

UNIVERSITÉ SORBONNE PARIS CITÉ





Thèse préparée à l'UNIVERSITÉ PARIS DIDEROT École doctorale STEP'UP-ED N°560 IPGP-Laboratoire de dynamique des fluides géologiques

Modélisation théorique et numérique de la convection thermique, applications aux manteaux planétaires.

par Kenny Vilella

présentée et soutenue publiquement le 28 Août 2015

Thèse de doctorat de Sciences de la Terre et de l'environnement dirigée

par Cinzia G. Farnetani & Édouard Kaminski

devant un jury composé de :

Frédéric Deschamps	Rapporteur
Gaël Choblet	Rapporteur
Chargé de recherche (Université de Nantes) Alexandre Fournier	Membre
Professeur (IPGP)	Membre
Professor (University of Colorado Boulder - US)	Membre
Edouard Kaminski Professeur (IPGP)	Co-directeur de thèse
Cinzia G. Farnetani Maître de conférences (Paris-Diderot)	Co-directrice de thèse

Résumé :

La convection thermique a un rôle fondamental sur l'évolution thermique d'une planète tellurique, telle que la Terre. La complexité de ce phénomène est ici étudiée avec des simulations numériques et une modélisation théorique.

La première partie de cette thèse présente les simulations numériques d'un système convectif de référence, sous l'approximation de Boussinesq, consistant en une couche horizontale de fluide possédant une condition de flux de chaleur nul à la base et de température constante à sa limite supérieure. Chaque particule de fluide est chauffée de manière homogène spatialement et temporellement. Nous établissons des lois d'échelle reliant le saut de température et l'épaisseur de la couche limite thermique au nombre de Rayleigh-Roberts (Ra_H), ce qui permet de décrire, au premier ordre, la structure thermique de tout le système. Le point fort de notre étude est d'obtenir, pour la première fois, des lois d'échelle purement théoriques en accord avec des simulations numériques. Pour cela nous postulons puis vérifions que la couche limite thermique se déstabilise, pour toute valeur de Ra_H , au même seuil de stabilité. Nous caractérisons également la structure horizontale du système en rapportant l'évolution du motif de convection en fonction de Ra_H . Pour quantifier cette évolution, il est possible d'établir les lois d'échelle reliant le nombre d'instabilités ainsi que la distance minimale entre instabilités à Ra_{H} . Cependant ces lois sont très sensibles à la définition d'une instabilité. L'alternative choisie ici est de proposer toute une gamme de valeurs possibles pour chaque Ra_H , afin d'illustrer les incertitudes causées par l'usage d'une variété de critères pour identifier une instabilité.

La seconde partie utilise les outils développés précédemment pour décrire les effets de la transition de l'état de spin du Fe^{2+} , dans le ferropériclase, sur la dynamique du manteau. Plus spécifiquement, nous étudions les variations de densité causées par cette transition électronique et par la modification de partitionnement du fer entre le ferropericlase et la perovskite. Le comportement du fer change drastiquement en présence de Al_2O_3 , c'est pourquoi nous considérons deux compositions pyrolitiques, une avec de l'aluminium et l'autre sans. Pour chaque composition, des considérations thermodynamiques permettent de modéliser la transition de l'état de spin. Puis nous utilisons l'équation d'état de Mie-Grüneisen-Debye pour obtenir la densité des assemblages minéralogiques en fonction de la température et de la pression. La densité résultante est en accord avec PREM et avec les données expérimentales. Les tables de densité sont incluses dans un code de convection compressible, avec les transitions de phase, et avec une viscosité dépendante de la température et de la profondeur. Globalement, l'effet sur la température du manteau est mineur, l'implication la plus notable est une augmentation de la vitesse verticale du fluide à la base du manteau.

Mots clés : Convection, couche limite thermique, transition de l'état de spin, loi d'échelle, motif de convection

Theoretical and numerical study of thermal convection, applications to planetary mantles.

Abstract :

Thermal convection is fundamental for the thermal evolution of a terestrial planet, such as the Earth. Here we study the complexity of thermal convection with both numerical simulations and theoretical modeling.

In the first part of the thesis we present numerical simulations, under the Boussinesq approximation, of a horizontal layer of fluid with no heat flux at the bottom and constant temperature at the top. Each part of the fluid is spatially and temporally homogeneously heated. We establish scaling laws linking the temperature jump and the thickness of the thermal boundary layer as a function of the Rayleigh-Roberts number (Ra_H) which provides, at first order, the thermal structure of the system. The novelty of our approach is to obtain, for the first time, purely theoretical scaling laws that agree with numerical simulations, by postulating that the thermal boundary layer becomes unstable and breaks off at the same limit of stability, regardless of the value of Ra_H . We also characterize the horizontal structure of the convective system and quantify how the convection planform varies with Ra_H . We establish scaling laws linking the number of instabilities and the minimum distance between instabilities as a function of Ra_{H} . However, the scaling laws are very sensitive to the criteria used to identify an instability. To highlight this issue we propose, for each Ra_H , a range of plausible values for the number of instabilities per surface area and their spacing.

The second part uses the methods previously developed to characterize the implications of the spin state transition of Fe^{2+} in ferropericlase on mantle dynamics. More specifically, we study the spin-induced density modifications caused by the volume collapse of ferropericlase and by the variation of Fe partitioning between ferropericlase and perovskite. The iron behaviour strongly depends on the presence of Al_2O_3 , therefore, we consider two pyrolitic compositions, with and without alumina. Our thermodynamically based model enables us to calculate, for each composition, the spin configuration of ferropericlase at lower mantle conditions. Then, we use the Mie-Grüneisen-Debye equation of state to obtain the density of the mineral assemblages as a function of temperature and pressure. The resulting density agrees with both PREM and experimental results. The density tables are then included in a compressible convection code with phase transitions, and with temperature and depth dependent viscosity. The effect of spin state transition on mantle temperatures is minor, the most important implication is the increase of the vertical component of the fluid velocity at the base of the mantle.

Keywords : Convection, thermal boundary layer, spin state transition, scaling law, convection planform

Remerciements

La partie la plus ardue de cette thèse à écrire est sans contestation possible ce paragraphe là. J'ai rencontré tellement de personnes différentes qu'il m'est difficile d'accorder une place à chacun d'eux, et c'est encore plus difficile de trouver les mots justes.

Mes premiers mots sont évidemment pour Cinzia, je te remercie du fond du coeur pour ces trois années passées à travailler ensemble. Tu as été une encadrante parfaite pour moi. Tu m'as laissé libre dans mes réflexions tout en me recadrant dans la bonne direction lorsque c'était nécessaire. Tu as été très souple et conciliante tout en étant stricte et rigoureuse. Tu as su me motiver, m'encourager et me donner confiance dans mon travail tout en pointant mes défauts pour m'aider à les corriger. L'alliance de cette douceur et de cette rigueur a, je pense, fait de moi le bon doctorant que je suis. Au delà du cadre de travail, ça toujours été un plaisir de discuter avec toi, et bien souvent tu as réussi à me faire retrouver le sourire par ta constante bonne humeur. C'est bizarre et un peu triste pour moi de partir bientôt, mais quoiqu'il arrive be careful the Pharaoh is watching you.

Je remercie également chaleureusement Angela et Édouard qui ont eu une influence importante sur mon travail. Les petites réunions chauffage interne avec Angela vont me manquer, elles ont égayé bon nombre de nos après-midi. Avec toi j'ai appris toute la complexité des expériences de laboratoire, et plus généralement de la convection thermique. Il est évident que ta présence a été indispensable pour la réalisation de ce travail. Après trois années passées à travailler avec toi Édouard, il y a quelque chose qui reste très mystérieux pour moi. Comment peuxtu être toujours disponible lorsque quelqu'un a besoin de toi avec un emploi du temps si chargé ? Tu as été la première personne de l'IPG que j'ai rencontré, alors que je n'étais qu'un simple étudiant de Master de physique, et déjà tu étais disponible pour moi. Tu m'as convaincu en une discussion de moins de deux heures à rejoindre l'IPG, et je t'offre toute ma gratitude pour cela.

