme with the introduction of an additional flux. This additional flux is a difference between the flux of a higher order scheme and that of the low order scheme “limited” (or “corrected”) in such a way as to ensure an oscillation

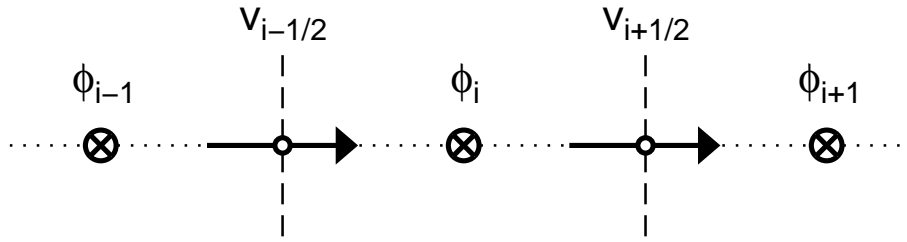


Figure 3.11: 1D discretization used in the discussion of the porosity advection scheme.

free scheme (Sweby, 1984).

Here we consider an advection equation without a source term in 1-D

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\partial(\phi \bar{v})}{\partial x} \equiv -\frac{\partial F}{\partial x}, \quad (3.44)$$

where the flux $F = \phi \bar{v}$ was defined.

We work on an equidistant staggered grid of spacing Δx where ϕ is evaluated at centers of 1-D “cells” ($\dots, \phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}, \dots$) and \bar{v} has values at mid-points or boundaries of the cells ($\dots, \bar{v}_{i-1/2}, \bar{v}_{i+1/2}, \dots$) (see Figure 3.11). Note that this indexing of velocities is different from what we use in the actual numerical program, where all array indices are integers. We choose to use the more physical half-step indexing of velocities in this section as it reveals the symmetry of the discretization. When we go from the presented algorithm to coding, we need to replace $\bar{v}_{i-1/2}$ with $\bar{v}_{[i]}$ on the mesh (“add 1/2 to the index”; compare Figures 3.10 and 3.11).

In order to attain precision of second order in time the partial derivative with respect to time is centered midway between current time level t and next time level $t + \Delta t$, *i.e.*,

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial t} \right|_i^{t+\Delta t/2} \approx \frac{\phi_i(t + \Delta t) - \phi_i(t)}{\Delta t}. \quad (3.45)$$

The right-hand side of (3.44) to be approximated is therefore $-\partial F/\partial x|_i^{t+\Delta t/2}$ and is calculated as average of $-\partial F/\partial x_i$ at times t and $t + \Delta t$, *i.e.*,

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_i^{t+\Delta t/2} \approx \frac{1}{2} \left(\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_i^t + \left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_i^{t+\Delta t} \right). \quad (3.46)$$

The spatial derivative of the flux F centered in the i -th cell is approximated by (we omit the time indexing below)

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_i \approx \frac{1}{\Delta x} \left(F_{i+1/2}^+ + F_{i+1/2}^- - F_{i-1/2}^+ - F_{i-1/2}^- \right), \quad (3.47)$$

where

$$F_{i+1/2}^+ = v_{i+1/2}^+ \phi_{i+1/2}^+, \quad (3.48)$$

$$F_{i+1/2}^- = v_{i+1/2}^- \phi_{i+1/2}^-. \quad (3.49)$$

In these equations the superscripts indicate the advection direction,

$$v_{i+1/2}^+ = \frac{1}{2} (\bar{v}_{i+1/2} + |\bar{v}_{i+1/2}|), \quad (3.50)$$

$$v_{i+1/2}^- = \frac{1}{2} (\bar{v}_{i+1/2} - |\bar{v}_{i+1/2}|), \quad (3.51)$$

(therefore only one of v^+ and v^- can be different from zero at any midpoint), and

$$\phi_{i+1/2}^+ = \phi_i + \frac{\lambda_{i+1/2}^+}{2} (\phi_{i+1} - \phi_i) \quad (3.52)$$

$$\phi_{i+1/2}^- = \phi_{i+1} + \frac{\lambda_{i+1/2}^-}{2} (\phi_i - \phi_{i+1}). \quad (3.53)$$

The approximation of the advection term (3.47) can be therefore written as

$$\left. \frac{\partial F}{\partial x} \right|_i \approx \frac{1}{\Delta x} (a_i \phi_{i-1} + b_i \phi_i + c_i \phi_{i+1}), \quad (3.54)$$

where

$$a_i = -v_{i-1/2}^+ \left(1 - \frac{\lambda_{i-1/2}^+}{2} \right) - \frac{v_{i-1/2}^- \lambda_{i-1/2}^-}{2}, \quad (3.55)$$

$$b_i = v_{i+1/2}^+ \left(1 - \frac{\lambda_{i+1/2}^+}{2} \right) + \frac{v_{i+1/2}^- \lambda_{i+1/2}^-}{2} - \frac{v_{i-1/2}^+ \lambda_{i-1/2}^+}{2} - v_{i-1/2}^- \left(1 - \frac{\lambda_{i-1/2}^-}{2} \right) \quad (3.56)$$

$$c_i = \frac{v_{i+1/2}^+ \lambda_{i+1/2}^+}{2} + v_{i+1/2}^- \left(1 - \frac{\lambda_{i+1/2}^-}{2} \right). \quad (3.57)$$

If all λ 's are set to zero one gets the simple upwind difference scheme on a staggered grid, λ 's equal to one give the centered difference scheme. A more complicated choice leads to the total variation diminishing (TVD) flux limiter schemes:

$$\begin{aligned} \lambda_{i+1/2}^{+/-} &= 0 & \dots & \text{UPWIND scheme} \\ \lambda_{i+1/2}^{+/-} &= 1 & \dots & \text{CENTERED scheme} \\ \lambda_{i+1/2}^{+/-} &= \mathcal{FL}(\mathcal{R}_{i+1/2}^{+/-}) & \dots & \text{TVD flux limiter } (\mathcal{FL}) \text{ schemes} \end{aligned}$$

where \mathcal{R} is the ratio of gradients of ϕ , with the local gradient in the denominator and the

gradient one cell upwind in the numerator, that is $\mathcal{R}_{i+1/2}^+ = (\phi_i - \phi_{i-1})/(\phi_{i+1} - \phi_i)$ and $\mathcal{R}_{i+1/2}^- = (\phi_{i+2} - \phi_{i+1})/(\phi_{i+1} - \phi_i)$.

Various flux limiters can be chosen that have the properties to be non-oscillatory and to minimize the dissipation (Leveque, 1996). They lead to numerical schemes close to second order centered differencing where the function is smooth, and close to stable upwind scheme near discontinuities.

Among the various flux limiters \mathcal{FL} that were proposed we tested

$$\mathcal{FL}(\mathcal{R}) = \max[0, \min(1, \mathcal{R})], \quad (3.58)$$

which gives the “minmod” scheme (Roe’s minmod transfer function; Sweby & Baines, 1981) and the “superbee” scheme (Roe’s compressive transfer function; Roe, 1985),

$$\mathcal{FL}(\mathcal{R}) = \max[0, \min(1, 2\mathcal{R}), \min(2, \mathcal{R})]. \quad (3.59)$$

All these schemes (see also the Van Leer or MC flux limiter schemes (van Leer, 1977)) becomes centered (*i.e.*, $\mathcal{FL}(\mathcal{R}) = 1$) when the function is linear (*i.e.*, when $\mathcal{R} = 1$) and upwind (*i.e.*, $\mathcal{FL}(\mathcal{R}) = 0$) near oscillations (*i.e.*, when $\mathcal{R} \leq 0$).

The approximation (3.46) requires the flux derivative $\partial F/\partial x|_i$ at both the current time level t and the next time level $t + \Delta t$. The flux derivative explicitly depends on ϕ_{i-1} , ϕ_i and ϕ_{i+1} at the relevant time level. The numerical approximation of (3.44) is therefore semi-implicit in time; in each time advancement of porosity a tridiagonal system is solved. Note that the coefficients a_i , b_i and c_i in (3.54) depend on velocities and in the case of flux limiter schemes also on porosity through λ 's (3.55–3.57). When calculating $\partial F/\partial x|_i$ at the time level $t + \Delta t$ the velocities and porosities from time level t are used to calculate a_i , b_i and c_i ; in fact the velocities at $t + \Delta t$ are not known yet, they are only updated after the porosity is advanced.

In two dimensions the advection term becomes $-\nabla \cdot (\phi \bar{\mathbf{v}}) = -\nabla \cdot \mathbf{F}$. The porosity is advanced in two implicit half time steps, one in each direction (alternate direction implicit or ADI method), which leads to two tridiagonal calls in each time step.

If a source term S is present on the right-hand side of (3.44), one needs to evaluate it at intermediate time level $t + \Delta t/2$ to keep second order precision in time; $S_i^{t+\Delta t/2}$ can be calculated from S at the current time level t and previous time level $t - \Delta t_{old}$ from

$$S_i^{t+\Delta t/2} \approx \left(1 + \frac{\Delta t}{2\Delta t_{old}}\right) S_i^t - \frac{\Delta t}{2\Delta t_{old}} S_i^{t-\Delta t_{old}}. \quad (3.60)$$

The equation of temperature evolution (3.14) contains a diffusion term, an advection term and source terms. The diffusion term is approximated by a second order in space Crank-Nicholson scheme, which is semi-implicit (centered) in time. Rather than using the flux limiter schemes for the advection term in the energy equation, we use a simpler second order semi-implicit finite differencing. The source terms at the mid-time level are calculated from (3.60).

3.7.2 Benchmarking the code

Most crudely viewed the numerical resolution consists of repeating two principal steps. The first step is solving the momentum equations for the velocity fields with a given porosity and temperature. This is the “two-phase Stokes problem” which was discussed in section 3.7. The second step is the advancement of porosity and temperature in time which we discussed in 3.7.1. We will now present some tests of each of the steps in the numerical code. We specifically benchmark the momentum equation in Appendix 3.A and the porosity advection schemes in Appendix 3.B.

We explain below how the energy is globally conserved; the actual tests are described in Appendix 3.C. With the free slip condition on the boundary of the calculation domain ($\mathbf{v}_f \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$, $\mathbf{v}_m \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$, $\mathbf{v}_m \cdot \underline{\boldsymbol{\tau}}_m \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$, where $\hat{\mathbf{n}}$ is a vector normal to the boundary) the energy can be transferred across the boundary only in the form of the thermal energy by heat conduction. For a thermally isolated domain (*i.e.*, with a boundary condition on temperature $\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T = 0$) the total energy in the domain remains constant.

We will neglect thermal expansivity ($\alpha_f = \alpha_m = 0$, or $B = B_f = 0$ in dimensionless equations), therefore the average density is only a function of porosity and the adiabatic temperature gradient is zero. Let us consider a reference (*e.g.*, the initial) porosity and temperature distribution which give a reference value of the total gravitational potential energy and thermal energy. In the course of time evolution the porosity and the temperature deviate from this reference profile by $\delta\phi(\mathbf{r}, t)$ and $\delta T(\mathbf{r}, t)$. The potential energy per unit volume in the gravity field in a region \mathcal{V} , the volume of which is denoted by the same symbol, then deviates from the reference value by

$$\delta E_p = \mathcal{V}^{-1} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{r} \cdot \mathbf{g} \Delta \rho^0 \delta \phi \, d\mathbf{r}. \quad (3.61)$$

Likewise the thermal energy per unit volume deviates from the reference value by

$$\delta E_T = \mathcal{V}^{-1} \int_{\mathcal{V}} \overline{\rho C} \delta T \, d\mathbf{r}. \quad (3.62)$$

In the case with $\mathbf{g} = g_0 \hat{\mathbf{z}}$ we have

$$\delta E_p = \tilde{\mathcal{V}}^{-1} a |\Delta \rho^0| g_0 \iint_{\tilde{\mathcal{V}}} s z \delta \phi \, dV, \quad (3.63)$$

and

$$\delta E_T = \tilde{\mathcal{V}}^{-1} a |\Delta \rho^0| g_0 \iint_{\tilde{\mathcal{V}}} T \, dV, \quad (3.64)$$

where all quantities inside the intergral are dimensionless and $\tilde{\mathcal{V}}$ is the dimensionless volume of the region.

The conservation of the total energy in the calculation domain is then expressed as

$$\frac{d}{dt} \iint_{\tilde{\mathcal{V}}} (T + s z \phi) \, dV = Ra Q, \quad (3.65)$$

where the dimensionles integrated heat flow across the boundary

$$Q = \oint_{\partial \tilde{\mathcal{V}}} \hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T \, dA \quad (3.66)$$

is zero if the thermal isolation boundary condition $\hat{\mathbf{n}} \cdot \nabla T$ is used. In two-dimensional case the “volume” (dV) integration is over the area of the 2-D domain and the “surface” (dA) integration is along the closed line representing the boundary of the calculation domain.

The numerical tests checking the energy changes presented in Appendix 3.C are in excellent agreement with the global conservation equation (3.65).

3.8 Applications

3.8.1 Segregation of a proto-core

A large number of numerical simulations can be performed with our code. We first present an example calculation of a two-phase segregation in a square region from an initial state where the metal/silicate component ratio is uniform. At $t = 0$ we increase the temperature in a circular zone close to the surface so that the temperature becomes higher than the melting temperature of iron. This initial condition may crudely approximate the situation during the period where the surface of a young planet was heated by a giant impact (Wetherill, 1985).

We consider a rather small planet with radius $a = 1600$ km just large enough that the

impact heating becomes important. All the various parameters are listed in Table 3.1. We assume that the temperature increase after the initial impact is $\Delta T = 200$ K (see equation 1.1) and that the initial temperature of the planet (assumed uniform) is at least $T_{melt} - \Delta T$ so that the metallic phase can separate. In dimensionless units, $T_{melt} = 0.48$, $\Delta T = 0.1$ and the initial planet temperature has to be between 0.38 and 0.48. In the following simulation we use an initial planet temperature of 0.43 (1160 K) and initial porosity of 0.25.

In this preliminary exploration of the parameter space, we assume a no heat flux boundary condition on top of our model. Another boundary condition would be very easy to implement but this insulation may be appropriate for a planet heated from the surface and where the atmosphere is very hot (Matsui & Abe, 1986).

Figures 3.12–3.13 and 3.14–3.15 show the evolution of porosity and temperature. Several stages of different prevailing segregation mechanisms can be identified in the simulation run. Initially the circular zone, containing molten metallic phase, segregates by a roughly 1-D porous flow ($t = 0$ –100). The molten metal concentrates and the iron content increases to a value close to 1. The dense metallic blob eventually descends in a diapir-like fall while the light residual silicate mantle rises and starts spreading along the surface ($t = 100$ –500). When the metal reaches the bottom it spreads as a gravity current and forms a proto-core. Along the cusp-like channel that connects the differentiated silicates to the core, pockets of metal are formed and descend to the proto-core ($t \sim 975$). The gravitational energy released by the formation of the differentiated structure is converted into heat and increases the temperature. The local temperature rise can induce further melting of the metallic phase and thus facilitates further segregation. At the interface between the differentiated silicate and the remaining undifferentiated mantle new metallic ponds are formed ($t = 1300$) that trigger new instabilities ($t = 1500$). These secondary instabilities follow the same kind of dynamics that the initial one with cusp-like channels ($t \sim 2500$) connecting them to the surface. The same process (creation of metallic ponds and descent of diapirs; $t = 3000$ –4000) occurs again. Large undifferentiated islands survive for some time ($t = 4000$ –5000) and are slowly eroded until the whole planet is differentiated. During the whole process various compaction waves are visible in both the silicates and the core.

The process just described can be followed both on the porosity figures 3.12–3.13 and on the temperature figures 3.14–3.15. The transfer of potential energy into thermal energy will be discussed in detail in Section 3.8.3 (we will particularly show in figure 3.24 that the global energy conservation is very closely satisfied throughout the whole simulation). This conversion occurs mostly along the channels trailing behind the diapirs. The heat seems to be transferred more or less equally between the core and the shallow mantle. After $t \sim 3000$ when only the deep mantle remains undifferentiated the rate of release of potential energy

decreases in amplitude and the erosion of the last cold undifferentiated regions occurs by thermal diffusion.

3.8.2 Various mechanisms of metal diapir propagation

In order to discuss the primary mechanisms of metal diapir propagation, we show in Figure 3.16 the instantaneous solutions to the mechanical equations for three different cases of simple porosity and temperature distributions (*i.e.*, we solve the Navier-Stokes and the Darcy equation for a given porosity and temperature field). In the case A (left column in Figure 3.16) the porosity is equal to 0.9 in a circular region of radius 0.2 in the center of the box and $\phi = 0.1$ elsewhere. The temperature is uniform and below the melting temperature of the iron phase. The stream function has a characteristic “dipole” shape that results from the sinking of the positive density anomaly due to the increased metal content in the central region (first row in Figure 3.16). The matrix velocity field can be inferred from the values of velocity in vertical direction (second row). In this case where the iron is solid, it moves together with the silicate matrix and no segregation occurs. The velocity difference $\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_m$ as well as the velocity divergence are zero (third and fourth row). The velocity field is purely incompressible ($\mathbf{v}_m = \mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2 = \mathbf{0}$).

In the case B (middle column in Figure 3.16) the porosity is again increased in the circular region as in the case A and temperature is uniform, but this time $T > T_{melt}$. The stream function and therefore the incompressible part of the matrix velocity field \mathbf{v}_1 are identical to the case A as we use approximation 2 ($\mu^* = 1$) where there is no coupling between Ψ_1 and Ψ_2 (*i.e.*, the incompressible and irrotational velocity fields) in the mechanical equations. The metallic phase can now separate from the silicates by compaction. This separation is the most efficient in the high porosity region but occurs outside of this region too; $\phi(v_{fz} - v_{mz}) > 0$ in the entire box. Now, the compressible velocity \mathbf{v}_2 contributes to the total matrix velocity. This is seen on the picture of the velocity divergence and on v_{mz} (compare to the case A). The largest amplitude of the divergence is in the high porosity region; a layer at the bottom of the box (where the fluid concentrates) and at the top (from where the fluid is drained) show smaller positive and negative values.

In the case C (right column in Figure 3.16) the porosity is uniform and equal to 0.3 in the box. Temperature is above the melting temperature in the circular region and below T_{melt} elsewhere. As there is no density variation and no coupling between the incompressible and compressible velocity fields (when approximation 2 is used), Ψ_1 and therefore \mathbf{v}_1 are both zero. The matrix movement is due to the fluid segregation inside the spherical region. Outside that region $\mathbf{v}_f - \mathbf{v}_m = \mathbf{0}$ and $\nabla \cdot \mathbf{v}_m = 0$.

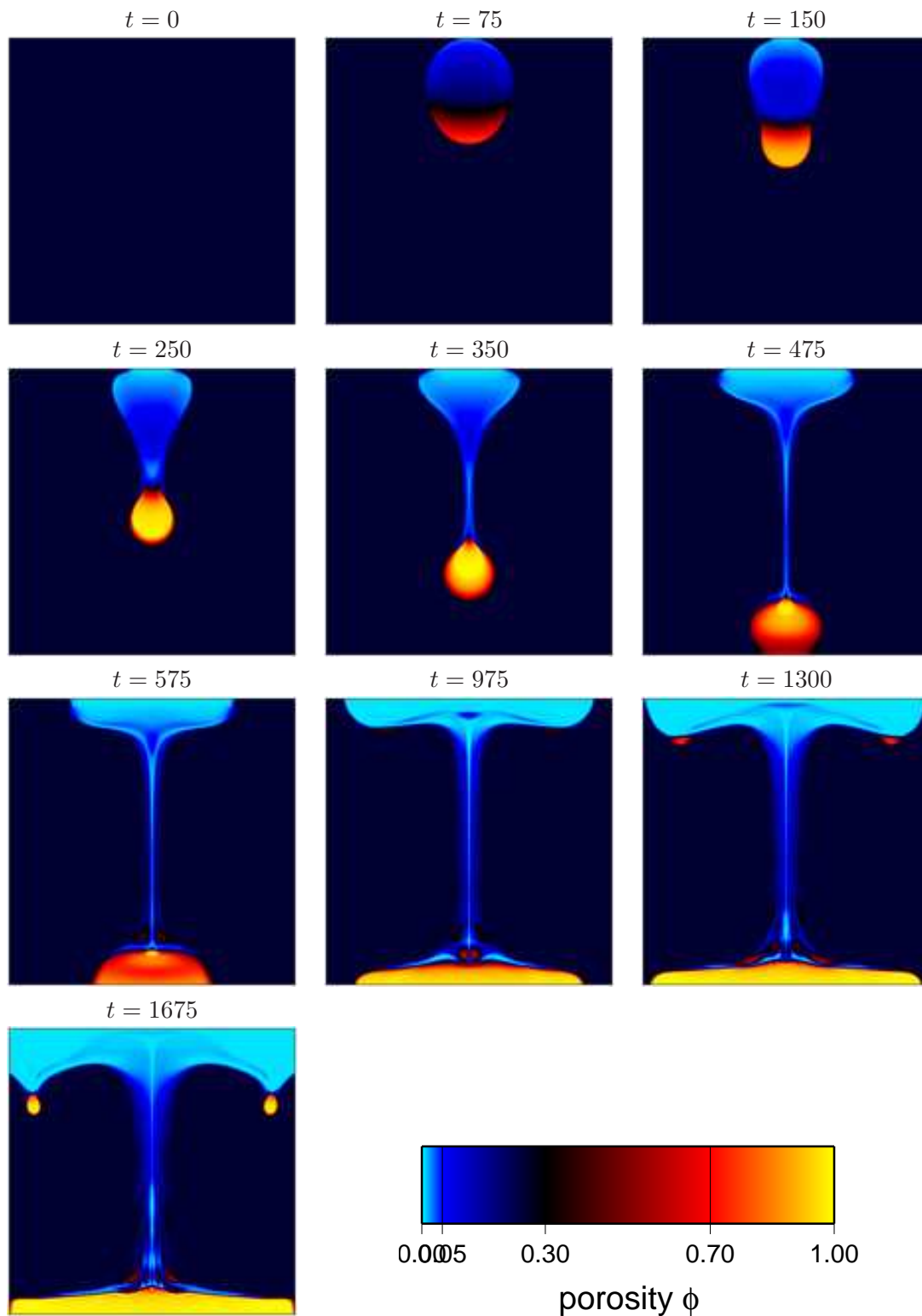


Figure 3.12: Evolution of porosity after an impact in a square box calculation with a uniform initial porosity. A circular zone of radius $1/6$ is initially heated above the melting temperature of iron. We choose the color scale so that the pure metallic phase is yellow, the pure silicate phase is cyan and the undifferentiated mantle is black. Approximation 2 ($\mu^* = 1$) is used with $B = 0$, $Ra = 10^6$, $\delta = 0.1$, 412×412 grid cells, superbeee advection scheme. (continued on the next page)

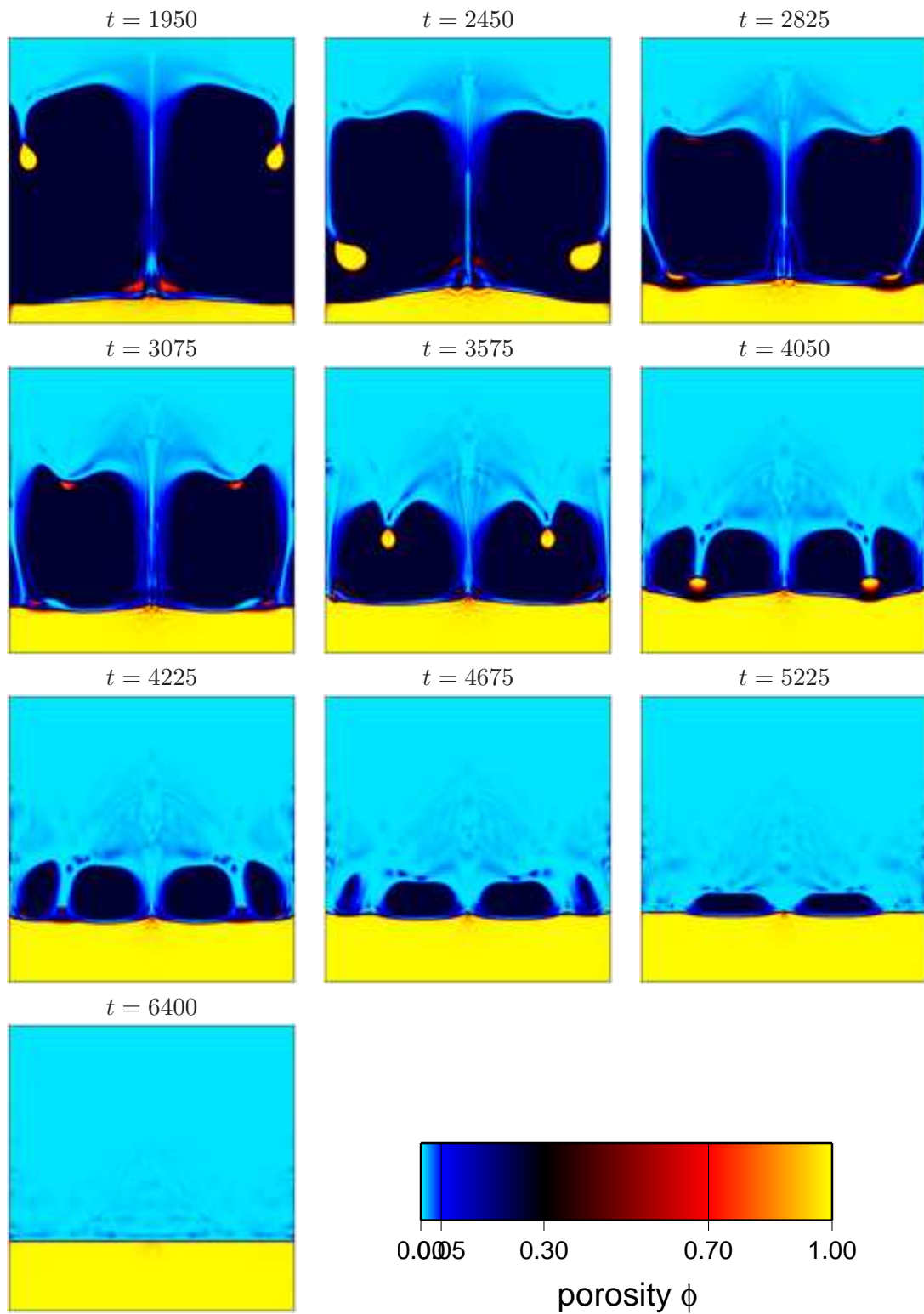


Figure 3.13: Evolution of porosity (continued).

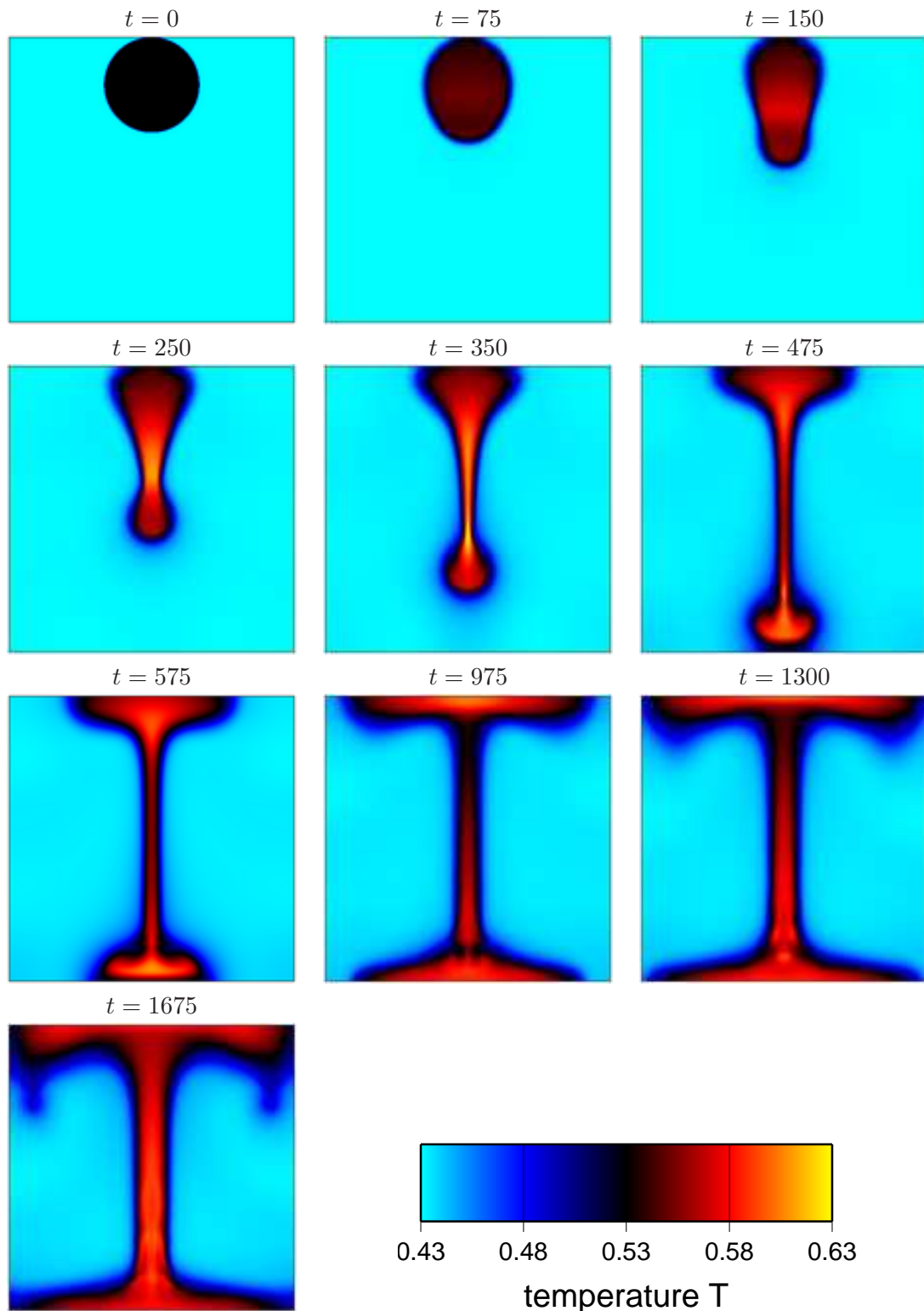


Figure 3.14: Evolution of temperature; parameters of the calculation are given in the caption of Figure 3.12. (continued on the next page)

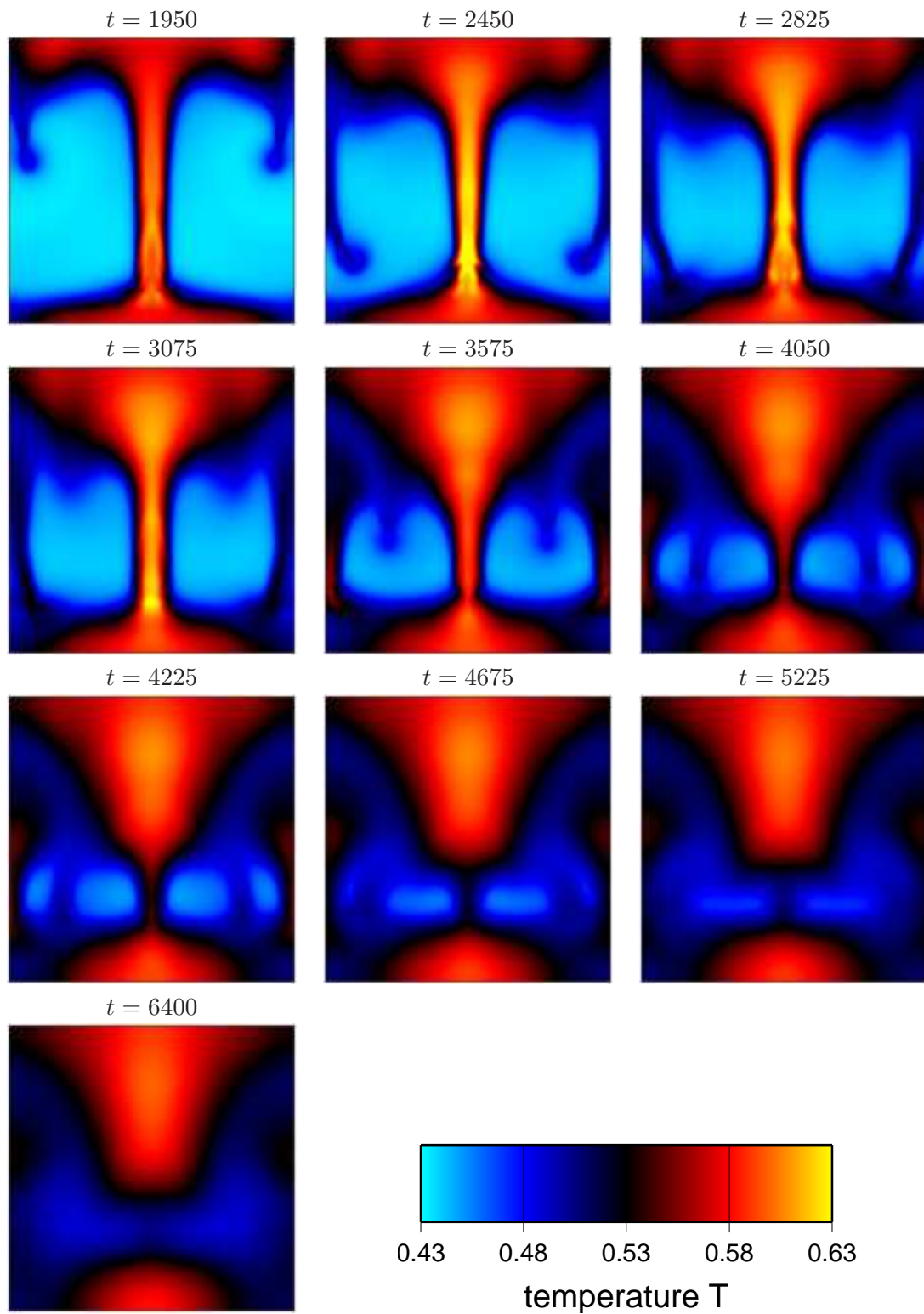


Figure 3.15: Evolution of temperature (continued).

The case A corresponds to the simple sinking of a high porosity heterogeneity without phase segregation. If evolved in time, this porosity blob would sink and spread along the bottom, but its porosity would remain unchanged. In order to separate the iron from the silicates the temperature has to reach the melting temperature of iron. This can happen locally in a small region (basically only within the diapir itself) as simulated in the case C. If the potential energy release of the sinking diapir is sufficient to heat up the surrounding areas, the segregation can occur everywhere as in the case (B). The sinking diapir of figure 3.12–3.15 belongs to a dynamics which is intermediate between cases A and C. The sinking velocity of a diapir is a combination of the Stokes' velocity of the dense iron blob and a porosity wave phenomenon (akin to the magmon behavior described, *e.g.*, by Scott & Stevenson, 1984), where the silicates traverse the metallic phase by a Darcy mechanism.

3.8.3 Energy transfer

The potential energy is converted into heat through three different mechanisms (see 3.14)

- a usual viscous dissipation term

$$\mu^* \underline{\boldsymbol{\tau}}_m : \nabla \mathbf{v}_m \quad (3.67)$$

- a Darcy term

$$\frac{\Delta \mathbf{v}^2}{\delta^2} \quad (3.68)$$

- and a compaction term

$$\frac{1 - \phi}{\phi} (\nabla \cdot \mathbf{v}_m)^2 \quad (3.69)$$

Figure 3.17 depicts the evolution of these quantities for the complete numerical simulation of section 3.8.1. The three curves with the largest amplitudes represent the maximum values of these sources, the three curves with the lowest amplitudes their averaged values over the box area.

Generally the average heat sources are dominated either by the usual viscous dissipation (black) or by the Darcy dissipation term (green). The heat source related to the compaction term is often negligible (red). However, locally, the three sources can have similar amplitudes.

