



Doctoral Thesis

Numerical modeling of particle suspensions with application to crystal-melt systems

Author(s):

Deubelbeiss, Yolanda

Publication Date:

2010

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-006200544> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

NUMERICAL MODELING OF PARTICLE SUSPENSIONS WITH APPLICATION TO CRYSTAL–MELT SYSTEMS

A dissertation submitted to
ETH ZURICH

for the degree of
Doctor of Sciences

presented by

YOLANDA DEUBELBEISS

Dipl. Natw. ETH Zurich

born 10.03.1980

citizen of
Holderbank (AG)

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. James A. D. Connolly	ETH Zurich	Examiner
Dr. Boris J. P. Kaus	ETH Zurich	Co-examiner
Prof. Dr. Paul J. Tackley	ETH Zurich	Co-examiner
Prof. Dr. Harro Schmeling	Universität Frankfurt	Co-examiner

Summary

Geodynamical processes are typically multi-phase and multi-scale problems. The spatial scales vary from lithospheric to crystal scale and different phases, such as different types of rock, show different behavior with material properties varying within very short distances. In this thesis, small-scale processes related to two-phase problems such as crystal settling or crystal-bearing melt flows are studied on the scale of individual particles (crystals).

Numerical modeling of two-phase flow and geodynamical processes in general, usually requires the solution of the Stokes equations. Because material properties, such as the effective viscosity of rocks, might vary many orders of magnitude over small spatial scales, it is a non-trivial task to solve the Stokes equations numerically in an accurate manner. In the first part of this thesis, the accuracy of several 2D Eulerian and Lagrangian numerical techniques in the presence of strongly spatially varying viscosity is evaluated. It is found that the Lagrangian finite element method with body-fitting elements tracking the material interfaces is most suitable to study problems with large viscosity contrasts.

In the second part of the thesis, the mechanical behavior and effective rheology of two-phase systems consisting of rigid particles (crystals) suspending in a viscous fluid (melt) is studied using 2D direct numerical simulations on the spatial scale of individual crystals. Scaling laws for the effective viscosity of two-phase systems for either Newtonian or non-Newtonian rheology and different particles shapes are derived. Instantaneous numerical simulations demonstrated that the effective rheology of the aggregate is non-Newtonian only if the fluid has a non-Newtonian rheology. For small fluid fractions, it is demonstrated that inter-granular strain rates can be significantly larger than the applied background strain rates. These locally enhanced strain rates may lead to a change in aggregate rheology from Newtonian to non-Newtonian, which is also observed in laboratory experiments. Moreover, it has been demonstrated that particles within a suspension either move independently or interact in such a manner that a suspension behaves as a layer with given effective density and viscosity. In the latter case, a setup consisting of a fluid-solid aggregate lying above a pure fluid layer, might result in Rayleigh-Taylor instabilities. Scaling laws were derived as a function of fluid fraction, viscosity, density,

shape and size of the particles that predict the transition from one deformation mode to the other.

The third part of the thesis is based on findings of laboratory studies, which indicate that crystal-melt systems are non-Newtonian at high strain rates and solid fractions. In the presented study here, parameter extraction of laboratory experiments using a zero-dimensional inversion model confirmed the non-Newtonian behavior with power law coefficients of up to $n = 13.5$. Direct numerical simulations (2D) are used to better understand the effective rheology of crystal-bearing magmas undergoing large-strain simple shear deformation. The models employ a visco-elasto-plastic rheology including shear heating. The relative importance of processes suggested to be responsible for non-Newtonian rheology, such as shear heating, power law rheology, finite strain effects and plasticity are examined by applying different rheologies separately. It is shown that shear heating has a minor effect on the effective aggregate rheology, whereas a combination of finite strain effects (microstructural reordering of crystals) and plastic failure of individual crystals are a likely cause of the strong non-Newtonian rheology of crystal-bearing magmas.

The thesis demonstrates the power of direct numerical simulation applied to particle suspensions. Until now, the effective rheology of crystal-bearing magmas has been studied primarily by laboratory experiments on synthetic and natural aggregates. Numerical models, however, have a major advantage: they permit complete control of the processes on a microscopic scale and it is possible to quantify parameters that are not accessible through analogue or laboratory experiments. Generally, results can be applied in any other research field dealing with particle suspensions (assuming similar spatial scales as presented in this thesis), such as medicine, food, pharmaceutical or cosmetic industry.

Zusammenfassung

Geodynamische Prozesse sind typischerweise Probleme, welche aus verschiedenen Phasen bestehen und sich auf verschiedenen Skalen ereignen. Die Masstäbe variieren in der Grössenordnung von der Lithosphäre bis zu Kristallen und die verschiedenen Phasen, z.B. verschiedene Gesteinsarten, zeigen ganz unterschiedliche Verhalten, welche auf engem Raum schnell ändern können. In der vorliegenden Dissertation werden kleinmasstäbliche Prozesse in Bezug auf Zwei-Phasen-Probleme wie etwa das Absinken von Kristallen oder Kristall-haltige Schmelzflüsse in der Grössenordnung von einzelnen Partikeln (Kristallen) untersucht.