Je remercie également Gaël Choblet et Frédéric Deschamps pour avoir accepté de rapporter ce manuscrit, dans les délais très courts que je vous demande. Je suis très heureux de vous avoir comme rapporteur, j'ai lu avec plaisir vos articles qui ont été une source d'inspiration pour mon travail. Merci Frédéric de m'avoir chaleureusement accueilli à Taiwan à plusieurs reprises, et encore merci pour m'avoir fourni certaines données que j'ai utilisé dans ce manuscrit. J'espère que le futur nous réserve de belles découvertes scientifiques.

Je n'oublierai jamais le mois passé en Arizona à ASU, et pas uniquement à cause des 50°C atteint durant mon séjour, mais aussi par l'accueil remarquable que j'ai reçu de la part de Dan Shim, Ed Garnero et Allen McNamara. C'est vraiment incroyable de condenser autant de talent dans un petit laboratoire. J'ai en tout cas appris énormément au contact de vous trois, et merci Mingming, Divya et Carole pour m'avoir aidé dans cet environnement plutôt extrême.

Tout au long de ma thèse j'ai eu la chance de discuter avec James Badro, Alexandre Fournier, Claude Jaupart et Loic Fourel, ces discussions ont toujours été très constructives et ont grandement contribué à l'avancée de mes recherches.

Je tiens également à remercier Shijie Zhong pour avoir accepté d'être membre de mon jury, et Paul Tackley pour avoir fourni le code numérique Stag3D. Je trouve particulièrement remarquable le travail de Paul et Shijie dans le développement et le partage de code numérique de convection. Je remercie également SCAPAD et IDRIS pour les quelques 3 millions d'heures, soit presque 350 années, d'heures de calculs que j'ai utilisé pour réaliser ce travail.

Le laboratoire DFG, qui est incontestablement le meilleur de l'IPG, a vraiment fourni un cadre de travail idéal. La vie à l'intérieur du labo a été incroyable, les composants se renouvellent mais la bonne ambiance à toujours été présente, et je suis certain qu'elle va perdurer. Il est impossible pour moi de me souvenir des milliers de discussions passionnées, bien souvent peu scientifique, qui ont constellé ma vie dans ce labo. Que ça soit dans un bar paumé de San Francisco, un petit resto au bord du Danube, dans le jardin d'Angela, ou bien le plus souvent aux Arènes on est toujours resté soudé. Une petite pensée donc pour Julien, Fanny, Francis, Morgane, Éric, Guillaume C., Pauline, François, Sylvie, Clément N., Hélène, Thierry, Anais, Gao, Geneviève, Olivier, Stéphanie, John, Laura, Hugo, Laure, Guillaume P., Maylis, Steve et Gaurav.

Mais l'IPG ne se résume pas qu'au DFG, il y a tellement de personnes formidables dans cet endroit qu'il est difficile pour moi de toutes les citées. Je vais toutefois remerciée certaines dont Ingrid, Aurélien, Boris, Lucile, Amarury, Élodie, Lambert, Marine, Damien, Sabrina, Eszter, Morgane, Géraldine, Kévine, Céline, Cyrielle...

Je tiens également à remercier tout particulièrement les deux personnes avec qui j'ai partagé mon bureau pendant ces trois années, j'ai nommé Alberto et Samuel plus connu sous le nom du gang des loubards. Je vais probablement jamais retrouvé des camarades comme vous, a posteriori on a passé ensemble trois années assez incroyable en alternant les périodes studieuses avec du grand n'importe quoi. En discutant de sujets aussi différents que l'existence du megalodon, la civilisation mésopatamienne, les reptiliens, ou bien la raison de la chute du second empire.

Plus personnellement je tiens à remercier Adrien et Clément pour votre amitié et le temps passé ensemble. Je pense à vous en finalisant l'écriture de ce manuscrit, et plus particulièrement je vous souhaite bon courage pour finaliser votre rédaction.

Je remercie également Seal, Kolala, Bear, Love Bear, Nasty, Ginger et Little White pour leur support, comprendra qui pourra.

Michel Leiris a écrit que pour être heureux un être humain a nécessairement besoin de quelque chose pour laquelle il serait capable de mourir. J'ai par chance trouver cette chose, ou de manière plus exacte cette personne. Je te dédie donc cette thèse, tu es ma muse...

Table des matières

1	Intr	oduction générale	3									
	1.1	La Terre : un ensemble de quatre systèmes dynamiques										
		1.1.1 L'atmosphère										
		1.1.2 Le manteau terrestre	7									
		1.1.3 Le noyau externe liquide	18									
		1.1.4 La graine solide	20									
		1.1.5 Les couplages et interfaces	20									
	1.2	Étude de la dynamique du manteau terrestre	21									
		1.2.1 Avant l'utilisation d'outils numériques : 1900-1974	22									
		1.2.2 Apparition des premiers centres de calcul : 1975-1992	27									
		1.2.3 De nos jours : 1993-2015	28									
	1.3	Conclusion	31									
2	Con	vection thermique	33									
	2.1	Présentation générale du système étudié	33									
	2.2	Mise en équation du système	34									
	2.3	Modèle numérique et expérimental	37									
	2.4	Les lois d'échelle régissant le système	40									
	2.5	Résultats expérimentaux et numériques	42									
	2.6	Conclusion	44									
3	Lois	d'échelle théorique gouvernant la convection thermique	45									
	3.1	Propos préliminaires	45									
	3.2	Introduction	50									
	3.3	Scaling laws for the boundary layer of an internally heated viscous										
		fluid at infinite Prandtl number	50									
		3.3.1 Dimensional analysis	50									
		3.3.2 Empirical scaling laws	53									
	3.4	A numerical investigation of scaling laws	54									
		3.4.1 Numerical model	54									
		3.4.2 Comparison with PS2000 results	55									
		3.4.3 Determination of the TBL based on heat fluxes	57									
	3.5	Critical thermal boundary layer theory	58									
		3.5.1 Fully theoretically determined scaling laws	58									
		3.5.2 Comparison with numerical simulations	60									
	3.6	Discussion	61									
	3.7	Conclusion	62									

4	Description des motifs de convection pour un fluide chauffé volumique-												
	mer	ent											
	4.1 Introduction												
	4.2	Numerical model	69										
	4.3	Results	70										
		4.3.1 Planform evolution	70										
		4.3.2 How to determine the horizontal organization of a convec-											
		tive planform?	76										
		4.3.3 What do these scaling laws tell us?	81										
	4.4	Conclusion	83										
5	Intr	oduction	85										
	5.1	Propos préliminaires	85										
		5.1.1 La transition de l'état de spin	86										
		5.1.2 Les contraintes observationnelles	87										
	5.2	Introduction	92										
	5.3	Density models	93										
		5.3.1 Average spin state of iron in ferropericlase	93										
		5.3.2 Iron content in ferropericlase and perovskite	95										
		5.3.3 Density as a function of temperature and pressure	97										
	5.4	.4 Mantle convection model											
	5.5	.5 Results											
	5.6	Discussion	105										
6	Perspectives et conclusions 109												
	6.1	Extension des lois d'échelle théoriques	109										
		6.1.1 Géométrie sphérique	109										
		6.1.2 Convection Rayleigh-Bénard	111										
		6.1.3 Notre Graal : Combinaison de chauffage par le bas et de											
		chauffage volumique	114										
	6.2	Conclusion	119										
Bi	bliog	raphie	121										

Préambule

L'atmosphère est la partie de la Terre que l'on connaît le mieux, vu que l'on peut réaliser des mesures directes qui couvrent une échelle de temps supérieure à celle de sa dynamique. Pour évaluer son évolution sur le long terme, e.g. l'augmentation de la température, il est préférable de ne retenir que les mécanismes fondamentaux gouvernant sa dynamique. Ceci peut être généralisé à tous les systèmes naturels dont la dynamique est trop complexe pour être fidèlement reproduite par des modèles physiques. Il est donc vain d'essayer de modéliser toute la complexité d'un système, la complexité du modèle doit être pondérée par la fiabilité des résultats attendus. L'idée sous-jacente est que la fiabilité du modèle décroît avec l'augmentation de la complexité. En effet en ajoutant de la complexité, on peut augmenter le nombre de couplages entre différents processus physiques, on peut également augmenter le nombre de paramètres, tout ceci implique une augmentation de la variabilité des résultats. Pour contrer cet effet il faut améliorer notre compréhension du système. La conclusion de cet exemple, qui est également le leitmotiv de ce travail, est qu'il est nécessaire d'augmenter la complexité d'un modèle à mesure que l'on augmente notre compréhension de celui-ci.