The letters A, B, C, D, E on top of Figure 3.17 relate the energy sources to the general dynamic situations presented in the various panels of Figure 3.12. The stage A corresponds to the initial segregation within the impacted zone: the energy is dissipated through Darcy flow and compaction. The stage B is the sinking of the large metallic diapir. It corresponds

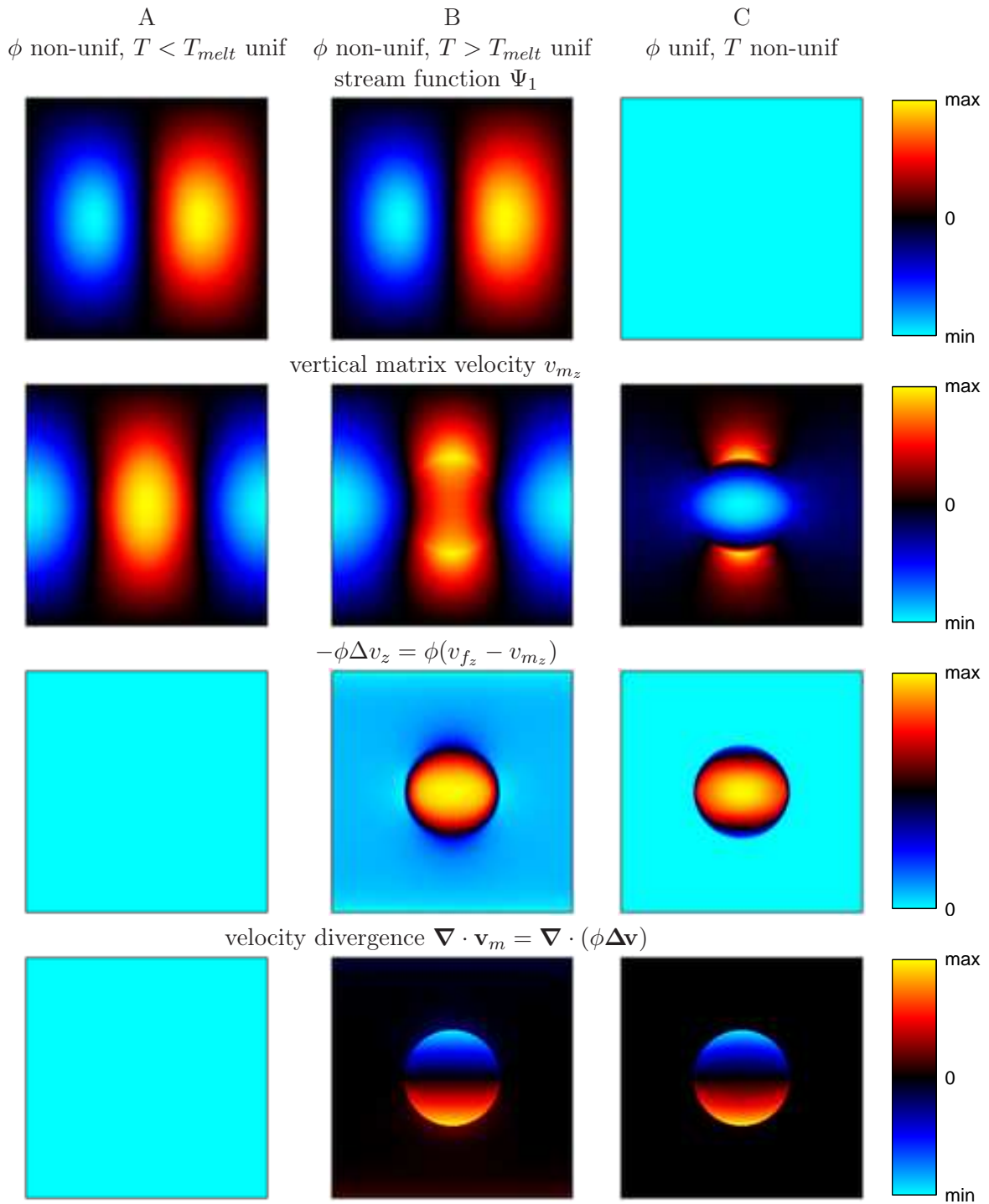


Figure 3.16: Stream function Ψ_1 , vertical matrix velocity v_{m_z} , vertical fluid segregation velocity $\phi(v_{f_z} - v_{m_z})$, and velocity divergence $\nabla \cdot \mathbf{v}_m = \nabla \cdot (\phi \Delta \mathbf{v})$ for three different simple porosity and temperature fields. For cases A (left column) and B (middle column) $\phi = 0.9$ in a circular zone of radius 0.2 in the center of the box and $\phi = 0.1$ elsewhere; temperature is uniform either below T_{melt} (A) or above T_{melt} (B). For the case C, $\phi = 0.3$ everywhere, $T > T_{melt}$ in the circular zone and $T < T_{melt}$ elsewhere.

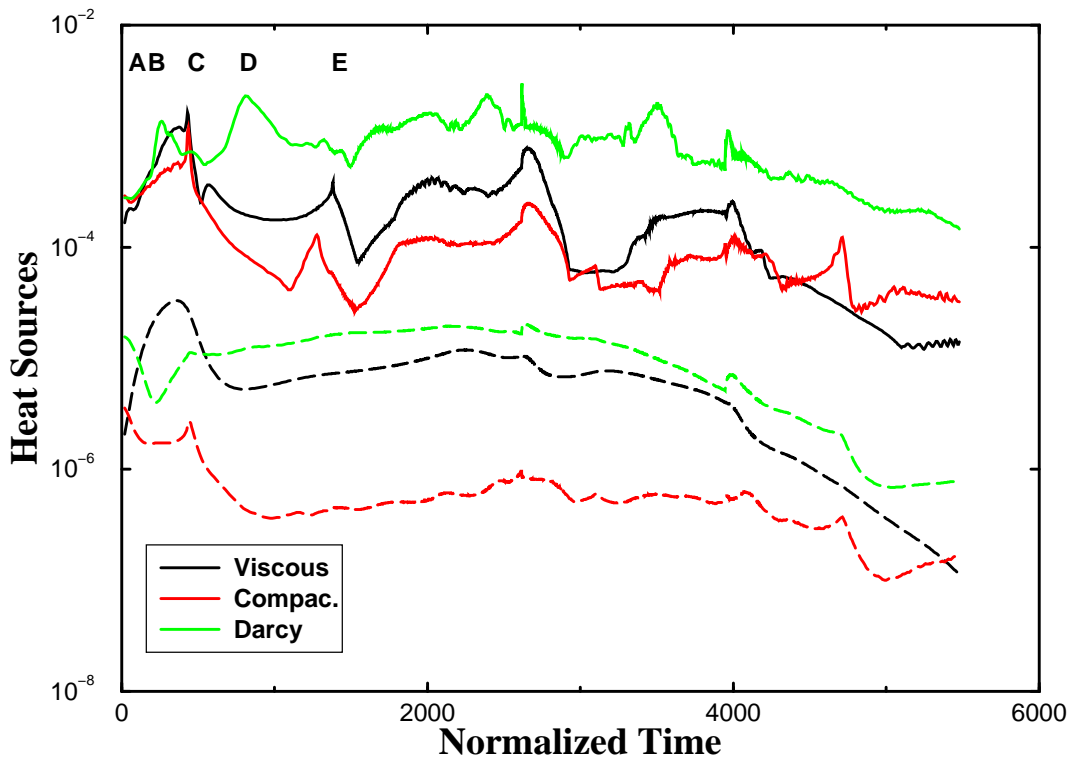


Figure 3.17: The three sources of dissipation occurring during the simulation shown in Figure 3.12 – viscous (3.67), Darcy (3.68) and compaction (3.69) – are plotted as a function of time (their maximum and their average values). Although locally and at a given time the three sources can have similar amplitudes, the dissipation is generally controlled by the Darcy term except during the travel through the undifferentiated mantle of large diapirs.

to a maximum of the viscous dissipation. The interaction of the initial diapir with the bottom of the box is marked by a peak of the maximum dissipation (C). The maximum of Darcy term (stage D), corresponds to a first burst of metal reaching the core through the central channel. The newly formed metallic diapirs on each sides of the central channel are seen as peaks in the maximum dissipation of the Darcy and compaction terms (E). Except during the initial sinking of the first massive diapir, the average dissipation of each term are evolving very regularly until the whole segregation is finished. Of course as the segregation proceeds the rate at which the potential energy is converted to heat decreases and consequently the heat sources weaken. This is clearly visible at $t > 4000$ in Figure 3.17 and all sources decline simultaneously.

3.8.4 Threshold of instability

Of course, the destabilization of a proto-planet by an impact only occurs for a limited range of parameters. A too cold planet does not allow the melting of the metallic phase and a too small impactor may increase the temperature in a too small domain for the gravitational destabiliza-

tion to proceed. Other parameters (viscosity, compaction length, temperature increase during an impact ...) also affect the evolution of the segregation. However, as we cannot explore all the parameters together we will focus on the threshold of this segregation instability when the initial temperature and initial radius of the impacted area are varied.

In a first set of experiment (Figure 3.18-top) we fixed the radius of the impactor to 1/6 of the box height and vary the initial planetary temperature. In a second set, we fixed the planetary temperature to 0.43 ($T = 1160$ K) and vary the initial radius of the impacted zone (Figure 3.18-bottom). According to the paragraph 1.2, this corresponds to changing the radius of the impactor.

The initial sinking of the first instability is marked by an initial increase of the percentage of the planet above the melting temperature (up to normalized times between 300 and 800). The spreading of initial metal diapir at the bottom corresponds to a decrease in the rate of heat production (conversion of potential energy into heat). In most cases, the ongoing segregation of the rest of the undifferentiated planet provides enough heat for the phenomenon to continue. However when the planet is too cold (top, blue) or the impactor too small (bottom, yellow and purple), the segregation may stop and the proto-core freezes. The simulation of section 3.8.1 corresponds to the red curve in the top panel and the black curve in the bottom panel.

3.9 Conclusion

Our model accounts for a spectrum of proposed planetary differentiation mechanisms and can be used for modeling of metal–silicate segregation in young terrestrial planets. The model predicts an evolution significantly different from the simple original scenario. The increase of temperature due to segregation (release of gravitational energy) is comparable to the initial heat delivered by the impact so that the process of segregation, once started, is more or less self maintained. The first diapir that crosses the mantle leaves a cusp-like trail that connects the proto-core to the near surface silicates across the undifferentiated material. Melting occurs continuously both in the shallow and in the deep mantle. The sinking of metallic diapirs is very fast (of order of 10 kyr) as instead of deforming the surrounding material as in a usual Stokes flow, the undifferentiated material desegregates on the bottom side of the diapir, the silicates cross the metallic phase, and accumulate behind the sinking diapir. The first impact that melts the iron phase is therefore potentially able to trigger the whole core-mantle segregation.

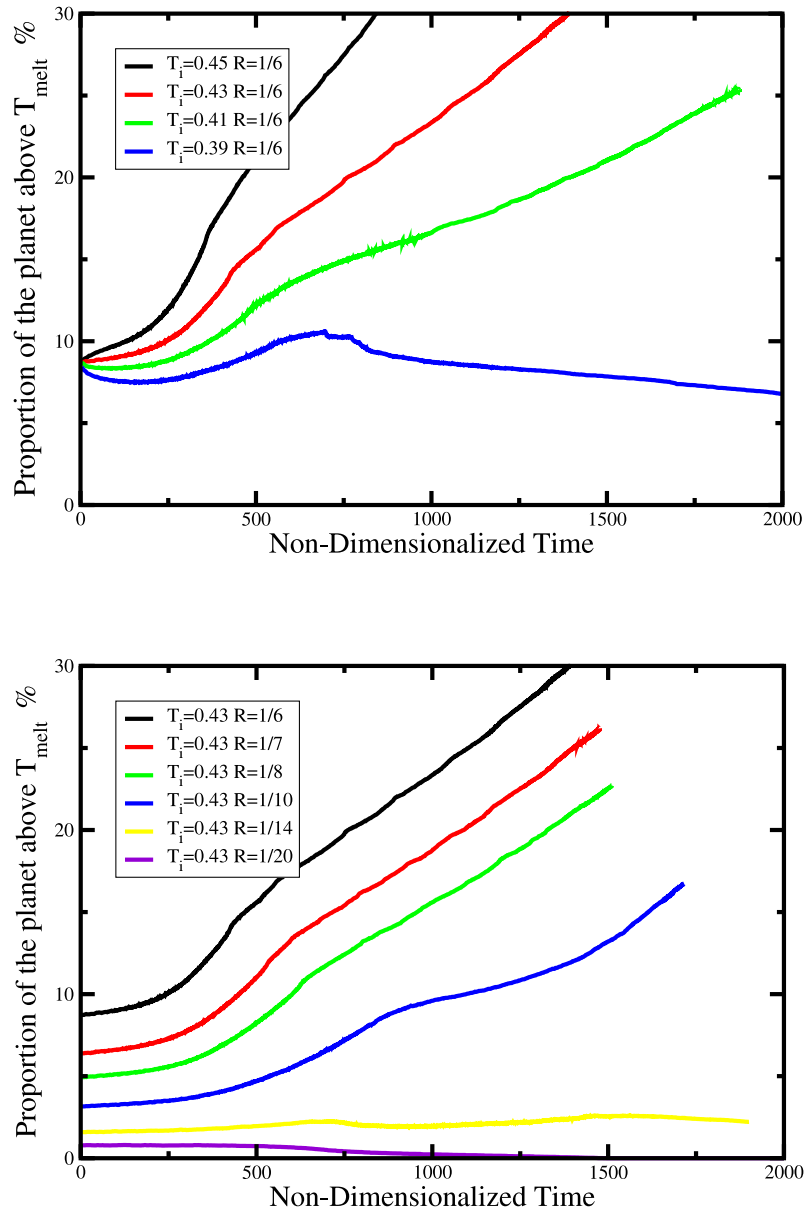


Figure 3.18: Proportion of the model above the melting temperature (in surface %) as a function of time. Top, for an impacted area of radius $1/6$, the initial temperature of the planet is varied between 0.39 and 0.45 (according to the normalization of Table 3.1, this corresponds to a radius of 266 km and temperatures between 1053 K and 1215 K). Bottom, for an initial temperature of 0.45 , the radius of the surface area is decreases from $R/6$ to $R/20$ (from 266 km to 80 km). All the various curves show a first increase associated with the sinking of the initial instability. However if the planet is too cold (top panel, blue) or the impacted area too small (bottom panel, yellow and purple), heat diffusion brings the temperature back below the iron melting temperature.

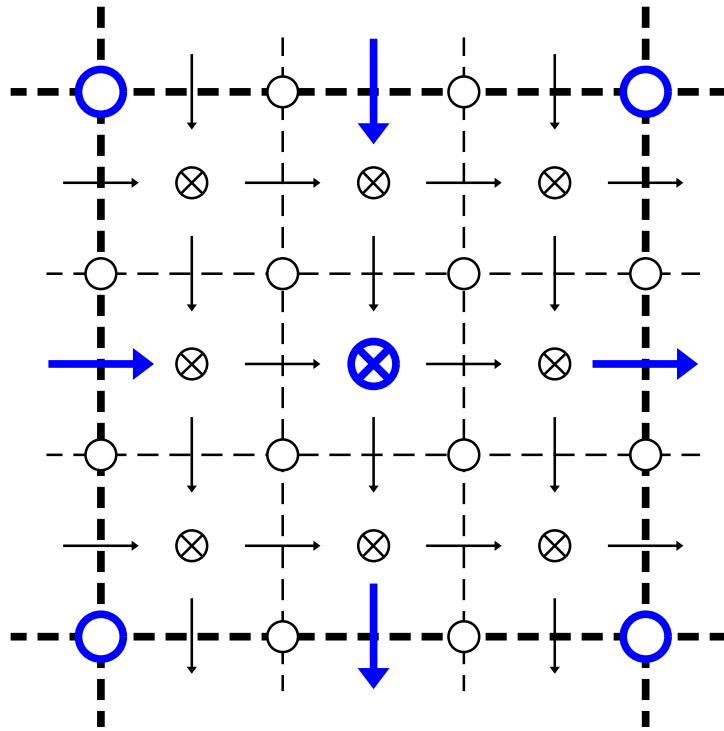


Figure 3.19: Embedding of a fine grid in a grid coarser by a factor of 3, exploited in test of the spatial accuracy. All points where various quantities are evaluated on the coarser grid (highlighted in blue) correspond to an identical location on one of the finer grid cells.

Appendix 3.A Momentum equations

All the equations were discretized such as to attain second order spatial accuracy. The error of the solution of the momentum equations should therefore be proportional to the square of the grid size. In order to test the accuracy of the solution we calculate the velocities for a given porosity distribution with several different grid steps. We change the grid step by a factor of 3 between a coarser and the next finer grid in which case each grid cell of the coarser grid is exactly filled with 3×3 grid cells of the finer grid and all locations on the coarser grid where various quantities are evaluated (that is, the center and the corners of a grid cell and the centers of cell faces) overlay identical locations on the finer grid (Figure 3.19).

We perform the calculations in a square box on grids with 6, 18, 54, 162 and 486 grid cells in each direction. The solution calculated on the finest grid is taken as a reference “accurate” solution and the errors on coarser grids are calculated with respect to this reference solution. Figure 3.20 shows the chosen porosity which is a Gaussian peak of amplitude 0.8 and full width at half maximum (FWHM) 0.2 over a background porosity of 0.1. Figure 3.20 also shows the velocities in the case of $\mu^* = 1 - \phi$, that is without any approximation to the momentum equations.

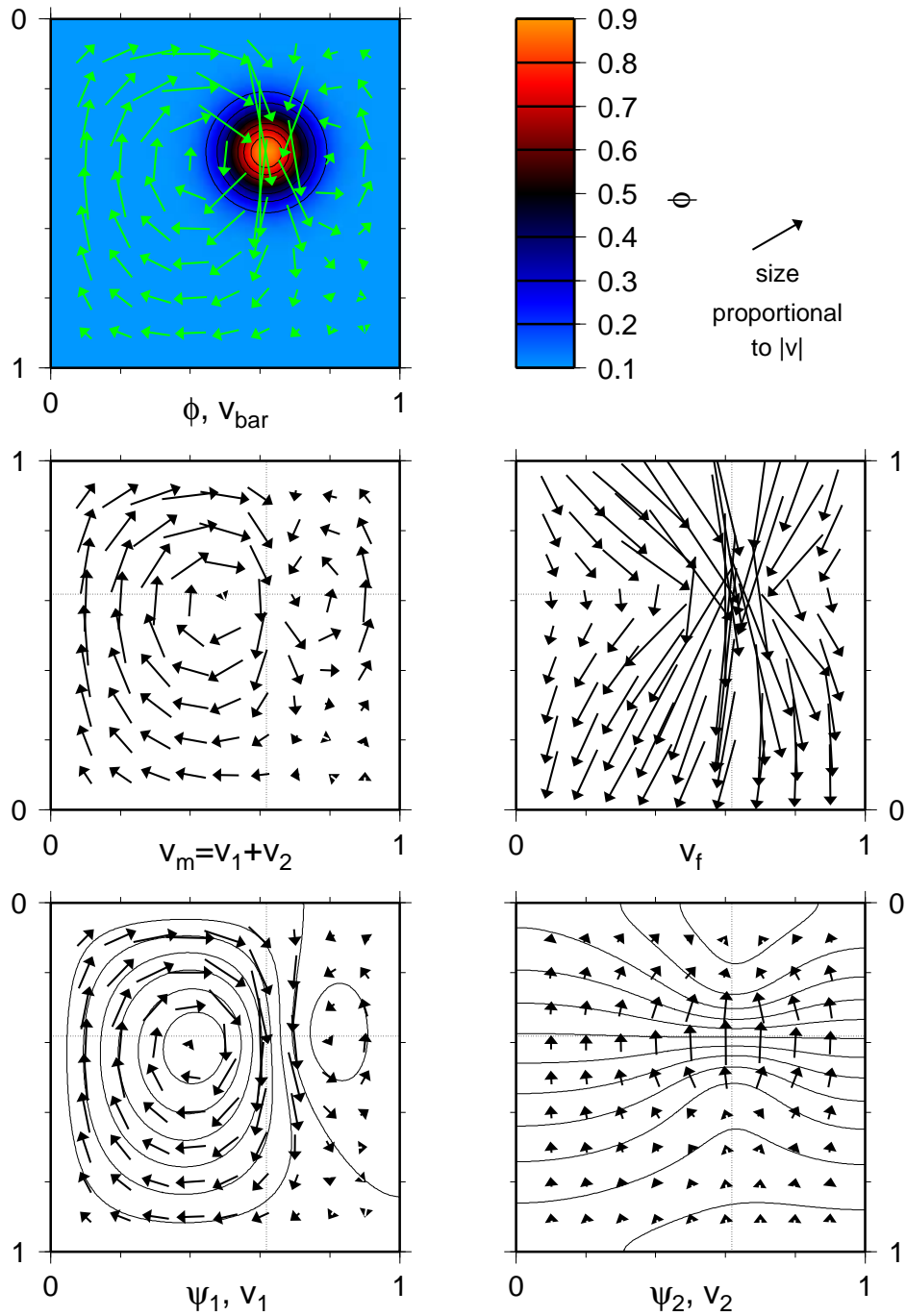


Figure 3.20: Porosity and resulting velocity fields used in the testing of momentum equations resolution. Top panel: porosity in color and contours and average velocity $\bar{\mathbf{v}}$ vectors; middle row: matrix velocity \mathbf{v}_m (left) and fluid velocity \mathbf{v}_f (right) vectors; bottom row: contours of stream function Ψ_1 and incompressible matrix velocity \mathbf{v}_1 vectors (left) and isolines of potential Ψ_2 and irrotational matrix velocity \mathbf{v}_2 vectors (right). Porosity is a Gaussian bell of amplitude 0.8 and full width at half maximum (FWHM) 0.2 over a background porosity of 0.1. Full solution of velocities (with $\mu^* = 1 - \phi$ is shown). Scaling of velocity arrows is the same in all panels.

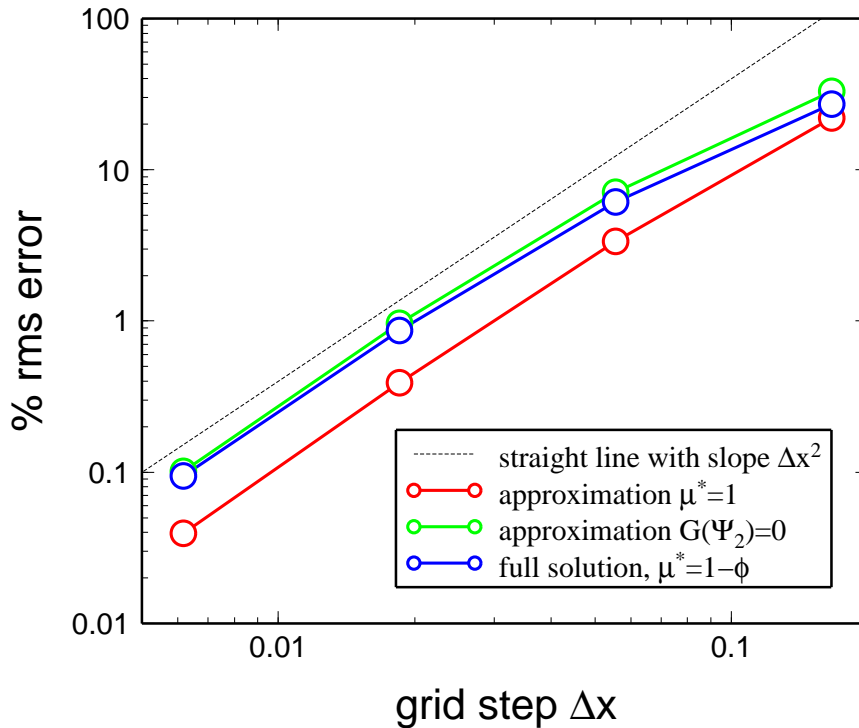


Figure 3.21: Root mean square (rms) error of the momentum equations solution as a function of grid step Δx . The flow fields as well as the porosity that drives the flow are shown in Figure 3.20. The simulations are performed in a square domain with identical number of cells and grid steps in each direction (*i.e.*, $\Delta x = \Delta z$). The error on the grids with 6, 18, 54 and 162 cells in each direction is calculated with respect to the solution on the finest grid (486 cells in each direction).

Figure 3.21 shows the root mean square (rms) error of the vertical average velocity (\bar{v}_z) solution as a function of grid step. The evaluation of the average velocity $\bar{\mathbf{v}}$ requires all of \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 and $\phi \Delta \mathbf{v}$, and $\bar{\mathbf{v}}$ therefore contains the combined error from all three steps of the momentum equations solution (see the flowchart of the algorithm in Figure 3.9). It is seen in Figure 3.21 that the error goes as the square of the grid step (with an expected slight deviation at extremely small number of grid points). This result confirms the second order accuracy of the momentum equations solver.

Appendix 3.B Porosity advection scheme

We tested the porosity advection schemes by calculating the advection (without any source terms) of a given porosity profile by a 2-D velocity field which corresponds to a rigid body rotation. The calculation domain is a square box and the center of rotation is in the box center. The initial porosity is zero except in two circular region of radius 0.15. In the bottom region the porosity is equal to 1. In the other region the porosity has a conic shape with a

maximum equal to one at the center. This initial porosity is advected by one full rotation (2π). The final porosity should therefore be identical to the initial porosity.

Figure 3.22 shows the initial porosity and the resulting porosity after one full rotation for several advection schemes. The difference between the final and initial porosity is also plotted and the rms error of the final porosity is given. The simple upwind (donor cell) scheme is highly diffusive. Much smaller error is attained when the MPDATA algorithm (Smolarkiewicz, 1983) is used; we show cases with 2 and 3 iterations (1 and 2 corrective steps, resp.). However MPDATA advection algorithm, at least in our implementation, produces ripples near porosity discontinuities. Our calculations confirm the positive definiteness of MPDATA (porosity stays above zero), but the porosity is not bound by its initial maximum value and exceeds 1. If MPDATA porosity advection were used in the two-phase numerical code, porosities above 1 would produce unphysical effects in the momentum equations. The accuracy of the minmod limiter scheme is similar to that of the MPDATA algorithm but without the artifactual oscillations. The superbee method gives the best results. The porosity of these two schemes remains bound between the initial minimum and maximum values, which is consistent with the TVD properties of the flux limiter schemes.

The modified flux limiter schemes presented in section 3.7.1 are semi-implicit in time. This assures their stability even for large time stepping when the Courant number is greater than one (*i.e.*, $2\Delta t|v|/\Delta x > 1$). This is not so for the time-explicit MPDATA algorithm which becomes unstable. We use the superbee flux limiter schemes in the two-phase numerical code.

Appendix 3.C Energy conservation

Figure 3.23 illustrates the conservation of total energy and the conversion of the potential energy into thermal energy during gravitational sinking of a porosity maximum through a compacting background porosity. Snapshots of porosity and temperature at different times are shown in Figures 3.25 and 3.26 and snapshots of various other quantities at $t = 110$ are shown in Figure 3.27. The initial porosity is a Gaussian peak of amplitude 0.6 and FWHM 0.2 over a background porosity of 0.1. The initial temperature is uniform and above the melting temperature. The square box is thermally isolated ($Q = 0$), Rayleigh number is 10^6 . The compaction length is 1/10 of the box size and the porosity maximum remains localized upon descent with slowly decreasing amplitude. As the shape of the stream function indicates (Figure 3.27) the incompressible matrix velocity field is characterized by two circulation cells as the porosity heterogeneity sinks. From the velocity potential distribution and the velocity divergence field one can see that the irrotational velocity field is vertical and uniform except

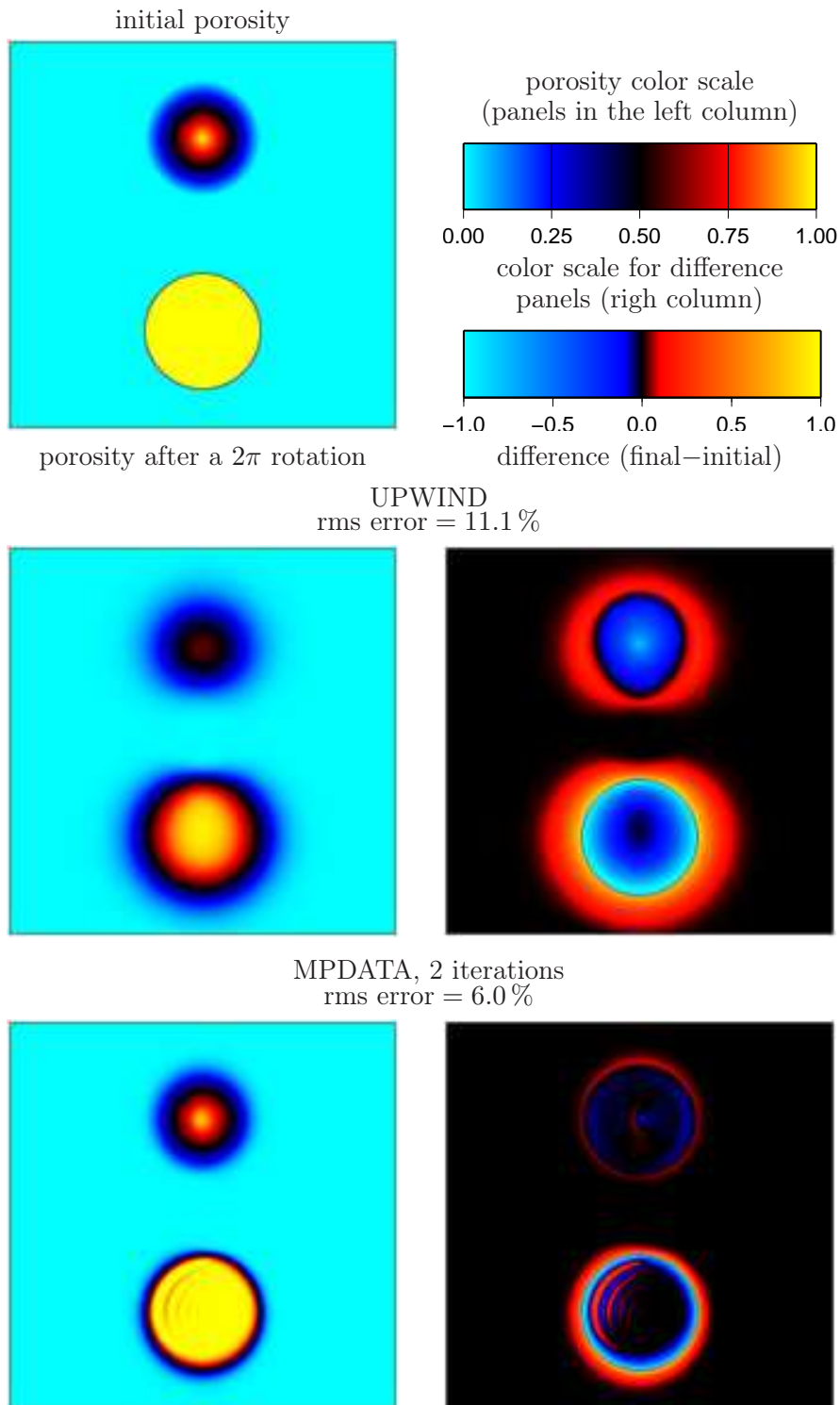


Figure 3.22: Test of a 2π rotation of the porosity field. The initial porosity is shown in the top left panel. The porosity after one full rotation (left column) and the difference of final and initial porosity (right column) are shown for the simple UPWIND scheme, the MPDATA algorithm with 2 and 3 iterations, and the flux limiter MINMOD and SUPERBEE schemes. Calculated on a grid with 400×400 grid cells with the Courant number 0.4. (continued on the following page)

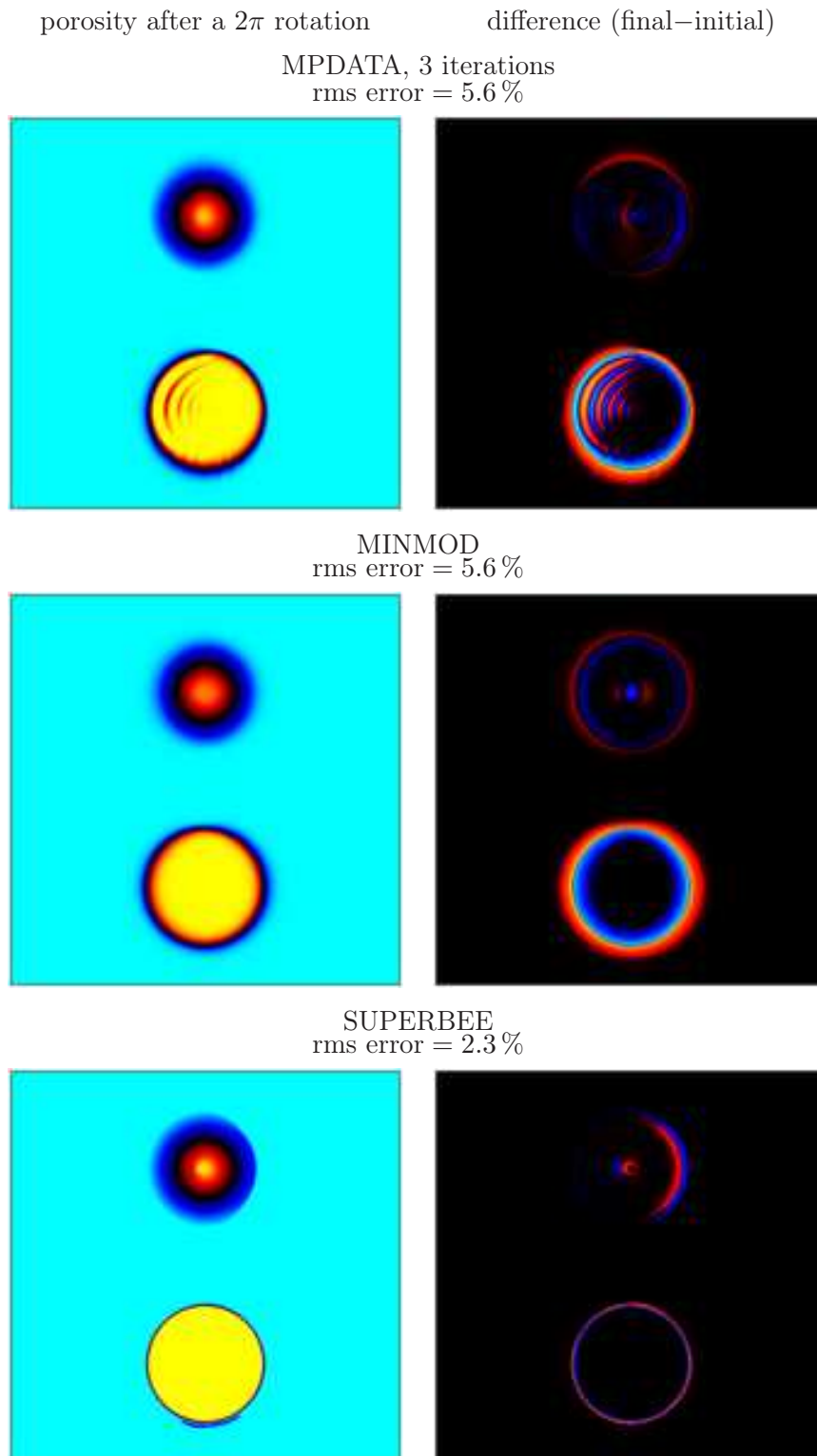


Figure 3.22 (continued)

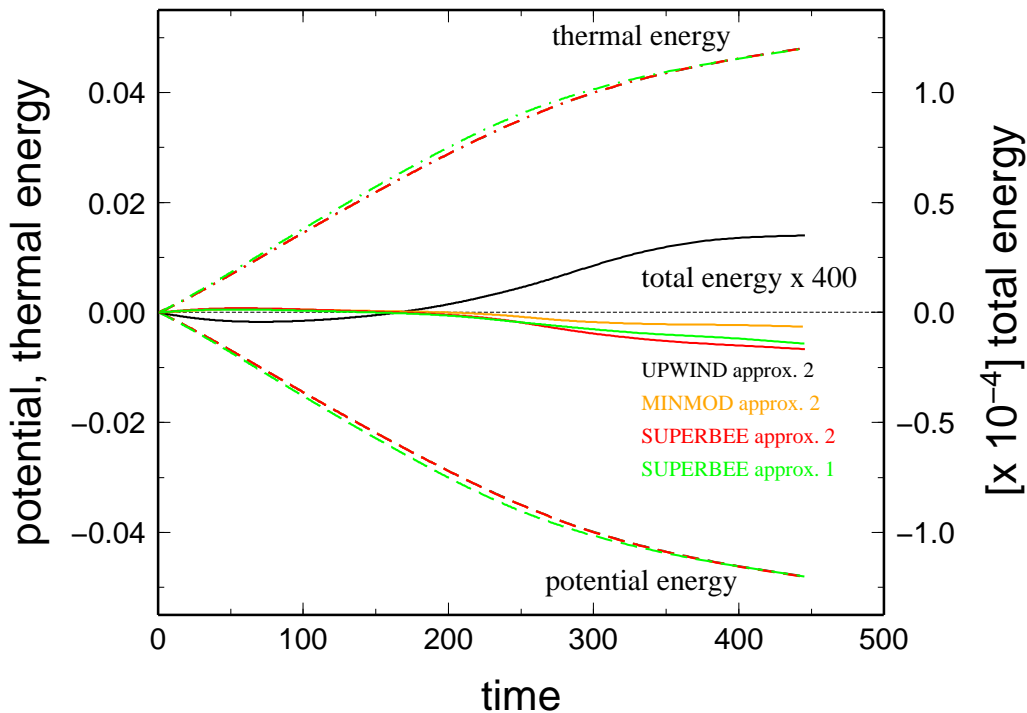


Figure 3.23: Integrated potential energy (dashed lines), thermal energy (dot-dashed lines) and the total energy (solid lines) as function of time for a Gaussian shape porosity maximum of amplitude 0.6 sinking in an initially uniform porosity of 0.1 (see Figure 3.25). The total energy is multiplied by a factor of 400 (graduations on the right vertical axis). All quantities are dimensionless. Calculated with $\delta = 0.1$, $Ra = 10^6$, in a square box with 297×297 grid cells.

for the region of the high porosity packet. The matrix velocity divergence is positive on the “upwind side”, that is, at the bottom edge of the 2-D porosity wave, and negative at its trailing edge, which allows the porosity wave to sink. High positive divergence of the matrix velocity is also observed along the bottom boundary where the fluid phase segregates. The sinking of the porosity maximum releases gravitational energy which is fully converted to heat (Figure 3.23; there is no work against adiabatic gradient in this case with $B = 0$) and causes the temperature to increase. The temperature largely increases along the track of the falling porosity maximum. A mild, roughly uniform temperature increase is observed in the entire domain and is due to the slow segregation of the initially uniform porosity (Figures 3.25, 3.26).