Für die numerische Modellierung von Zwei-Phasen-Flüssen oder geodynamische Prozesse generell werden normalerweise die Gleichungen von Stokes verwendet. Weil sich das Verhalten von den verschiedenen Materialien wie z.B. der Viskosität von Gesteinen innerhalb von kleinen Distanzen um viele Grössenordnungen ändern kann, können die Stokes-Gleichungen numerisch nicht immer mit genügender Genauigkeit gelöst werden. Im ersten Teil der Dissertation wird die Genauigkeit von verschiedenen zweidimensionalen Eulerschen und Lagrange'schen numerischen Methoden für Probleme mit stark räumlich ändernden Viskositäten evaluiert. Es stellte sich heraus, dass eine Lagrange'sche Finite Elemente Methode mit einem unstrukturierten Gitter, welches den Materialgrenzen folgt, am geeignetsten ist, um Probleme mit grossen Viskositätskontrasten zu studieren.

Im zweiten Teil der Dissertation wird das mechanische Verhalten und die effektive Rheologie von Zwei-Phasen-Systemen, bestehend aus einer viskosen Suspension (Schmelze mit Kristallen) mit darin schwimmenden rigidem Partikeln (Kristallen), studiert. Dazu wurden zweidimensionale Direkte Numerische Simulationen verwendet, in welchen jedes einzelne Kristall numerisch aufgelöst ist. Für die Bestimmung der effektiven Viskosität von Zwei-Phasen-Systemen mit entweder Newtonscher oder nicht-Newtonscher Rheologie und mit verschiedenen Formen von Partikeln wurden Skalierungsgesetze hergeleitet. Instantane numerische Simulationen haben gezeigt, dass die effektive Rheologie von Aggregaten (Partikel Suspensionen) nur nicht-Newtonsch ist, wenn das Fluid eine nicht-Newtonsche Rheologie aufweist. Für kleine Fluidanteile wurde gezeigt, dass

die inter-granularen Deformationsraten signifikant grösser sein können, als die ursprünglich angesetzten Hintergrunds-Deformationsraten. Die lokal erhöhten Deformationsraten könnten für den in Laborexperimenten beobachteten Übergang von einer Newtonschen zu einer nicht-Newtonschen Rheologie verantwortlich sein. Zusätzlich wurde gezeigt, dass Partikel in Suspension sich entweder unabhängig bewegen oder interagieren, so als würde sich eine Suspension als ein Lage mit einer effektiven Dichte und Viskosität verhalten. Ein Model, bestehend aus einer Zwei-Phasen-Lage (Fluid-Partikel) schwimmend auf einer Ein-Phasen-Lage (Fluid), würde in letzterem Falle Rayleigh-Taylor-Instabilitäten bilden. Skalierungsgesetze, welche als Funktion von Fluidanteil, Viskosität, Dichte, Form und Grösse von Partikeln hergeleitet wurden, können voraussagen, wo der Übergang von einem Deformationsmodus zum anderen liegt.

Der dritte Teil der Dissertation basiert auf Forschungsergebnissen von Laborstudien, welche besagen, dass sich ein Gemisch aus Kristallen und Schmelze unter hohen Deformationsraten und Kristallanteilen nicht-Newtonsch verhält. In der präsentierten Arbeit wird ein nulldimensionales Inversionsmodell verwendet, um Parameter aus Laborexperimenten zu extrahieren. Die Parameter bestätigen das nicht-Newtonsche Verhalten und es ergeben sich Potenzgesetz-Exponenten von bis zu $n = 13.5$. Direkte Numerische Simulationen (2D) werden verwendet, um die effektive Rheologie von Kristall-haltigen Magmen, welche hohen Scherdeformationen unterworfen sind, besser zu verstehen. Die Modelle verwenden eine visko-elasto-plastische Rheologie, welche auch Schererwärmung in Betracht zieht. Das Erwägen der Wichtigkeit der Prozesse, welche verantwortlich sein können für die nicht-Newtonsche Rheologie, kann untersucht werden, indem man die verschiedenen Rheologien, wie Schererwärmung, nicht-Newtonsche Rheologie, Kristallanordnungseffekte (entstehen während der Scherdeformation) und Plastizität separat anwendet. Es wurde gezeigt, dass Schererwärmung nur geringfügige Auswirkungen hat auf die effektive Aggregat-Rheologie. Hingegen, kann eine Kombination von Effekten, hervorgerufen durch Kristallneuanordnung und plastischem Brechen der einzelnen Kristalle, die nicht-Newtonsche Rheologie von Kristall-haltigen Magmen induzieren.

Die Dissertation zeigt die Mächtigkeit der Direkten Numerischen Simulation in Anwendung auf Partikel Suspensionen auf. Bis jetzt wurden effektive Rheologien von Kristall-haltigen Magmen hauptsächlich mit Laborexperimenten mit synthetischen oder natürlichen Aggregaten studiert. Numerische Modelle haben jedoch einen bedeutenden Vorteil:

Sie erlauben volle Kontrolle über kleinräumige Prozesse und zusätzlich können die Parameter, welche nicht durch Analog- oder Laborexperimente zugänglich sind, quantifiziert werden. Generell können die Resultate auf ein beliebiges Forschungsgebiet angewandt werden, welche sich mit Partikel Suspensionen beschäftigen (unter der Annahme, dass die Masstäbe in einem ähnlichen Bereich sind, wie in dieser Dissertation). Solche Forschungsgebiete sind zum Beispiel: die Medizin, die Nahrungsmittelindustrie, die pharmazeutische oder kosmetische Industrie.