Cette approche est utilisée pour étudier la convection mantellique appliquée à la planète Terre. Dans un premier chapitre introductif nous allons présenter notre planète et la découper en quatre systèmes : le noyau interne solide, le noyau externe liquide, le manteau et l'atmosphère. Ces systèmes possèdent des dynamiques différentes qui sont influencées par les couplages existants. Néanmoins le manteau terrestre possède la dynamique avec l'échelle de temps la plus longue, il est donc l'agent régulateur de la planète. Depuis le premier modèle d'évolution thermique de la Terre réalisé par Kelvin (1862), notre conception du manteau terrestre a grandement évolué, et elle continue à évoluer. Toute la sophistication des modèles actuels de Terre va être présentée, ainsi que le cheminement pour arriver à un tel résultat. Cette partie va nous permettre d'introduire et de justifier les résultats qui vont par la suite être présentés.

Chapitre 1 Introduction générale

Sommaire

1.1	La Te	La Terre : un ensemble de quatre systèmes dynamiques									
	1.1.1	L'atmosphère									
	1.1.2	Le manteau terrestre 7									
	1.1.3	Le noyau externe liquide									
	1.1.4	La graine solide									
	1.1.5	Les couplages et interfaces									
1.2	Étude	e de la dynamique du manteau terrestre									
	1.2.1	Avant l'utilisation d'outils numériques : 1900-1974 22									
	1.2.2	Apparition des premiers centres de calcul : 1975-1992 27									
	1.2.3	De nos jours : 1993-2015									
1.3	Concl	usion									

1.1 La Terre : un ensemble de quatre systèmes dynamiques

La Terre peut être découpée en plusieurs sous-systèmes, le but de ce découpage est de créer des ensembles qui possèdent des propriétés et des échelles de temps comparables. Ces limites sont donc principalement dictées par la viscosité des matériaux constituant chaque sous-système, puisque celle-ci contrôle la vitesse du fluide. La raison principale de ce processus est la difficulté d'appréhender





FIGURE 1.2 – Bilan d'énergie solaire interagissant avec la Terre. D'après Trenberth *et al.* (2009).

la dynamique d'un système possédant deux échelles de temps, et donc deux viscosités, très différentes l'une de l'autre. Découpler les différentes parties composant la Terre par échelle de temps nous permet de simuler individuellement l'évolution de chaque sous-système. Nous découpons ici la Terre en quatre sous-systèmes qui sont, en allant du plus superficiel au plus profond : l'atmosphère, le manteau terrestre, le noyau externe liquide et la graine solide (figure 1.1). Ce découpage est bien évidemment subjectif, on pourrait par exemple considérer les océans en tant que sous-système à part entière ou combiner les deux parties du noyau. Ce choix se base sur la suite de cet exposé et il a pour but sa clarté. Nous allons commencer par présenter la dynamique interne de chaque sous-système, puis les couplages et interfaces existant entre eux.

1.1.1 L'atmosphère

L'atmosphère ¹ est une bande englobant la Terre d'environ 100 km d'épaisseur ². Elle est composée principalement de N₂ (78%) et de O₂ (21%), et dispose d'une viscosité de l'ordre de 10^{-5} Pa s. La source principale d'énergie de ce système est d'origine solaire, les rayons solaires arrivant jusqu'à la Terre sont majoritairement absorbés (70%), et le restant est réfléchi (30%). L'énergie totale mise en jeu lorsque celle-ci est dimensionnée par rapport à la frontière supérieure de l'atmosphère est de l'ordre de 341 W m⁻². La répartition de cette énergie est schématisée par la figure 1.2. La réflexion des rayons se fait principalement par les nuages et l'atmosphère (23%), mais également par la surface (7%). La surface de la Terre absorbe donc presque la totalité des rayons incidents (47% par rapport à 7% réfléchis), les rayons solaires restants sont absorbés par l'atmosphère (23%), via la vapeur d'eau ,l'ozone (3%) ou bien par les nuages (3%). La surface de la Terre

^{1.} Ce paragraphe s'inspire des livres écrits par Hartmann (1994) et par Mathez et Webster (2004). Pour plus de détails se référer à ces deux références.

^{2.} Selon la définition de la Fédération Aéronautique Internationale.

transmet ensuite l'énergie absorbée à l'atmosphère de trois différentes façons. La première (23%) est d'évaporer l'eau présente à la surface de la Terre, cette vapeur d'eau chaude s'élève jusqu'à condenser, suite à la baisse de température présente dans les 20 premiers kilomètres de l'atmosphère. Lors de la condensation, la vapeur d'eau fournit de l'énergie aux nuages et à l'atmosphère par le biais de sa chaleur latente. La seconde (18%) correspond à la radiation issue de la surface de la Terre, les rayons ainsi créés sont en partie absorbés par l'atmosphère (16%) tandis que l'autre partie s'échappe directement dans l'espace. La troisième (5%) est le réchauffement de l'air ambiant par conduction, ce matériel va ensuite s'élever participant activement aux mouvements atmosphériques. Un mécanisme important omis dans cette vue simplifiée de l'atmosphère est la réémission d'énergie par certains gaz, comme le CO_2 ou la vapeur d'eau. En effet l'énergie absorbée par ces gaz va ensuite être rayonnée dans toutes les directions, une fraction de cette énergie va s'échapper dans l'espace, une autre va être absorbée par la surface de la Terre, et la dernière fraction va être de nouveau absorbée par l'atmosphère.



FIGURE 1.3 – Une surface *A* reçoit des rayons solaires inclinés d'un angle θ . La surface effective "vue" par les rayons solaires est donc $A\cos(\theta)$. L'inclinaison induit donc une réduction, à énergie constante, de l'énergie par unité de surface reçue par le plan incliné.

Ce bilan d'énergie est global, il existe donc de fortes variations temporelles et spatiales. En premier lieu il y a les variations dues au cycle jour/nuit, la Terre ne recevant pratiquement pas de rayons solaires durant la nuit. Il y a également des variations annuelles causées par le changement d'inclinaison de la Terre par rapport au Soleil. Ce dernier mécanisme, expliqué simplement par la figure 1.3, entraîne une forte variation spatiale de l'ensoleillement. La sphéricité de la Terre induit une augmentation progressive de l'inclinaison, de nulle à l'équateur jusqu'à 90° aux pôles, ce qui crée une structure zonale de l'ensoleillement figure 1.4. Il existe d'autres sources de variations, telle que l'excentricité de l'orbite de la Terre qui cause un changement saisonnier de la distance Terre/Soleil et donc de l'amplitude de l'ensoleillement, mais elles n'ont qu'un impact mineur sur ce dernier. Cette hétérogénéité d'absorption de l'énergie solaire par la surface de la Terre est cruciale, car elle est la force motrice de la dynamique de l'atmosphère. L'air ambiant au niveau de l'équateur est plus chaud que l'air ambiant au niveau des pôles,



FIGURE 1.4 – Énergie à la surface de la Terre provenant de la radiation solaire, moyennée sur la période Novembre 1984 – Décembre 1989. Les données ont été collectées par le projet Earth Radiation Budget Experiment. D'après Li et Leighton (1993).

cette différence de température entraîne de la convection thermique qui va tendre à homogénéiser la température de l'atmosphère.