The total energy is reasonably well conserved with the flux limiter schemes; on a grid with ~ 300 cells, the relative error is of the order of 10^{-4} after the complete traverse of the porosity peak and its spreading at the bottom. The potential energy and thermal energy evolution curves (Figure 3.23) are similar between approximations 1 and 2. The descent of the porosity peak is slightly faster when the viscosity variations are accounted for in the incompressible field (approximation 1; the green curves in Figure 3.23 have slightly steeper slope in the middle part; see also the animations at <http://geo.mff.cuni.cz/~sramek/movies/>).

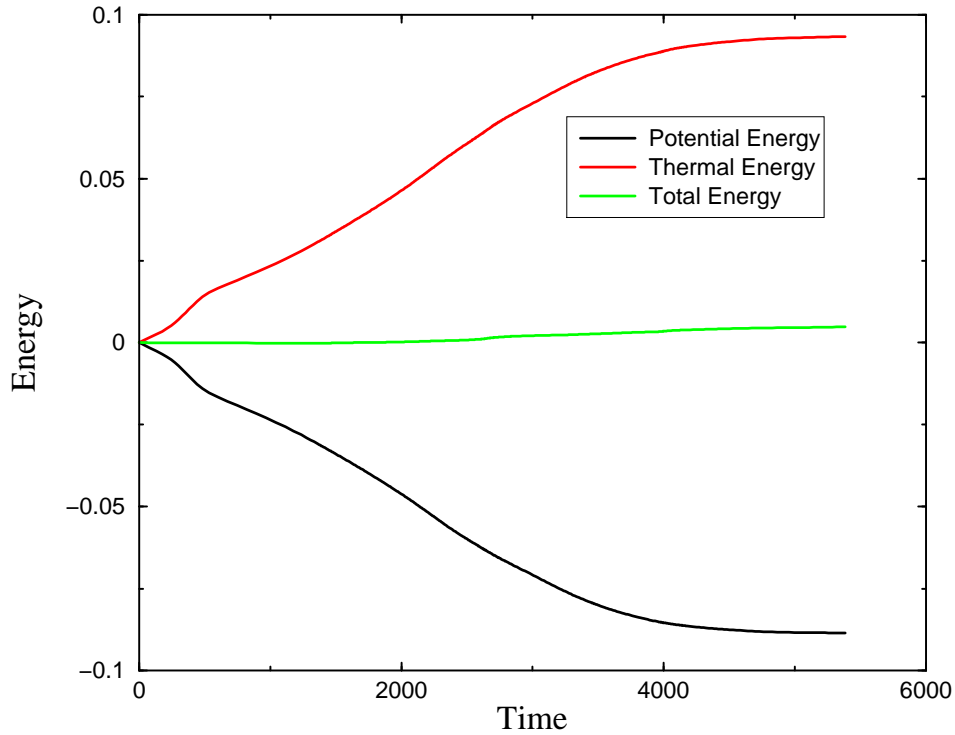


Figure 3.24: Energy conservation of the simulation presented in section 3.8.1. The total energy (green curve) accumulates a relative error of at most 5% of the potential energy change (black curve). In fact up to $t = 2000$ basically no error occurs. For $t > 2000$ the time stepping of the numerical code reaches an arbitrary minimum threshold (an accurate modeling of the extraction of the last bits of metal from silicates, where $\phi \sim 0$, or the last bits of silicates from metal, where $\phi \sim 1$, would require an extremely small time stepping) and we crudely impose a maximum porosity 0.999 and a minimum porosity 0.001. This is necessary to guarantee a reasonable execution time but decreases the accuracy of the results.

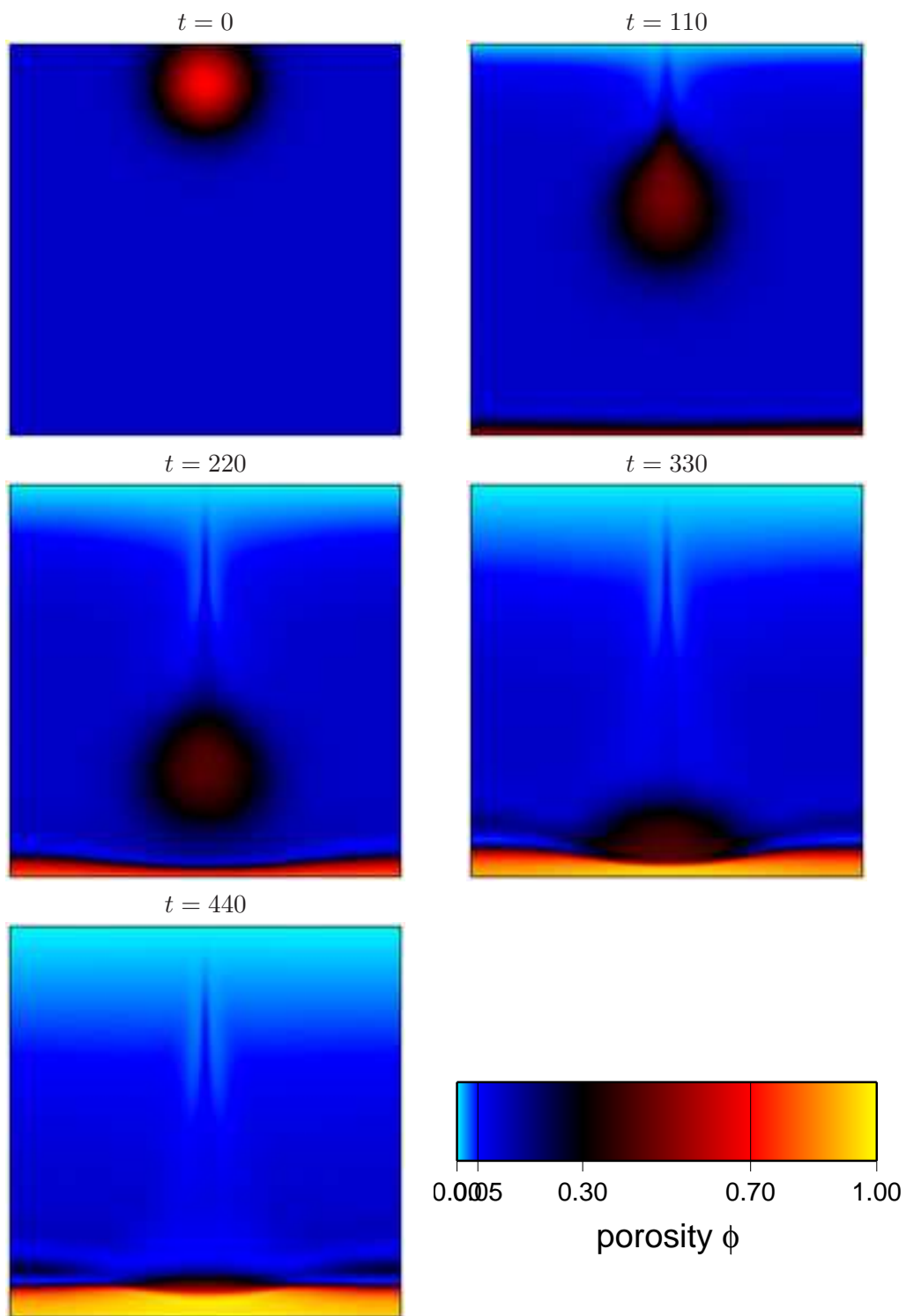


Figure 3.25: Snapshots of porosity in a thermally insulated square box calculation. The initial porosity is a symmetrical Gaussian peak of amplitude 0.6 and FWHM 0.2 over a background porosity of 0.1. The initial temperature is uniform and equal to 0.50 (above the melting temperature of iron 0.48). Approximation 2 ($\mu^* = 1$) is used with no thermal buoyancy ($B = 0$), $Ra = 10^6$, $\delta = 0.1$, on a grid with 297×297 cells and superbee advection of porosity.

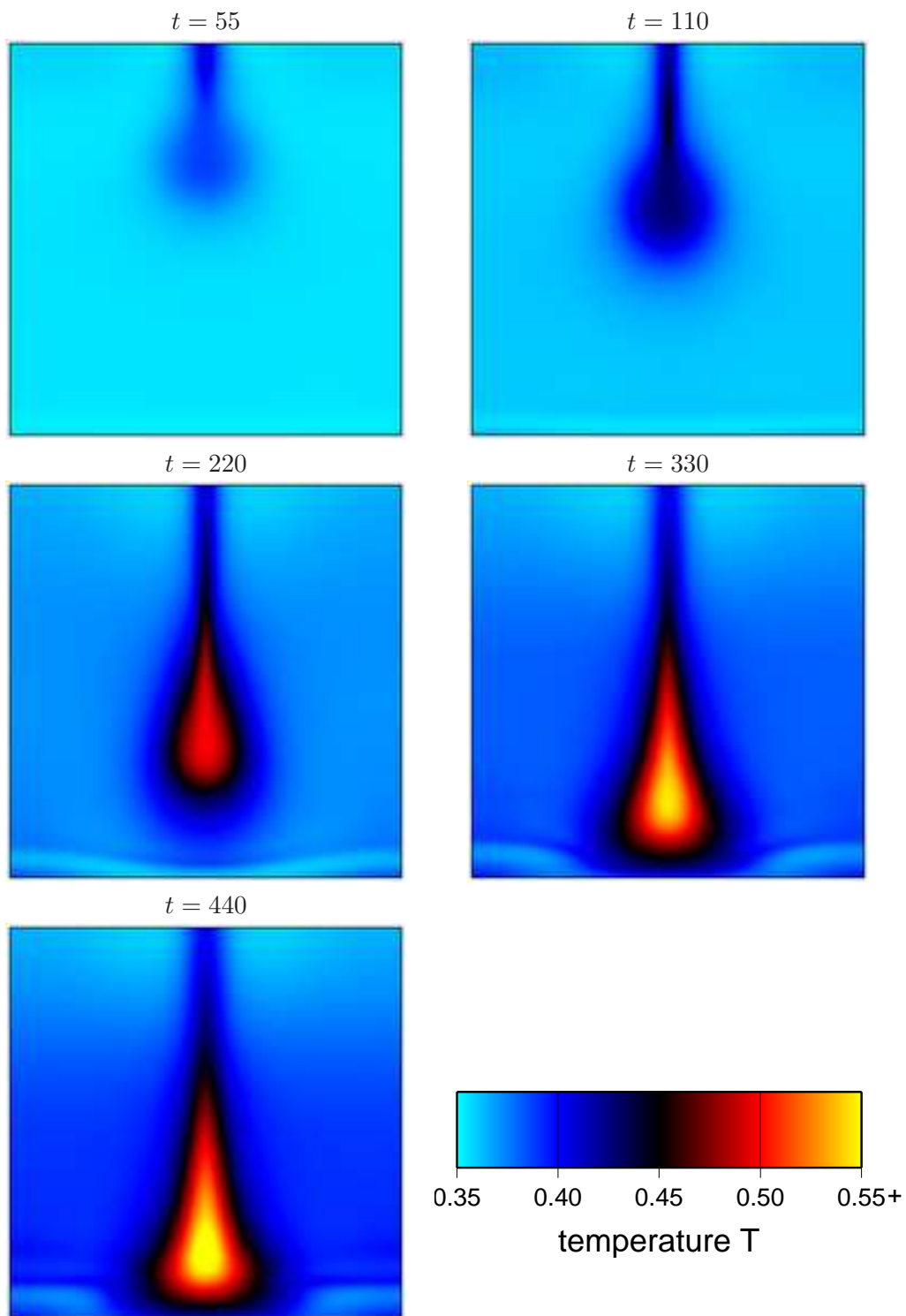


Figure 3.26: Snapshots of the temperature field in a thermally insulated square box. The initial temperature is uniform. Parameters of the calculation are given in the caption of Figure 3.25.

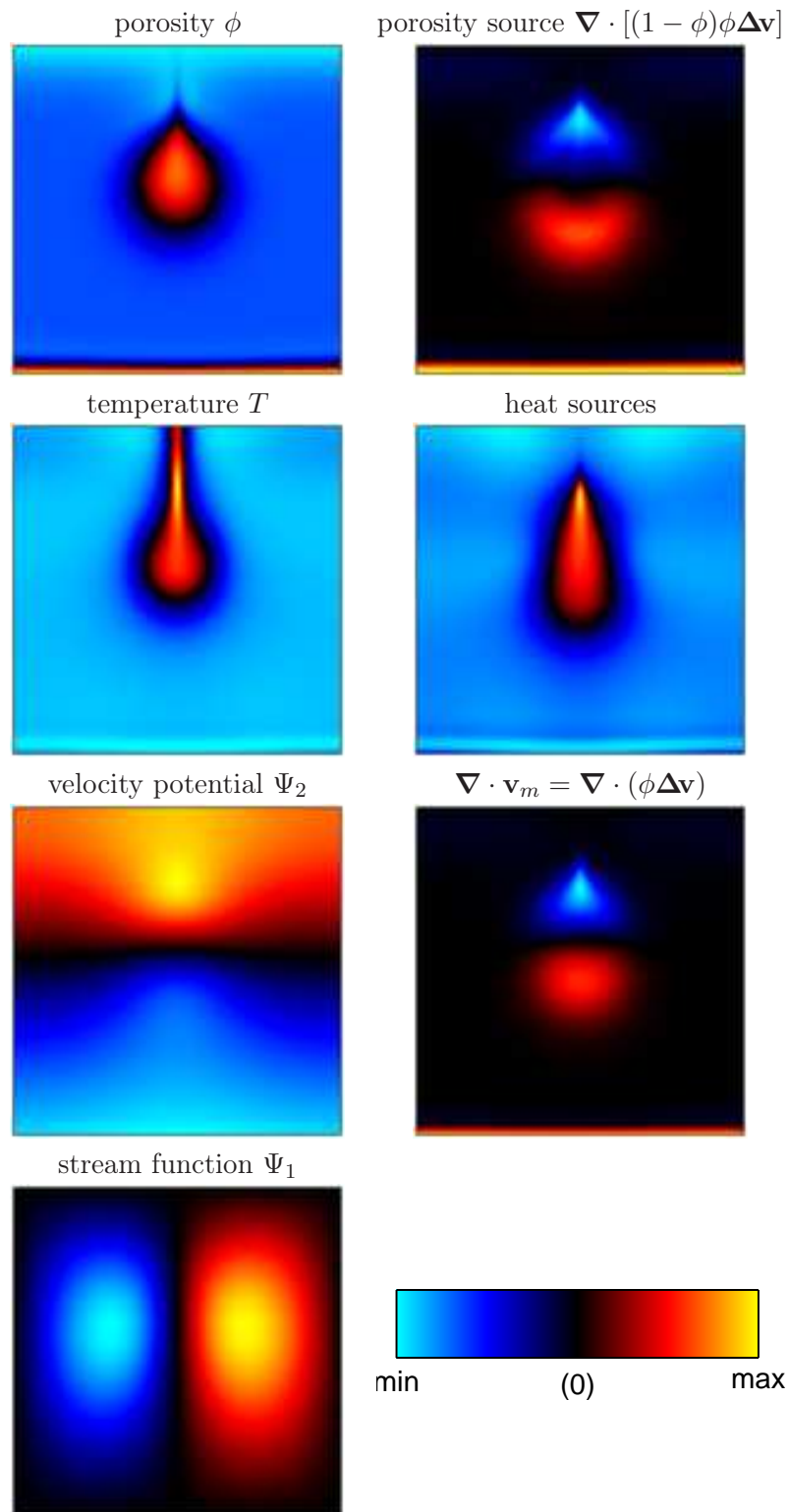


Figure 3.27: Various quantities at time $t = 110$ of the calculation described in the caption of Figure 3.25. The color scale is different in each frame. For quantities that have both positive and negative values (Ψ_1 , Ψ_2 , $\nabla \cdot \mathbf{v}_m$, porosity sources), zero is black and the scale is linear from the minimum value to zero and from zero to the maximum value. For non-negative quantities (ϕ , T , heat sources) the scale is linear from min to max.

Chapitre 4

Modèle biphasé avec la fusion

Simultaneous melting and compaction in deformable two-phase media

Ondřej Šrámek^{1,2}, Yanick Ricard^{3,1} and David Bercovici¹

¹Department of Geology and Geophysics, Yale University, New Haven, USA

²Laboratoire de Sciences de la Terre, CNRS UMR 5570, ENS Lyon, France.

³Laboratoire de Sciences de la Terre, CNRS UMR 5570, UCB Lyon 1, France.

L'article est publié à Geophysical Journal International (Šrámek et al., 2007).

Summary

Melt generation and extraction are typically modeled using the two-phase equations developed by McKenzie (1984) or Scott & Stevenson (1984). Various approximations are often made to simplify the problem which may lead to some unphysical results (*e.g.*, thermodynamically inconsistent conditions of melting and unrealistic porosity profiles). We discuss a generalized version of the set of equations introduced by Bercovici *et al.* (2001a) that allows for mass transfer between the two phases in a single component system and consider a self-consistent set of equations. In our description the two phases, solid and melt, are submitted to individual pressure fields whose difference is related to the surface tension at the interfaces, changes in porosity and the melting rate. A kinetic relation for the melting rate arises from the second law of thermodynamics. The condition of chemical equilibrium corresponds to the usual univariant equality of the chemical potentials of each phase when the matrix and melt are motionless. In the most general form, phase equilibrium is influenced by both the Gibbs-Thomson effect that arises naturally from thermodynamic considerations on surface tension and by the viscous deformation of the phases. We apply these new equations to a steady

state problem of pressure release melting in a univariant system. We treat melting and compaction simultaneously and observe several new effects including multiple domains near the onset of melting that correspond to various force balances. A consequence of matrix compaction and melt expulsion (or matrix dilation and melt accumulation) is a pressure difference between melt and solid that facilitates (inhibits) melting. For parameters corresponding to mid-oceanic ridge magmatism, compaction permits melting to start as much as ~ 2 km below the standard solidus. Numerical solutions are necessary to determine the magnitude of the melt zone shift. Numerical results support the boundary layer solutions obtained analytically and suggest that in most of the melting zone the movement of melt and matrix should be close to the Darcy equilibrium where the buoyancy of melt is balanced by the viscous drag between the phases. The Darcy equilibrium follows an initial stage where the matrix viscous stresses balance Darcy drag. In all situations the steady state porosity profile remains a monotonic function of depth. The existence of a compaction layer following a melting zone where the porosity is maximum as described in various earlier publications has never been found.

Key words

melt generation, mid-ocean ridges, phase transitions, thermodynamics

4.1 Introduction

Melting and melt migration are important processes within the Earth to transport heat and mass and to drive chemical differentiation. Below midocean ridges upwelling material undergoes pressure release melting and new oceanic lithosphere is created (*e.g.*, McKenzie & Bickle, 1988). Partial melting processes are responsible for continental crust formation (*e.g.*, White & McKenzie, 1989). There are suggestions that dehydration-induced partial melting occurs in the transition zone (Bercovici & Karato, 2003; Ohtani *et al.*, 2004). Partial melting may also occur in the region above the core-mantle boundary (Williams & Garnero, 1996). A rigorous theoretical framework is therefore necessary to account for melting in geodynamical modeling of various processes in the Earth.

Description of melting and subsequent melt migration requires a continuum model with at least two distinct phases. Since the pioneering work of Frank (1968) and Sleep (1974) the dynamics of two-phase flows has been extensively discussed in the geophysical literature (*e.g.*, Ahern & Turcotte, 1979; McKenzie, 1984; Ribe, 1985a,b; Scott & Stevenson, 1986; Spiegelman, 1993a,b; Rabinowicz *et al.*, 1987). However, in previous papers (Bercovici *et al.*,

2001a; Bercovici & Ricard, 2003), we have shown that the self-consistent introduction of surface tension and surface free energy between two phases imposes additional rigor to the theoretical modeling. With surface tension, the two phases are clearly submitted to two different pressure fields. The partitioning of the surface energy and interface forces between the two phases also has to be defined. This led us to propose a new set of equations that is also applicable to non-equilibrium situations and provides a model of damage (Bercovici *et al.*, 2001b; Bercovici & Ricard, 2003; Ricard & Bercovici, 2003). Close to thermodynamic equilibrium, neglecting surface tension, assuming that μ_m , the viscosity of the solid matrix phase, is infinitely larger than μ_f , the viscosity of the fluid phase, and assuming small porosity, our equations become equivalent to those proposed by McKenzie (1984), when the bulk viscosity, ζ , is replaced by the porosity dependent factor proportional to μ_m/ϕ . Such a porosity-dependent bulk viscosity was also suggested by others (Nye, 1953; Fowler, 1985; Scott & Stevenson, 1986; Schmeling, 2000); it hinders the squeezing of the matrix and expulsion of melt at low porosity and favors it at large porosity where bulk and shear viscosity become comparable.

In Bercovici *et al.* (2001a) and Bercovici & Ricard (2003) however, we were not concerned with the possible transfer of matter between phases (*i.e.*, with melting of the matrix or solidification of the fluid melt). While some previous studies (*e.g.*, Ribe, 1985a; Schmeling, 2000) discussed the effect of a prescribed melting rate on matrix compaction, to our knowledge, no previous study considered the full feedback between viscous two-phase deformation and the thermodynamic conditions for melting/solidification. The usual simplifying assumptions (ascribing identical pressure to both phases or maintaining the matrix pressure to the lithostatic pressure, neglecting the interfacial effects, decoupling melting from viscous compaction, using empirical laws to relate degree of melting to temperature and pressure) can only be justified by comparison with results based on a more general description. In this study, we offer such a general framework. After formulating the theory for a single component system in section 4.2, with the mass transfer between phases explicitly taken into account, we apply our new set of equations to a simple 1-D steady-state model of pressure-release melting in section 6.1. Concluding remarks follow in section 6.2.

4.2 General theory

We describe a two-phase continuum consisting of a solid matrix and a fluid (melt) phase. We assume that the individual phases have constant densities, ρ_f in the fluid phase and ρ_m in the solid, and constant Newtonian viscosities μ_f and μ_m . Despite this notation that uses indices f and m , however, in its most general form the theory is symmetrical with respect to swapping the phases. For any quantity q with values q_f and q_m in the fluid and matrix phase, we define average and difference quantities by $\bar{q} = \phi q_f + (1 - \phi)q_m$ and $\Delta q = q_m - q_f$.

Equations presented below result from averaging the “true” or microscopic quantities of the mixture assumed isotropic over a control volume. This control volume is sufficiently small to be regarded as a “point” in the continuum mechanical sense but also sufficiently large to contain many pores or grains (see Bear, 1988; Bercovici *et al.*, 2001a).

4.2.1 Mass conservation

The derivation of the two mass conservation equations is fairly standard (see McKenzie, 1984; Bercovici *et al.*, 2001a) and leads to

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot [\phi \mathbf{v}_f] = \frac{\Delta \Gamma}{\rho_f}, \quad (4.1)$$

$$-\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot [(1 - \phi) \mathbf{v}_m] = -\frac{\Delta \Gamma}{\rho_m}, \quad (4.2)$$

where ϕ is porosity or the volume fraction of the fluid phase, the fluid and matrix phases have volume averaged velocities \mathbf{v}_f and \mathbf{v}_m and $\Delta \Gamma$ is the rate of mass exchange per unit volume ($\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$) between the phases. A positive $\Delta \Gamma$ corresponds to melting, a negative $\Delta \Gamma$ to solidification.

4.2.2 Momentum conservation

The momentum equations remain identical to those without phase change, at least in the approximation of infinite Prandtl number. Strictly speaking, new source terms of momentum could arise from the phase change. When matrix material melts, it undergoes a velocity jump from \mathbf{v}_m to \mathbf{v}_f which imposes an impulse discontinuity (Drew, 1983). These terms are however of the order of the kinetic energy which is neglected in this study, as are the terms related to acceleration.

As discussed in Bercovici *et al.* (2001a), the total momentum conservation is

$$-\nabla \bar{P} + \nabla \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} - \bar{\rho} g \hat{\mathbf{z}} + \nabla(\sigma \alpha) = 0. \quad (4.3)$$

In this equation, \bar{P} , $\bar{\boldsymbol{\tau}}$ and $\bar{\rho}$ are the average pressure, viscous stress and density, $\hat{\mathbf{z}}$ is the unit vector in vertical direction, g is the magnitude of gravitational acceleration, and σ is the coefficient of surface tension. The quantity α is the melt-solid interfacial area per unit volume of mixture; it has units of m^{-1} and basically represents the inverse of the average size of grains and pores in the mixture. Here we do not consider grain-grain contacts; these are subject of a study by Hier-Majumder *et al.* (2006).

The total momentum equation is the sum of equations for fluid and matrix which, individually, are (Bercovici & Ricard, 2003)

$$-\phi[\nabla P_f + \rho_f g \hat{\mathbf{z}}] + \nabla \cdot [\phi \underline{\boldsymbol{\tau}}_f] + c \Delta \mathbf{v} + \omega[\Delta P \nabla \phi + \nabla(\sigma\alpha)] = 0, \quad (4.4)$$

$$-(1-\phi)[\nabla P_m + \rho_m g \hat{\mathbf{z}}] + \nabla \cdot [(1-\phi)\underline{\boldsymbol{\tau}}_m] - c \Delta \mathbf{v} + (1-\omega)[\Delta P \nabla \phi + \nabla(\sigma\alpha)] = 0, \quad (4.5)$$

where $\Delta \mathbf{v} = \mathbf{v}_m - \mathbf{v}_f$ is the difference in velocities, and likewise $\Delta P = P_m - P_f$ is the difference in pressures between the phases. The interaction coefficient c is related to permeability which is itself a function of porosity. A symmetrical form compatible with the usual Darcy term is (see Bercovici *et al.*, 2001a)

$$c = \frac{\mu_f \mu_m}{k_0[\mu_f(1-\phi)^{n-2} + \mu_m \phi^{n-2}]}, \quad (4.6)$$

where the permeability of the form $k_0 \phi^n$ was used (the exponent n is usually found to be about 2–3). In the following we assume $n = 2$ and also $\mu_m \gg \mu_f$. The interaction coefficient then becomes $c = \mu_f/k_0$ (independent of porosity). The parameter ω is discussed in section 4.2.2.

The relationship between stress and velocities does not include an explicit bulk viscosity term (Bercovici *et al.*, 2001a), and for each phase j the deviatoric stress is simply

$$\underline{\boldsymbol{\tau}}_j = \mu_j \left(\nabla \mathbf{v}_j + [\nabla \mathbf{v}_j]^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_j \mathbf{I} \right), \quad (4.7)$$

where j stands for f or m , $[\cdot]^T$ denotes tensor transpose and \mathbf{I} is the identity tensor.

Instead of using the two force balance equations (4.4) and (4.5), it is often easier to use the total momentum equation (4.3) and the “action-reaction” equation that can be deduced by combining the two former equations,

$$-\phi(1-\phi)[\nabla \Delta P + \Delta \rho g \hat{\mathbf{z}}] + \nabla \cdot [\phi(1-\phi)\Delta \underline{\boldsymbol{\tau}}] - \bar{\boldsymbol{\tau}} \cdot \nabla \phi - c \Delta \mathbf{v} + (\phi - \omega)[\Delta P \nabla \phi + \nabla(\sigma\alpha)] = 0. \quad (4.8)$$

Interfacial quantities

The interface between the phases exerts a surface force on the two-phase mixture. The coefficient ω , $0 < \omega < 1$, controls the partitioning of the interface surface force between the two phases (Bercovici & Ricard, 2003) and represents the fraction of the volume-averaged surface force exerted on the fluid phase. The exact value of ω is related to the microscopic behavior of the two phases (molecular bond strengths and thickness of the interfacial region or “selvedge” layer) and represents the extent to which the interface is embedded in one phase more than

the other. The only general physical constraints that we have is that ω must be zero when the fluid phase disappears (when $\phi = 0$) and when the fluid phase becomes unable to sustain stresses (when $\mu_f = 0$). A symmetrical form like

$$\omega = \frac{\phi\mu_f}{\phi\mu_f + (1 - \phi)\mu_m} \quad (4.9)$$

would satisfy these conditions.

Given the surface force partitioning, the velocity that controls the surface work is consequently found to be the ω -weighted sum of the phase velocities

$$\mathbf{v}_\omega = \omega\mathbf{v}_f + (1 - \omega)\mathbf{v}_m. \quad (4.10)$$

which reflects the extent to which the interface is advected by each of the phases (Bercovici & Ricard, 2003).

On the microscopic level, a phase change contributes to the interface motion with the velocity of the propagating phase front. However this phase front velocity has opposite directions at opposite sides of a grain/pore. The velocity of the interfaces due to a phase change averaged over a control volume is proportional to the integral $\int \Delta\Gamma\hat{\mathbf{n}}dS$, where the integration is over all the interfacial surfaces with normal $\hat{\mathbf{n}}$ (pointing say, from the matrix phase to the fluid phase). Assuming that the two-phase mixture is isotropic then the interfaces are randomly oriented, in which case the integral $\int \Delta\Gamma\hat{\mathbf{n}}dS$ is zero if $\Delta\Gamma$ is uniform or slowly varying relative to fluctuations in $\hat{\mathbf{n}}$. The average interface velocity therefore remains \mathbf{v}_ω with or without melting, *i.e.* is independent of the instantaneous melting rate.

Bercovici & Ricard (2003) show that the pressure P_i on the interface between the two fluids is (see also Drew, 1983)

$$P_i = (1 - \omega)P_f + \omega P_m. \quad (4.11)$$

Notice that the weighting factors ω and $1 - \omega$ appear in a reverse order in (4.11) compared to (4.10). The behavior of P_i can be understood by rewriting the pressure jump ΔP as the difference between the pressure jump across the matrix selvedge layer and that across the fluid selvedge layer, $\Delta P = (P_m - P_i) - (P_f - P_i)$. In the case where the surface effects are totally embedded in the matrix ($\mu_f = 0$ and $\omega = 0$), the entire pressure drop across the interface should be accounted for by the matrix contribution, and therefore controlled by the first term $P_m - P_i$ containing the matrix pressure. One thus gets $P_i = P_f$. Later (in section 4.2.3) we will find it necessary to introduce an effective interface density weighted in the same way as the interface pressure P_i ,

$$\rho_i = (1 - \omega)\rho_f + \omega\rho_m. \quad (4.12)$$

4.2.3 Energy conservation

No terms related to phase change appear in the creeping momentum equations, and only appear in a trivial way in the two mass conservation equations. In contrast, the energy equation is modified in a substantial way and is now discussed in detail.

Each phase has a specific (per mass) internal energy, ε_f and ε_m , respectively. In our model where individual phases are incompressible, the internal energy density of each phase is uniquely determined by the temperature. We assume the same temperature T in both phases (local thermal equilibrium). We can write $d\varepsilon_j = C_j dT$, where C_j is the heat capacity of phase j . To account for its thermodynamic presence, the interface is treated as an independent phase. The mechanical and thermodynamic state of the interface is described by its surface energy ξ_i , entropy s_i (both per unit area), and surface tension coefficient σ ; these quantities are (for chemically homogeneous systems) related according to (Bailyn, 1994; Bercovici *et al.*, 2001a)

$$s_i = -\frac{d\sigma}{dT}, \quad \xi_i = \sigma - T \frac{d\sigma}{dT}. \quad (4.13)$$

The interfacial surface energy is transported by the moving continuum with the average interface velocity \mathbf{v}_ω defined by equation (4.10).

The conservation of energy is expressed by the following equation where the left-hand side represents the temporal change of energy content in a fixed control volume and the right-hand side represents the different contributions to this change, namely internal heat sources, Q , loss of energy due to diffusion, $\nabla \cdot \mathbf{q}$, advection of energy, and rate of work of both surface and body forces.

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} [\phi \rho_f \varepsilon_f + (1 - \phi) \rho_m \varepsilon_m + \xi_i \alpha] \\ &= Q - \nabla \cdot \mathbf{q} - \nabla \cdot [\phi \rho_f \varepsilon_f \mathbf{v}_f + (1 - \phi) \rho_m \varepsilon_m \mathbf{v}_m + \xi_i \alpha \mathbf{v}_\omega] \\ &+ \nabla \cdot [-\phi P_f \mathbf{v}_f - (1 - \phi) P_m \mathbf{v}_m + \phi \mathbf{v}_f \cdot \underline{\boldsymbol{\tau}}_f + (1 - \phi) \mathbf{v}_m \cdot \underline{\boldsymbol{\tau}}_m + \sigma \alpha \mathbf{v}_\omega] \\ &- \phi \mathbf{v}_f \cdot \rho_f g \hat{\mathbf{z}} - (1 - \phi) \mathbf{v}_m \cdot \rho_m g \hat{\mathbf{z}}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

The last equation is manipulated in the standard way using the mass and momentum equations. We also use expressions for $d\varepsilon_j$ and relationship between interfacial energy and entropy, (4.13). After some algebra we get

$$\begin{aligned} & \phi \rho_f C_f \frac{D_f T}{Dt} + (1 - \phi) \rho_m C_m \frac{D_m T}{Dt} - T \frac{D_\omega}{Dt} \left(\alpha \frac{d\sigma}{dT} \right) - T \alpha \frac{d\sigma}{dT} \nabla \cdot \mathbf{v}_\omega \\ &= Q - \nabla \cdot \mathbf{q} + \Psi - \left(\Delta P + \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \right) \frac{D_\omega \phi}{Dt} + \left[\Delta \varepsilon + \frac{P_m}{\rho_m} - \frac{P_f}{\rho_f} \right] \Delta \Gamma, \end{aligned} \quad (4.15)$$

where $\Delta\varepsilon = \varepsilon_m - \varepsilon_f$ is the difference between the specific internal energies of the phases, and Ψ is the rate of deformational work,

$$\Psi = c\Delta v^2 + \phi \nabla \mathbf{v}_f : \boldsymbol{\tau}_f + (1 - \phi) \nabla \mathbf{v}_m : \boldsymbol{\tau}_m. \quad (4.16)$$

The fundamental derivatives are defined by

$$\frac{D_j}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_j \cdot \nabla, \quad (4.17)$$

where j is to be substituted with the appropriate subscript f , m or ω .

Equation (4.15) is arranged in such a way as to group the terms related to temporal entropy variations on the left-hand side ($-\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}T$ is the interfacial entropy). The right-hand side then contains terms related to entropy sources and fluxes. In addition to the usual heat production, diffusion and deformational work, two other expressions appear with clear physical meanings. One of them includes $\Delta P + \sigma \mathrm{d}\alpha/\mathrm{d}\phi$. As the quantity $\mathrm{d}\alpha/\mathrm{d}\phi$ is the sum of the average curvatures of grain/pores, $2/\langle R \rangle$ (here curvature is defined positive when concave to the fluid; see Bercovici *et al.*, 2001a), the Laplace's condition on the pressure drop across a curved interface is recovered when the pressure difference between the two phases is $\Delta P = -\sigma \mathrm{d}\phi/\mathrm{d}\alpha$ (Landau & Lifshitz, 1959). The Laplace's equilibrium condition can only be satisfied if the phases are stationary. Thus $\Delta P + \sigma \mathrm{d}\phi/\mathrm{d}\alpha$ is the out-of-equilibrium pressure difference, that is due to the viscous deformation of the phases. The other term contains the difference in the specific enthalpies $\Delta h = h_m - h_f$ where the enthalpy of phase j is defined by $h_j = \varepsilon_j + P_j/\rho_j$. The energy equation (4.15) corresponds to the one found in Bercovici *et al.* (2001a, eqn. 59). It contains one additional source term, $\Delta h \Delta \Gamma$, which arises from the phase change.

The mass conservation equations (4.1) and (4.2), the momentum equations (4.4) and (4.5), augmented by the viscous stress relations (4.7), and the energy equation (4.15) need to be supplemented with two more relations. In particular we need to determine the pressure difference ΔP between the phases and the melting rate $\Delta \Gamma$. To this end, we examine entropy production in the system and employ the method of non-equilibrium thermodynamics (*e.g.*, de Groot & Mazur, 1984) to arrive at the two requisite equations, similar to the approach that was presented in Bercovici *et al.* (2001a). In the case with no phase change ($\Delta \Gamma$ identically zero) this non-equilibrium thermodynamics approach led to a relationship between the interphase pressure drop ΔP and viscous compaction (Bercovici *et al.*, 2001a).

The entropy conservation writes in the most general case (de Groot & Mazur, 1984)

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \rho_f s_f + (1 - \phi) \rho_m s_m - \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} \alpha \right] = -\nabla \cdot \left[\phi \rho_f s_f \mathbf{v}_f + (1 - \phi) \rho_m s_m \mathbf{v}_m - \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}T} \alpha \mathbf{v}_\omega \right] - \nabla \cdot \mathbf{J} + \mathcal{S}, \quad (4.18)$$

where \mathbf{J} represents the microscopic non-convective entropy flux and \mathcal{S} is the internal entropy production. According to the second law of thermodynamics, \mathcal{S} cannot be negative. To identify the entropy sources and the microscopic flux in our particular case, we compare the energy and the entropy equations (4.15) and (4.18) taking into account that, for each incompressible phase, $ds_j = C_j dT/T = d\varepsilon_j/T$. After some algebra, one gets

$$\mathbf{J} = \frac{\mathbf{q}}{T}, \quad (4.19)$$

$$TS = Q - \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \nabla T + \Psi - \left(\Delta P + \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \right) \frac{D_\omega \phi}{Dt} + \Delta \Gamma \Delta \mu, \quad (4.20)$$

where we have introduced the difference in chemical potential between the two phases

$$\Delta \mu = \Delta \varepsilon + \frac{P_m}{\rho_m} - \frac{P_f}{\rho_f} - T \Delta s, \quad (4.21)$$

where $\Delta s = s_m - s_f$ is the change in specific entropies. In addition to the usual entropy sources related to heat production, diffusion, and dissipation Ψ (see equation (4.16)), we find two additional entropy sources: one is related to the out-of-equilibrium pressure difference and goes as $-(\Delta P + \sigma d\alpha/d\phi)$ multiplied by the temporal change in porosity $D_\omega \phi/Dt$; the other arises from the phase change rate $\Delta \Gamma$, which is multiplied by the difference of chemical potential of the bulk phases $\Delta \mu$.

It is tempting to recognize two thermodynamic scalar forces and their conjugate fluxes in the last two terms of the entropy production (4.20). However, with this choice, the individual forces and fluxes are not independent; the pressure jump affects the chemical potential difference, and the porosity change is affected by the melting rate. Therefore we reorganize the entropy production term \mathcal{S} in a somewhat different form. We write

$$TS = Q - \frac{1}{T} \mathbf{q} \cdot \nabla T + \Psi - \left(\Delta P + \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \right) \left(\frac{D_\omega \phi}{Dt} - \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} \Delta \Gamma \right) + \Delta \Gamma \left[\Delta \mu - \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} \left(\Delta P + \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \right) \right]. \quad (4.22)$$

In this expression, the pressure jump in excess of Laplace's condition appears as conjugate to the porosity change in excess of melting, which can be expressed, using (4.1), (4.2), (4.10) and (4.12), as

$$\frac{D_\omega \phi}{Dt} - \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} \Delta \Gamma = (1 - \omega)(1 - \phi) \nabla \cdot \mathbf{v}_m - \omega \phi \nabla \cdot \mathbf{v}_f. \quad (4.23)$$

Using (4.11), (4.12) and (4.21), we can write

$$\Delta \mu - \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} \left(\Delta P + \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \right) = \Delta \varepsilon - T \Delta s - P_i \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} - \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m}. \quad (4.24)$$

The expressions (4.23) and (4.24) are chosen as the thermodynamic forces. Following

the standard procedure of non-equilibrium thermodynamics (*e.g.*, de Groot & Mazur, 1984), we assume that there is a coupled linear relationship between the two thermodynamic scalar fluxes, and the two thermodynamic forces, to wit

$$-\left(\Delta P + \sigma \frac{d\alpha}{d\phi}\right) = L_{11} \left(\frac{D_\omega \phi}{Dt} - \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} \Delta \Gamma\right) + L_{12} \left(\Delta \varepsilon - T \Delta s - P_i \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} - \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m}\right), \quad (4.25)$$

$$\Delta \Gamma = L_{21} \left(\frac{D_\omega \phi}{Dt} - \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} \Delta \Gamma\right) + L_{22} \left(\Delta \varepsilon - T \Delta s - P_i \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} - \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m}\right). \quad (4.26)$$

The phenomenological coefficients L_{ij} form a 2 by 2 matrix \mathbf{L} . The off-diagonal coefficients of this matrix can be constrained using the Onsager's theorem (de Groot & Mazur, 1984). The two forces (4.23) and (4.24) in our problem are odd and even functions of velocities, respectively; then following Onsager's findings we have $L_{21} = -L_{12}$, *i.e.*, the matrix \mathbf{L} is antisymmetric. To insure the positivity of the entropy production, the symmetric part of the matrix \mathbf{L} must be positive definite; this constraint gives us $L_{11} > 0$ and $L_{22} > 0$.

The existence of a non-zero coupling phenomenological coefficients like L_{12} is possible in irreversible thermodynamic but is not always the case. In our context, a thought experiment suggests that the two fluxes decouple ($L_{12} = L_{21} = 0$). Let us consider a situation of homogeneous isotropic melting without surface tension where the melt has such a low viscosity that it cannot sustain viscous stresses and cannot interact with the solid by Darcy terms. For such an inviscid melt $\omega = 0$ according to (4.9). In this case, as the melt can escape instantaneously, the matrix should not dilate (*i.e.*, using (4.23), the first term on the right-hand side of (4.25) is zero), and thus the two pressures should be the same (therefore the left-hand side should disappear). The only solution for the equation (4.25) to hold is to have $L_{12} = 0$ as the term containing $\Delta \mu$ can be arbitrarily imposed.

Another requirement is that (4.25) should correspond to what was found in Bercovici *et al.* (2001a) and Bercovici & Ricard (2003) when $\Delta \Gamma = 0$. Simple micromechanical models (*e.g.* Nye, 1953) allow us to evaluate L_{11} ,

$$L_{11} = K_0 \frac{\mu_f + \mu_m}{\phi(1 - \phi)}. \quad (4.27)$$

The dimensionless constant K_0 accounts for grain/pore geometry and is of $O(1)$.

Using these constraints we can therefore restate the two phenomenological equations as

$$\Delta P + \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} = -K_0 \frac{\mu_f + \mu_m}{\phi(1 - \phi)} \left(\frac{D_\omega \phi}{Dt} - \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} \Delta \Gamma\right), \quad (4.28)$$

$$\Delta \Gamma = L_{22} \left(\Delta \varepsilon - T \Delta s - P_i \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} - \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m}\right). \quad (4.29)$$

The first equation establishes a general relationship controlling the pressure drop between phases. The left-hand side represents the out-of-equilibrium pressure difference due to deformation of the two-phase mush. This deformation is represented on the right-hand side by the temporal change in porosity less the contribution from the phase transition. This condition is in agreement with that found in previous papers without phases changes (Bercovici *et al.*, 2001a; Ricard *et al.*, 2001; Bercovici & Ricard, 2003). In the former, it was argued that some deformational work could also affect this pressure drop. This hypothesis led to a damage theory developed in Bercovici *et al.* (2001b); Ricard & Bercovici (2003) and Bercovici & Ricard (2005). Here we assume that the system remains close enough to mechanical equilibrium that no damage occurs and we use (4.28). The generalization would anyway be straightforward.

The second equation gives the melting rate in terms of departure from thermodynamic equilibrium between the phases, represented by the parentheses on the right-hand side. The linear relationship assumes that the departures from equilibrium are small. The positive coefficient L_{22} is related to the usual rate constant k_r of kinetic theory (see for example Lasaga, 1998).

4.2.4 The equilibrium condition

In the case of mechanical equilibrium (*i.e.*, when Laplace's condition holds), (4.29) recovers the usual proportionality of the melting rate to the difference in chemical potentials of single phases $\Delta\mu$ (see also (4.24)). In general the non-equilibrium pressure drop affects the melting rate. We thus define a new chemical equilibrium state from (4.29) with $\Delta\Gamma/L_{22} \rightarrow 0$, which requires

$$\Delta\varepsilon - T\Delta s - P_i \frac{\Delta\rho}{\rho_f \rho_m} - \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} = 0. \quad (4.30)$$

This equilibrium is controlled by the interface properties, interface pressure P_i and interface density ρ_i (see (4.11) and (4.12)).

In the following we assume that the melting occurs at equilibrium and use (4.30) rather than the kinetic relation (4.29) (this is equivalent to using (4.29) with a very large kinetic coefficient L_{22}). We also make the assumption that the heat capacities are constant; in this case, for each phase j one has

$$\varepsilon_j = \varepsilon_j^0 + C_j(T - T_0), \quad (4.31)$$

$$s_j = s_j^0 + C_j \ln\left(\frac{T}{T_0}\right), \quad (4.32)$$

where T_0 , ε_j^0 and s_j^0 are reference values. We assume that the two heat capacities are equal,

$C_f = C_m = C$, and the equilibrium condition (4.30) thus simply writes

$$(T - T_0)\Delta s + P_i \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} + \sigma \frac{d\alpha}{d\phi} \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} = 0, \quad (4.33)$$

where $\Delta s = \Delta s^0$ and $T_0 = \Delta \varepsilon^0 / \Delta s^0$; T_0 is therefore the melting temperature of a flat interface at zero pressure. In this equation one can introduce the classical Clapeyron slope $\gamma' = -\Delta \rho / (\rho_f \rho_m \Delta s)$ (in K Pa^{-1}). We can also express the melting temperature in terms of the measurable average pressure \bar{P} :

$$T = T_0 + \gamma' \bar{P} - \frac{\sigma}{\Delta s} \frac{\bar{\rho}}{\rho_f \rho_m} \frac{d\alpha}{d\phi} + \gamma' K_0 (1 - \omega - \phi) \frac{\mu_m + \mu_f}{\phi(1 - \phi)} \left(\frac{D_\omega \phi}{Dt} - \frac{\rho_i}{\rho_f \rho_m} \Delta \Gamma \right). \quad (4.34)$$

This equation shows that two new terms affect the Clapeyron static melting condition, $T = T_0 + \gamma' \bar{P}$, that would hold in a single phase modeling. The third term on the right side of (4.33), containing the surface tension σ , represents the Gibbs-Thomson effect. For grains of silicates in contact with the melt, the values of surface tension are around 1 J m^{-2} . With $\rho \sim 3000 \text{ kg m}^{-3}$ and $\Delta s \sim -(300-400) \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$, this term is quite small for grain size of $10 \mu\text{m}-1 \text{ mm}$, spanning a range of about $0.001-0.1 \text{ K}$. In this calculation we took $1/\text{grain size}$ as the measure of characteristic interface curvature. In theory the Gibbs-Thomson effect could be significant, depending on the behavior of $d\alpha/d\phi$, which is a more appropriate measure of the average curvature, *i.e.*, depending on the microscopic model of the interfaces. In the case where all interfaces are between matrix and magma (*i.e.*, when grain-grain interfaces are not considered), the dependence of α on ϕ is such that $d\alpha/d\phi$ becomes very large as $\phi \rightarrow 0$, remains positive at small ϕ and changes sign at some ϕ_c . The nucleation of a new phase (at $\phi = 0$) requires lower pressure or larger temperature than those of the Clapeyron curve to overcome the pressure jump associated with interface surface tension. Similar behavior was found in the model that includes grain-grain interfaces in the case of large (> 60 degrees) dihedral angle. If the dihedral angle is small (< 60 degrees), the presence of grain-grain interfaces causes the sum of average curvatures $d\alpha/d\phi > 0$ to become negative and nucleation of melt occurs at higher pressure or lower temperature compared to Clapeyron conditions (Hier-Majumder *et al.*, 2006). The question remains as to the nature of the first melt to appear. If the first liquid forms at some localized nucleation sites as tiny droplets, the pressure will be increased due to large positive interface curvature, and the Gibbs-Thomson effect will act against melting. This case could be, at least qualitatively, modeled using a simple interface model without grain-grain interfaces (discussed above); the model could be adjusted such that the change in curvature sign occurs at some very small porosity ϕ_c . On the other hand, if the first melt behaves as a wetting grain boundary phase, then melting is probably facilitated by the Gibbs-Thomson effect.

The last term on the right side of (4.34) is the dynamic pressure perturbation caused by matrix dilation or compaction (that is not associated with melting or freezing). With $\mu_f \ll \mu_m$ and thus $\omega = 0$, the dynamic pressure perturbation simplifies to $K_0\mu_m(1 - \phi)/\phi \nabla \cdot \mathbf{v}_m$. In a compacting melting matrix ($\nabla \cdot \mathbf{v}_m < 0$), the dynamic pressure is negative and melting thus occurs at larger mean pressure \bar{P} or at lower temperature than in a static case. Reciprocally, in a dilating matrix ($\nabla \cdot \mathbf{v}_m > 0$) melting requires lower pressure or higher temperatures. When $\rho_f < \rho_m$, the bulk volume increases upon melting. The melt is extracted since it is lighter than the matrix and rises faster. Whether the matrix compacts or dilates depends on how efficient the melt extraction is relative to the bulk volume increase. We have thus identified two effects that change the Clapeyron melting condition based on the average pressure \bar{P} : Gibbs-Thomson effect and dynamic pressure perturbation. Both can influence the phase equilibrium in either direction. The dynamic pressure effect will be quantified in section 6.1.3.

4.2.5 Simplifying assumptions and governing equations

The introduction of surface tension was crucial to derive our equations properly by forcing us to be explicit in the definitions of the various quantities, pressures, densities and velocities, pertaining to surfaces or phases. However, the surface tension also induces the well-known Gibbs-Thomson effect in which case melting may be totally forbidden by capillary forces unless a more sophisticated model of heterogeneous nucleation is considered. This physical difficulty could be removed by considering a more realistic case wherein the matrix itself contains both grain-fluid and grain-grain interfaces, each with different surface tension (see Hier-Majumder *et al.*, 2006, for a complete discussion). We leave the discussion of the surface tension effects for future studies and assume in the rest of the paper that $\sigma = 0$.

We further assume that the matrix is much more viscous than the fluid phase ($\mu_f \ll \mu_m$) as typical for melting scenarios, which implies that $\underline{\tau}_f = 0$, $\omega = 0$, $\rho_i = \rho_f$, $P_i = P_f$, and $\mathbf{v}_\omega = \mathbf{v}_m$. For convenience we summarize the governing equations with these assumptions ($\sigma = 0$, $\mu_f \ll \mu_m$).

By combining equations (4.1) and (4.2) we obtain the mass conservation for the two phase material

$$\nabla \cdot \bar{\rho} \mathbf{v} = \Delta \rho \frac{\partial \phi}{\partial t}, \quad (4.35)$$

where $\bar{\rho} \mathbf{v} = \rho_f \phi \mathbf{v}_f + \rho_m (1 - \phi) \mathbf{v}_m$. It must be supplemented by another mass conservation equation, for example the matrix equation

$$-\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot [(1 - \phi) \mathbf{v}_m] = -\frac{\Delta \Gamma}{\rho_m}. \quad (4.36)$$

The equations of conservation of momentum for the fluid phase is

$$-\phi \nabla [P_f + \rho_f g z] + c \Delta \mathbf{v} = 0, \quad (4.37)$$

and the force-difference (or action-reaction) equation is

$$-\nabla [(1 - \phi) \Delta P] - (1 - \phi) \Delta \rho g \hat{\mathbf{z}} + \nabla \cdot [(1 - \phi) \underline{\boldsymbol{\tau}}_m] - \frac{c \Delta \mathbf{v}}{\phi} = 0. \quad (4.38)$$

The deviatoric stress in the matrix is given by

$$\boldsymbol{\tau}_m = \mu_m \left(\nabla \mathbf{v}_m + [\nabla \mathbf{v}_m]^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{v}_m \mathbf{I} \right). \quad (4.39)$$

The pressure jump between phases becomes

$$\Delta P = -K_0 \frac{\mu_m}{\phi} \nabla \cdot \mathbf{v}_m. \quad (4.40)$$

Here $K_0 \mu_m / \phi$ represents the bulk viscosity. The value of the dimensionless factor K_0 depends on the geometry of the two-phase mixture. In the case of non-interacting cylindrical inclusions Bercovici *et al.* (2001a) found $K_0 = 1$. Some more complicated functional dependence of bulk viscosity on porosity was suggested (see discussion in Schmeling, 2000) that takes into account the interaction between individual pores/grains. Here we will assume the simple $1/\phi$ dependence as it captures the most important characteristic of the bulk viscosity in the limit of small porosity. For the sake of compact mathematical expressions here we adopt the value $K_0 = 4/3$.

In general, when the phases are not in thermodynamic equilibrium, the rate of melting is determined by (4.29), which, with (4.31) and (4.32), yields

$$\Delta \Gamma = -L_{22} \left[(T - T_0) \Delta s + P_f \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} \right], \quad (4.41)$$

where P_f could be replaced by $\bar{P} + K_0 \mu_m (1 - \phi) \nabla \cdot \mathbf{v}_m / \phi$ to emphasize the effect of compaction on the melting condition. In the following we assume thermodynamic equilibrium, *i.e.*, an infinitely fast reaction rate ($L_{22} \rightarrow \infty$).

The energy equation is

$$\rho_f \phi C \frac{D_f T}{Dt} + \rho_m (1 - \phi) C \frac{D_m T}{Dt} - T \Delta s \Delta \Gamma = Q - \nabla \cdot \mathbf{q} + \frac{\Delta \Gamma^2}{L_{22}} + K_0 \mu_m \frac{1 - \phi}{\phi} (\nabla \cdot \mathbf{v}_m)^2 + \Psi. \quad (4.42)$$

On the right-hand side one recognizes the various dissipative terms, in particular the chemical relaxation term $\Delta \Gamma^2 / L_{22}$ (de Groot & Mazur, 1984), and the bulk compression term

$$K_0 \mu_m (1 - \phi) / \phi (\nabla \cdot \mathbf{v}_m)^2.$$

In the case of thermodynamic equilibrium ($L_{22} \rightarrow \infty$) the Gibbs equilibrium condition (4.41) is no longer an equation for the melting rate. It can be interpreted as an equation for the temperature while the energy equation (4.42) controls the melting rate.

Table 4.1: Table of quantities et parameters of two-phase model

symbol	description	definition	units
\bar{q}	average quantity defined for any q_f, q_m	$\phi q_f + (1 - \phi)q_m$	unité of q_f, q_m
Δq	difference quantity defined for any q_f, q_m	$q_m - q_f$	units of q_j 's
ϕ	porosity, volume fraction of fluid phase		1
$\mathbf{v}_f, \mathbf{v}_m$	average fluid and matrix velocities		m/s (or dimless)
\mathbf{v}_ω	average interface velocity		m/s
$\Delta\Gamma$	melting rate		kg/(m ³ s)
X	degree of melting		1
P_f, P_m	average fluid and matrix pressures		Pa (or dimless)
P_i	effective pressure on the interface		Pa
T	temperature		K (or dimless)
$\underline{\boldsymbol{\tau}}_f, \underline{\boldsymbol{\tau}}_m$	fluid and matrix viscous stress tensor		Pa
$\varepsilon_f, \varepsilon_m$	specific internal energies of fluid and matrix		J/kg
ξ_i	interfacial surface energy		J/m ²
s_f, s_m	specific entropies of fluid and matrix		J/(K kg)
s_i	interfacial entropy		J/(K m ²)
Δs	difference of entropies at reference temperature T_0	$s_m^0 - s_f^0$	J/(K kg)
h_f, h_m	specific enthalpies		J/kg
Δh	difference in specific enthalpies	$h_m - h_f$	J/kg
$\Delta\mu$	difference in chemical potentials	$\Delta h - T(s_m - s_f)$	J/lg
z	vertical coordinate		m (or dimless)
t	time		s (or dimless)
$\hat{\mathbf{z}}$	unit vector in vertical direction		
ρ_f, ρ_m	fluid and matrix densities		kg/m ³
ρ_i	effective interfacial density		kg/m ³
μ_f, μ_m	fluid and matrix shear viscosities		Pa s
K_0	geometric factor of $O(1)$		1
σ	surface tension		J/m ²
α	interface area density		1/m
g	gravitational acceleration		m/s ²
ω	surface energy partitioning coefficient		1
k_0	constant in permeability relationship		m ²

Table 4.1: Table of quantities et parameters of two-phase model (continued)

symbol	description	definition	units
c	Darcy interaction coefficient		Pa s/m^2
Q	heat source		$\text{J}/(\text{m}^3 \text{s})$
\mathbf{q}	heat flux		$\text{J}/(\text{m}^2 \text{s})$
Ψ	deformational work		$\text{J}/(\text{m}^3 \text{s})$
\mathbf{J}	non-convective entropy flux		$\text{J}/(\text{K m}^2 \text{s})$
\mathcal{S}	entropy production		$\text{J}/(\text{K m}^3 \text{s})$
C	heat capacity		$\text{J}/(\text{K kg})$
T_0	initial temperature of upwelling		K
T_σ	capillarity temperature scale		K
V	initial velocity of upwelling		m/s
H	length scale	$\rho_f T_0 \Delta s^2 / (\Delta \rho g C)$	m
γ	Clapeyron slope	$\Delta \rho / (\rho_f \rho_m \Delta s)$	K/Pa
k_T	thermal conductivity		$\text{J}/(\text{m s K})$
R	density ratio	ρ_f / ρ_m	1
V_B	buoyancy velocity	$\Delta \rho g / (cV)$	1
β		$-C / \Delta s$	1
κ		$R k_T T_0 / (\Delta \rho g V H^2)$	1
δ	compaction length	$\sqrt{4\mu_m / (3cH^2)}$	1

Chapitre 5

Quelques solutions simples de couplage fusion/déformation

5.1 La fusion d'une sphère

L'étude de la fusion et compaction d'un échantillon sphérique présentée dans cette section est un exemple simple de couplage entre fusion et déformation visqueuse. Une analyse similaire de la compaction sphérique sans fusion a été présentée dans McKenzie (1984) et discutée dans Ricard *et al.* (2001). Dans le papier de McKenzie cette expérience hypothétique de compaction sphérique a été proposée pour justifier la présence d'une viscosité de compression (*bulk viscosity*). Ricard *et al.* montre l'équivalence entre le terme $K_0\mu_m/\phi$ dans leurs équations qui utilisent une seule viscosité de cisaillement pour chaque phase et la viscosité de compression, ou *seconde* viscosité, de McKenzie (1984) dans le cas où la porosité est constante et uniforme.

Ici nous allons ajouter la fusion dans le modèle. Nous considérons une sphère de rayon r_0 (Figure 5.1) et restons dans l'approximation adoptée dans la section 2.2 (voir aussi la section 4.2.5) où la viscosité de la phase liquide est beaucoup plus petite que celle de la phase solide ($\mu_f \ll \mu_m$, et par conséquence $\omega = 0$, $\mathbf{v}_\omega = \mathbf{v}_m$, $\rho_i = \rho_f$, $P_i = P_f$, $\boldsymbol{\tau}_f = 0$), et où la tension de surface est absente ($\sigma = 0$). De plus, nous négligeons la force de gravité ($g = 0$). Avec ces approximations, l'équation (2.18) pour les quantités de différence (appelée l'équation *d'action-réaction* dans Bercovici *et al.*, 2001a) devient

$$-\nabla[(1-\phi)\Delta P] + \nabla \cdot [(1-\phi)\boldsymbol{\tau}_m] - \frac{c\Delta\mathbf{v}}{\phi} = 0. \quad (5.1)$$

Nous considérons le cas à symétrie sphérique où toutes les variables dépendent uniquement

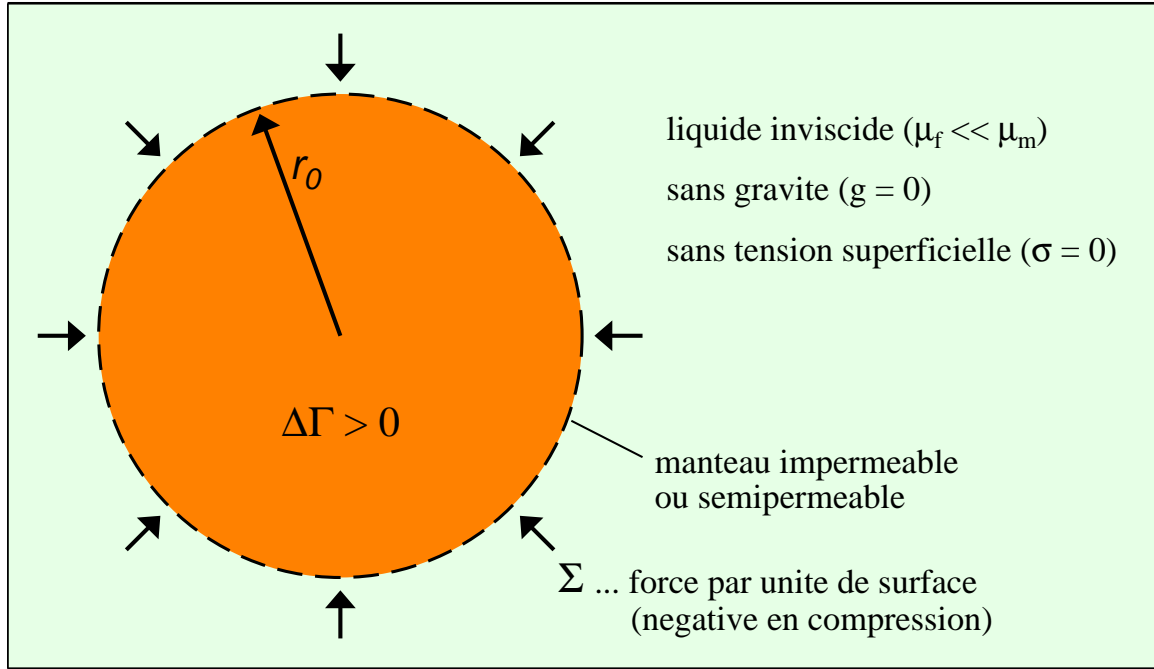


FIG. 5.1 – Une sphère de rayon r_0 à l'intérieur de laquelle la fusion se produit est encapsulée dans un manteau imperméable ou semiperméable (*i.e.*, le liquide peut sortir). Une force par unité de surface Σ est appliquée à la surface.

de la coordonnée radiale r . Avec (3.28) et la substitution de ΔP de (2.19) avec $K_0 = 4/3$ l'équation (5.1) devient

$$\delta^2 \phi \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1 - \phi^2}{\phi} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_m) \right] + 3\delta^2 \frac{\phi v_m}{r} \frac{\partial \phi}{\partial r} - \Delta v = 0, \quad (5.2)$$

où v_m et Δv sont des vitesses radiales et δ est la longueur de compaction définie par

$$\delta^2 = \frac{4 \mu_m}{3 c}. \quad (5.3)$$

5.1.1 Fusion et compaction sphérique sans interaction Darcy

On va d'abord étudier un cas où l'interaction de Darcy est négligée ($c \rightarrow 0$, qui se traduit par $\delta \rightarrow \infty$). On peut trouver une solution analytique dans le cas d'une porosité uniforme ($\phi(r) = \phi_0$). L'équation (5.2) devient

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_m) \right] = 0, \quad (5.4)$$

dont la solution est $v_m = Ar + B/r^2$, où A et B sont des constantes d'intégration. Pour que la solution soit régulière au centre de la sphère, B doit être 0. Pour obtenir A , il faut imposer une condition à la surface de la sphère (en $r = r_0$).

Le champ de vitesse $\mathbf{v}_m = (Ar, 0, 0)$ n'induit pas de contrainte visqueuse ($\underline{\tau}_m = 0$), en particulier la contrainte normale dans la direction radiale est nulle puisque

$$\tau_{m_{rr}} = \frac{4}{3}\mu r \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{v_m}{r} \right). \quad (5.5)$$

Supposons que nous imposions à la surface de la sphère une force par unité de surface. Cette force ne peut être supportée que par les pressions puisque les contraintes visqueuses sont absentes. Si on impose la même force aux deux phases, la pression sera la même dans le solide et le liquide ($\Delta P = 0$). Dans ce cas, on obtient $A = 0$ à partir de l'équation (2.19) et la matrice est donc immobile ($v_m = 0$). La vitesse du liquide est obtenue par intégration (2.11). Dans le cas à symétrie sphérique et avec $v_m = 0$ la vitesse radiale du liquide est

$$v_f = \frac{\Delta\rho}{\rho_f \rho_m} \frac{1}{\phi_0 r^2} \int_0^r r'^2 \Delta\Gamma dr'. \quad (5.6)$$

Même avec une matrice immobile, du liquide est expulsé pour compenser le changement de volume lors de la fusion.

Imaginons maintenant que la sphère soit encapsulée dans un manteau semiperméable d'où le liquide puisse sortir librement tandis qu'une force Σ (positive en tension, négative en compression) appliquée à la surface est supportée par la matrice. La première partie de cette condition impose $P_f = 0$ à $r = r_0$. En l'absence de forces volumiques ($g = 0$) et lorsque les forces de Darcy sont négligeables ($c = 0$), le gradient de pression fluide est nul (voir (2.13)). La pression du liquide reste donc partout nulle ($P_f = 0$). L'application d'une force en surface implique $\Sigma = -(1 - \phi_0)P_m$ à $r = r_0$, et on peut remplacer P_m par ΔP (puisque $P_f = 0$). À partir de l'équation donnant le saut de pression entre les phases (2.19) on obtient A , d'où se déduit l'expression de v_m

$$v_m = \frac{\phi_0}{1 - \phi_0} \frac{\Sigma}{4\mu_m} r, \quad (5.7)$$

et, dans le cas du taux de fusion $\Delta\Gamma$ uniforme,

$$v_f = -\frac{\Sigma}{4\mu_m} r + \frac{\Delta\rho}{\rho_f \rho_m} \frac{\Delta\Gamma}{3\phi_0} r. \quad (5.8)$$

La pression du solide est aussi uniforme, $P_m = -\Sigma/(1 - \phi_0)$. De la conservation de la masse (2.9) on déduit l'évolution temporelle instantanée de la porosité,

$$\frac{\partial\phi_0}{\partial t} = \frac{3}{4} \frac{\phi_0 \Sigma}{\mu_m} + \frac{\Delta\Gamma}{\rho_m}. \quad (5.9)$$

La porosité peut donc décroître par la compaction de la matrice solide (terme en Σ) ou par la solidification du liquide (terme en $\Delta\Gamma$).

Dans cette étude où la phase fluide est parfaitement inviscide (sans contrainte puisque $\mu_f = 0$ mais aussi sans terme de Darcy puisque $c = 0$) les résultats pour v_m , P_m et P_f sont les mêmes que ceux obtenus par (Ricard *et al.*, 2001) lorsque la fusion n'était pas considérée ($\Delta\Gamma = 0$). La fusion modifie seulement la vitesse du liquide v_f et l'évolution de la porosité. Il faut souligner que les expressions dérivées ici sont valables uniquement dans la situation où la porosité est uniforme, donc seulement à l'instant initial de l'expérience.

5.1.2 Fusion et compaction sphérique avec le terme Darcy

L'approximation $c = 0$ discutée dans la section précédente devient intenable à petite porosité. C'est évident d'après l'équation (5.1) puisque le terme proportionnel à c qui apparaît sous la forme c/ϕ ne peut plus être négligé (la même chose est observée pour le terme correspondant dans l'équation 5.2). On va maintenant garder ce terme qui représente la résistance à la séparation des phases, une manifestation du frottement cisailant visqueux à travers l'interface solide-liquide. Le coefficient c est lié à l'inverse de la perméabilité $k(\phi)$ de la loi de Darcy (équations 2.16 ou 4.6; Bercovici *et al.*, 2001a; Darcy, 1856).

À porosité uniforme ($\phi(r) = \phi_0$), l'équation (5.2) devient

$$h^2 \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_m) \right] - \phi_0 \Delta v = 0, \quad (5.10)$$

où h est l'échelle naturelle de longueur donnée par

$$h^2 = \delta^2 \phi_0 (1 - \phi_0^2). \quad (5.11)$$

Nous allons discuter des solutions analytiques dans deux situations spécifiques. Nous supposerons d'abord un taux de fusion $\Delta\Gamma$ uniforme. On montrera que les conditions thermodynamique nécessaires pour générer un tel taux de fusion sont problématiques de point de vue expérimental. Nous discuterons ensuite le cas où la température est contrôlée par l'expérimentateur.

Fusion à taux de fusion uniforme

Ici on considère $\Delta\Gamma$ uniforme, on peut intégrer la conservation de la masse (2.11) et ainsi obtenir $\phi_0 \Delta v = v_m - \bar{v}$ en fonction de v_m et $\Delta\Gamma$. Après substitution dans l'équation (5.10) nous obtenons une équation pour la vitesse du solide

$$h^2 \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 v_m) \right] - v_m = -\frac{1}{3} \frac{\Delta\rho}{\rho_f \rho_m} \Delta\Gamma r. \quad (5.12)$$

La solution de cette équation est

$$v_m = A \frac{h^2}{r} \left[\cosh\left(\frac{r}{h}\right) - \frac{h}{r} \sinh\left(\frac{r}{h}\right) \right] + \frac{1}{3} \frac{\Delta\rho}{\rho_f \rho_m} \Delta\Gamma r, \quad (5.13)$$

où A est une constante d'intégration et $v_m = 0$ au centre. La vitesse du liquide v_f et la différence de pression ΔP sont facilement obtenues des équations (2.11) et (2.19),

$$v_f = -A \frac{1 - \phi_0}{\phi_0} \frac{h^2}{r} \left[\cosh\left(\frac{r}{h}\right) - \frac{h}{r} \sinh\left(\frac{r}{h}\right) \right] + \frac{1}{3} \frac{\Delta\rho}{\rho_f \rho_m} \Delta\Gamma r, \quad (5.14)$$

$$\Delta P = -\frac{4}{3} \frac{\mu_m}{\phi_0} \left[A \frac{h}{r} \sinh\left(\frac{r}{h}\right) + \frac{\Delta\rho}{\rho_f \rho_m} \Delta\Gamma \right]. \quad (5.15)$$

Pour obtenir A on va utiliser la condition imposée par une membrane semipermeable en surface. Contrairement au cas étudié précédemment, sans le terme de Darcy la contrainte visqueuse radiale (5.5) n'est plus zéro. La condition à la surface maintenant devient $\Sigma = (1 - \phi_0)(\tau_{mrr} - P_m)|_{r=r_0}$, où on peut toujours remplacer P_m en surface par ΔP ($P_f = 0$ est imposé à $r = r_0$). Après quelques manipulations on obtient

$$A = \frac{r_0}{h} \left[\frac{3\Sigma}{4\mu_m(1 - \phi_0)} - \frac{\Delta\rho}{\rho_f \rho_m} \frac{\Delta\Gamma}{\phi_0} \right] \left[\left(1 + \frac{3h^2}{r_0^2} + \frac{1}{\phi_0} \right) \sinh\left(\frac{r_0}{h}\right) - \frac{3h}{r_0} \cosh\left(\frac{r_0}{h}\right) \right]^{-1}. \quad (5.16)$$

Si $\Delta\Gamma = 0$ le résultat trouvé est semblable à celui discuté par Ricard *et al.* (2001).

La Figure 5.2 montre les vitesses du solide et du liquide v_m et v_f en fonction du rayon pour deux valeurs différentes de l'échelle de longueur h . Le rayon est normalisé par r_0 et les vitesses par $r_0 \Delta\rho \Delta\Gamma / (3\rho_f \rho_m)$ qui est la vitesse commune de v_f et v_m à la surface lorsque $h \ll r_0$. Sur les figures aucune compaction n'est imposée, c'est à dire que ni le liquide ni la matrice solide ne sont restreints ($\Sigma = 0$). Toute la déformation est causée par la fusion. L'échelle de longueur h correspond à la distance sur laquelle l'extraction du liquide est possible. La limite de $h \gg r_0$ correspond à la situation sans terme de Darcy qui est discutée dans la section précédente. Dans cette limite et avec $\Sigma = 0$ la matrice est immobile et la vitesse normalisée d'échappement de v_f augmente d'une façon linéaire de 0 au centre à $1/\phi_0$ à $r = r_0$ (équation(5.8)). Quand l'échelle de longueur h est comparable au rayon r_0 (courbes épaisses à $h = r_0$), le liquide d'une densité inférieure qui est généré par la fusion s'échappe en entraînant la matrice à faible vitesse. Quand l'échelle h est petite par rapport à r_0 (courbes fines à $h = r_0/10$) le liquide ne peut pas s'échapper et sa vitesse est considérablement réduite. À cause de la friction de Darcy, le liquide reste prisonnier du solide près du centre de la sphère où les vitesses d'inflation du solide et du liquide sont les mêmes. Une couche limite d'une épaisseur proportionnelle à h est présente près de la surface où le liquide s'échappe librement pendant que la matrice solide se compacte faiblement.