Un autre effet est déterminant pour la dynamique de l'atmosphère, il s'agit de la force de Coriolis (F_C). Puisque la Terre tourne sur elle-même, toute particule composant la Terre subit la force de Coriolis, et en particulier l'atmosphère. L'expression de la force de Coriolis est la suivante

$$F_C = -2m\Omega(t)(\mathbf{z} \wedge \mathbf{v}), \tag{1.1}$$

où *m* est la masse de la particule, $\Omega(t)$ la vitesse angulaire instantanée, z un vecteur unitaire selon l'axe de rotation et \mathbf{v} le vecteur vitesse de la particule. La force résultante est donc perpendiculaire à la direction du mouvement de la particule et à l'axe de rotation de la Terre. Prenons l'exemple d'un volume infinitésimal d'air situé à l'équateur, cet air est chaud donc il s'élève jusqu'à atteindre une certaine altitude d'équilibre. Il va ensuite se propager selon la latitude soit vers le Nord soit vers le Sud, en s'équilibrant thermiquement très rapidement avec le milieu environnant. L'effet de Coriolis affecte son mouvement en le déviant vers l'Est. Le moment cinétique de la particule diminue lorsqu'elle se rapproche des pôles, vu que sa distance à l'axe de rotation diminue. Donc par conservation du moment cinétique, sa vitesse de dérive augmente, jusqu'à environ 30° de latitude. Puis la particule retourne éventuellement vers l'équateur, lors de ce retour l'effet de Coriolis dévie le volume vers l'Ouest avec une vitesse qui décroit à mesure que la distance à l'axe de rotation augmente, ceci forme donc une cellule convective nommée cellule de Hadley (figure 1.5), en l'honneur de George Hadley (1685-1768) qui est le premier à suggérer l'existence d'une telle circulation. La deuxième possibilité est que le volume poursuive sa route en direction des pôles, formant une cellule de Ferrel (figure 1.5), en l'honneur de William Ferrel qui a expliqué les mouvements atmosphériques pour ces latitudes. La dynamique de l'atmosphère est complexe



FIGURE 1.5 – À gauche, une représentation de la circulation atmosphérique verticale pour l'hémisphère Nord, pour l'hémisphère Sud la circulation est identique. À droite, le sens du vent causé par le couplage de l'effet Coriolis et de la circulation atmosphérique présentée à gauche. D'après Mathez et Webster (2004).

1.1.2 Le manteau terrestre

Ce système dynamique est notre objet d'étude principal, il est donc décrit de manière plus détaillée. Le manteau terrestre est principalement composé de roches avec une viscosité de l'ordre de 10²¹ Pa s (figure 1.6) ce qui fait de lui le soussystème terrestre avec la dynamique la plus longue. L'état du manteau juste après la création de la Terre est mal connu, en particulier sa composition initiale. La Terre est issue de l'accrétion de chondrites (Wood, 1962); ces chondrites, créées lors de la condensation de la nébuleuse, sont principalement formées de silicates et de fer. Après l'accrétion de différentes chondrites la planète était sous forme liquide, l'énergie dégagée par les collisions entre ces différents "planétésimaux" a causé une augmentation drastique de la température, ce qui a permis la différentiation noyau/manteau (Urry, 1949). Le fer plus dense s'est concentré au centre, et un manteau silicaté s'est formé autour de ce noyau. Par conséquent la composition du manteau est dictée par les chondrites qui ont engendré la Terre, cependant les échantillons de chondrites collectés possèdent une variabilité compositionnelle importante. Une première méthode pour résoudre ce problème est de considérer que la composition du Soleil, qui représente 99% de la masse du système solaire, reflète celle des corps ayant formé la Terre. Les chondrites carbonées de type CI possèdent une composition très proche de celle du Soleil (Anders et Ebihara, 1982; Anders et Grevesse, 1989), ces météorites sont donc les meilleurs candidats pour faire office de corps parents. Une seconde méthode consiste à étudier les laves éruptées à la surface pour en déduire la roche mère qui les a engendrés. Il en résulte la pyrolite (Ringwood, 1962; Green et Ringwood, 1963) dont la composition est proche de la composition donnée par les chondrites de type CI (table 1.1), ce qui renforce l'hypothèse d'une composition pyrolitique du manteau. En réalisant ce calcul on suppose implicitement que le manteau a une composition homogène. Le modèle pyrolitique ne fait pas l'unanimité, certains avancent l'idée



FIGURE 1.6 – Trois profiles de viscosité, en échelle logarithmique, en fonction du rayon de la Terre. Ces modèles sont obtenus à partir du rebond post-glaciaire. Ils sont donc basés sur des modèles d'évolution historique du niveau de l'eau et de glaciation, ainsi que sur les mouvements actuels de la surface terrestre. Cet outil contraint fortement la viscosité du manteau supérieur, mais des incertitudes perdurent pour la viscosité du manteau inférieur. D'après Peltier (1998).

que les chondrites à enstatite sont les corps parents de la planète Terre (Javoy, 1995; Javoy et al., 2010). Les deux modèles sont relativement proches (table 1.2), le modèle à enstatite, par rapport à la composition pyrolitique, est enrichi en silice et en fer mais appauvri en magnésium. Pour le moment des lacunes subsistent dans les deux modèles, il n'y a donc pas de consensus. La composition pyrolitique reste le modèle standard de composition de la Terre, mais de plus en plus d'attention est portée aux chondrites à enstatite. Cette question est primordiale car elle conditionne notre conception du manteau à l'état présent. Une première différence entre ces deux théories est que le modèle à enstatite nécessite l'existence d'hétérogénéités compositionnelles à grande échelle dans le manteau, tandis que le modèle pyrolitique est satisfaisant avec un manteau homogène au premier ordre. Une seconde différence est la quantité d'éléments radiogéniques, qui diffère selon les compositions, présente dans la Terre. Ce point est crucial vu que la chaleur produite par la désintégration de ces éléments est une source importante d'énergie pour la dynamique du manteau (McDonough et Sun, 1995; Jaupart et al., 2007). Pour ne pas surcharger d'information le lecteur, nous allons suivre le modèle standard de composition, donc pyrolitique. Il faut garder en mémoire qu'une histoire différente de celle présentée ici est toutefois possible.

Retournons à la Terre juste après la différentiation noyau/manteau, le manteau était alors entièrement liquide, dans un état que l'on appelle océan magmatique. La convection était extrêmement vigoureuse, ce qui implique que le profil de température suivait le profil adiabatique. Parce que la vitesse de fluide est très impor-

TABLE 1.1 – Modèles de manteau terrestre primitive, le modèle pyrolitique pro-vient de McDonough et Sun (1995) tandis que le modèle CI est issu de (Taylor etMcLennan, 1985)

	Pyrolite	CI
SiO ₂	45.0	49.9
MgO	37.8	35.15
FeO	8.05	8.0
Al_2O_3	4.45	3.65
CaO	3.55	2.90
Cr_2O_3	0.384	0.44
Na ₂ O	0.36	0.34
K ₂ O	0.029	0.022
NiO	0.25	0.25
TiO ₂	0.201	0.16
MnO	0.135	0.13
P_2O_5	0.021	

TABLE 1.2 – Composition des éléments majeurs (wt%) pour le modèle pyrolitique(McDonough et Sun, 1995) et enstatique (Javoy, 1999)

Pyrolite	Enstatite
22.8	17.9
21.2	23.6
6.26	10.9
2.53	1.48
2.35	1.36
0.20	0.27
	Pyrolite 22.8 21.2 6.26 2.53 2.35 0.20



FIGURE 1.7 – Schéma illustrant un scénario possible de la solidification d'un océan magmatique. La partie rouge représente le noyau liquide, la partie jaune du matériel à l'état liquide enrichi en éléments incompatibles et la partie grise le solide résiduel. La partie solide à tendance à croître au détriment de la partie liquide, jusqu'à obtenir un manteau totalement solide. D'après Labrosse *et al.* (2007).