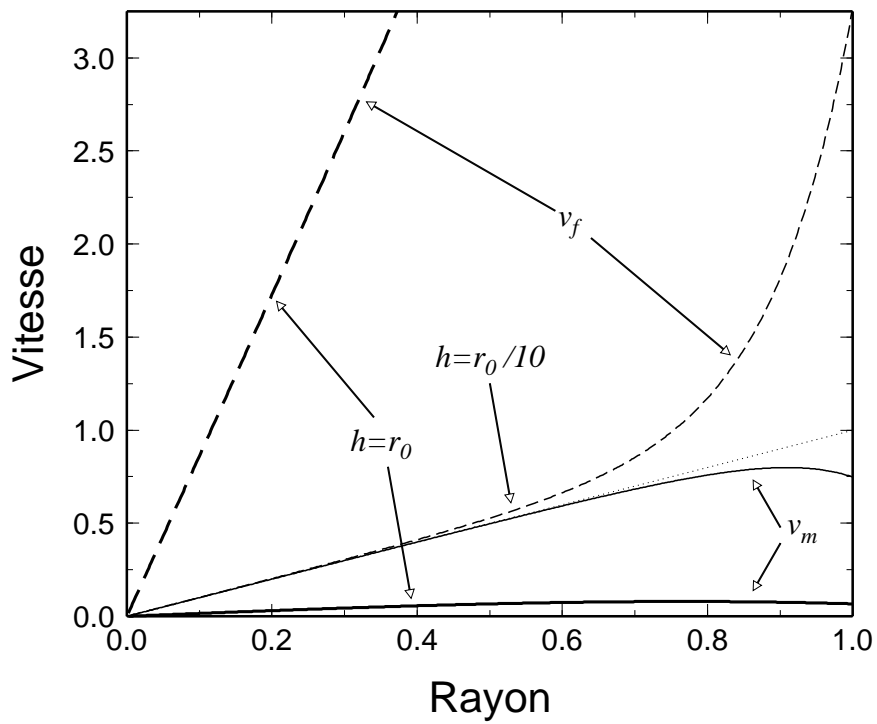


FIG. 5.2 – Vitesses du solide (trait plein) et du liquide (tiretés) en fonction du rayon normalisé r/r_0 dans le cas de $\Delta\Gamma$ constant, $\Sigma = 0$ et porosité uniforme de $\phi_0 = 0.1$. Les vitesses sont normalisées par $r_0\Delta\rho\Delta\Gamma/(3\rho_f\rho_m)$. Les courbes épaisses correspondent à $h = r_0$, les courbes fines à $h = r_0/10$. La ligne pointillée montre v_m aussi que v_f à la limite de $h/r_0 \rightarrow 0$.

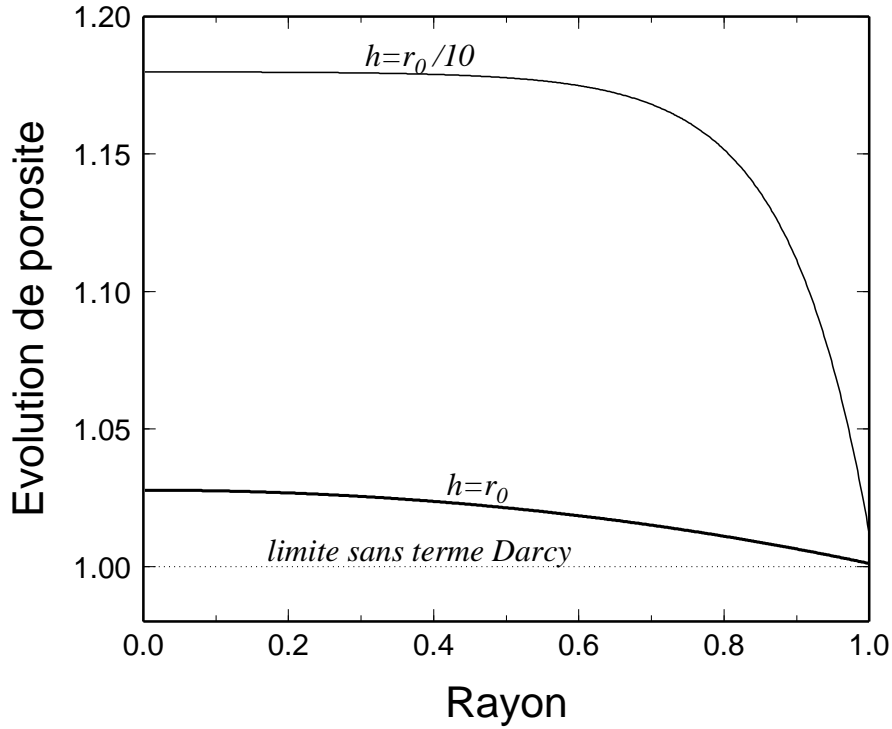


FIG. 5.3 – Le changement de porosité $\partial\phi_0/\partial t$ en fonction du rayon normalisé r/r_0 dans le cas de $\Delta\Gamma$ constant, $\Sigma = 0$ et porosité uniforme de $\phi_0 = 0.1$. Le changement de porosité est normalisé par $\Delta\Gamma/\rho_m$. On prend $\Delta\rho/\rho_m = 1/6$. La courbe épaisse correspond à $h = r_0$, la courbe fine à $h = r_0/10$. La ligne pointillée montre la limite sans le terme Darcy (équation 5.9).

L'évolution temporelle de la porosité à l'instant initial (à l'instant où la porosité est uniforme) est obtenue de la conservation de la masse (2.9),

$$\frac{\partial\phi_0}{\partial t} = A(1 - \phi_0)\frac{h}{r} \sinh\left(\frac{r}{h}\right) + \frac{\bar{\rho}}{\rho_f\rho_m}\Delta\Gamma. \quad (5.17)$$

La Figure 5.3 montre le changement de porosité $\partial\phi_0/\partial t$ normalisé par $\Delta\Gamma/\rho_m$, le terme source dans l'équation (2.9), en fonction du rayon normalisé r/r_0 . Quand l'échelle h est petite par rapport à r_0 (courbe fine) le liquide reste piégé dans le solide et le changement de porosité est uniquement contrôlé par le terme source, donc atteint une valeur normalisée de $\bar{\rho}/\rho_f$. Près de la surface où le liquide peut s'échapper la porosité augmente moins rapidement. Quand h est grand, le liquide superflu peut s'échapper librement depuis tous les points de la sphère et la croissance de porosité est donc plus uniforme mais moins rapide.

Considération de la faisabilité de l'expérience

Il est utile de discuter la faisabilité de l'expérience proposée. Si on veut assurer un taux de fusion uniforme à l'intérieur de l'échantillon, il faut qu'on impose un certain profil de température. À l'équilibre thermodynamique le profil de température nécessaire est, d'après l'équation (2.20) en supposant l'équilibre thermodynamique, $L_{22} = 0$,

$$T = T_0 - \frac{P_f}{\Delta s} \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m}. \quad (5.18)$$

Comme on connaît les vitesses des deux phases, donc aussi Δv , la pression dans le liquide est obtenue par intégration de la "loi de Darcy" (2.13) avec la condition limite $P_f = 0$ à la surface,

$$P_f = A \frac{ch^2}{\phi_0^2} \left[\frac{h}{r} \sinh\left(\frac{r}{h}\right) - \frac{h}{r_0} \sinh\left(\frac{r_0}{h}\right) \right]. \quad (5.19)$$

On peut aussi écrire P_f en fonction du changement de porosité (5.17) comme

$$P_f = \frac{ch^2}{\phi_0^2(1-\phi_0)} \left(\left. \frac{\partial \phi_0}{\partial t} \right|_r - \left. \frac{\partial \phi_0}{\partial t} \right|_{r_0} \right). \quad (5.20)$$

La pression fluide étant inhomogène, un taux de fusion homogène nécessite donc une température inhomogène qu'on peut écrire en fonction du changement de porosité en utilisant (5.18) et (5.20). La pression du liquide augmente de 0 à la surface vers des valeurs positives à l'intérieur. Comme Δs est négatif—l'entropie d'un liquide est plus grande que celle du solide de la même composition— la température augmente aussi de T_0 à la surface, vers l'intérieur de la sphère, où la pression élevée du liquide nécessite une température proportionnellement plus élevée pour que la fusion se produise. L'écart de température $\Delta T = T - T_0$ ainsi que la pression du liquide sont montrés dans figure 5.4. La même courbe montre P_f normalisé par $\Pi_{\Delta\Gamma} = 4\mu_m\Delta\Gamma(1-\phi_0)\Delta\rho/(3\phi_0\rho_f\rho_m)$ et ΔT normalisé par $\Pi_{\Delta\Gamma}\Delta\rho/(|\Delta s|\rho_f\rho_m)$. La valeur $\Pi_{\Delta\Gamma}$ est la pression du liquide à la limite de $h \ll r_0$. Ces profils sont similaires à ceux de l'évolution de porosité (figure 5.3). Lors d'une expérience au laboratoire, où la taille d'échantillon est vraisemblablement beaucoup plus petite que la longueur de compaction δ , la température en excès au centre de la sphère est (de 5.16–5.18, 5.20)

$$T_{r=0} \sim T_0 - \frac{2\mu_m}{9\Delta s} \left(\frac{r_0}{\phi_0\delta} \right)^2 \left(\frac{\Delta\rho}{\rho_f\rho_m} \right)^2 \Delta\Gamma. \quad (5.21)$$

Si cette expérience était effectuée avec un échantillon centimétrique ($r_0 \sim 0.05$), à un taux de fusion $\Delta\Gamma \sim 1 \text{ kg m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ (la totalité d'échantillon va fondre en ~ 1 heure), et en choisissant $\rho_m \sim 3200 \text{ kg m}^{-3}$, $\Delta\rho \sim 500 \text{ kg m}^{-3}$, $\mu_f \sim 10 \text{ Pa s}$, $\mu_m \sim 10^{18} \text{ Pa s}$, $k_0 \sim 5 \times 10^{-10} \text{ m}^2$

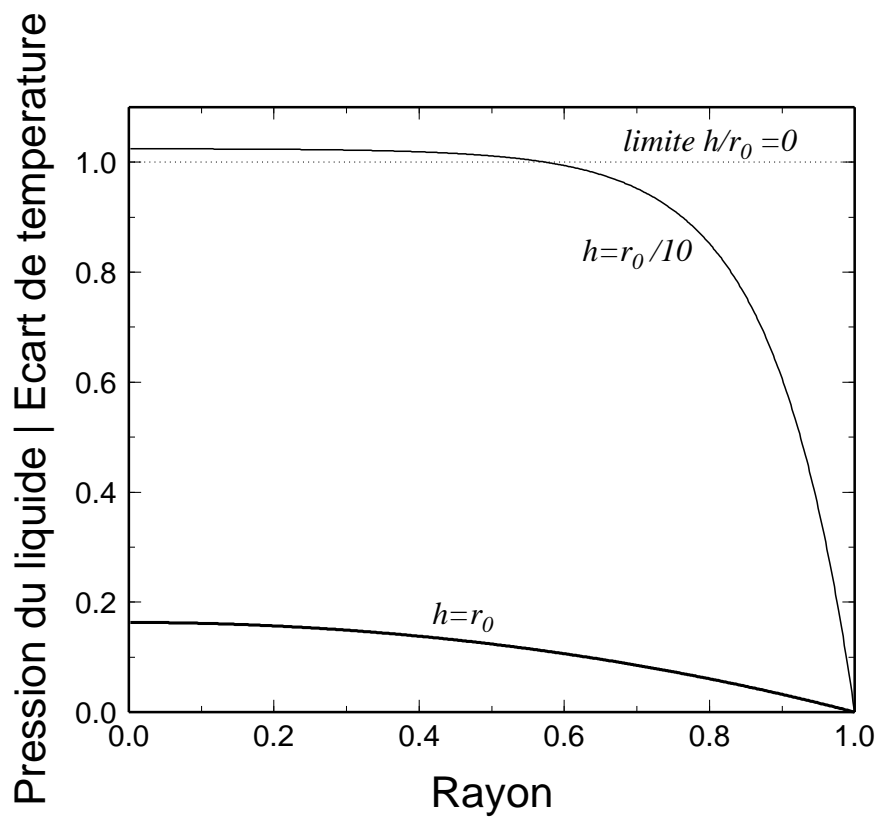


FIG. 5.4 – Presson dans le liquide en fonction du rayon normalisé r/r_0 dans le cas de $\Delta\Gamma$ constant, $\Sigma = 0$ et porosité uniforme de $\phi_0 = 0.1$. La pression est normalisée par $\Pi_{\Delta\Gamma} = 4\mu_m\Delta\Gamma(1 - \phi_0)\Delta\rho/(3\phi_0\rho_f\rho_m)$. La courbe épaisse correspond à $h = r_0$, la courbe fine à $h = r_0/10$. Ces courbes représentent aussi l'écart de température ΔT , normalisé par $\Pi_{\Delta\Gamma}\Delta\rho/(|\Delta s|\rho_f\rho_m)$.

et $\Delta s = -340 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, un excès de température de 0.8 K serait nécessaire à une porosité $\phi_0 = 0.01$. Évidemment la dépendance de cet excès en $1/\phi_0^2$ implique qu'un solide pur exigerait une température infinie en son centre pour que la fusion s'y produise. Un solide pur doit forcément fondre uniquement à partir de l'extérieur.

Fusion à température uniforme

En pratique, ce n'est pas possible d'imposer une température à l'intérieur de l'échantillon qui dépende de r et qui croisse vers le centre. Il sera plus facile d'ajuster une température uniforme dans l'échantillon. Imposons donc un écart de température $\Delta T = T - T_0$ uniforme. Dans ce cas il faut utiliser la relation cinétique (2.20)

et écrire le taux de fusion en fonction de la température et la pression dans le liquide. L'équation de quantité de mouvement du liquide (2.13), le taux de fusion (2.20) et l'équation de continuité (2.11)

(les deux dernières différenciées par rapport à r) conduisent à

$$\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \bar{v}) \right] + \frac{L_{22}c}{\phi_0^2} \left(\frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} \right)^2 \phi_0 \Delta v = 0. \quad (5.22)$$

On peut écrire \bar{v} en fonction de v_m et Δv et utiliser l'équation d'action-réaction (5.10) pour obtenir

$$H^2 \frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \Delta v) \right] - \Delta v = 0, \quad (5.23)$$

où l'échelle caractéristique de longueur H est donnée par

$$\frac{h^2}{H^2} = 1 + \frac{4}{3} \mu_m L_{22} \left(\frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} \right)^2 \frac{1 - \phi_0^2}{\phi_0}. \quad (5.24)$$

La solution à cette équation analogue à (5.12), sans membre de droite est

$$\Delta v = A \frac{H^2}{r} \left[\cosh \left(\frac{r}{H} \right) - \frac{H}{r} \sinh \left(\frac{r}{H} \right) \right], \quad (5.25)$$

où A est une constante d'intégration. Maintenant que la différence de vitesses est connue, la pression dans le liquide est obtenue par l'intégration de l'équation (2.13) avec la condition $P_f = 0$ en surface,

$$P_f = \frac{cAH^2}{\phi_0} \left[\frac{H}{r} \sinh \left(\frac{r}{H} \right) - \frac{H}{r_0} \sinh \left(\frac{r_0}{H} \right) \right]. \quad (5.26)$$

Le taux de fusion $\Delta \Gamma$ est facilement calculé par (2.20). La vitesse moyenne du mélange

biphasé est obtenue de l'équation (2.11), de \bar{v} et Δv les vitesses du solide et du liquide sont calculées. La vitesse du solide est

$$v_m = A\phi_0 \frac{H^4}{h^2 r} \left[\cosh\left(\frac{r}{H}\right) - \frac{H}{r} \sinh\left(\frac{r}{H}\right) \right] + \frac{1}{3} Ar\phi_0 \left(1 - \frac{H^2}{h^2}\right) \frac{H}{r_0} \sinh\left(\frac{r_0}{H}\right) - \frac{1}{3} L_{22} \Delta T \Delta s \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} r. \quad (5.27)$$

La différence de pressions ΔP et la contrainte radiale dans le solide τ_{mrr} sont facilement calculées de (2.19) et (5.5). On considère la même condition de membrane semipermeable à la surface que précédemment. Cette condition donne

$$A = \frac{3}{4} \frac{1}{\phi_0} \frac{h^2 r_0}{H^3} \left[\frac{\Sigma}{\mu_m (1 - \phi_0)} + \frac{4}{3} \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} \frac{L_{22} \Delta T \Delta s}{\phi_0} \right] \left[\left(1 + \frac{3H^2}{r_0^2} + \frac{1}{\phi_0} \frac{h^2}{H^2}\right) \sinh\left(\frac{r_0}{H}\right) - \frac{3H}{r_0} \cosh\left(\frac{r_0}{H}\right) \right]^{-1}. \quad (5.28)$$

Les Figures 5.5, 5.6 et 5.7 montrent les vitesses du solide et du liquide, la pression dans le liquide et le taux de fusion en fonction du rayon normalisé r/r_0 . On prend toujours $\Sigma = 0$ (pas de force imposée à la surface). On choisit $h^2/H^2 = 2$ qui correspond à une valeur du coefficient cinétique (5.24)

$$L_{22} = \left[\frac{4}{3} \mu_m \left(\frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} \right)^2 \frac{1 - \phi_0^2}{\phi_0} \right]^{-1}. \quad (5.29)$$

Ce choix est assez arbitraire mais suffit pour montrer le comportement de la solution. Les vitesses sont normalisées par

$$V_{\Delta T} = \frac{1}{3} \frac{H^2}{h^2} \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} r_0 L_{22} \Delta T |\Delta s|, \quad (5.30)$$

qui est la vitesse commune du liquide et du solide à la surface dans la limite $h \ll r_0$. La pression du liquide est normalisée par

$$\Pi_{\Delta T} = \frac{4}{3} \mu_m \frac{\Delta \rho}{\rho_f \rho_m} \frac{1 - \phi_0^2}{\phi_0 \left(\frac{h^2}{H^2} + \phi_0 \right)} L_{22} \Delta T |\Delta s|, \quad (5.31)$$

qui est la valeur de P_f dans la limite $h \ll r_0$. Le taux de fusion est normalisé par $L_{22} |\Delta s| \Delta T$ qui est la valeur à la surface. On voit que les vitesses et la pression du liquide sont similaires au cas précédent où $\Delta \Gamma$ était uniforme. Par contre, on voit une différence dans le profil de taux de fusion. Le taux de fusion est maintenant plus grand à la surface de l'échantillon, où la pression basse du liquide favorise la fusion. Si h est comparable à r_0 le taux de fusion décroît

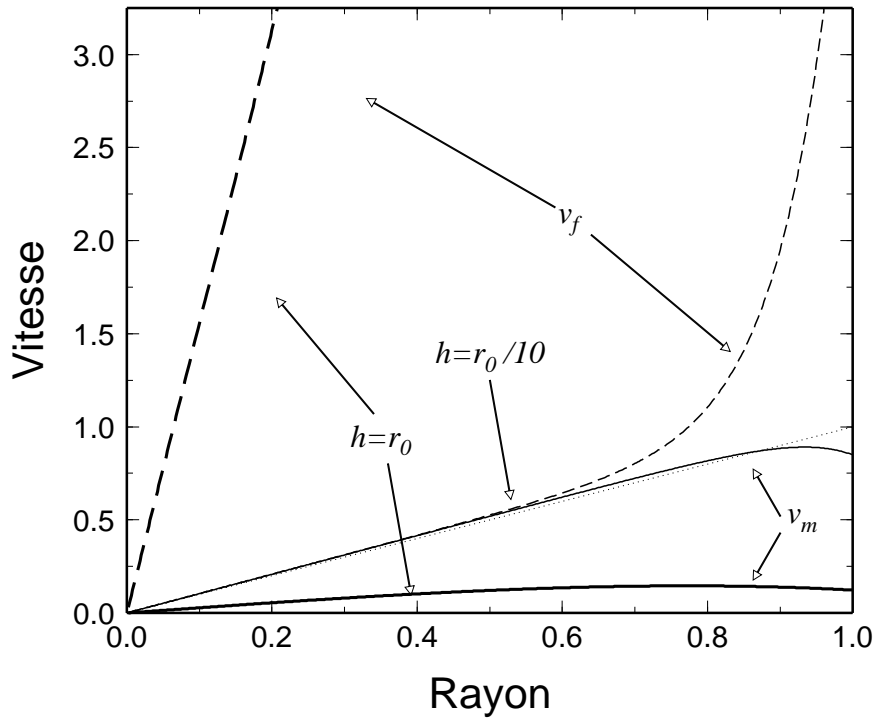


FIG. 5.5 – Vitesses du solide (trait plein) et du liquide (trait en pointillé) en fonction du rayon normalisé r/r_0 dans le cas ΔT constant, $\Sigma = 0$ et une porosité uniforme $\phi_0 = 0.1$. Les vitesses sont normalisées par $V_{\Delta T}$ (équation 5.30). Les courbes épaisses correspondent à $h = r_0$, les courbes fines à $h = r_0/10$. Dans les deux cas on choisit $h^2/H^2 = 2$. La ligne pointillée montre v_m aussi que v_f à la limite de $h/r_0 \rightarrow 0$.

vers le centre. Si h est plus petit que r_0 , le taux de fusion diminue vers une valeur uniforme au-dessous d'une couche limite près de la surface. Dans ce cas, l'épaisseur de la couche limite est proportionnelle à h (si h/H est fini) et la différence entre le taux de fusion à la surface et dans le noyau uniforme varie approximativement comme $1 - H^2/h^2$. Quand le coefficient cinétique est grand, la fusion se produit près de l'équilibre thermodynamique. Dans ce cas le rapport H^2/h^2 est petit (5.24). À la limite $H^2/h^2 \rightarrow 0$ (on garde toujours $\Sigma = 0$)

$$A = \frac{\Delta\rho}{\rho_f\rho_m} \frac{L_{22}\Delta T\Delta s}{\phi_0} \left[\frac{H}{r_0} \sinh\left(\frac{r_0}{H}\right) \right]^{-1}. \quad (5.32)$$

À cette limite $v_m = 0$. La fusion se produit uniquement à la surface. La dépendance de changement de porosité $\partial\phi_0/\partial t$ est, avec une normalisation appropriée, similaire aux profils de $\Delta\Gamma$.

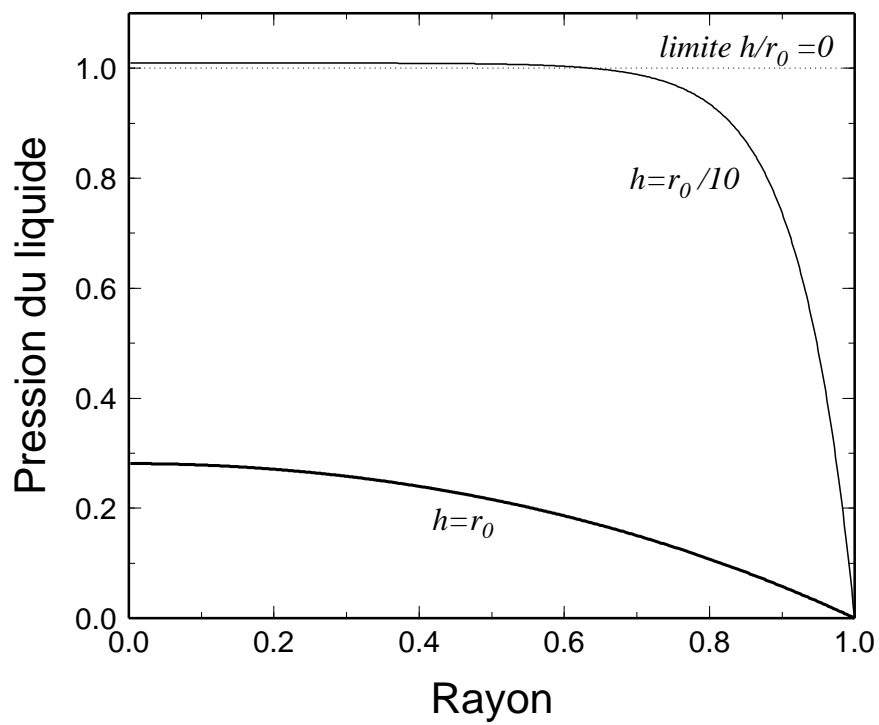


FIG. 5.6 – Pression dans le liquide en fonction du rayon normalisé r/r_0 dans le cas ΔT constant, $\Sigma = 0$ et une porosité uniforme $\phi_0 = 0.1$. La pression est normalisée par $\Pi_{\Delta T}$ (équation 5.31). La courbe épaisse correspond à $h = r_0$, la courbe fine à $h = r_0/10$ et on prend $h^2/H^2 = 2$.

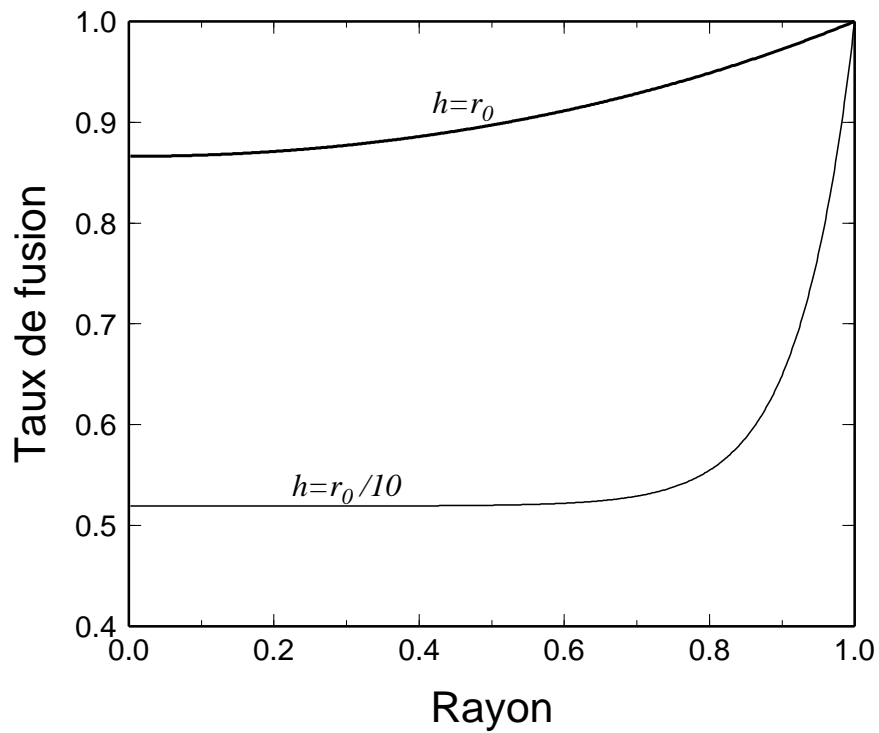


FIG. 5.7 – Le taux de fusion $\Delta\Gamma$ en fonction du rayon normalisé r/r_0 dans le cas de ΔT constant, $\Sigma = 0$ et porosité uniforme de $\phi_0 = 0.1$. Le taux de fusion est normalisé par $L_{22}\Delta T|\Delta s|$. La courbe épaisse correspond à $h = r_0$, la courbe fine à $h = r_0/10$ et on prend $h^2/H^2 = 2$.

Chapitre 6

1-D steady-state melting

6.1 1-D steady-state melting

Various studies have dealt with 2-D simulations of melt migration with a simplified set of equations (Ribe, 1988; Spiegelman, 1993c; Choblet & Parmentier, 2001). However to understand the physics of two-phase medium near the onset of melting we restrict our study to a simple 1-D melting problem. Similar problems were discussed by McKenzie (1984), Ribe (1985a) and Turcotte & Phipps Morgan (1992). Although some of these studies described simultaneous melting and compaction, they did not account for the feedback between the viscous deformation and the thermodynamics of melting. McKenzie (1984) considered isentropic batch melting (*i.e.*, no melt extraction) and prescribed a dependence of the degree of melting on temperature and pressure. Turcotte & Phipps Morgan (1992) and Ribe (1985a) used an a priori melting relation; Turcotte & Phipps Morgan (1992) actually decoupled the processes of melting and compaction. Only Fowler (1989) discussed the effect of compaction on the melting behavior in the case of simultaneous melting and compaction. However, Fowler's basic equations differ from ours in that he assumed the matrix pressure is lithostatic. The Darcy interaction term present in his fluid momentum equation that goes as $\mathbf{v}_f - \bar{\mathbf{v}}$ does not have its equal and opposite counterpart in the matrix momentum equation. Therefore Fowler's formulation violates Newton's 3rd law; in particular, when the two momentum equations are added to describe the force balance on the entire mixture, the Darcy drag term remains as a spurious body force (*i.e.*, the drag of the fluid on the matrix must be equal and opposite to the drag of the matrix on the fluid).

In our model we consider the melting of a simple univariant system. In the melting region temperature follows the Clapeyron slope, which describes equilibrium between the phases. Melt extraction occurs simultaneously with melting, which leads to viscous deformation of the

matrix and consequently to different pressure fields in the two phases.

We assume matrix material initially ascends with an upward velocity V before melting starts. No heat is supplied to the ascending matrix. As the matrix is incompressible, before melting starts, there is no adiabatic gradient and the far-field temperature T_0 remains uniform. The melting starts when the ascending solid reaches the melting pressure. This point is considered as the origin of the coordinate z , which is positive upward. From this point on two phases coexist until all the matrix has melted. Above the melting zone, melt is transported isothermally again. As in the previous section we assume that the matrix is much more viscous than the fluid and we neglect surface tension. We only study the steady-state solution of this problem.

First we write the equations in the dimensionless form. The natural length scale for this melting problem is the width of the melting zone. It can be estimated from a simplified form of the energy equation (4.42) assuming that the drop in temperature is purely due to heat consumed by melting, *i.e.*, $\Delta\Gamma = \rho_m VC(dT/dz)/(T\Delta s)$, where the temperature gradient dT/dz is the Clapeyron slope. For the purpose of scaling, T can be replaced with T_0 , the initial temperature, and the melting rate $\Delta\Gamma$ can be assumed constant; in this case, integration of (4.36) in 1-D steady state over the depth of the partial-melt layer H leads to $\Delta\Gamma = \rho_m V/H$. The previous two expressions for $\Delta\Gamma$ combine to give $H = \rho_f T_0 \Delta s^2 / (\Delta\rho g C)$. Velocity and temperature are scaled with their initial values V and T_0 . Pressure is scaled with $\rho_m g H$. Performing this scaling, the dimensionless thermal conductivity $k_T = \rho_f k'_T T_0 / (\rho_m \Delta\rho g V H^2)$ (where k'_T is dimensional conductivity), buoyancy velocity $V_B = \Delta\rho g / (cV)$, dimensionless compaction length $\delta = \sqrt{4\mu_m / (3cH^2)}$ (McKenzie, 1984), and dimensionless Clapeyron slope $\gamma = \gamma' \rho_m g H / T_0$ appear. The dimensionless Clapeyron slope is also simply the ratio of entropy difference to heat capacity, $\gamma = -\Delta s / C$. At last we introduce R as the density ratio $R = \rho_f / \rho_m$. We assume $\rho_f < \rho_m$ and $\Delta s < 0$, therefore all the dimensionless parameters are positive. Note that in our description, the Darcy interaction coefficient c is constant. More generally it is written as $c = \mu_f \phi^2 / k(\phi)$ in the case of $\mu_m \gg \mu_f$ (see equation (4.6)) with $k(\phi)$ a porosity-dependent permeability. We assume $k(\phi) = k_0 \phi^2$ which leads to a constant $c = \mu_f / k_0$.

With these definitions, the 1-D steady-state governing equations are the dimensionless form of the action-reaction equation (4.38) (with (4.39) and (4.40)),

$$\delta^2 \phi \frac{d}{dz} \left(\frac{1 - \phi^2}{\phi} \frac{dv_m}{dz} \right) - \Delta v = V_B \phi (1 - \phi), \quad (6.1)$$

where $\Delta v = v_m - v_f$ can be expressed in terms of porosity and matrix velocity from integrated

mass conservation (4.35) (continuous mass flux implies $\bar{\rho}v = \text{const.} = \rho_m V$),

$$\Delta v = \frac{[1 - (1 - R)\phi]v_m - 1}{R\phi}, \quad (6.2)$$

the equation for the fluid pressure (4.37),

$$\frac{dP_f}{dz} = -R + \frac{1 - R}{V_B} \frac{\Delta v}{\phi}, \quad (6.3)$$

the equilibrium condition (4.41) assuming $L_{22} \rightarrow \infty$,

$$T = 1 + \gamma P_f, \quad (6.4)$$

the energy equation (4.42) with equilibrium melting ($L_{22} \rightarrow \infty$),

$$\frac{1}{\gamma^2} \frac{dT}{dz} + \frac{1}{\gamma} T \Delta \Gamma = k_T \frac{d^2 T}{dz^2} + \frac{R \Delta v^2}{V_B} + \frac{R \delta^2}{V_B} \frac{1 - \phi^2}{\phi} \left(\frac{dv_m}{dz} \right)^2, \quad (6.5)$$

and the matrix mass conservation (4.36),

$$\frac{d}{dz} [(1 - \phi)v_m] + \Delta \Gamma = 0. \quad (6.6)$$

This set of equations must be supplemented by their boundary conditions, which, as usual in two phase flows, are not trivial. The porosity ϕ goes continuously from 0, for $z \leq 0$, to 1, for $z \geq z_f$, where z_f is the as yet unknown position of where melting is complete ($\phi = 1$). The matrix and melt fluxes, $(1 - \phi)v_m$ and $R\phi v_f$ (or $\rho_m(1 - \phi)v_m$ and $\rho_f\phi v_f$ in dimensional form), are also continuous; this implies that v_m is continuous and equal to 1 (the upward velocity) at $z = 0$, while v_f is continuous and equal to R^{-1} (the upward velocity augmented by the matrix to melt density ratio) at $z = z_f$. However, v_f is not necessarily continuous at $z = 0$ nor is v_m at $z = z_f$. By definition $T = 1$ and $P_f = 0$ at $z = 0$. Eliminating Δv between (6.1) and (6.3) we obtain

$$\frac{dP_f}{dz} = -1 + (1 - R)\phi + \frac{(1 - R)\delta^2}{V_B} \frac{d}{dz} \left(\frac{1 - \phi^2}{\phi} \frac{dv_m}{dz} \right). \quad (6.7)$$

To assure $P_f = 0$ at $z = 0$, we introduce an integration constant

$$z_0 = \frac{(1 - R)\delta^2}{V_B} \frac{1}{\phi} \frac{dv_m}{dz} \Big|_{z=0}, \quad (6.8)$$

which has to be finite for the solution to be non-singular at $z = 0$. We thus have $dv_m/dz = 0$ at $z = 0$ since $\phi = 0$ there. Comparing (6.8) to the 1-D dimensionless form of (4.40), one finds that $z_0 = -\Delta P|_{z=0} = -P_m|_{z=0} = -\bar{P}|_{z=0}$, the second equality coming from $P_f|_{z=0} = 0$ and the third using also $\phi = 0$ at $z = 0$. The finite pressure difference at the onset of melting

results from the viscous deformation of the matrix; it is the dynamic pressure perturbation discussed in section 4.2.4. The consequence is that the melting zone is shifted by z_0 (upwards for positive z_0) relative to what suggests the simple Clapeyron curve based on the average pressure. Finally equation (6.1) at $\phi = 1$ implies that $2\delta^2(d\phi/dz)(dv_m/dz) + \Delta v = 0$ at $z = z_f$.

In order to constrain the dimensionless parameters of the governing equations, we estimate values of various material parameters for typical conditions of oceanic spreading centers. The viscosity of the solid μ_m could be about 10^{18} – 10^{19} Pa s. For the viscosity μ_f of the basaltic melt we adopt 10 Pa s. These values of viscosities are however not well constrained and they span a wide range in the literature. Moreover, a shift of several orders of magnitude in viscosity might be expected in the presence of water (*e.g.* Karato, 1989; Mei & Kohlstedt, 2000b; Karato & Jung, 2003). Here we will assume dry conditions. We choose $k_0 = 5 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, which corresponds to grain size of the order of 1 mm. The value of the compaction length then spans a range 8–26 km. A characteristic upwelling velocity of the mantle below the melting region is few cm yr^{-1} , up to about 10 cm yr^{-1} . We take $\rho_m = 3200 \text{ kg m}^{-3}$ and $\rho_f = 2800 \text{ kg m}^{-3}$ for the densities of the solid and melt. The buoyancy velocity scale V_B therefore spans a range of 60–160, the lower value corresponding to high upwelling velocity. We note that these values of δ and V_B were obtained for relatively low viscosity basaltic melt. These numbers would be smaller for more viscous siliceous melts. The usual values of heat capacity and entropy of fusion found in literature fall into $C = 1000$ – $1300 \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$, and $\Delta s = -(250$ – $400) \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$ (see Kojitani & Akaogi, 1995, and references therein). The Clapeyron slope of melting can be calculated from the given parameters. Alternatively, one can look at the solidus values inferred from experiments on peridotite samples. Compilation by Hirschmann (2000) of experimental data gives a depth-dependent solidus, where the slope changes from 133 K GPa^{-1} at ambient pressure to 100 K GPa^{-1} at 6.5 GPa (200 km depth). The parameters are listed in Table 6.1.

For calculations in this study we use the following preferred values: $\mu_m = 10^{18}$ Pa s, $\mu_f = 10$ Pa s, $V = 10 \text{ cm yr}^{-1}$, $k_0 = 5 \times 10^{-10} \text{ m}^2$, $\Delta s = -340 \text{ J kg}^{-1} \text{ K}^{-1}$, $C = 1200 \text{ J K}^{-1} \text{ kg}^{-1}$, $k'_T = 3.7 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$. We take the Clapeyron slope $\gamma' = 1.3 \times 10^{-7} \text{ K Pa}^{-1}$ (or 3.6 K km^{-1}). For initial matrix temperature $T_0 = 1673 \text{ K}$ we get a length scale $H = 115 \text{ km}$. This choice of parameters leads to dimensionless numbers $\delta = 0.07$, $k_T = 0.03$, $V_B = 60$, $R = 0.875$ and $\gamma = 0.28$.

6.1.1 Darcy equilibrium: the outer solution

In magmatic settings the compaction length is usually much smaller than the thickness of the melting zone. The dimensionless compaction length δ is a small parameter and therefore the

Table 6.1: Table of parameters applicable to dry melting below mid ocean spreading centers.

symbol	description	definition	possible ranges	preferred value	units
μ_f	fluid shear viscosity			10	Pa s
μ_m	matrix shear viscosity		10^{18} – 10^{19}	10^{18}	Pa s
k_0	constant in permeability relationship		10^{-10} – 10^{-9}	5×10^{-10}	m^2
c	Darcy interaction coefficient	μ_f/k_0	10^{10} – 10^{11}	2×10^{10}	Pa s m^{-2}
ρ_f	fluid density			2800	kg m^{-3}
ρ_m	matrix density			3200	kg m^{-3}
g	gravitational acceleration			9.8	m s^{-2}
Δs	entropy of fusion	$s_m - s_f$	-(250–400)	-340	$\text{J K}^{-1} \text{kg}^{-1}$
C	heat capacity		1000–1300	1200	$\text{J K}^{-1} \text{kg}^{-1}$
T_0	initial temperature of upwelling		1573–1673	1673	K
V	initial velocity of upwelling		4–10	10	cm yr^{-1}
H	length scale	$\rho_f T_0 \Delta s^2 / (\Delta \rho g C)$	60–150	115	km
k'_T	thermal conductivity			3.7	$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$
k_T	dimensionless thermal conductivity	$\rho_f k'_T T_0 / (\rho_m \Delta \rho g V H^2)$		0.03	–
γ'	Clapeyron slope	$\Delta \rho / (\rho_f \rho_m \Delta s)$	100–133	130	K GPa^{-1}
γ	dimensionless Clapeyron slope	$\gamma' \rho_m g H / T_0 = -\Delta s / C$		0.28	–
δ'	compaction length	$\sqrt{4\mu_m / (3c)}$	8–26	8	km
δ	dimensionless compaction length	δ' / H	0.07–0.23	0.07	–
V_B	buoyancy velocity scale	$\Delta \rho g / (cV)$	60–1000	60	–
R	density ratio	ρ_f / ρ_m		0.875	–

force balance on the phases should be similar to that with a simpler state where $\delta = 0$. We call this state, where gravity is balanced by Darcy drag, the Darcy equilibrium. In Darcy equilibrium the force balance (6.1) becomes an algebraic relation where the velocity difference and the matrix and melt velocities are explicit functions of porosity, *i.e.*, combining (6.1) and (6.2) and using $\Delta v = v_m - v_f$ leads to

$$\Delta v = -V_B \phi(1 - \phi) \quad (6.9)$$

$$v_m = \frac{1 - RV_B \phi^2(1 - \phi)}{1 - (1 - R)\phi}, \quad (6.10)$$

$$v_f = \frac{1 + V_B \phi(1 - \phi)^2}{1 - (1 - R)\phi}. \quad (6.11)$$

Numerical solutions for the Darcy equilibrium are easily obtained since four of the equations are algebraic in this case ((6.4), (6.5) with thermal diffusion neglected, (6.10) and (6.11)) and a single quadrature is needed in (6.3). Porosity as a function of vertical coordinate is shown in Figure 6.1 for several values of the dimensionless buoyancy velocity V_B . When V_B is large, (*i.e.*, when $V_B \gtrsim 5.9$ for $R = 0.875$ and $\gamma = 0.28$), porosity becomes a multivalued function of z and Darcy equilibrium cannot be a legitimate solution over the whole extent of the melting region. To understand the limit of the Darcy approximation near the end of the melting zone, a new quantity has to be introduced.

The degree of melting X at a point z is the mass fraction of matrix which has undergone melting all the way from 0 to z , which in dimensional quantities is

$$X(z) = \frac{1}{\rho_m V} \int_0^z \Delta \Gamma(z') dz'. \quad (6.12)$$

Contrary to the porosity, which is the instantaneous volume fraction of fluid, the degree of melting accounts for the melting history. Integrating the mass conservation equation (4.36) with the appropriate boundary conditions and using (4.35), the degree of melting can also be written in dimensionless quantities as

$$X = R\phi v_f = 1 - (1 - \phi)v_m. \quad (6.13)$$

The degree of melting is thus also the magma mass flux divided by the total mass flux (Ahern & Turcotte, 1979; Ribe, 1985b). If the densities are kept distinct but velocities are assumed the same as in the case of batch melting, then we have the relation $X = \phi \rho_f / \bar{\rho}$, which is what McKenzie (1984) and Iwamori *et al.* (1995) use. The batch melting approximation implies that $X \sim \phi$ as $\rho_m \sim \rho_f$. In the general case however ϕ and X can be largely different as v_f can be much larger than v_m . As long as melt is lighter than matrix and can escape easily, X can

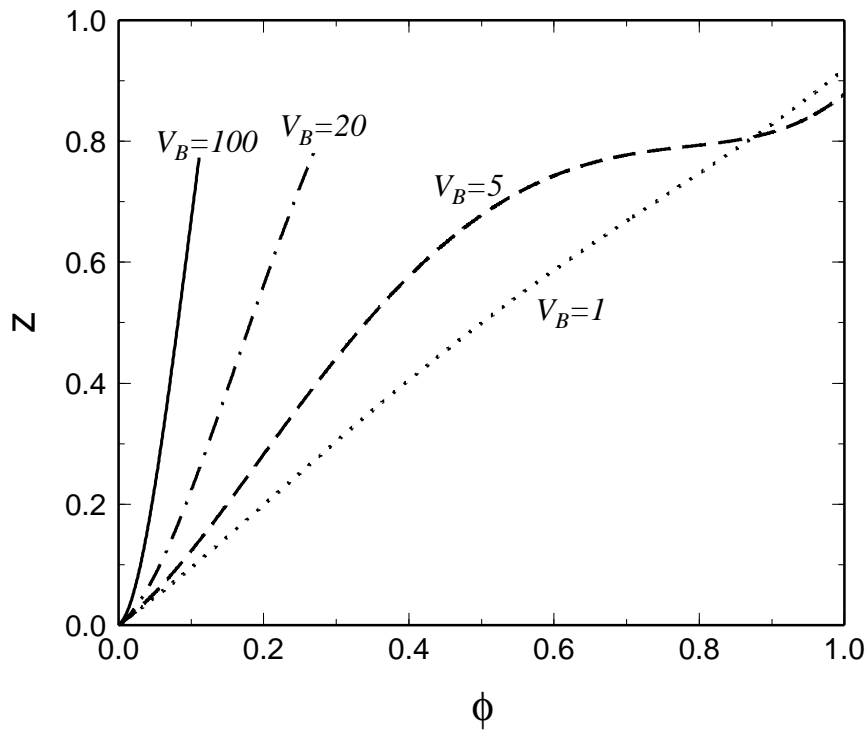


Figure 6.1: Porosity profiles in the melting zone in the Darcy equilibrium approximation ($\delta = 0$). All are curves calculated with $\gamma = -\Delta s/C = 0.28$, $R = \rho_f/\rho_m = 0.875$. The values of dimensionless buoyancy velocity $V_B = \Delta\rho g/(cV)$ are indicated. For V_B larger than ~ 5.9 , porosity becomes a multivalued function in the Darcy approximation.

be close to 1 even at small porosity. At the end of the melt zone, $z = z_f$, however, one must have $X = 1$, $\phi = 1$ and $v_f = 1/R$ simultaneously. The Darcy equilibrium solutions for large V_B do not satisfy these boundary conditions; when X reaches 1, $\phi < 1$ and $v_f \gg 1/R$. This implies that near the end of the melting zone ϕ has to increase and v_f has to decrease rapidly relative to Darcy equilibrium values. The magnitude of Darcy drag Δv thus decreases while the matrix viscous term $\nabla \cdot [(1 - \phi)\underline{\tau}_m]$, or at least its component $-\underline{\tau}_m : \nabla \phi$, increases. At the end of the melting zone, the viscous forces become important relative to Darcy drag even for small values of the compaction length δ , and the Darcy approximation does not hold.

To understand the complete behavior of the system, we must drop the assumption of Darcy equilibrium and take into account the viscous terms near the origin and near the end of the melting. We focus on the behavior of our equations at low porosity as this case is more interesting geophysically. An analytical expression is useful to understand the limitations of the Darcy solution near $z = 0$. The matrix and fluid velocities (6.10) and (6.11) can be expressed at small ϕ as

$$v_m = 1 + (1 - R)\phi - [V_B R - (1 - R)^2]\phi^2 + O(\phi^3), \quad (6.14)$$

$$v_f = 1 + (V_B + 1 - R)\phi - [V_B(1 + R) - (1 - R)^2]\phi^2 + O(\phi^3). \quad (6.15)$$

According to (6.3) and (6.4) and using (6.9), we get $\gamma^{-1}dT/dz = -1 + (1 - R)\phi$. As $T = 1$ at $z = 0$, the initial melting rate deduced from (6.5) is $\Delta\Gamma \approx -\gamma^{-1}dT/dz = 1 - (1 - R)\phi$. Integration of the mass conservation (6.6) implies in turn that $1 - (1 - \phi)v_m = \int \Delta\Gamma dz'$. Combining these results and introducing the expression for v_m from (6.14) we get, after some algebra,

$$\phi + (V_B + 1 - R)\phi^2 = \frac{z}{R} - \frac{1 - R}{R} \int_0^z \phi dz' + V_B \int_0^z \frac{\phi^2(1 - \phi)^2}{\gamma^{-1} - z + (1 - R) \int_0^{z'} \phi dz''} dz'. \quad (6.16)$$

In the typical case, $1 - R \ll 1 \ll V_B$. In the vicinity of $z = 0$ we neglect the two integral terms on the right of (6.16) of order $(1 - R)\phi z$ and $V_B\phi^2 z$; we also neglect $1 - R$ with respect to V_B . We get the z -dependence of porosity

$$\frac{z}{R} \approx \phi + V_B\phi^2. \quad (6.17)$$

The porosity has therefore a parabolic form and varies as $\phi \approx (\sqrt{1 + 4V_B z/R} - 1)/(2V_B)$. The initial slope at $z = 0$ is equal to $1/R$. Practically for all simulations that we performed, R gives a rough estimate of the total thickness of the two-phase melting zone. The parabolic form of the porosity profile is a consequence of $n = 2$ in the permeability-porosity law (see text after equation (4.6)). Schmeling (2006) finds identical $z(\phi)$ behavior to our equation (6.17)

when he restricts his melt extraction model for plumes to a single component case.

The matrix velocity increases initially with ϕ increasing (see (6.14)). This effect is due to the dilation of the matrix by the introduction of less dense melt that cannot easily escape. As soon as the porosity reaches $(1 - R)/(2RV_B)$ (see (6.14)), the draining of the fluid toward the surface allows the matrix to compact and v_m starts decreasing. With parameters appropriate for a ridge, the matrix would inflate until $\phi = 0.001$ which would occur at

$$z_D = \frac{1 - R}{2V_B} \quad (6.18)$$

after the first 120 m of melting.

Near $z = 0$, however, the Darcy equilibrium cannot be sustained. Indeed, the viscous compaction term that was neglected goes as $\delta^2 \phi^{-1} dv_m/dz$ and is thus predicted by the Darcy approximation to vary as $\delta^2(1 - R)/z$; therefore this term will dominate the Darcy term Δv ($\Delta v \approx -V_B z/R$) at small enough z .

6.1.2 Initiation of melting

How melting initiates is not obvious in the framework of the Darcy approximation. The presence of ϕ in the denominators of (6.1), (6.3) and (6.5) introduces a singularity at the onset of melting. The first drop of liquid requires more volume than the equivalent mass of solid it replaces. This raises the pressure in the fluid because the necessary dilation of the matrix is inhibited by the large equivalent bulk viscosity μ_m/ϕ . This excess pressure tends in turn to bring the thermodynamic conditions back to freezing. From the mass continuity (4.35) at $z = 0$ where $\phi = 0$, $v_m = 1$ and $dv_m/dz = 0$, one has $[Rv_f - 1] d\phi/dz = 0$. One possibility to satisfy this equation would be $d\phi/dz = 0$ at $z = 0$. But then from (6.6) the melting rate $\Delta\Gamma$ would also be zero, *i.e.*, at the onset of melting no melting would occur! Therefore one necessarily has $v_f = 1/R$; unlike in the Darcy approximation there is a finite difference in velocities $\Delta v = -(1 - R)/R$ at the onset of melting. From (6.3) the gradient in P_f is infinite at $z = 0$ and through the equilibrium melting condition (6.4), this singularity translates into a singularity of the temperature gradient that should not exist in the presence of thermal diffusion.

In fact, equations (6.1)–(6.6) do not necessarily even have a solution when the starting condition is a pure matrix with zero porosity. There are various possibilities to circumvent this difficulty. One could consider that a finite porosity is present in the solid even before melting starts. This removes the difficulty but in a somewhat unphysical way since it assumes melt is already present before melting starts. One could account for the fluid phase compressibility (Connolly & Podladchikov, 1998; Richard *et al.*, 2007) since liquids are indeed more

compressible than solids (Stolper *et al.*, 1981). At high pressures this effect might even favor melt initiation by a release of pressure accompanying melting. Another possibility is to remove the discontinuity in temperature gradient at the onset of melting by taking into account the kinetics of the fusion reaction and replace (6.4) by (4.41). This would require the knowledge of the reaction rate factor L_{22} which is likely to be a complex function of ϕ , T and P_f . We will further constrain L_{22} in section 6.1.2 A simpler approach is to accept the singularity of the thermal gradient but to neglect the thermal diffusion in the energy conservation (6.5). This is the approach that we take in the following of this paper.

The squirting solution

The finite value of Δv at the onset of melting induces a Darcy friction that can only be balanced by the compactive viscous stress since the buoyancy forces which go as $\Delta\rho\phi$, are zero at $z = 0$ (see (6.1)). We call this equilibrium between the viscous compaction term and the Darcy drag the “squirting” solution because the fluid pressure gradient has a singularity at $z = 0$, *i.e.*, by (6.3) and using $\Delta v = -(1 - R)/R$, goes as

$$\frac{dP_f}{dz} \approx -\frac{(1 - R)^2}{RV_B\phi}. \quad (6.19)$$

According to the Clapeyron relation (6.4), the gradient in P_f is also the gradient in temperature dT/dz , which is therefore also singular at $z = 0$. Furthermore, by matrix mass conservation (6.6), with the condition $dv_m/dz|_{z=0} = 0$, $\Delta\Gamma$ near $z = 0$ obeys

$$\frac{d\phi}{dz} \approx \Delta\Gamma. \quad (6.20)$$

In the energy equation (6.5), assuming the absence of thermal conduction, the singularity in dT/dz can only be balanced by an infinite rate of melting (all the other terms are negligible or zero at $z = 0$)

$$\Delta\Gamma \approx -\frac{1}{\gamma} \frac{d \ln T}{dz} \approx \frac{(1 - R)^2}{RV_B\phi}, \quad (6.21)$$

since $T = 1$ at $z = 0$. From (6.20) and (6.21) one obtains

$$\phi \approx (1 - R) \sqrt{\frac{2z}{RV_B}}. \quad (6.22)$$

With the initial behavior of ϕ determined, we search for a solution of (6.1)–(6.6) in the form of a series in \sqrt{z} . After a bit of algebra we obtain the following terms of the expansions,

$$\phi = (1 - R) \sqrt{\frac{2z}{RV_B}} + \frac{2}{3} \left[R + \frac{2\gamma(1 - R)^2}{RV_B} \right] z + O(z^{3/2}), \quad (6.23)$$

$$P_f = -(1-R)\sqrt{\frac{2z}{RV_B}} - \frac{2}{3}\left[R - \frac{\gamma(1-R)^2}{RV_B}\right]z + O(z^{3/2}), \quad (6.24)$$

$$v_m = 1 + \frac{2z_0}{3\delta^2}\sqrt{\frac{2V_B}{R}}z^{3/2} + O(z^2). \quad (6.25)$$

These analytical solutions will be compared to the numerical solutions in the section 6.1.3. The expansion for v_m remains a function of z_0 that cannot be determined by an analytical study at $z = 0$ but is controlled by the boundary condition at the end of the melting zone. Getting an analytical estimate for z_0 is feasible but cumbersome. It consists of using the boundary condition $2\delta^2(d\phi/dz)(dv_m/dz) + \Delta v = 0$ at $z = z_f$, obtained from (6.1) with the use of $\phi = 1$, with the expansions previously found for ϕ and v_m , the end of the melting zone z_f being obtained by solving $\phi(z_f) = 1$. The sign of z_0 is, however, easy to estimate from a simple physical consideration. At low buoyancy velocity V_B , the melt is somewhat locked in the matrix, and the volume expansion associated with first melting induces matrix dilation at the base of the melting zone; therefore, according to (6.8), z_0 will be positive. At high buoyancy velocity V_B , the easy extraction of melt allows the matrix to readily compact upon first melting, and z_0 is negative. This change in sign of z_0 will be demonstrated later in Figure 6.7. During the initial squirting equilibrium the porosity increases and for large V_B the gravity term $V_B\phi(1-\phi)$ can overcome the Darcy term $\Delta v = -(1-R)/R$. This may lead to a new force balance.

Visco-gravitational equilibrium

The potential of balance between viscous compaction and buoyancy is called visco-gravitational equilibrium. When the Darcy term Δv is negligible the pressure is simply (see (6.3) and (6.4))

$$P_f = (T-1)\gamma \approx -Rz. \quad (6.26)$$

From the energy equation (6.5) the melting rate is simply

$$\Delta\Gamma \approx \frac{R}{1-R\gamma z}. \quad (6.27)$$

Knowing the melting rate, the other variables are readily computed; one obtains from (6.6) and (6.8)

$$\phi \approx Rz, \quad (6.28)$$

$$v_m \approx 1 + \frac{z_0 V_B R}{2\delta^2(1-R)}z^2, \quad (6.29)$$

where the expansion of both ϕ and v_m was truncated after the first non-zero term in z . Again, as in the squirting approximation, the value of z_0 can only be obtained by solving the equations

in the whole integration domain. However, the sign of z_0 can be determined: Darcy drag is negligible in this approximation, therefore the easy extraction of melt will allow the matrix to compact and z_0 will be negative.

Ordering of boundary regions

Up to now we have defined three possible force equilibria: Darcy, squirting and visco-gravitational. In each case one force term was neglected: the viscous compaction term, the buoyancy term, $V_B\phi(1-\phi)$, and the Darcy drag term, Δv , respectively. From the first order solutions given in each domain ((6.14), (6.15) and (6.17) for Darcy equilibrium; (6.23)–(6.25) for squirting approximation; (6.26)–(6.29) for visco-gravitational balance), these neglected terms amount to $\delta^2(1-R)/(Rz)$ (viscous compaction term), $(1-R)\sqrt{2V_Bz/R}$ (buoyancy force), and $-(1-R)/R$ (Darcy drag), respectively. We compare the magnitude of the neglected terms between pairs of equilibrium approximations and introduce three coordinates

$$z_1 = \frac{1}{2RV_B} \quad \text{squirting. } (z < z_1) \text{ vs. visco-grav. } (z > z_1), \quad (6.30)$$

$$z_2 = \delta^2 \quad \text{visco-grav. } (z < z_2) \text{ vs. Darcy } (z > z_2), \quad (6.31)$$

$$z_3 = \sqrt[3]{\frac{\delta^4}{2RV_B}} \quad \text{squirting } (z < z_3) \text{ vs. Darcy } (z > z_3). \quad (6.32)$$

The squirting solution is thus valid from $z = 0$ to $\min(z_1, z_3)$, above which is possibly the visco-gravitational equilibrium up to z_2 . These inner solutions then give place to the outer Darcy equilibrium. As $z_1 z_2^2 = z_3^3$, the three domains have a common point where $2\delta^2 RV_B = 1$.

This study of the squirting solution nearest the origin can be used to illustrate the problems when the thermal diffusivity is not neglected. The derivative of the fluid pressure remains always singular (proportional to $1/\phi$, see (6.19)) although the presence of the thermal diffusivity in the energy equation (6.5) forbids the singularity of dT/dz . There is therefore no possibility to insure the thermodynamic equilibrium. We could instead replace the thermodynamic equilibrium (6.4) by the kinetic law (4.41), but this puts some constraints on the functional form of the kinetic coefficient L_{22} . For example, if ϕ varies like z^n , the leading term of P_f will be in z^{1-n} (see (6.19)) and that of $\Delta\Gamma$ in z^{n-1} (see (6.20)). To balance these terms into the kinetic equation we need to choose $L_{22} \propto z^{2n-2} \propto \phi^{2-2/n}$. To have $P_f(0) = 0$ we need $n < 1$ and therefore L_{22} should depend on a negative power of ϕ . The kinetic rate should therefore be infinite at $z = 0$ for a solution with diffusion to exist. Rather than exploring this situation, and in the absence of a clear experimental or theoretical form for the kinetic rate, we simply assume that the very small parameter k_T is zero. In fact a layer dominated

by thermal conduction should exist close to $z = 0$. Its thickness

$$z_T = \frac{k'_T}{\rho_m CV} \quad (6.33)$$

should be of order 300 m.

We summarize the various domains near $z = 0$ in Figure 6.2. The first domain of thickness $k'_T/(\rho_m CV)$ corresponds to a diffusive layer. It has not been explicitly studied as it requires one to take into account the kinetics of melting which would introduce various additional unknowns and difficulties. The second domain corresponds to the domain of the squirting equilibrium. It is replaced either by the Darcy equilibrium at low compaction lengths or by the visco-gravitational equilibrium at larger compaction lengths. Near the end of the melting zone, where $z > R$ and $\phi \lesssim 1$, the viscous force becomes again important and limits the validity of the Darcy approximation. This diagram has been computed for $V_B = 60$ and changes with V_B , however its topology remains similar. For smaller values of V_B , one can distinguish a dilational and a compacting regime in the Darcy domain (z_D , which was defined in section 6.1.1, becomes larger than the thermal diffusive layer thickness z_T). In the situation of the Earth the force equilibrium changes directly from squirting regime to Darcy equilibrium even for the least viscous magmas.

6.1.3 Numerical solutions

The full system of equations (6.1)–(6.6) can be solved numerically. We choose a domain of integration from $z = 0$ to a sufficiently large z_{max} (remember that the width of the melting zone is yet unknown). From a guessed porosity we obtain the matrix velocity using a tridiagonal solver of equation (6.1) with boundary conditions $v_m = 1$ at $z = 0$ and $dv_m/dz = 0$ at $z = z_{max}$. Fluid pressure is then calculated from (6.3) and the temperature from (6.4). We use the inner squirting solution, (6.24), to estimate P_f for the first two grid points to avoid the numerical indeterminacy of the integral of $\Delta v/\phi$ near $z = 0$. The energy equation (6.5) is used to calculate the melting rate. Finally porosity is updated from equation (6.6) (we actually use the time dependent form of this equation, *i.e.* (4.36)). We iterate this scheme to obtain the steady-state solution.

This numerical solution can be compared to the analytical solutions (6.23) and (6.17). For this case we choose a rather low buoyancy velocity $V_B = 10$ and rather large compaction length $\delta = 0.26$ in order to emphasize the thickness of the boundary region near $z = 0$ where the viscous term is dominant. The results are depicted in Figure 6.3 where the complete numerical solution (solid line) is compared to the Darcy solution (dotted line) and the squirting solution (dashed line). This figure confirms the accuracy of the analytical solutions and shows that

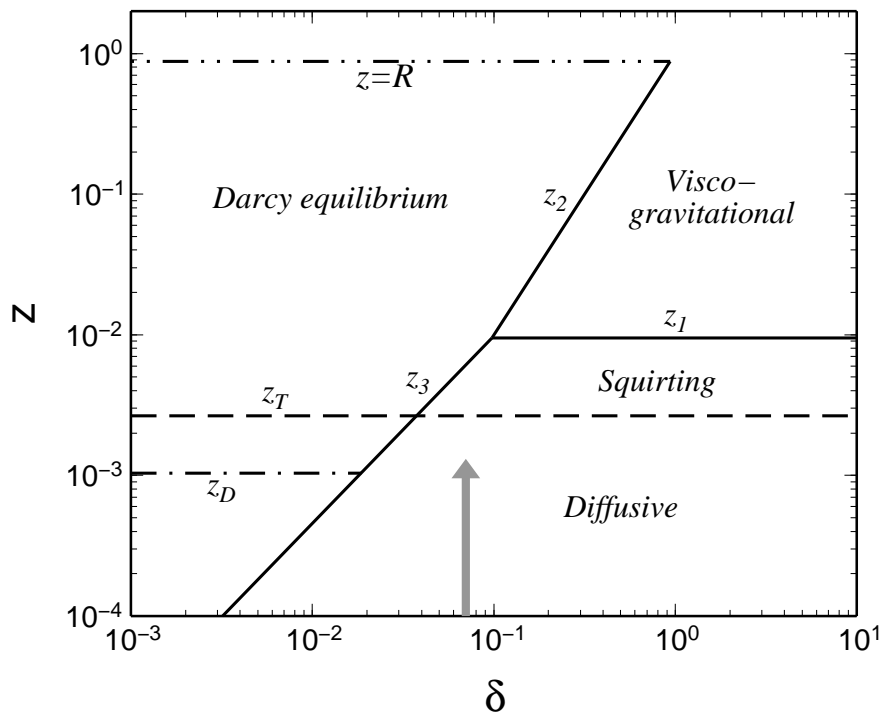


Figure 6.2: Graphical representation of the various regions along the melting zone (dimensionless z coordinate plotted on the vertical axis in logarithmic scale, melting starts at $z = 0$) as a function of the dimensionless compaction length $\delta = \sqrt{4\mu_m/(3cH^2)}$ (on horizontal axis with logarithmic scaling). Plotted for buoyancy velocity $V_B = \Delta\rho g/(cV) = 60$. The compaction length appropriate for melting under a ridge is indicated by an arrow.

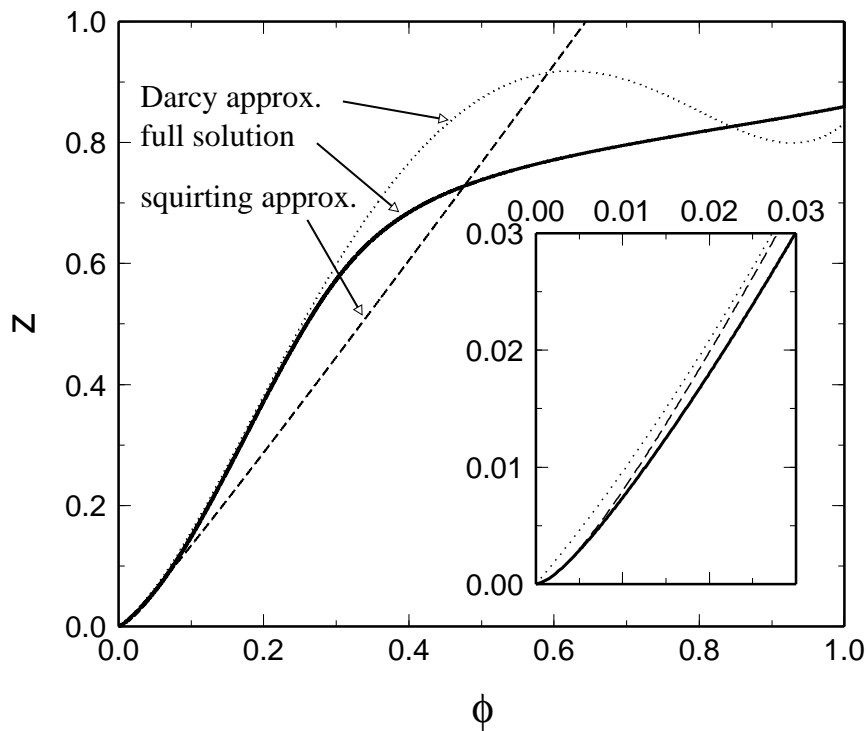


Figure 6.3: Calculated porosity profile in the melting zone (thick solid line) compared to the Darcy approximation (dotted line) and the initial squirting equilibrium approximation (dashed line). The details of the curves near the origin are zoomed in the embedded panel. All curves are calculated with $\gamma = 0.28$, $R = 0.875$, $V_B = 10$, $\delta = 0.26$. As expected the viscous equilibrium prevails in a very thin boundary layer near the origin.

the Darcy approximation remains very close to the real solution over the 2/3 of the melting zone. The blow up panel shows the initial behavior of the numerical solution and confirms the validity of the squirting approximation in the vicinity of $z = 0$.

Porosities for three different values of the compaction length δ are shown in Figure 6.4. When δ is small compared to the width of the melting zone, the porosity follows the $\delta = 0$ Darcy equilibrium profile (gravity is balanced by Darcy resistance). At the end of the melting zone there is a narrow region where the contribution of viscous forces becomes important again relative to Darcy drag. In this region porosity increases rapidly with z until it reaches 1 where melting is complete. The overall thickness of the two-phase melting zone increases with δ . This behavior is due to the contribution to the fluid pressure gradient by the viscous deformation (the last term in equation (6.7) that is multiplied with δ^2). In the limit of very large compaction length the force balance in the melting zone is basically between the viscous compaction and buoyancy, and the difference in velocities remains small between the two phases (numerical results for velocities are shown in Figure 6.6). Then the pressure gradient in the melt is $dP_f/dz \approx -R$ (*i.e.*, the fluid pressure is controlled by the magma density; see equation (6.3), also (6.26)). In the limit of very small compaction length one can see

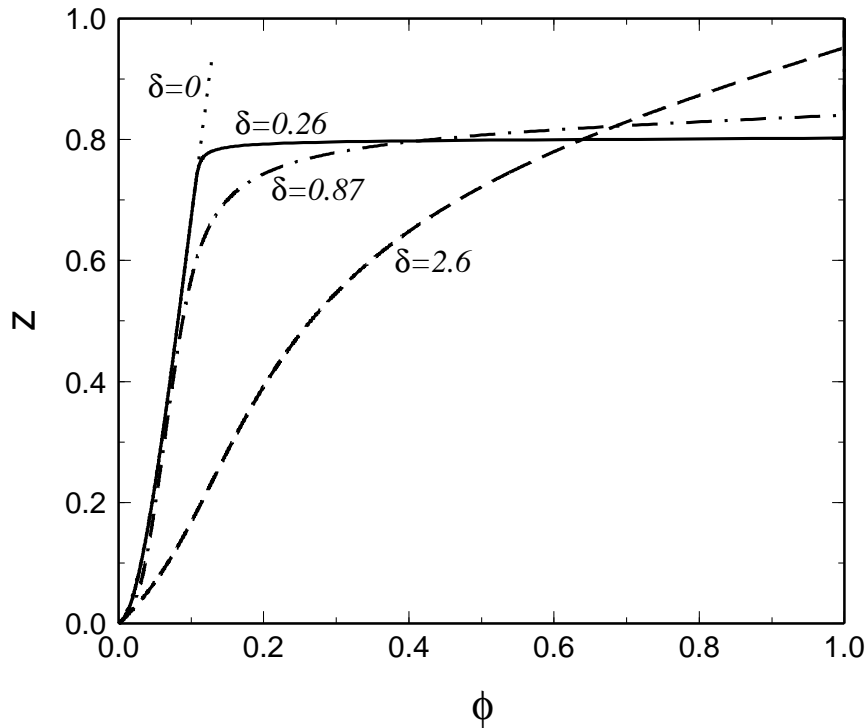


Figure 6.4: Porosity profiles in the melting zone for different values of the compaction length δ . All curves are calculated with $\gamma = 0.28$, $R = 0.875$, $V_B = 100$. Values of the compaction length are 2.6 (300 km; dashed line), 0.87 (100 km; dot-dashed line) and 0.26 (30 km; solid line). Porosity in Darcy equilibrium ($\delta = 0$) is shown as thin dotted line.

from equation (6.7) that $dP_f/dz \approx -1$ (*i.e.*, the fluid pressure is controlled by the matrix density, since porosity also remains small in most of the melt zone; see Figure 6.4). When δ is comparable to (or exceeds) the size of the melting zone, the deviation from the Darcy equilibrium is more pronounced. This case however is far from geophysical interest: in the ridge case when the buoyancy velocity is large and the Darcy equilibrium is close to the real force balance, the porosity profile is essentially identical to the Darcy solution, from which it deviates only at the very end of the melting zone. Taking the limit $V_B \gg 1$ at the end of the melting zone ($z \approx R$) in the approximate Darcy equilibrium solution (6.17) suggests that the porosity jumps abruptly from a value close to $\phi \approx R^{-1}V_B^{-1/2}$ (or about 0.1 for the characteristic values of $R \approx 0.9$ and $V_B \approx 100$) to $\phi = 1$. This means that even in the case of extensive melting (degree of melting of several tens percent) the porosity remains quite small ($< 10\%$).

Curves in Figure 6.4 depict porosity in the case of complete melting of a univariant material. In real geophysical situations the matrix is a multicomponent material which partially melts up to some limited degree of melting. In the case of pressure release melting under mid ocean ridges the degree of melting typically does not exceed 20–30% (Turcotte & Phipps Morgan, 1992). In the numerical simulations the degree of melting increases in an approx-

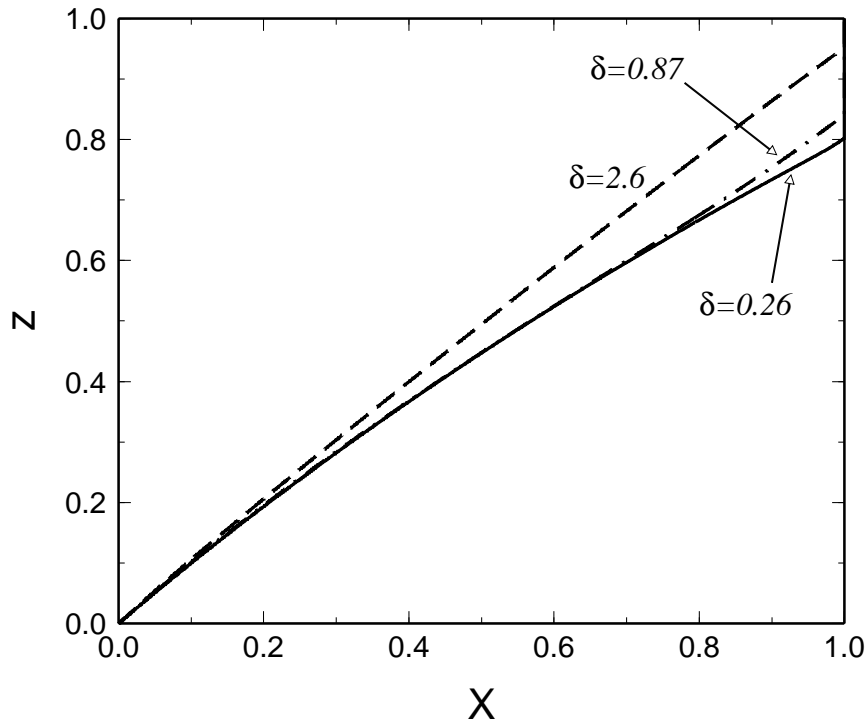


Figure 6.5: Degree of melting in the melting zone for different values of the compaction length δ . Values of parameters and line textures correspond to those in Figure 6.4.

imately linear fashion throughout the melting zone as is seen in Figure 6.5. This behavior is very different from the parabolic evolution of ϕ . In particular when V_B is very large, ϕ is much smaller than X everywhere except at the end of the melting zone. Using the values of parameters suggested in the previous section, porosity is only ~ 0.05 when $X = 0.2$. Although the porosity profile is very dependent on the compaction length, the melting rate is not.

Figure 6.6 shows matrix (left panel) and fluid (right panel) velocities. The matrix enters the melting zone at dimensionless velocity $v_m = 1$ and decreases regularly during the compaction process. The first drop of melt is already moving at velocity $v_f = 1/R$ as already seen in section 6.1.2. This velocity is also the melt velocity at the end of the melting zone. For the figure we used compaction lengths larger than appropriate for a ridge. The case with $\delta = 0.07$ (8 km) would however be very similar to the case $\delta = 0.26$ but the final viscous boundary layer would be somewhat thinner. The maximum fluid velocity is about 10 times the velocity of the upwelling mantle, *e.g.* of order of 1 m yr^{-1} . The matrix velocity curves are terminated at the end of the melting zone; no matrix is present above the partial-melt zone, and matrix velocity is therefore undefined here.