tante, de petites différences de température, comparées au profil adiabatique, sont suffisantes pour transporter une quantité importante de chaleur qui s'échappe par la surface. Cette perte de chaleur entraîne le refroidissement de l'océan magmatique et donc le début de sa solidification. Plusieurs modèles évoquent une solidification du bas vers le haut (Abe, 1997; Elkins-Tanton, 2008), alors que d'autres auteurs (Labrosse et al., 2007) suggèrent la présence d'une couche en fusion proche du noyau impliquant une solidification par le milieu (figure 1.7). Lors de ce processus la partie liquide résiduelle va être progressivement enrichie en éléments incompatibles, dont font partie le fer et les éléments radiogéniques (U, Th et K). L'emplacement de ces couches se solidifiant en dernier est crucial car elles entraînent un manteau hétérogène. De plus ces couches sont très denses, car enrichies en fer, et plus chaudes, car enrichies en éléments radiogéniques, il est donc clair que leurs emplacements, compositions et tailles sont déterminants pour l'évolution ultérieure du manteau (Nakagawa et Tackley, 2014). Un résultat robuste des simulations de solidification d'océan magmatique est le temps court de ce processus (au maximum 50 millions d'années), ceci induit que le profil de température suit la température du solidus (Elkins-Tanton, 2008). La pétrologie expérimentale permet donc de contraindre la condition initiale de température. Pour des pressions proches de celle régnant à la limite noyau/manteau les expériences prédisent une température de 3600-4100 K (Fiquet et al., 2010; Andrault et al., 2011; Nomura et al., 2014), cette incertitude est causée par l'incertitude sur la composition du manteau et également par les incertitudes inhérentes à ces expé-



FIGURE 1.8 – Distributions des âges des Zircons d'origine sédimentaire (bleu, noir et vert) et des granites issus de la formation des montagnes (rouge). D'après Condie (2011).



FIGURE 1.9 – Évolution temporelle schématique du volume de croûte continentale. D'après Taylor et McLennan (1995).

riences. Nakagawa et Tackley (2010) ont montré qu'une variation de température initiale n'affecte pratiquement pas l'état du manteau actuel, par conséquent cette divergence de résultats n'est pas déterminante.

Après cet épisode d'océan magmatique la convection mantellique débute avec l'apparition d'instabilités chaudes, qui vont probablement créer la première croûte terrestre. Le déroulement de cette partie de l'histoire de la Terre est peu connu, par exemple la date de la formation des continents et le début de la tectonique des plaques ne fait pas consensus. Toutefois la distribution des âges provenant de roches sédimentaires nous fournit de précieuses informations sur la croissance des continents. Les études portent généralement sur les Zircons, puisqu'ils sont très stables et donc résistent à d'éventuel épisodes ultérieurs de fusion et/ou d'érosion. Les compilations d'âges des roches sédimentaires (figure 1.8 et 1.9) montrent que la croissance de la croûte continentale a probablement commencé il y a 4 milliards d'années. Ensuite la distribution d'âges possède des pics (il y a 2.7, 2.5, 2.1, 1.9 et 1.1 milliards d'années) qui correspondraient à des périodes de fortes croissances des continents (ou une période de plus forte conservation des continents, voir Arndt et Davaille (2013) pour plus de détails sur ces deux théories). Finalement, la Terre atteint un état proche de celui qu'elle a de nos jours. Des panaches sont créés par le biais d'instabilités de la couche limite thermique existante proche du noyau. Les panaches atteignent la surface formant des points chauds, tel que les volcans Hawaïens. Ces panaches font parties de cellules convectives (figure 1.10) qui englobent également la lithosphère océanique, formée par les rides océaniques puis subductée. Lors de cette descente la lithosphère produit de la fusion partielle (certainement à cause de l'eau emprisonnée en son sein) qui alimente le volcanisme d'arc (figure 1.11). La convection induit un transfert de chaleur de l'intérieur convectif à la surface, impliquant une perte de chaleur et donc un refroidissement séculaire estimé à 100 K par milliard d'années (Jaupart et al., 2007).

Le temps est arrivé de décrire l'état actuel du manteau. Nous allons essayer de résumer ici les résultats exempts de toutes controverses, ce qui implique de ne pas présenter toutes les subtilités, tout en continuant de privilégier le modèle pyrolitique de composition du manteau. La combinaison des observations des ondes sismiques et d'expériences de pétrologie, à haute pression et température, ont grandement contribué à notre connaissance de la structure du manteau et de l'intérieur de la Terre en général. Très tôt (Byerly, 1926) l'étude des ondes sismiques a indi-



FIGURE 1.10 – Vue schématique d'une cellule convective à l'intérieur du manteau terrestre. Figure modifiée d'après l'USGS.



FIGURE 1.11 – Schéma de la subduction de la lithosphère océanique. La lithosphère entraîne des sédiments gorgés d'eau dans son mouvement. Ces sédiments induisent de la fusion partielle et donc du volcanisme à la surface. D'après Schubert *et al.* (2001).

 TABLE 1.3 – Le modèle de la Terre tel que prédit par Bullen (1947).

Partie	Croute		Manteau						Noyau				
Couche	A		В		С		D		Е		F		G
Limite	0	33		413		984		2898		4982		5121	
(km)													

qué un changement de comportement des vitesses sismiques avec la profondeur. Bernal (1936) a suggéré que la raison de cette observation pourrait être une transition de phase de l'olivine vers une structure spinelle. L'amélioration des modèles sismiques, symbolisée par les travaux de Jeffreys (1939), a permis à Bullen (1947) de construire un premier modèle de manteau basé sur les gradients de vitesses sismiques. Les différentes couches identifiées par Bullen sont représentées dans la table 1.3. En particulier, il y a la présence de deux frontières à l'intérieur du manteau, la première à 413 km de profondeur et la seconde à 984 km de profondeur. Birch (1952) a développé la fameuse équation d'état de Birch-Murnaghan, à l'aide de ce nouvel outil il a indiqué que la partie supérieure du manteau devrait être composée d'un ensemble d'olivine, de pyroxène et de grenat, alors que la partie inférieure de phases plus denses tel que du périclase (MgO). Il a également suggéré que des transitions de phases devraient progressivement avoir lieu. Le développement des premiers réseaux de sismomètres (Niazi et Anderson, 1965; Johnson, 1967) a fourni des modèles de vitesses sismiques beaucoup plus détaillés, qui ont définitivement affirmé l'existence de transitions de phases à 410 km et



FIGURE 1.12 – Schéma simplifié de la proportion des phases minéralogiques en fonction de la profondeur. Ce diagramme est calculé pour une composition pyrolitique et une température adiabatique de 1600 K. ol correspond à olivine, opx à orthopyroxène, plg à feldspath, cpx à clinopyroxène, sp à spinel, gt à grenat, hcpx à HP-clinopyroxène, wa à wadsleyite, ri à ringwoodite, capv à calcium perovskite, pv à silicate perovskite, fp à ferropériclase, cf à Ca-ferrite et ppv à post-perovskite. Modifiée d'après Stixrude et Lithgow-Bertelloni (2011).

660 km de profondeur. Mais avant cela, un jeune scientifique, Ted Ringwood, a effectué des calculs thermodynamiques afin de confirmer l'existence d'une transition de phase de l'olivine vers une structure spinelle (Ringwood, 1956, 1958). Résultat expérimentalement observé par Ringwood et Seabrook (1963) et Ringwood et Major (1967), donnant une explication probante de la discontinuité à 410 km de profondeur. La discontinuité à 660 km de profondeur a quant à elle été expliquée par Liu (1974), avec l'observation expérimentale de la silicate perovskite, cette dernière marque la limite entre le manteau supérieur et le manteau inférieur. La figure 1.12 résume un modèle compositionnel simplifié. De la surface jusqu'à 410 km de profondeur, le manteau est composé d'un ensemble de grenat, d'olivine et de pyroxène. La proportion de pyroxène décroît en faveur du grenat jusqu'à disparaître à 410 km. Ensuite l'olivine se transforme en wadsleyite puis en ringwoodite à 520 km de profondeur. Le système ringwoodite-grenat devient, à 660 km de profondeur, du ferropériclase, de la silicate perovskite (récemment renommée bridgmanite) et de la calcium perovskite (Wood, 2000). On a intentionnellement fait abstraction de la croûte terrestre, la raison est simplement la complexité de sa structure et les fortes hétérogénéités latérales existantes.

Pour le moment, nous nous sommes focalisés sur les conséquences de ces transitions de phases sur les ondes sismiques, mais elles induisent également de forts changements dans la dynamique du système. Dziewonski et Anderson (1981) ont établi le modèle PREM (figure 1.13), basé sur des données sismiques, fournissant les vitesses sismiques, ainsi que la densité et la pression en fonction de la profondeur. PREM fait depuis figure de modèle de référence pour la structure interne de



FIGURE 1.13 – Profils radiaux de densité (bleu), de vitesse des ondes P (violet) et de vitesse des ondes S (orange) en fonction de la profondeur et de la pression provenant du modèle PREM (Dziewonski et Anderson, 1981).

la Terre. On peut voir que la transition à 410 km de profondeur, soit l'équivalent de ~14 GPa, s'accompagne d'une variation de densité de ~200 kg/m³ (~6%). La pente de Clapeyron est de 4 MPa/K (Katsura et al., 2004), c'est donc une transition exothermique, c.a.d. qui fournit de l'énergie au système, causant une augmentation de la flottabilité du matériel qui la subit, et donc une accélération. La seconde transition à 660 km de profondeur (~23 GPa) induit une variation de densité de ~400 kg/m³ (~9%). La pente de Clapeyron est estimée à -2.5 MPa/K (Ye et al., 2014), c'est donc une transition endothermique, c.a.d. qui requiert de l'énergie. Cette transition s'oppose donc aux mouvements du fluide, d'autant plus qu'elle s'associe à une augmentation de la viscosité d'un facteur 10 à 100 (Ricard et al., 1993; Peltier, 1998; Mitrovica et Forte, 2004). De nombreux scientifiques ont alors suggéré que le manteau inférieur et le manteau supérieur étaient deux réservoirs chimiquement distincts, donc sans échange de matière. Chaque réservoir possède une convection qui lui est propre, on appelle ce modèle convection double couche. van der Hilst et al. (1997) et Grand et al. (1997) ont montré, à l'aide d'un modèle de tomographie sismique globale de haute résolution, que la subduction de la lithosphère océanique atteint le manteau inférieur (figure 1.14).



FIGURE 1.14 – a, section verticale représentant les anomalies de vitesses sismiques des ondes P dans le manteau sous l'Amérique centrale. Les zones bleues, associées à des anomalies positives, peuvent être interprétées comme du matériel froid et donc un panneau plongeant, tandis que les zones rouges, associées à des anomalies négatives, comme du matériel chaud. D'après van der Hilst *et al.* (1997). b, section verticale représentant les anomalies de vitesses sismiques des ondes S au niveau de la plaque Farallon. D'après Grand *et al.* (1997).

Par conséquent la convection à double couche n'est pas viable pour le manteau terrestre. La dernière transition de phase découverte est la transformation de la silicate perovskite en post-perovskite. Murakami *et al.* (2004) ont étudié la silicate perovskite pour une température supérieure à 2000 K, et ils ont montré l'apparition de post-perovskite pour des pressions ~125 GPa, donc très proches de l'interface avec le noyau (~135 GPa). Cette transition s'associe à une augmentation de la densité de l'ordre de 1% . À de telles conditions de température et de pression les expériences sont très sensibles, il existe donc des variations importantes dans les résultats. Par exemple, Catalli *et al.* (2009) suggèrent une pente de Clapeyron de 6.7 MPa/K tandis que Tateno *et al.* (2009) observent 13.3 MPa/K. Ces variations entraînent une grande variabilité sur les possibles implications, une conclusion robuste est que cette transition est plus facile dans la matière froide, et donc qu'elle devrait se produire à l'intérieur des panneaux plongeants qui atteignent l'interface noyau/manteau.

La post-perovskite n'est pas la seule complexité de la base du manteau : depuis les premiers modèles sismiques (Jeffreys, 1939; Bullen, 1947; Dziewonski et Anderson, 1981) les 200 derniers kilomètres du manteau sont crédités de faibles vitesses sismiques (figure 1.13). Cette couche, nommée D" d'après le modèle de Bullen (1947), a été dans un premier temps interprétée comme une forte augmentation de température causée par la convection thermique. L'étude locale des ondes S (Lay et Helmberger, 1983) présente des régions avec une augmentation de la vitesse des ondes S, potentiellement compensée par une réduction de cette même vitesse à plus grande profondeur (Thomas *et al.*, 2004), en désaccord avec une explication thermique. Plusieurs explications ont été avancées (voir Garnero *et McNamara* (2008) pour de plus amples détails) mais aucune ne fait consensus. Cette observation est locale, sur une échelle plus globale il existe deux aires



FIGURE 1.15 – Anomalies de vitesses des ondes S provenant de S20RTSb (Ritsema *et al.*, 2004) situées à 2850 km de profondeur. Bleu correspond à des vitesses faibles, rouge correspond à des vitesses élevées. Au dessus de la carte l'anomalie maximale par rapport à PREM (%).

étendues, une sous le Pacifique et une sous l'Afrique (Dziewonski et al., 1977), possédant des vitesses sismiques des ondes S faibles (figure 1.15). Ces deux zones, appelées LLSVPs (Large Low Shear Velocity Provinces) par certains, superplumes par d'autres, sont sujets à de nombreux débats. Elles possèdent une extension verticale de ~500 km sous le Pacifique et ~1000 km sous l'Afrique, et leurs bords sont presque vertical (Ni et al., 2002). La plupart des auteurs sont en faveur d'une origine compositionnelle pour les deux LLSVP (Masters et al., 2000; Deschamps et Tackley, 2008, 2009; Li et al., 2014), mais certains suggerent que les observations sismiques peuvent être expliquées uniquement avec des effets thermiques (Schuberth et al., 2009; Davies et al., 2012). Dans le cas d'une origine compositionelle deux explications ont été proposées. La première est d'assimiler les LLSVP à une accumulation de lithosphère océanique qui a subducté (Nakagawa et al., 2009, 2010). La seconde est de postuler l'existence d'un réservoir de matériel primitif (Kellogg et al., 1999), qui pourrait provenir de la subduction d'une croûte primitive (Tolstikhin et al., 2006), ou bien d'un résidu de l'océan magmatique primordial. L'explication la plus raisonnable est la présence d'un réservoir combinant du matériel primitif avec de la lithosphère océanique subductée (Tackley, 2012; Nakagawa et Tackley, 2014). La dernière structure observée dans cette région est la présence d'aires peu étendues, de l'ordre de 40 km de hauteur et de 700 km de largeur (McNamara et al., 2010), possédant des vitesses des ondes S très faibles (chute d'environ 10%). Ces zones, appelées Ultra Low Velocity Zone (ULVZ), ont peu d'influence sur la dynamique, par conséquent nous nous contentons d'une brève description. La nature des ULVZ est incertaine, elles peuvent être expliquées par de la fusion partielle (Williams et al., 1998), ou par une composition différente (Mao et al., 2006).

Pour terminer ce paragraphe la figure 1.16, réalisée par Garnero et McNamara



FIGURE 1.16 – Schéma de la structure du manteau inférieur, reposant sur une section verticale de vitesses des ondes S. Bleu correspond à des vitesses faibles, rouge correspond à des vitesses élevées. À gauche une représentation d'une LLSVP avec un panache central, et à droite la subduction d'un panneau plongeant qui atteint la limite noyau/manteau. L'interaction du panneau plongeant et des parois raides de la LLSVP induit un panache. D'après Garnero et McNamara (2008).