In the present theory the two phases are submitted to different pressure fields. The fluid pressure P_f , the matrix pressure P_m and the average pressure \bar{P} are different. The pressure difference ΔP is a dynamical effect that comes from changes in porosity in excess to those due

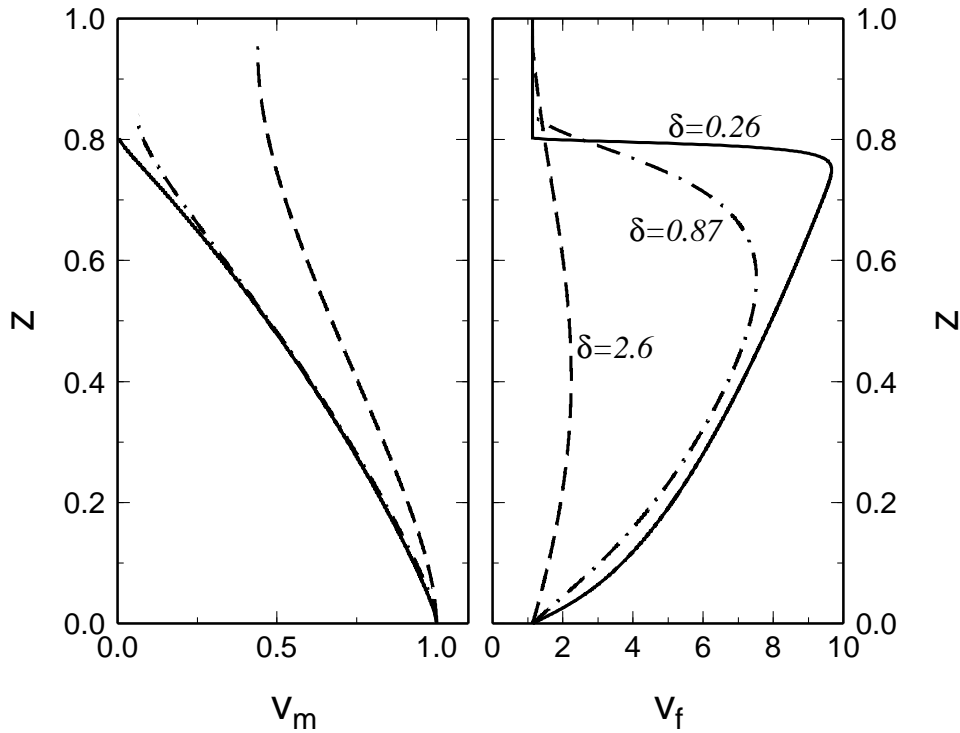


Figure 6.6: Matrix (left panel) and fluid (right panel) velocities in the melting zone. Values of parameters and line textures correspond to those in Figure 6.4.

to melting as discussed in section 4.2.3. In the limit where the fluid phase is much less viscous than the matrix, the pressure difference is directly related to deformation of the matrix. It is positive when matrix compacts and negative when matrix dilates (equation (4.40)). The observer at the surface of the Earth does not know the variation of the fluid pressure with depth. He may believe to have a better understanding of the variations with depth of the matrix pressure, $P_m = P_f + \Delta P$, or the average pressure, $\bar{P} = P_f + (1 - \phi)\Delta P$ and may expect melting to start at the melting conditions $P_m = 0$ or $\bar{P} = 0$ when $T = 1$. However at the onset of melting where $P_f = 0$, $P_m = \bar{P} = \Delta P = -z_0$ (see discussion around equation (6.8)). As a consequence the melting does not start where expected but the onset of melting is shifted by the distance z_0 . When z_0 is negative, the fluid pressure is lower than the average pressure which favors melting at greater depths. On the contrary a positive z_0 implies higher pressure in the melt and therefore the melting condition is only reached at shallower depth.

Figure 6.7 shows z_0 as a function of the compaction length δ for several values of the dimensionless buoyancy velocity V_B . No simple functional dependence of z_0 on δ or V_B is found. As seen from Figure 6.7, z_0 can be positive or negative depending on the value of V_B , the change of sign occurring near $V_B \sim 1$. When the buoyancy velocity is small, the melt extraction from the matrix is difficult. The only way to compensate for the bulk volume increase upon melting is that both matrix and fluid velocities increase. Pressure in the fluid is

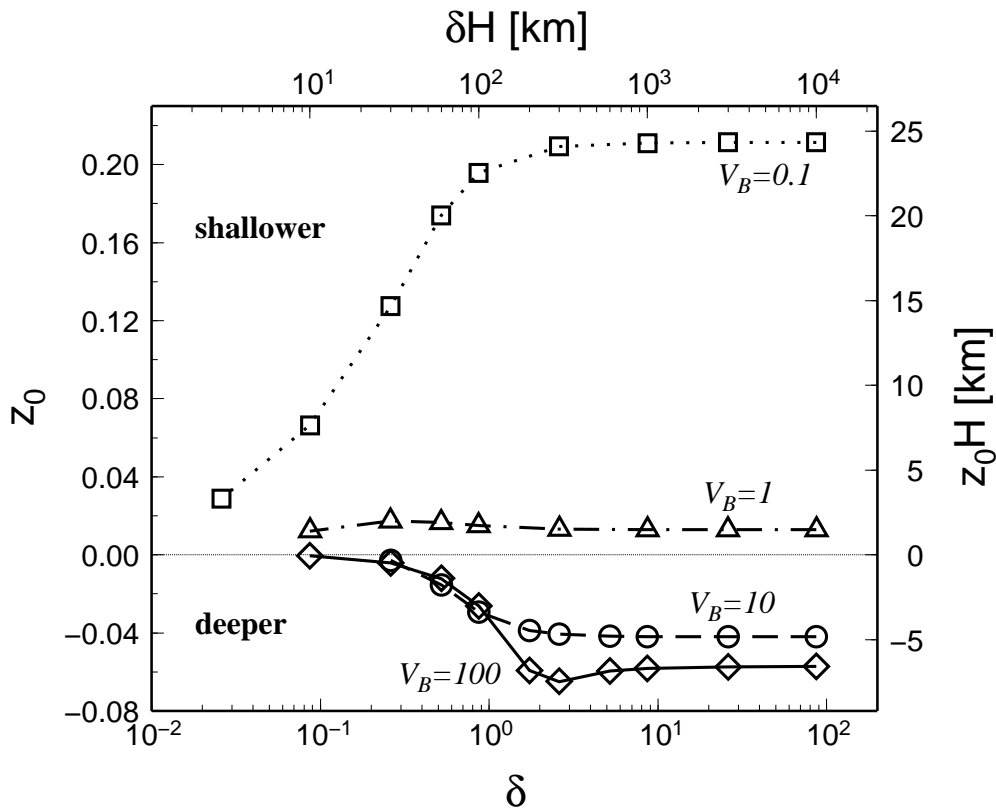


Figure 6.7: Shift of the melting z_0 zone as a function of the compaction length δ for the following values of the buoyancy velocity: $V_B = 100$ (solid line, diamonds), $V_B = 10$ (dashed line, circles), $V_B = 1$ (dot-dashed line, triangles), $V_B = 0.1$ (dotted line, squares). Both dimensionless values (bottom and left axes) and values in km (top and right axes) are shown. Positive (negative) z_0 means shallower (deeper) melting. Calculated with $\gamma = 0.28$, $R = 0.875$.

in this case larger than in the matrix, and melting starts at a shallower depth ($z_0 > 0$). This corresponds to the case of squirting equilibrium. On the other hand when $V_B \gg 1$ (visco-gravitational balance), the melt extraction is efficient and the matrix compacts while the fluid velocity increases. Pressure is in this case decreased in the fluid and the melting can start deeper ($z_0 < 0$). When δ decreases, the Darcy equilibrium prevails and as expected, z_0 tends to zero. An asymptotic behavior is obtained at very large compaction lengths. For values appropriate for a ridge the melting is likely to occur at most a few kilometers deeper than what could be expected from the average pressure.

The sign of z_0 is indicative of the sign of the difference between pressure of the two phases ΔP . In Figure 6.8 we show the pressure difference in the melting region as a function of z for three values of the buoyancy velocity V_B and a fixed value of the compaction length $\delta = 0.26$. This value corresponding to 30 km is somewhat too large for a ridge but it is used to emphasize the difference between the various cases. In the extreme case of very large or very small buoyancy velocity the melt is either uniformly under-pressured or over-pressured

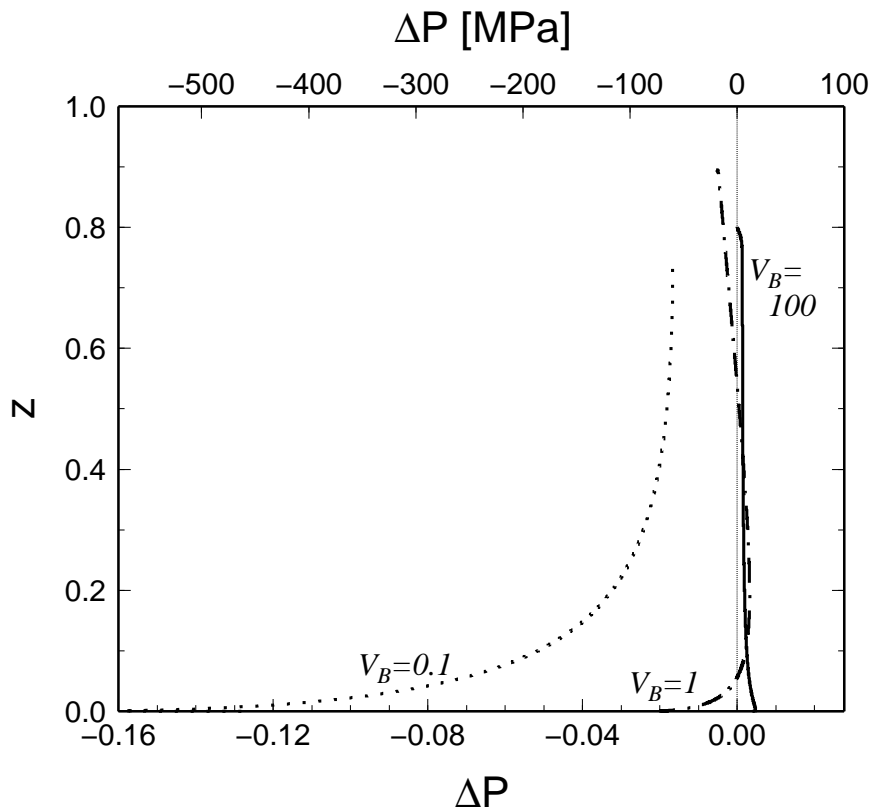


Figure 6.8: Pressure difference $\Delta P = P_m - P_f$ in the melting zone calculated with $\delta = 0.26$ (30 km) and the following values of the buoyancy velocity: $V_B = 100$ (solid line), $V_B = 1$ (dot-dashed line), $V_B = 0.1$ (dotted line). Both dimensionless values of pressure difference (bottom axis) and values in MPa (top axis) are shown. Calculated with $\gamma = 0.28$, $R = 0.875$.

with respect to the matrix. For intermediate values of V_B the pressure difference can change sign twice. The pressure difference between matrix and fluid is about 5 MPa (50 bar) even far from the incipient melting for typical ridge parameters. The fact that the fluid is under-pressured should somewhat inhibit hydro-fracturing of the matrix by the rising magma. For moderate buoyancy velocities, however (dot-dashed line), there is significant tendency for the fluid pressure to overcome that of the matrix.

6.2 Discussion and conclusion

In this paper we developed a theoretical model of two-phase flow in the presence of melting in a single component system. Our model properly accounts for the feedback between the viscous deformation of the phases and the thermodynamic conditions of melting. As in previous papers (Bercovici *et al.*, 2001a; Ricard *et al.*, 2001; Bercovici & Ricard, 2003), we accounted for the presence of surface tension on the interface between the two phases which imposes a clear distinction between the properties of each phase and those of the interface (pressures, velocities and densities). The conditions of equilibrium between the two phases are naturally deduced from the second law of thermodynamics. The usual Clapeyron slope is affected by the presence of the surface tension (Gibbs-Thomson effect) and by the dynamic pressure difference between the phases. This pressure difference is proportional to the rate of matrix compaction and to the inverse of porosity; its role is somewhat equivalent to the bulk viscosity of other theories (McKenzie, 1984). It is only in the case of motionless mixture without surface tension that the usual Clapeyron slope is recovered. In the motionless case with surface tension, the pressure difference between the phases verifies the Laplace's condition but the phase equilibrium is affected by the Gibbs-Thomson effect. The model also allows for non-equilibrium situations, in which case a kinetic relation links the melting rate to the departure from equilibrium. The general non-equilibrium treatment will be useful in future extended models where the realistic chemical composition of Earth material will be taken into account.

We use our equations in the simple case of 1-D melting. The equations are very complex by the presence of various singularities near $\phi = 0$. Neither the length of the melting zone nor the position of melt initiation (z_0) are known a priori. The solutions are primarily controlled by two parameters, the compaction length δ and the buoyancy velocity V_B . We discuss the existence of various possible boundary regions near the onset of melting. The onset of melting corresponds to a balance between the viscous forces and the Darcy friction. This first boundary region is followed at large enough $\delta^2 V_B$ by a zone of balance between gravity forces and viscous matrix stresses. Then the Darcy balance (equilibrium between gravity force and Darcy friction) dominates in most of the melting region. The Darcy equilibrium can itself be divided into a domain where the fluid does not escape fast enough to avoid matrix dilation (caused by volume

increase upon melting), and a domain where matrix compacts while the fluid is extracted. This already very complex structure should also include a thin thermal diffusion boundary zone (that was neglected in this study) which cannot be understood at exact thermodynamic equilibrium unless the kinetics of the melting is taken into account. The effect of dynamic pressure on the onset of melting can raise or depress the depth of melting by few kilometers with respect to what would be expected from the average pressure. With parameters appropriate for melting under an oceanic ridge ($\delta \sim 0.1$, $V_B \sim 100$) all these boundary zones occur in the first few kilometers of the two-phase region. The melting starts up to a few km deeper than what could be expected from matrix pressure only.

The 1-D model suggests that for $V_B \gtrsim 1$, z_0 is negative, and therefore melting begins deeper than standard Clapeyron slope predicts; likewise for $V_B \lesssim 1$, z_0 is positive, and melting does not begin until lower pressure is reached. Parameters that determine the value of V_B are the density difference between phases, average grain size, upwelling velocity, and melt viscosity, the latter parameter exhibiting the largest variation in Earth. Thus, for example, differences in melt viscosity at two otherwise similar geological locations would result in different depths of melting; a more mafic magma of lower viscosity at oceanic arcs would facilitate deeper melting compared to more felsic magma of higher viscosity at continental arcs. We stress that these predictions are based on a fairly simple model and that further refinement of the description is needed to generate more reliable predictions. In particular, the effect of surface tension, which was neglected in the 1-D model application, could either facilitate or inhibit melting, depending on the geometry of the first melt to appear; localized spheroidal pockets of first melt of positive average curvature would hamper melting by Gibbs-Thomson effect, while melting along grain boundaries resulting in melt network of negative curvature would favor melting. More experimental evidence is needed on the geometrical distribution of the first melt within the solid matrix. Moreover, the effect of viscous compaction/dilation on solid–melt phase equilibria of multicomponent Earth material should be studied. In fact, the main asset of the present study, rather than offering accurate predictions of geological observables, is the development of a framework to consistently account for the interplay between two-phase viscous flow and the melting condition.

The results of our 1-D model cannot be directly compared to those obtained by other authors. Most previous studies had not attempted to solve the self-consistent set of equations but have employed various approximations that do not seem to be supported by our study. Various authors have imposed the melting rate as a simple function of depth (average pressure). This decouples the melting problem from the compaction problem and may generate a spurious layer of compaction where the porosity decreases (Turcotte & Phipps Morgan, 1992). In our simulation the porosity is always increasing function of the vertical coordinate and the porosity remains much smaller than the degree of melting ($\phi < V_B^{-1/2}$). With ridge parameters this

porosity corresponds to a threshold $\sim 10\%$ after which the melt accumulates instantaneously at some depth and the porosity jumps to 1 above it. This contradicts the adiabatic batch melting model where porosity and degree of melting are closely related (McKenzie, 1984). Our results are more similar to those of Fowler (1989), at least in their goals, although significant difference in the starting equations makes a detailed comparison difficult: however, we agree with him about the presence of significant pressure difference (5 MPa or 50 bar) between the two phases all along the melting zone.

The present theory offers a framework for treatment of physical situations where melting of viscously deformable media is concerned. Although our focus was on geological settings, the description is applicable to much wider spectrum of problems. Various extensions to what was discussed in the present study are possible, including melting of multivariant material, non-equilibrium time-dependent melting, and 2-D (3-D) flow modeling.

Acknowledgments

The authors benefited from reviews by Harro Schmeling and Michel Rabinowicz. Support was provided by the National Science Foundation (NSF, grant EAR-0537599), and the Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS).

Chapitre 7

Notes sur la tension superficielle

Dans la section 4.2.4 (page 101) nous avons montré comment les conditions (P, T) de changement de phase à l'équilibre sont affectées par la tension de surface et par la déformation (équation 4.34). Dans la suite, nous avons étudié en détail l'effet de la déformation sur l'initiation de fusion (section 6.1), tandis que la tension superficielle σ était négligée. Dans ce paragraphe nous allons discuter les effets de celle-ci.

Nous avons déjà montré que la déformation isotrope de la matrice génère une différence de pression entre les deux phases, ΔP , non-zéro même si σ est négligeable. La tension superficielle modifie encore ce ΔP . En général une interface courbe entre deux liquides, caractérisée par la tension superficielle σ et la somme des courbures principales $\mathcal{K} = \mathcal{K}_1 + \mathcal{K}_2 = 1/R_1 + 1/R_2$ (R_1 et R_2 sont les rayons principaux de courbure) produit une différence de pression

$$\Delta P = \sigma \mathcal{K}, \quad (7.1)$$

et la plus grande pression est du côté de l'interface où se trouvent les centres de courbure (là où tombe le centre de la plus grande courbure s'il agit d'une interface de type "selle"). Notre modèle suppose que la relation de type (7.1) pour la différence de pression due à la tension superficielle est valide sur les interfaces du milieu biphasé.

Pour quantifier la somme de courbures principales \mathcal{K} , Bercovici *et al.* (2001a) introduisent la quantité d'interface α , en m^{-1} , qui est la superficie des interfaces par unité de volume. La quantité α dépend de la porosité ϕ – par exemple dans le cas où il n'y a pas d'interfaces solide-solide ou fluide-fluide, α doit tendre vers zéro si $\phi \rightarrow 0$ ou $\phi \rightarrow 1$. Bercovici *et al.* (2001a) proposent la relation

$$\alpha = \alpha_0 \phi^a (1 - \phi)^b, \quad (7.2)$$

où α_0 est une constante approximativement égale à l'inverse de la taille caractéristique des

grains ou pores et a et b sont des exposants entre 0 et 1. Ils aussi montrent que l'action de la force superficielle sur le mélange biphasé s'exprime par un terme volumique moyenné $\nabla(\sigma\alpha)$ (voir l'équation 4.3) et que

$$\mathcal{K} = \frac{d\alpha}{d\phi}. \quad (7.3)$$

La courbure positive correspond à l'interface qui est concave pour la phase f (*e.g.*, pores sphéroïdaux contenant la phase liquide). La différence de pression causée par la tension superficielle est donc

$$\Delta P = P_m - P_f = -\sigma \frac{d\alpha}{d\phi}. \quad (7.4)$$

Maintenant, avec ce modèle d'interface nous pouvons regarder l'effet de la tension superficielle aux conditions de changement de phase. Cet effet est visible dans le troisième terme à droite de l'équation (4.34), qui donne les conditions de l'équilibre thermodynamique, *i.e.*,

$$-\frac{\sigma}{\Delta s} \frac{\bar{\rho}}{\rho_f \rho_m} \frac{d\alpha}{d\phi}, \quad (7.5)$$

Ce terme est représenté dans la Figure 7.1 en fonction de la porosité avec $a = b = 1/2$ dans l'équation (7.2) et les valeurs du tableau 6.1 (page 127). La tension superficielle augmente la température de fusion à petite porosité et la diminue à grande porosité à une pression donnée. La forme de la dépendance $\alpha(\phi)$ fait diverger $\mathcal{K} = d\alpha/d\phi$ vers $+/-$ infini quand la porosité tend vers 0/1. Pour initier la fusion (à $\phi = 0$) il faut une température infinie (ou une dépression infinie) d'après ce modèle d'interface! La difficulté d'un changement de phase homogène sans un modèle de nucléation est bien connu en physique.

Clairement le modèle de l'interface $\alpha(\phi)$ (7.2) est trop simple. À faible porosité, le liquide est supposé remplir de petits pores sphériques. La limite $\phi \rightarrow 0$ correspond à la réduction du rayon de ces pores $R \rightarrow 0$ ce qui donne une courbure $\mathcal{K} = d\alpha/d\phi$ infinie. Ce modèle considère uniquement les interfaces entre les régions occupées par les phases distinctes (*i.e.*, interfaces $m-f$ ou solide-liquide). Dans la discussion de l'interconnectivité des magmas (paragraphe 1.3.3) nous avons montré l'importance des interfaces entre deux grains de la même phase pour le bilan énergétique, la valeur de l'angle de mouillage, et donc la forme et la micro-structure d'un agrégat biphasé. Il faut un modèle plus sophistiqué dans cette direction pour obtenir un effet de tension superficielle plus réaliste.

Hier-Majumder *et al.* (2006) ont développé un modèle micromécanique qui inclut les interfaces solide-liquide ainsi que les interfaces solide-solide entre deux grains de la matrice silicatée. Les interfaces solide-solide sont présents si la porosité est en dessous de la « porosité de désagrégation » (Figure 7.2a). Au dessus de cette porosité la géométrie correspond à des grains cylindriques qui ne se touchent pas et qui sont entièrement mouillés (Figure 7.2b).

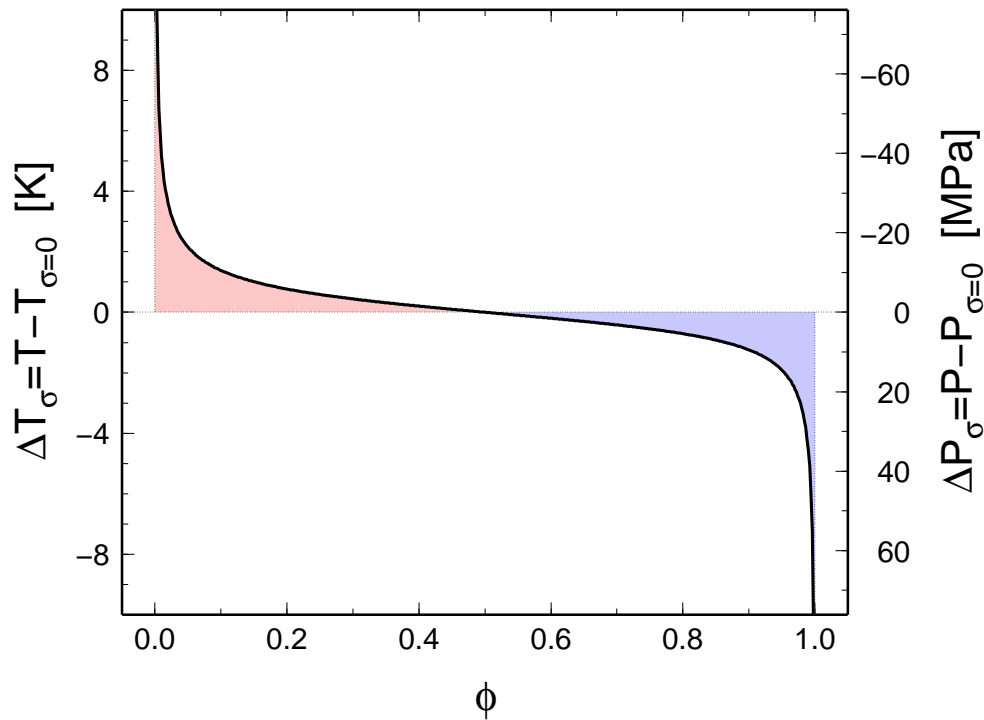


FIG. 7.1 – Effet de la tension de surface sur la fusion à l'équilibre pour un modèle simple des interfaces (sans interfaces solide–solide). Sans tension superficielle ($\sigma = 0$) et dans une situation statique ($\mathbf{v}_f = \mathbf{v}_m = 0$) la fusion se produit aux conditions $\bar{P} = \bar{P}_{\sigma=0}$, $T = T_{\sigma=0}$. La tension superficielle nécessite un écart de température $\Delta T_\sigma = T - T_{\sigma=0}$ (si la pression moyenne est maintenue à $\bar{P}_{\sigma=0}$; courbe noire épaisse, axe vertical à gauche) ou un écart de pression $\Delta \bar{P}_\sigma = \bar{P} - \bar{P}_{\sigma=0}$ (si la température est restée constante; axe vertical à droite), pour que la fusion s'initie (voir l'équation 4.34). Nous utilisons $\alpha = \alpha_0 \sqrt{\phi(1-\phi)}$ avec $\alpha_0 = 10^6 \text{ m}^{-1}$, et les valeurs dans tableau 6.1. Les régions colorées marquent le domaine métastable (*e.g.*, en termes de température, « overheating » du solide en rouge ou « undercooling » du liquide en bleu).

L'énergie de surface $\sigma\alpha(\phi)$ de notre modèle issue de Bercovici *et al.* (2001a) devient naturellement

$$\chi(\phi) = \sigma_{mm}\alpha_{mm}(\phi) + \sigma_{mf}\alpha_{mf}(\phi), \quad (7.6)$$

où α_{mm} et α_{mf} représentent les interfaces solide-solide et solide-liquide (avec leurs tensions σ_{mm} et σ_{mf}) et la différence de pression à cause de la tension superficielle est $\Delta P = -d\chi/d\phi \equiv -\chi'$.

La Figure 7.3b montre les termes χ et χ' en fonction de la porosité pour deux valeurs de l'angle de mouillage θ_d . Un grand angle de mouillage reflète une faible tension superficielle aux interfaces solide-solide par rapport aux interfaces solide-liquide (voir 1.11), et un comportement similaire au modèle sans interfaces solide-solide est obtenu (courbes bleues dans Figure 7.3). La discontinuité montre la désagrégation à une porosité de 0.59 (le modèle de Hier-Majumder *et al.* (2006) présente cette discontinuité car les grains deviennent soudainement sphériques au delà de la porosité de désagrégation tandis qu'ils sont "à facettes" en deçà).

L'importance de la tension solide-solide augmente avec l'angle de mouillage décroissant et change le caractère de $d\chi/d\phi = \chi'$ quand θ_d devient inférieur à 90° . La courbe rouge de la Figure 7.3b où $\chi' < 0$ à toutes porosités montre le cas où la tension solide-solide est maximale ($\theta_d \rightarrow 0$).

Si nous ne pouvons fondre un solide en ne prenant qu'une tension superficielle solide-liquide, il devient maintenant impossible de cristalliser tout le solide! Clairement, l'initiation ou la fin d'un changement de phase demandent la prise en compte de thermodynamique à petite échelle (par exemple la nucléation et une chimie multicomposante) qui dépasserait notre approche.

La tension de surface est importante non seulement pour l'initiation de fusion mais aussi pour la migration du liquide. Considérons comme d'habitude un liquide peu visqueux ($\mu_f \ll \mu_m$, et par conséquent $\omega = 0$, $\underline{\tau}_f \ll 1$). Dans ce cas, l'équation (4.8) en prenant compte l'expression de ΔP où nous gardons le terme de tension superficielle (4.28) et en remplaçant $\sigma\alpha(\phi)$ par $\chi(\phi)$ (équation 7.6), s'écrit

$$(1 - \phi)\chi''\nabla\phi + \nabla \left(\mu_m K_0 \frac{1 - \phi}{\phi} \nabla \cdot \mathbf{v}_m \right) + \nabla \cdot [(1 - \phi)\underline{\tau}_m] + (1 - \phi)\Delta\rho\mathbf{g} - \frac{c\Delta\mathbf{v}}{\phi} = 0, \quad (7.7)$$

où $\chi'' = d^2\chi/d\phi^2$. Supposons que le liquide coule à travers d'une matrice immobile ($\mathbf{v}_m = 0$, ainsi que $\underline{\tau}_m = 0$ et $\Delta\mathbf{v} = -\mathbf{v}_f$) sans influence de gravité ($\Delta\rho = 0$). La vitesse du fluide devient simplement

$$\mathbf{v}_f = -c^{-1}\chi''\phi(1 - \phi)\nabla\phi. \quad (7.8)$$

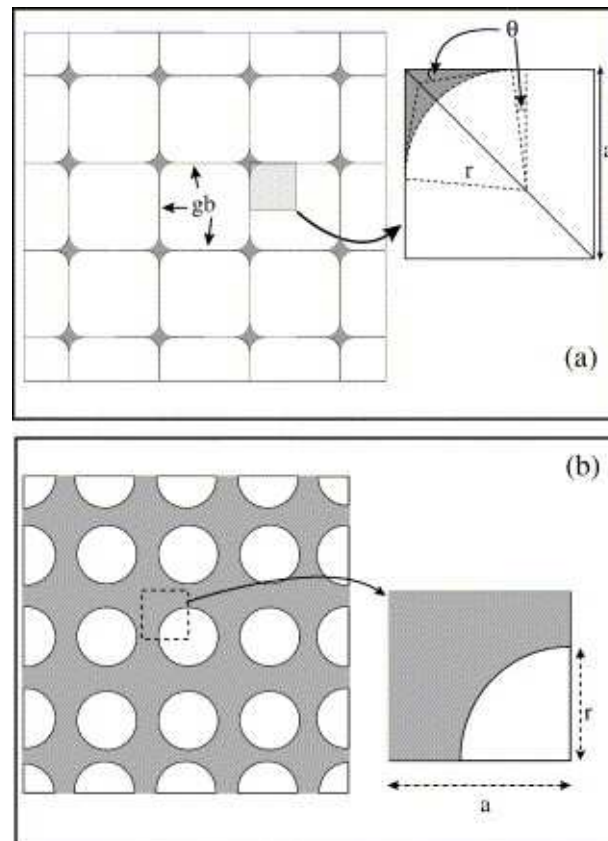


FIG. 7.2 – La disposition géométrique des grains solides (en blanc) et des pores remplis de magma (en gris) dans le modèle micro-mécanique pour étudier la tension superficielle de Hier-Majumder *et al.* (2006). Au dessous de la porosité de désagrégation les interfaces solide–solide contribuent à la tension superficielle (a). Le magma est alors distribué dans des tubules aux interfaces des grains. Au dessus de la porosité de désagrégation il n’y a que des interfaces solide–liquide et des grains cylindriques (b).

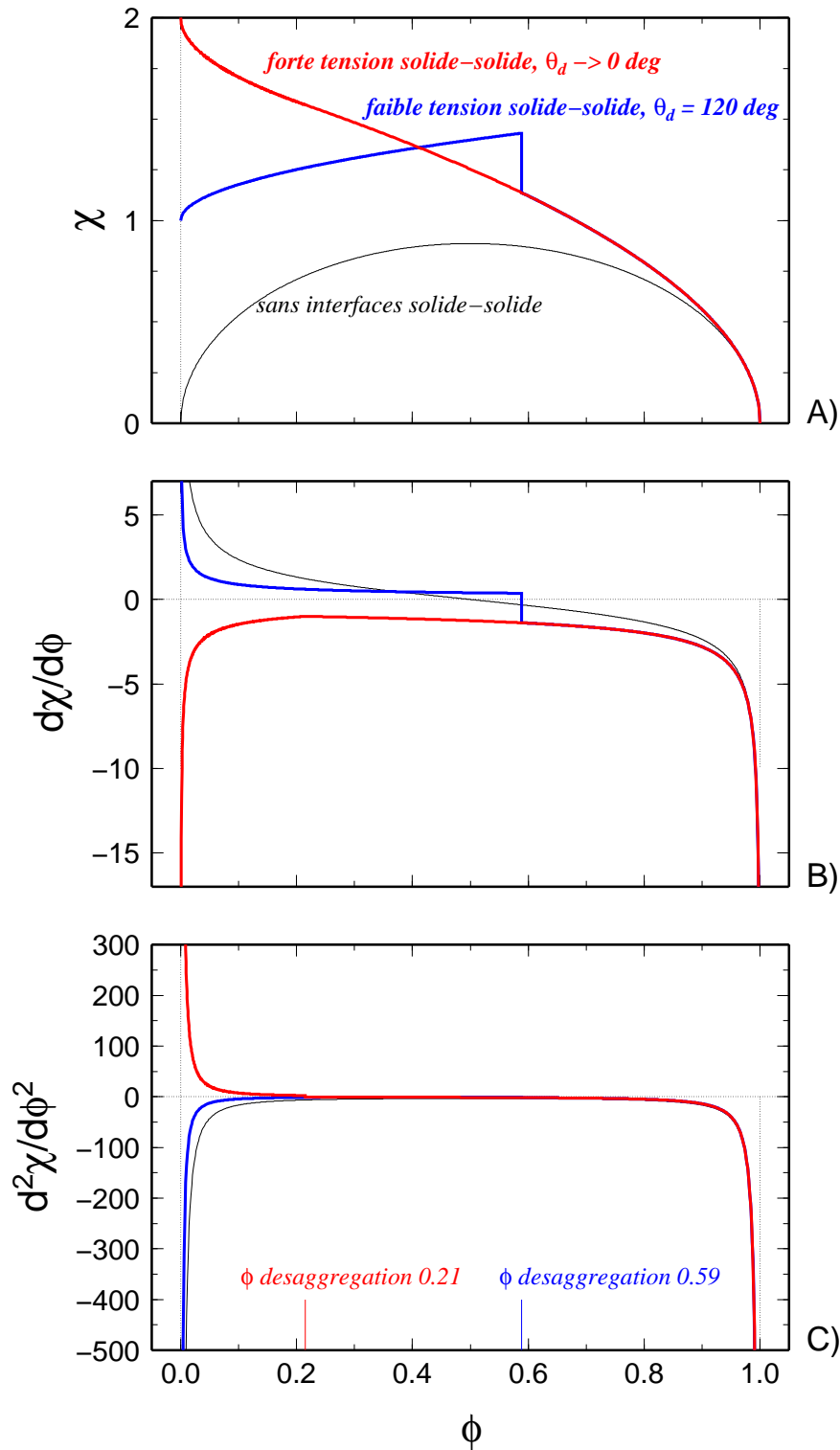


FIG. 7.3 – Comportement de l'énergie de surface χ du modèle de Hier-Majumder *et al.* (2006). a) $\chi(\phi)$; b) $d\chi/d\phi$ qui correspond à $\sigma d\alpha/d\phi$ dans notre modèle, ainsi qu'à la différence de pression $-\Delta P$; c) $d^2\chi/d\phi^2$ est lié au gradient de ΔP . Un grand angle de mouillage θ_d (courbes bleues, $\theta_d = 120^\circ$) correspond à une faible tension solide-solide et le comportement est qualitativement similaire au modèle sans interfaces solide-solide (courbes noires et Figure 7.1). Un petit angle de mouillage (courbes rouges, $\theta_d \rightarrow 0^\circ$) reflète une forte tension aux interfaces solide-solide; $d\chi/d\phi < 0$ à toutes porosités. Calculé à partir de Hier-Majumder *et al.* (2006) avec $\sigma_{mf} = 1$ et $\alpha_0 = 1$, les figures (a) et (c) reproduisent leurs Fig. 1.

Le liquide va dans la direction positive ou négative du gradient de porosité en fonction du signe de la dérivé seconde de l'énergie de surface, χ'' . Si $\chi'' > 0$ le flux, dans la direction de $-\nabla\phi$, a une tendance à diminuer les extrêmes de porosité. Par contre si $\chi'' < 0$, la migration du liquide amplifie les perturbations des porosité et provoque la séparation (démixion) des phases. Naturellement la simplification d'une matrice immobile ne peut plus tenir une fois que la redistribution du liquide commence : il faut alors inclure les termes de compaction, néanmoins l'équation (7.8) est instructive pour montrer le rôle de χ'' .

Pour mieux comprendre la physique, regardons la différence de pression entre le liquide et le solide, causée par la tension superficielle $P_f - P_m = \chi'$ (équation 7.4). Entre deux points A et B entre lesquels la porosité change de $\Delta_{A-B}\phi$, la différence de pression varie de $\Delta_{A-B}(P_f - P_m) = \Delta_{A-B}\chi'$. Maintenant si le signe $\Delta_{A-B}\chi'$ est le même que celui de $\Delta_{A-B}\phi$, ce qui est une condition équivalente à $\chi'' > 0$, la pression du liquide par rapport au solide sera plus grande au point où la porosité est la plus grande. Le liquide va s'écouler vers le point de pression inférieure, donc la différence de porosité va diminuer. Dans le cas contraire (équivalent à $\chi'' < 0$) on obtiendra une amplification des différences de porosité.