(2008), compile toutes les complexités présentées auparavant, et ce schéma inclut également les possibles interactions entre les différentes structures et la convection mantellique. Par exemple, les panaches situés au centre des LLSVP (Tan et Gurnis, 2005), les ULVZ situées sur les bords des LLSVP (McNamara *et al.*, 2010) et les panaches créés sur les bords des LLSVP par l'interaction avec les panneaux plongeants (Torsvik *et al.*, 2006).

1.1.3 Le noyau externe liquide

Oldham (1906) a été le premier à suggérer l'existence d'un noyau au centre de la Terre. Pour arriver à ce résultat il s'est basé sur les ondes sismiques P, en remarquant une zone que les ondes ne traversaient pas. Il a postulé l'existence d'un corps situé au centre de la Terre possédant des vitesses sismiques faibles et donc bloquant la propagation des ondes. Il a estimé son rayon à 3000 km, ce qui est étonnamment proche de la valeur réelle de 3486 km. Quelques années plus tard, Jeffreys (1929) a démontré la fluidité du noyau en s'aidant de l'oscillation de Chandler.

Auparavant Wiechert (1896) avait proposé la présence d'un noyau principalement composé de fer. Son argument était que la densité moyenne de la Terre (~5500kg/m³) est très éloignée de la densité des roches qui composent sa surface (~3300kg/m³), et donc un réservoir profond très dense devrait compenser la faible densité de sa partie superficielle. Considérant la composition des météorites qui étaient supposées représenter la Terre, il a postulé que ce réservoir pourrait être composé de fer. Il a fallu attendre Birch (1952) pour avoir une preuve que le noyau



FIGURE 1.17 – Représentation de la vorticité dans un modèle de dynamo terrestre. Rouge pour la vorticité cyclonique et bleu pour la vorticité anticyclonique. La dynamique du noyau externe est dominée par des mouvements en forme de colonnes. D'après Soderlund *et al.* (2012).

est composé principalement de fer liquide, avec également la présence possible d'éléments légers. En effet la densité du noyau est plus faible que la densité du fer pur d'environ 10% (Mao *et al.*, 1990), la présence d'éléments plus légers est donc nécessaire pour expliquer une telle différence. La présence de nickel est fortement suspectée (Brett, 1971), ceci augmente la proportion d'éléments légers nécessaire vu que le nickel est plus dense que le fer. De nombreux éléments ont été proposés, Si, S, O, H, C, sans atteindre de consensus (voir le résumé de Poirier (1994)).

La convection au sein du noyau liquide est extrêmement vigoureuse, de sorte que le profil de température est très proche du profil adiabatique. La structure thermique du noyau est également contrainte par la température à la limite noyau/manteau, appelée CMB pour Core Mantle Boundary, et à la limite noyau externe/graine, appelée ICB pour Inner Core Boundary. Pour la température à la CMB, le couplage entre les données sismiques et les données de pétrologie expérimentale permet de réduire la gamme des températures possibles à 3000–4000 K (Deschamps et Trampert, 2004). La température à l'ICB est quant à elle égale à la température de solidus du noyau liquide située entre 5500 et 6700 K, en considérant les incertitudes sur sa composition (Alfe *et al.*, 2003) et sur la mesure de cette température (Anzellini *et al.*, 2013).

La dynamique interne du noyau est complexe, nous présenterons ici que les processus majeurs gouvernant sa dynamique. La force motrice à l'intérieur du noyau est la convection qui va donc mettre en mouvement le fer liquide constituant le noyau. Le fer liquide étant fortement conducteur, un champ magnétique se forme par effet dynamo. Ce champ magnétique va rétroactivement agir sur le mouvement à l'intérieur du noyau (force de Laplace) en s'opposant à la déformation des lignes de champs. La dynamique du noyau est également influencée par l'effet de Coriolis. Dans le cas où l'effet de Coriolis est dominant, Proudman (1916) et Taylor (1917) ont montré que le champ de vitesse est invariant selon l'axe parallèle à l'axe de rotation, on appelle ce résultat le théorème de Proudman-Taylor. En conséquence, l'écoulement est dit géostrophique et il prend la forme de colonnes (figure 1.17). Il est a noté que la force de Laplace tend à briser cette structure en colonne, néanmoins l'écoulement quasi-géostrophique devrait être dominant (figure 1.17).

1.1.4 La graine solide

La graine a été découverte par Lehmann (1936) à l'aide de la propagation des ondes sismiques. Plus tard, Birch (1952) assimile la graine à une partie cristallisée du noyau externe. Elle est donc principalement composée de fer, avec des éléments légers mais en quantité plus faible que dans le noyau externe (Masters et Gubbins, 2003). Contrairement au noyau externe, la graine n'était pas présente lors de la création de la Terre. Elle est issue du refroidissement du noyau externe, et son âge est estimé à $\sim 1-2.5$ milliards d'années (Labrosse *et al.*, 2001). La graine continue à croître à mesure que la Terre refroidit, et cette croissance est peut-être l'unique processus dynamique en son sein. Il est possible qu'une très faible convection thermique ait lieu, mais les incertitudes liées aux propriétés physiques de la graine sont trop importantes pour trancher cette question.

1.1.5 Les couplages et interfaces

Les couplages et interfaces entre ces quatre systèmes dynamiques sont omniprésents et cruciaux dans leur dynamique. L'exemple le mieux connu est la protection offerte à l'atmosphère par le champ magnétique issu du noyau externe. Les lignes de champ magnétique traversent le manteau, ceci a pour effet de couper les variations basses fréquences du champ magnétique, c.à.d que les variations spatiales à petites échelles ainsi que les variations temporelles rapides du champ magnétique terrestre vont être lissées en traversant le manteau. Une fois que les lignes de champ ont traversé le manteau terrestre, elles englobent l'atmosphère en la protégeant du vent solaire. La présence d'un champ magnétique n'est pas vitale pour avoir une atmosphère, vu que Vénus possède une atmosphère sans avoir un champ magnétique fort. Cependant il permet d'avoir une atmosphère peu dense, qui en l'absence de protection aurait été balayée par le vent solaire. Ainsi le champ magnétique est un important paramètre de contrôle pour la composition de l'atmosphère.

La composition de l'atmosphère influence sa température, et donc la température de surface du manteau qui est déterminante pour la vigueur de la convection mantellique. Dans un cas extrême, telle que lors de l'épisode d'océan magmatique primordial, la température de l'atmosphère est tellement haute que la surface du manteau est totalement fondue. Lorsqu'au contraire la température de l'atmosphère est très basse, la vigueur de la convection mantellique augmente. Ceci cause une élévation du dégazage du manteau, d'où une augmentation de la température de l'atmosphère. Par conséquent la température actuelle de la surface est due à un équilibre entre le manteau et l'atmosphère. À l'autre extrémité du manteau, l'énergie est extraite du noyau par conduction et participe à la convection mantellique. Gomi *et al.* (2013) ont calculé que le manteau doit extraire au minimum 11 TW du noyau, afin de rendre possible la création et le maintien du champ magnétique. En effet l'énergie extraite du noyau, et donc sa dynamique, est principalement contrôlée par le manteau. Plus la convection du manteau est vigoureuse, plus la quantité d'énergie extraite du noyau est élevée. Si la force du champ magnétique diminue, l'atmosphère va subir le vent solaire et donc s'échapper dans l'espace. La température de surface va diminuer, donc la convection mantellique va devenir plus vigoureuse ce qui va avoir pour conséquence la réactivation du champ magnétique. Le couplage entre atmosphère/manteau/noyau est donc déterminant pour la dynamique de chaque sous-système.

À l'interface atmosphère/manteau, la présence de vie peut influencer la dynamique des systèmes composant la Terre. Le réchauffement climatique d'origine humaine va probablement avoir de désastreuses conséquences pour l'humanité, cependant son influence sur la dynamique mantellique est négligeable. En revanche, il y a 2.3 milliards d'années les cyanobactéries, via la photosynthèse, ont transformé le CO_2 présent en O_2 . Cette transformation a eu un impact majeur sur la composition actuelle de l'atmosphère et a permis de garder des conditions propices à la vie (Kasting et Siefert, 2002). Ce changement de composition atmosphérique a probablement été réalisé sur une période de temps importante (~1 milliard d'années), et accompagné par des variations de température à la surface de l'ordre de 100 K (Lowe et Tice, 2007), suffisantes pour impacter la dynamique du manteau.