Un travail pionnier sur l'effet de la tension superficielle pour la migration du liquide dans un contexte géologique a été présenté par Stevenson (1986). L'analyse de la stabilité marginale et les simulations dans le système général des équations de Bercovici *et al.* (2001a) sont présentées dans Ricard *et al.* (2001); Bercovici *et al.* (2001b); Bercovici & Ricard (2003); Hier-Majumder *et al.* (2006). Avec un modèle sans interfaces solide-solide, χ'' reste négatif à toutes porosités (Figure 7.3, courbe noire). Le modèle de Hier-Majumder *et al.* (2006) avec interfaces solide-solide donne un résultat similaire si la tension entre les grains est faible. Avec une importante énergie de surface solide-solide $\chi''(\phi) > 0$ au dessous de la porosité de désagrégation et $\chi''(\phi) < 0$ au dessus de cette porosité. Une forte tension solide-solide et une taille de grain faible (l'énergie de surface χ est alors plus grande) tend a "capturer" le magma aux joints de grains, a empêcher son extraction, et à gêner la propagation de magmons Hier-Majumder *et al.* (2006).

Chapitre 8

Conclusion

8.1 Résumé

Dans cette thèse nous avons étudié la modélisation des milieux biphasés en contexte des Sciences de la Terre. Le travail comprend deux sujet principaux, nommément la modélisation de la compaction et de la ségrégation planétaire et la modélisation de la fusion partielle dans un milieu déformable.

Nous avons présenté un modèle général de la mécanique et la thermodynamique d'un mélange de deux phases qui se déforment (chapitres 2 et 4). Le modèle est basé sur les équations récentes de Bercovici *et al.* (2001a) mais introduit une extension importante qui est le transfert massique entre les deux phases (le changement de phase). Le modèle décrit un mélange mécanique à l'échelle mésoscopique de deux fluides visqueux par des équations de milieux continus. Le traitement cohérent de la thermodynamique prenant en compte l'interface entre les deux phases conduit au couplage entre la déformation visqueuse, l'effet de tension superficielle et le changement de phase. Puisque notre objectif principal est l'étude du couplage fusion-déformation, nous avons considéré la composition chimique la plus simple d'un milieux biphasé avec une seule composante.

Nous avons discuté des points communs et des différences entre notre modèle et le modèle "classique" du milieu biphasé avec fusion partielle de McKenzie (1984). La comparaison est possible lorsque nous écrivons nos équations dans la limite géologique où une des phases (appelée phase liquide) est beaucoup moins visqueuse que l'autre (phase solide). La différence la plus importante de notre modèle par rapport à McKenzie (1984) est l'existence d'une différence de pressions entre le solide et le liquide, qui est générée i) par la tension superficielle aux interfaces, et ii) par la déformation isotrope des phases individuelles lors de l'écoulement.

Nous avons appliqué nos équations à la modélisation de la différenciation d'une planète

tellurique (chapitre 3). La phase solide représente les silicates du manteau et la phase liquide est l'alliage métallique du noyau ; il n'y a pas de transfert de masse entre les silicates et le métal. La phase métallique est présente soit à l'état solide (à basse température) soit à l'état liquide, et sa fusion/solidification est décrite d'une façon simplifiée. Cette fusion/solidification très simplifiée nous permet donc de modéliser un milieu potentiellement tri-phasé (silicate solide, metal solide, metal liquide). Nous avons étudié d'abord la compaction et la séparation de phases sans considérer les effets thermiques dans une couche puis dans un corps symétrique sphérique (modèles 1-D). Puis un code numérique Cartésien à deux dimensions a été présenté et testé. Dans ce modèle, la libération de l'énergie potentielle dans le champs de gravité lors de la différenciation et sa conversion en chaleur sont correctement incluses. Nous avons présenté une simulation qui montre plusieurs mécanismes physiques de la séparation (ségrégation quasi-1-D, instabilité Rayleigh-Taylor, écoulement diapirique, propagation d'un courant de gravité...).

Dans le chapitre 5 nous avons présenté des solutions simples qui montrent le couplage de la déformation et la fusion dans le nouveau modèle. Il s'agit de la modification de l'étude de la compaction en géométrie sphérique présentée par McKenzie (1984), puis par Ricard *et al.* (2001). Nous avons considéré un échantillon sphérique enveloppé dans une membrane qui ne laisse sortir que la phase liquide, dans lequel la fusion partielle se produit, soit uniformément en espace soit à cause d'un écart de température uniforme au dessus de la température de fusion.

Nous avons étudié la décompression adiabatique dans un manteau remontant sous une dorsale (chapitre 6). La déformation volumique du squelette solide génère une différence dynamique de pressions entre le solide et le liquide : le magma subit une pression inférieure à celle de la matrice qui se compacte. Cet effet devient particulièrement important lors de l'initiation de la fusion et peut décaler la profondeur de la base de la zone de fusion de plusieurs kilomètres. L'effet de la tension superficielle à l'initiation de fusion est aussi discuté et dépend du bilan énergétique des interfaces à l'échelle de grains, et en conséquence de la géométrie du premier liquide. Les vitesses de remontée du magma atteignent au plus dix fois celles de la matrice. La porosité reste faible (quelques %) même à fort taux de fusion, et est d'allure parabolique sur toute la zone fondue.

8.2 Perspectives

De nombreuses possibilités de développement sont possibles. Le modèle de la différenciation planétaire développé dans le chapitre 3 représente le travail en cours. Les simulations ici présentées sont assez préliminaires et une analyse systématique des échelles de temps de la

différenciation et des simulations plus réalistes seront le sujet de nos prochains travaux.

Les applications du modèle de fusion partielle dans cette thèse se limitent aux cas où la fusion se produit à l'équilibre (à l'exception de la section 5.1.2) et les solutions données sont soit instantanées (chapitre 5), soit à l'état stationnaire (chapitre 6). Il serait important d'étudier la dynamique d'un système en fusion partielle non stationnaire pour étudier le couplage entre la fusion et la déformation lors de la propagation des ondes de porosité.

Vu la motivation principale qui était l'étude du couplage entre la compaction et la fusion, nous avons limité la composition chimique dans notre modèle biphasé au cas le plus simple à une seule composante. Une possible extension de ce modèle est l'introduction d'une composition chimique multivariante. Avec cette extension, notre description pourrait comporter l'enrichissement du magma et la déplétion du résidu solide lors de la fusion. À côté de la composition chimique en composants majeurs, le contenu en volatiles est extrêmement importante pour le processus de fusion dans la Terre et une paramétrisation de cet effet serait utile.

Le modèle de la différenciation métal-silicates en 2-D ne permet pas le changement de phase au sens strict ; la transition entre l'état liquide et l'état solide de la phase métallique est décrite d'une façon simple qui néglige la chaleur latente et ne change pas la porosité. Prendre en compte la chaleur latente dans les simulations de compaction en sphérique sera très simple. La programmation sera plus complexe en 2D car il faudra calculer et faire évoluer en chaque point une nouvelle variable (le rapport volumique fer liquide sur fer solide). Néanmoins la méthode de solution de cette thèse ouvre la voie pour un prochain modèle 2-D avec un changement de phase inclus plus précisément avec ses effets thermiques et le changement de volume associé.

Enfin nous souhaitons souligner que l'objectif principal de cette thèse est la dérivation rigoureuse d'un nouveau modèle biphasé avec le changement de phase. Les applications présentées sont assez simples, et visent à révéler le comportement fondamental du système, en particulier le couplage entre la fusion et la déformation. Le cadre temporel de la thèse n'a pas permis exploitation de nos équations dans les problèmes plus spécifique ou plus appliqués de géophysique. Nous espérons pouvoir le faire dans le futur.

Bibliographie

- Agee, C. B., 1998. Crystal-liquid density inversions in terrestrial and lunar magmas, *Phys. Earth Planet. Int.*, **107**(1-3), 63–74.
- Agee, C. B., Li, J., Shannon, M. C. & Circone, S., 1995. Pressure-temperature phase diagram for the Allende meteorite, *J. Geophys. Res.*, **100**(B9), 17725–17740.
- Agee, C. B. & Walker, D., 1993. Olivine flotation in mantle melt, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **114**(2-3), 315–324.
- Aharonov, E., Spiegelman, M. & Kelemen, P., 1997. Three-dimensional flow and reaction in porous media: Implications for the Earth's mantle and sedimentary basins, *J. Geophys. Res.*, **102**(B7), 14821–14833.
- Aharonov, E., Whitehead, J. A., Kelemen, P. B. & Spiegelman, M., 1995. Channeling instability of upwelling melt in the mantle, *J. Geophys. Res.*, **100**(B10), 20433–20450.
- Ahern, J. L. & Turcotte, D. L., 1979. Magma migration beneath an ocean ridge, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **45**(1), 115–122.
- Ahrens, T. J., 1990. Earth accretion, in *Origin of the Earth*, eds. H. E. Newsom & J. H. Jones, pp. 211–227, Oxford University Press.
- Bailyn, M. A., 1994. *Survey of Thermodynamics*, AIP Press, Woodbury, NY.
- Barcilon, V. & Lovera, O. M., 1989. Solitary waves in magma dynamics, *J. Fluid Mech.*, **204**, 121–133.
- Barcilon, V. & Richter, F. M., 1986. Nonlinear waves in compacting media, *J. Fluid Mech.*, **164**, 429–448.
- Bear, J., 1988. *Dynamics of Fluids in Porous Media*, Dover Publications, New York.
- Beeman, M. L. & Kohlstedt, D. L., 1993. Deformation of fine-grained aggregates of olivine plus melt at high temperatures and pressures, *J. Geophys. Res.*, **98**(B4), 6443–6452.

- Benz, W. & Cameron, A. G. W., 1990. Terrestrial effects of the giant impact, in *Origin of the Earth*, eds. H. E. Newsom & J. H. Jones, pp. 61–67, Oxford University Press, New York.
- Benz, W., Slattery, W. L. & Cameron, A. G. W., 1986. The origin of the Moon and the single-impact hypothesis I, *Icarus*, **66**(3), 515–535.
- Benz, W., Slattery, W. L. & Cameron, A. G. W., 1987. The origin of the Moon and the single-impact hypothesis II, *Icarus*, **71**(1), 30–45.
- Bercovici, D. & Karato, S., 2003. Whole mantle convection and the transition-zone water filter, *Nature*, **425**(6953), 39–44.
- Bercovici, D. & Ricard, Y., 2003. Energetics of a two-phase model of lithospheric damage, shear localization and plate boundary formation, *Geophys. J. Int.*, **152**(3), 581–596.
- Bercovici, D. & Ricard, Y., 2005. Tectonic plate generation and two-phase damage: Void growth versus grain size reduction, *J. Geophys. Res.*, **110**(B3), B03401.
- Bercovici, D., Ricard, Y. & Schubert, G., 2001a. A two-phase model for compaction and damage, Part 1: General theory, *J. Geophys. Res.*, **106**(B5), 8887–8906.
- Bercovici, D., Ricard, Y. & Schubert, G., 2001b. A two-phase model for compaction and damage, Part 3: Application to shear localization and plate boundary formation, *J. Geophys. Res.*, **106**(B5), 8925–8939.
- Bonatti, E., 1990. Not so hot "hot spots" in the oceanic mantle, *Science*, **250**(4977), 107–111.
- Brown, G. O., 2002. Henry Darcy and the making of a law, *Water Resources Research*, **38**(7).
- Buck, W. R. & Su, W., 1989. Focused mantle upwelling below mid-ocean ridges due to feedback between viscosity and melting, *Geophys. Res. Lett.*, **16**(7), 641–644.
- Cameron, A. G. W., 1983. Origin of the atmospheres of the terrestrial planets, *Icarus*, **56**(2), 195–201.
- Canup, R. M. & Righter, K., eds., 2000. *Origin of the Earth and Moon*, University of Arizona Press, Tucson.
- Carlson, R. W. & Langmuir, G. W., 2000. Timescales of planetesimal formation and differentiation based on extinct and extant radioisotopes, in *Origin of the Earth and Moon*, eds. R. M. Canup & K. Righter, pp. 25–44, University of Arizona Press, Tucson.
- Choblet, G. & Parmentier, E. M., 2001. Mantle upwelling and melting beneath slow spreading centers: effects of variable rheology and melt productivity, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **184**(3–4), 589–604.

- Cmíral, M., Fitz Gerald, J. D., Faul, U. H. & Green, D. H., 1998. A close look at dihedral angles and melt geometry in olivine-basalt aggregates: a TEM study, *Contrib. Mineral. Petrol.*, **130**, 336–345.
- Connolly, J. A. D. & Podladchikov, Y. Y., 1998. Compaction-driven fluid flow in viscoelastic rock, *Geodinamica Acta*, **11**(2–3), 55–84.
- Crisp, J. A., 1984. Rates of magma emplacement and volcanic output, *J. Volcanology and Geothermal Res.*, **20**(3–4), 177–211.
- Darcy, H., 1856. Les fontaines publiques de la ville de Dijon, Dalmont, Paris.
- de Groot, S. R. & Mazur, P., 1984. *Non-Equilibrium Thermodynamics*, Dover Publications, New York.
- Dietz, R. S., 1961. Continent and ocean basin evolution by spreading of the sea floor, *Nature*, **190**, 854–857.
- Drew, D. A., 1971. Averaged field equations of two-phase media, *Stud. Appl. Math.*, **50**(2), 133–166.
- Drew, D. A., 1983. Mathematical modeling of two-phase flow, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, **15**, 261–291.
- Drew, D. A. & Passman, S. L., 1998. *Theory of Multicomponent Fluids*, vol. 135 of *Applied Mathematical Sciences*, Springer-Verlag, New York.
- Drew, D. A. & Segel, L. A., 1971a. Analysis of fluidized beds and foams using averaged equations, *Stud. Appl. Math.*, **50**(3), 233–257.
- Drew, D. A. & Segel, L. A., 1971b. Averaged equations for two-phase flows, *Stud. Appl. Math.*, **50**(3), 205–231.
- Faul, U. H., 1997. Permeability of partially molten upper mantle rocks from experiments and percolation theory, *J. Geophys. Res.*, **102**(B5), 10299–10311.
- Fei, Y., Bertka, C. M. & Finger, L. W., 1997. High-pressure iron-sulfur compound, Fe_3S_2 , and melting relations in the Fe-FeS system, *Science*, **275**(5306), 1621–1623.
- Fowler, A. C., 1985. A mathematical model of magma transport in the asthenosphere, *Geophys. Astrophys. Fluid Dyn.*, **33**(1), 63–96.
- Fowler, A. C., 1989. Generation and creep of magma in the Earth, *SIAM J. Appl. Math.*, **49**(1), 231–245.

- Frank, F. C., 1968. Two-component flow model for convection in the Earth's upper mantle, *Nature*, **220**(5165), 350–352.
- Ganesan, S. & Poirier, D. R., 1990. Conservation of mass and momentum for the flow of interdendritic liquid during solidification, *Metall. Trans. B*, **21**(1), 173–181.
- Ghosh, A. & McSween, H. Y., 1998. A thermal model for the differentiation of asteroid 4 Vesta, based on radiogenic heating, *Icarus*, **134**(2), 187–206.
- Greenberg, R., Wacker, J. F., Hartmann, W. K. & Chapman, C. R., 1978. Planetesimals to planets: Numerical simulation of collisional evolution, *Icarus*, **35**(1), 1–26.
- Hernlund, J. W. & Tackley, P. J., 2007. Some dynamical consequences of partial melting in Earth's deep mantle, *Phys. Earth Planet. Int.*, **162**(1-2), 149–163.
- Hess, H. H., 1962. History of ocean basins, in *Petrologic Studies – A Volume in Honor of A. F. Buddington*, eds. A. E. J. Engel, H. L. James & B. F. Leonard, pp. 599–620, Geological Society of America, New York.
- Hier-Majumder, S., Ricard, Y. & Bercovici, D., 2006. Role of grain boundaries in magma migration and storage, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **248**(3-4), 735–749.
- Hirschmann, M. M., 2000. Mantle solidus: Experimental constraints and the effects of peridotite composition, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, **1**(10).
- Hirschmann, M. M., 2006. Water, melting, and the deep Earth H₂O cycle, *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, **34**, 629–653.
- Holness, M. B., 2006. Melt–solid dihedral angles of common minerals in natural rocks, *J. Petrol.*, **47**(4), 791–800.
- Honda, R., Mizutani, H. & Yamamoto, T., 1993. Numerical simulation of Earth's core formation, *J. Geophys. Res.*, **98**(B2), 2075–2089.
- Hutcheon, I. D. & Hutchison, R., 1989. Evidence from the Semarkona ordinary chondrite for ²⁶Al heating of small planets, *Nature*, **337**(6204), 238–241.
- Inoue, T., 1994. Effect of water on melting phase relations and melt composition in the system Mg₂SiO₄–MgSiO₃–H₂O up to 15 GPa, *Phys. Earth Planet. Int.*, **85**, 237–263.
- Iwamori, H., McKenzie, D. & Takahashi, E., 1995. Melt generation by isentropic mantle upwelling, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **134**(3-4), 253–266.
- Karato, S., 1989. Grain growth kinetics in olivine aggregates, *Tectonophys.*, **168**(4), 255–273.

- Karato, S., Bercovici, D., Leahy, G., Richard, G. & Jing, Z., 2006. The transition-zone water filter model for global material circulation: Where do we stand?, in *Earth's Deep Water Cycle*, eds. S. D. Jacobsen & S. van der Lee, AGU Geophysical Monograph 168, pp. 289–313, American Geophysical Union, Washington, DC.
- Karato, S. & Jung, H., 2003. Effects of pressure on high-temperature dislocation creep in olivine, *Philos. Mag.*, **83**(3), 401–414.
- Karato, S., Paterson, M. S. & FitzGerald, J. D., 1986. Rheology of synthetic olivine aggregates: Influence of grain size and water, *J. Geophys. Res.*, **91**(B8), 9151–9176.
- Kleine, T., Mezger, K., Palme, H. & Munker, C., 2004. The W isotope evolution of the bulk silicate Earth: constraints on the timing and mechanisms of core formation and accretion, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **228**(1-2), 109–123.
- Kleine, T., Münker, C., Mezger, K. & Palme, H., 2002. Rapid accretion and early core formation on asteroids and the terrestrial planets from Hf–W chronometry, *Nature*, **418**(6901), 952–955.
- Kojitani, H. & Akaogi, M., 1995. Measurement of heat of fusion of model basalt in the system diopside–forsterite–anorthite, *Geophys. Res. Lett.*, **22**(17), 2329–2332.
- Kushiro, I., Syono, Y. & Akimoto, S. I., 1968. Melting of a peridotite nodule at high pressures and high water pressures, *J. Geophys. Res.*, **73**(18), 6023–6029.
- Labrosse, S., Hernlund, J. W. & Coltice, N., 2007. A crystallizing dense magma ocean at the base of the Earth's mantle, *Nature*, **450**(7171), 866–869.
- Ladyzhenskaya, O. A., 1985. *The boundary value problems of mathematical physics*, Applied Mathematical Sciences, Springer, New York.
- Landau, L. D. & Lifshitz, E. M., 1959. *Fluid Mechanics*, vol. 6 of *Course of Theoretical Physics*, Pergamon Press, New York.
- Lasaga, A. C., 1998. *Kinetic Theory in the Earth Sciences*, Princeton University Press, Princeton, New Jersey.
- Lay, T., Garnero, E. J. & Williams, Q., 2004. Partial melting in a thermo-chemical boundary layer at the base of the mantle, *Phys. Earth Planet. Int.*, **146**(3-4), 441–467.
- Lay, T., Williams, Q. & Garnero, E. J., 1998. The core-mantle boundary layer and deep Earth dynamics, *Nature*, **392**(6675), 461–468.
- Leahy, G. M. & Bercovici, D., 2007. On the dynamics of a hydrous melt layer above the transition zone, *J. Geophys. Res.*, **112**(B07401).

- Lee, D.-C. & Halliday, A. N., 1995. Hafnium-tungsten chronometry and the timing of terrestrial core formation, *Nature*, **378**(6559), 771–774.
- Leveque, R. J., 1996. High-resolution conservative algorithms for advection in incompressible flow, *SIAM J. Numer. Anal.*, **33**(2), 627–665.
- Levin, B. J., 1972. Origin of the earth, in *The Upper Mantle*, ed. A. R. Ritsema, pp. 7–30, Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam.
- Li, J. & Agee, C. B., 1996. Geochemistry of mantle-core differentiation at high pressure, *Nature*, **381**(6584), 686–689.
- Manga, M., 1996a. Dynamics of drops in cavity flows: Aggregation of high viscosity ratio drops, *Phys. Fluids*, **8**(7), 1732–1737.
- Manga, M., 1996b. Mixing of heterogeneities in the mantle: Effect of viscosity differences, *Geophys. Res. Lett.*, **23**(4), 403–406.
- Manga, M., Castro, J., Cashman, K. V. & Loewenberg, M., 1998. Rheology of bubble-bearing magmas, *J. Volcanology and Geothermal Res.*, **87**(1-4), 15–28.
- Manga, M. & Stone, H. A., 1995a. Collective hydrodynamics of deformable drops and bubbles in dilute low Reynolds number suspensions, *J. Fluid Mech.*, **300**, 231–263.
- Manga, M. & Stone, H. A., 1995b. Low Reynolds number motion of bubbles, drops and rigid spheres through fluid–fluid interfaces, *J. Fluid Mech.*, **287**, 279–298.
- Matas, J., 1999. *Modélisation Thermochimique des Propriétés de Solides à Hautes Températures et Hautes Pressions. Applications Géophysiques.*, Ph.D. thesis, École Normale Supérieure de Lyon.
- Matsui, T. & Abe, Y., 1986. Impact-induced atmospheres and oceans on Earth and Venus, *Nature*, **311**(6079), 526–528.
- McKenzie, D., 1984. The generation and compaction of partially molten rock, *J. Petrol.*, **25**(3), 713–765.
- McKenzie, D. & Bickle, M. J., 1988. The volume and composition of melt generated by extension of the lithosphere, *J. Petrol.*, **29**, 625–279.
- Mei, S. & Kohlstedt, D. L., 2000a. Influence of water on plastic deformation of olivine aggregates, 1. Diffusion creep regime, *J. Geophys. Res.*, **105**(B9), 21457–21469.
- Mei, S. & Kohlstedt, D. L., 2000b. Influence of water on plastic deformation of olivine aggregates, 2. Dislocation creep regime, *J. Geophys. Res.*, **105**(B9), 21471–21481.

- Monteux, J., Coltice, N., Dubuffet, F. & Ricard, Y., 2007. Thermo-mechanical adjustment after impacts during planetary growth, *Geophys. Res. Lett.*, **34**(L24201).
- Murakami, M., Hirose, K., Kawamura, K., Sata, N. & Ohishi, Y., 2004. Post-perovskite phase transition in MgSiO₃, *Science*, **304**(5672), 855–858.
- Newsom, H. E. & Jones, J. H., eds., 1990. *Origin of the Earth*, Oxford University Press, New York.
- Ni, J. & Beckermann, C., 1991. A volume-averaged two-phase model for transport phenomena during solidification, *Metall. Trans. B*, **22**(3), 349–361.
- Nichols, A. R. L., Carroll, M. R. & Höskuldsson, A., 2002. Is the Iceland hot spot also wet? Evidence from the water contents of undegassed submarine and subglacial pillow basalts, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **202**(1), 77–87.
- Nye, J. F., 1953. The flow law of ice from measurements in glacier tunnels, laboratory experiments and the Jungfraufirn borehole experiment, *Proc. R. Soc. London A*, **219**(1139), 477–489.
- O’Connell, R. J. & Budiansky, B., 1977. Viscoelastic properties of fluid-saturates cracked solids, *J. Geophys. Res.*, **82**(36), 5719–5735.
- Oganov, A. R. & Ono, S., 2004. Theoretical and experimental evidence for a post-perovskite phase of MgSiO₃ in Earth’s D" layer, *Nature*, **430**(6998), 445–448.
- Ohtani, E., Litasov, K., Hosoya, T., Kubo, T. & Kondo, T., 2004. Water transport into the deep mantle and formation of a hydrous transition zone, *Phys. Earth Planet. Int.*, **143**, 255–269.
- Parmentier, E. M. & Phipps Morgan, J., 1990. Spreading rate dependence of three-dimensional structure in oceanic spreading centres, *Nature*, **348**(6299), 325–328.
- Phipps Morgan, J., 1987. Melt migration beneath mid-ocean spreading centers, *Geophys. Res. Lett.*, **14**(12), 1238–1241.
- Pietrzak, J., 1998. The use of TVD limiters for forward-in-time upstream-biased advection schemes in ocean modeling, *Month. Weather Rev.*, **126**(3), 812–830.
- Pozrikidis, C., 1992. *Boundary Integral and Singularity Methods for Linearized Viscous Flow*, Cambridge Texts in Applied Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge.
- Rabinowicz, M., Ceuleneer, G. & Nicolas, A., 1987. Melt segregation and flow in mantle diapirs below spreading centers: Evidence from the Oman ophiolite, *J. Geophys. Res.*, **92**(B5), 3475–3486.

- Rabinowicz, M., Genthon, P., Ceuleneer, G. & Hillairet, M., 2001. Compaction in a mantle mush with high melt concentrations and the generation of magma chambers, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **188**(3-4), 313–328.
- Ribe, N. M., 1985a. The deformation and compaction of partial molten zones, *Geophys. J. Roy. Astron. Soc.*, **83**(2), 487–501.
- Ribe, N. M., 1985b. The generation and composition of partial melts in the Earth's mantle, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **73**(2-3), 361–376.
- Ribe, N. M., 1988. On the dynamics of mid-ocean ridges, *J. Geophys. Res.*, **93**(B1), 429–436.
- Ricard, Y. & Bercovici, D., 2003. Two-phase damage theory and crustal rock failure: the theoretical 'void' limit, and the prediction of experimental data, *Geophys. J. Int.*, **155**(3), 1057–1064.
- Ricard, Y., Bercovici, D. & Schubert, G., 2001. A two-phase model for compaction and damage, Part 2: Applications to compaction, deformation and the role of interfacial surface tension, *J. Geophys. Res.*, **106**(B5), 8907–8924.
- Richard, G., Monnereau, M. & Rabinowicz, M., 2007. Slab dehydration and fluid migration at the base of the upper mantle: implications for deep earthquake mechanisms, *Geophys. J. Int.*, **168**(3), 1291–1304.
- Richter, F. M. & McKenzie, D., 1984. Dynamical models for melt segregation from a deformable matrix, *J. Geol.*, **92**(6), 729–740.
- Rigden, S. M., Ahrens, T. J. & Stolper, E. M., 1984. Densities of liquid silicates at high pressures, *Science*, **226**(4678), 1071–1074.
- Riley, G. N. & Kohlstedt, D. L., 1991. Kinetics of melt migration in upper mantle-type rocks, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **105**(4), 500–521.
- Roberts, J. J., Kinney, J. H., Siebert, J. & Ryerson, F. J., 2007. Fe-Ni-S melt permeability in olivine: Implications for planetary core formation, *Geophys. Res. Lett.*, **34**(L14306).
- Roe, P. L., 1985. Some contributions to the modelling of discontinuous flows, in *Large-scale computations in fluid mechanics; Proceedings of the Fifteenth Summer Seminar on Applied Mathematics, La Jolla, CA*, pp. 163–193, American Mathematical Society, Providence, RI.
- Rubie, D. C., Melosh, H. J., Reid, J. E., Liebske, C. & Richter, K., 2003. Mechanisms of metal-silicate equilibration in the terrestrial magma ocean, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **205**(3-4), 239–255.

- Rushmer, T., Minarik, W. G. & Taylor, G. J., 2000. Physical processes of core formation, in *Origin of the Earth and Moon*, eds. R. M. Canup & K. Righter, pp. 25–44, University of Arizona Press, Tucson.
- Russel, J. S., 1844. Report on waves, Fourteenth meeting of the British Association for the Advancement of Science.
- Safronov, V. S., 1969. *Evolution of the Protoplanetary Cloud and Formation of the Earth and the Planets*, Nauka, Moscow, translation from Russian NASA TTF-677, 1972.
- Schilling, J. G., Bergeron, M. B. & Evans, R., 1980. Halogens in the mantle beneath the Nort-Atlantic, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **297**(1431), 147–178.
- Schmeling, H., 1985. Numerical models on the influence of partial melt on elastic, anelastic and electric properties of rocks. Part I: elasticity and anelasticity, *Phys. Earth Planet. Int.*, **41**(1), 43–57.
- Schmeling, H., 2000. Partial melting and melt segregation in a convecting mantle, in *Physics and Chemistry of Partially Molten Rocks*, eds. N. Bagdassarov, D. Laporte & A. B. Thompson, vol. 11 of *Petrology and Structural Geology*, chap. 5, pp. 141–178, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht.
- Schmeling, H., 2006. A model of episodic melt extraction for plumes, *J. Geophys. Res.*, **111**(B03202).
- Schubert, G., Turcotte, D. L. & Olson, P., 2001. *Mantle Convection in Earth and Planets*, Cambridge University Press, Cambridge.
- Scott, D. R. & Stevenson, D. J., 1984. Magma solitons, *Geophys. Res. Lett.*, **11**(11), 1161–1164.
- Scott, D. R. & Stevenson, D. J., 1986. Magma ascent by porous flow, *J. Geophys. Res.*, **91**(B9), 9283–9296.
- Scott, D. R. & Stevenson, D. J., 1989. A self-consistent model of melting, magma-migration and buoyancy driven circulation beneath mid-ocean ridges, *J. Geophys. Res.*, **94**(B3), 2973–2988.
- Scott, D. R., Stevenson, D. J. & Jr, J. A. W., 1986. Observations of solitary waves in a viscously deformable pipe, *Nature*, **319**(6056), 759–761.
- Senshu, H., Kuramoto, K. & Matsui, T., 2002. Thermal evolution of a growing Mars, *J. Geophys. Res.*, **107**(E12), 5118.
- Shannon, M. C. & Agee, C. B., 1998. Percolation of core melts at lower mantle conditions, *Science*, **280**(5366), 1059–1061.

- Shukolyukov, A. & Lugmair, G. W., 1993. Live iron-60 in the early Solar System, *Science*, **259**(5098), 1138–1142.
- Sleep, N. H., 1974. Segregation of magma from a mostly crystalline mush, *Geol. Soc. Am. Bull.*, **85**(8), 1225–1232.
- Sleep, N. H., 2006. Mantle plumes from top to bottom, *Earth Sci. Rev.*, **77**, 231–271.
- Smolarkiewicz, P. K., 1983. A simple positive definite advection scheme with small implicit diffusion, *Month. Weather Rev.*, **111**(3), 479–486.
- Solomatov, V. S., 2000. Fluid dynamics of a terrestrial magma ocean, in *Origin of the Earth and Moon*, eds. R. M. Canup & K. Righter, pp. 323–338, University of Arizona Press, Tucson.
- Sparks, D. W. & Parmentier, E. M., 1991. Melt extraction from the mantle beneath spreading centers, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **105**(4), 368–377.
- Spiegelman, M., 1993a. Flow in deformable porous media. Part 1 Simple analysis, *J. Fluid Mech.*, **247**, 17–38.
- Spiegelman, M., 1993b. Flow in deformable porous media. Part 2 Numerical analysis – the relationship between shock waves and solitary waves, *J. Fluid Mech.*, **247**, 39–63.
- Spiegelman, M., 1993c. Physics of melt extraction: theory, implications and applications, *Trans. R. Soc. Lond. A*, **342**(1663), 23–41.
- Spiegelman, M., Kelemen, P. B. & Aharonov, E., 2001. Causes and consequences of flow organization during melt transport: The reaction infiltration instability in compactible media, *J. Geophys. Res.*, **106**(B2), 2061–2077.
- Spiegelman, M. & McKenzie, D., 1987. Simple 2-D models for melt extraction at mid-ocean ridges and island arcs, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **83**(1-4), 137–152.
- Šrámek, O., Ricard, Y. & Bercovici, D., 2007. Simultaneous melting and compaction in deformable two-phase media, *Geophys. J. Int.*, **168**(3), 964–982.
- Stevenson, D. J., 1981. Models of the Earth's core, *Science*, **214**(4521), 611–619.
- Stevenson, D. J., 1986. On the role of surface tension in the migration of melts and fluid, *Geophys. Res. Lett.*, **13**(11), 1149–1152.
- Stevenson, D. J., 1987. Origin of the moon, *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, **15**, 271–315.
- Stevenson, D. J., 1990. Fluid dynamics of core formation, in *Origin of the Earth*, eds. H. E. Newsom & J. H. Jones, pp. 231–249, Oxford University Press.

- Stolper, E., Walker, D., Hager, B. H. & Hays, J. F., 1981. Melt segregation from partially molten source regions: The importance of melt density and source region size, *J. Geophys. Res.*, **86**(B7), 6261–6271.
- Sweby, P. K., 1984. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws, *SIAM J. Numer. Anal.*, **21**(5), 995–1011.
- Sweby, P. K. & Baines, M. J., 1981. Convergence of Roe's scheme for the general non-linear scalar wave equation, Numerical Analysis Report, Reading University.
- Tanzosh, J., Manga, M. & Stone, H. A., 1992. Boundary element methods for viscous free-surface flow problems : Deformation of single and multiple fluid-fluid interfaces, in *Boundary Element Technologies*, eds. C. A. Brebbia & M. S. Ingber, pp. 19–39, Computational Mechanics Publications and Elsevier Applied Science, Southampton.
- Terasaki, H., Frost, D. J. & Rubie, D. C., 2007. Interconnectivity of Fe—O—S liquid in polycrystalline silicate perovskite at lower mantle conditions, *Phys. Earth Planet. Int.*, **161**(3-4), 170–176.
- Terasaki, H., Frost, D. J., Rubie, D. C. & Langenhorst, F., 2005. The effect of oxygen and sulphur on the dihedral angle between Fe—O—S melt and silicate minerals at high pressure: Implications for Martian core formation, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **232**(3-4), 379–393.
- Tonks, W. B. & Melosh, H. J., 1993. Magma ocean formation due to giant impacts, *J. Geophys. Res.*, **98**(E3), 5319–5333.
- Tsuchiya, T., Tsuchiya, J., Umemoto, K. & Wentzcovitch, R. M., 2004. Phase transition in MgSiO₃ perovskite in the earth's lower mantle, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **224**(3-4), 241–248.
- Turcotte, D. L. & Ahern, J. L., 1978. Porous flow model for magma migration in the asthenosphere, *J. Geophys. Res.*, **83**, 767–772.
- Turcotte, D. L. & Phipps Morgan, J., 1992. The physics of magma migration and mantle flow beneath a mid-ocean ridge, in *Mantle Flow and Melt Generation at Mid-Ocean Ridges*, eds. J. Phipps Morgan, D. K. Blackmann & J. M. Simpson, AGU Geophysical Monograph 71, pp. 155–182, American Geophysical Union, New York.
- van Leer, B., 1977. Towards the ultimate conservative difference scheme. IV. A new approach to numerical convection, *J. Computational Phys.*, **23**(3), 276–299.
- von Bargen, N. & Waff, H. S., 1986. Permeabilities, interfacial areas and curvatures of partially molten systems: Results of numerical computation of equilibrium microstructures, *J. Geophys. Res.*, **91**(B9), 9261–9276.

- Waff, H. S. & Bulau, J. R., 1979. Equilibrium fluid distribution in an ultramafic partial melt under hydrostatic stress conditions, *J. Geophys. Res.*, **84**(NB11), 6109–6114.
- Wetherill, G. W., 1980. Formation of the terrestrial planets, *Annu. Rev. Astron. Astrophys.*, **18**, 77–113.
- Wetherill, G. W., 1985. Occurrence of giant impacts during the growth of the terrestrial planets, *Science*, **228**(4701), 877–879.
- Wetherill, G. W., 1986. Accumulation of the terrestrial planets and implications concerning lunar origin, in *Origin of the Moon*, eds. W. K. Hartmann, R. J. Phillips & G. J. Taylor, pp. 519–550, Lunar and Planetary Institute, Houston.
- Wetherill, G. W., 1988. Accumulation of Mercury from planetesimals, in *Mercury*, eds. F. Vilas, C. R. Chapman & M. S. Matthews, pp. 670–691, University of Arizona Press.
- Wetherill, G. W., 1990. Formation of the Earth, *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.*, **18**, 205–256.
- White, R. & McKenzie, D., 1989. Magmatism at rift zones: The generation of volcanic continental margins and flood basalts, *J. Geophys. Res.*, **94**(B6), 7685–7729.
- Wiggins, C. & Spiegelman, M., 1995. Magma migration and magmatic solitary waves in 3-D, *Geophys. Res. Lett.*, **22**(10), 1289–1292.
- Williams, Q. & Garnero, E. J., 1996. Seismic evidence for partial melt at the base of Earth's mantle, *Science*, **273**(5281), 1528–1530.
- Yin, Q. Z., Jacobsen, S. B., Yamashita, K., Blichert-Toft, J., Télouk, P. & Albarède, F., 2002. A short timescale for terrestrial planet formation from Hf-W chronometry of meteorites, *Nature*, **418**(6901), 949–952.
- Yoshino, T., Walter, M. J. & Katsura, T., 2003. Core formation in planetesimals triggered by permeable flow, *Nature*, **422**, 154–157.
- Yoshino, T., Walter, M. J. & Katsura, T., 2004. Connectivity of molten Fe alloy in peridotite based on in situ electrical conductivity measurements: implications for core formation in terrestrial planets, *Earth Planet. Sci. Lett.*, **222**, 501–516.