Nous avons vu auparavant que la graine, par le biais des mouvements issus de la convection, engendre le champ magnétique. Avant l'apparition de la graine, la convection thermique assurait l'existence d'un champ magnétique, et lorsque le noyau solide est apparu la convection chimique (ou compositionnelle) est venue suppléer la convection thermique. Nous avons indiqué une présence plus faible d'éléments légers présents dans la graine que dans le noyau externe. Ceci signifie que lors de la cristallisation du fer liquide présent dans le noyau externe, une partie des éléments légers ne cristallisent pas. Ces éléments, étant plus légers, s'élèvent et participent à la convection.

1.2 Étude de la dynamique du manteau terrestre

Nous avons présenté dans la section précédente les principaux systèmes dynamiques composant la Terre, et nous avons mis en lumière toute la complexité de ces systèmes. Un des systèmes, considéré indépendamment des autres, est déjà extrêmement difficile à reproduire, et en tenant compte des couplages existants entre ces quatre systèmes, la tâche semble devenir impossible. Il est donc nécessaire de simplifier le système dynamique afin de pouvoir l'étudier. Cette étape de simplification est cruciale et peut être ardue. La clé est de maintenir un équilibre entre le processus physique que l'on veut étudier, et les mécanismes physiques que l'on intègre dans le modèle. Nous allons présenter ici l'historique des études concernant la dynamique du manteau terrestre, en particulier l'augmentation progressive de la complexité des modèles.

1.2.1 Avant l'utilisation d'outils numériques : 1900-1974

L'étude de la dynamique du manteau terrestre a commencé par la combinaison d'expériences de laboratoire et d'études analytiques. Les premières études rigoureuses de la convection ont été réalisées par Bénard (1900*a*,*b*) qui a étudié un fluide chauffé par le bas et refroidi par le haut. Il a montré qu'une fois dépassé un certain seuil d'apport d'énergie par le bas, la convection démarre avec des structures hexagonales régulières, les cellules de Bénard. En augmentant l'apport d'énergie dans le système, il a observé un régime turbulent. Plus tard Rayleigh (1916) continue l'étude de Bénard en la formalisant mathématiquement, entre autres il identifie les paramètres gouvernant la convection thermique et fournit un cadre mathématique permettant de calculer les seuils de stabilité. Les paramètres régissant ce système forment un nombre sans dimension appelé le nombre de Rayleigh,

$$Ra = \frac{\rho g \alpha \Delta T d^3}{\eta \kappa},\tag{1.2}$$

avec ρ la densité, g l'accélération de la pesanteur, α le coefficient de dilatation thermique, ΔT la différence de température que subit le système, d la hauteur, η la viscosité et κ la diffusivité thermique. À faibles nombres de Rayleigh, la chaleur est transportée par conduction et à partir d'un seuil, appelé Rayleigh critique (Ra_c), la convection commence. Ce système thermique est appelé la convection Rayleigh-Bénard en l'honneur aux deux grands scientifiques. Auparavant, Boussinesq (1903) a étudié les équations régissant la convection thermique et a proposé une simplification connue sous le nom d'approximation de Boussinesq. Cette approximation consiste à négliger toute les variations de densité, sauf les variations dues à la température dans le terme de flottabilité. Ce modèle, en plus d'être simple, s'applique très bien aux expériences de laboratoire vu que dans ce cas les variations de densité sont faibles.

À cette époque, très peu de personnes postulaient l'existence de convection à l'intérieur de la Terre (Jeffreys, 1929). L'apparition du concept de dérive des continents (Taylor, 1910; Wegener, 1915) a changé les forces en présence. Il était nécessaire de trouver une force étant assez forte pour déplacer les plaques. Holmes (1929, 1945) a suggéré que la convection thermique était responsable du mouvement des plaques. Son étude est qualitative, il ne propose pas de preuves formelles, cependant il décrit très bien l'effet de la convection sur les continents (figure 1.18). Holmes (1929) insiste sur l'importance des éléments radioactifs présents à l'intérieur de la Terre. Jeffreys (1929) était un fervent opposant à la tectonique des plaques, mais ironiquement Jeffreys (1930) a participé à l'amélioration de la compréhension de la convection, en étudiant l'effet de la compressibilité sur la stabi-



FIGURE 1.18 – Schéma illustrant l'effet de la convection sur la surface terrestre. En haut, un continent est entouré d'océan. En bas, les mouvements convectifs cassent le continent en deux, avec la création au milieu d'une île causée par la remontée de matière. D'après Holmes (1929).

lité de la convection Rayleigh-Bénard. Pekeris (1935) poursuit l'idée proposée par Holmes (1929), en utilisant les données disponibles, en particulier les premières estimations de la viscosité du manteau réalisées par Haskell (1935), afin de déterminer si la convection thermique est possible. L'étude de Pekeris (1935) donne une première preuve mathématique de l'existence de la convection thermique. Hales (1936) continue le travail théorique en expliquant les anomalies de gravité par de la convection thermique. Les travaux successifs sont compilés et utilisés par Knopoff (1964) pour démontrer de manière très claire que la Terre possède une convection très vigoureuse. Il commence par calculer le nombre de Rayleigh de la Terre, qu'il estime entre 10⁶ et 10⁸, puis il compare cette valeur aux limites de stabilité calculées théoriquement. Il débute par un modèle simple, puis le complexifie en ajoutant la compressibilité et une transition de phase à 400-1000 km de profondeur. Dans tout les cas il trouve que la Terre est thermiquement instable et donc que la convection est nécessairement présente. En revanche il considère la transition de phase comme une barrière, et donc prévoit une convection à double couche. Cependant Hess (1951) a déjà pris en compte ce problème, et il a suggéré que la transition de phase ne devrait pas bloquer la convection. En résumé, les premières études portant sur la convection mantellique visaient à déterminer les seuils de stabilité, symbolisés par Ra_c, et à les comparer aux conditions terrestres. Ce calcul de stabilité a été formalisé par Chandrasekhar (1961), dans un livre qui est encore une référence incontournable. En parallèle, de nombreuses expériences de laboratoire et études analytiques ont été réalisées afin de mieux comprendre la physique de la convection. Deux axes principaux ont été suivis.

Le premier axe consiste à établir des lois d'échelle caractérisant le système convectif. Avant de développer plus en détail nous devons introduire un second nombre sans dimension, le nombre de Nusselt, nommé en hommage aux travaux de Wilhelm Nusselt sur les échanges de chaleur. Ce nombre sans dimension est la rapport entre l'énergie transportée par convection, sur l'énergie qui aurait été



FIGURE 1.19 – Le nombre de Nusselt en fonction du nombre de Rayleigh dans une échelle logarithmique. La courbe rouge correspond à un ajustement avec une pente fixée à 0.25. Les données sont issues des expériences de laboratoire de Silveston (1958).

transportée par conduction en l'absence de convection. Il mesure donc l'efficacité de la convection thermique dans le système. <u>Malkus (1954)</u> a établi expérimentalement une relation liant le nombre de Rayleigh au nombre de Nusselt, qui peut être simplement écrite par

$$Ra \propto N u^{\beta},$$
 (1.3)

où β est une constante à déterminer. Il est le premier à observer un changement de β en fonction de *Ra*. En particulier, il propose que $\beta \sim 0.25$ lorsque la convection est laminaire, tandis que $\beta \sim 0.33$ lorsque la convection est turbulente, ce résultat est confirmé par une seconde étude expérimentale (figure 1.19). L'exposant pour la convection turbulente a par la suite été démontré analytiquement par Townsend (1964), son travail est fondamental car il est la base de toutes les lois d'échelle qui, par exemple, lient le saut de température ou le nombre de Nusselt au nombre de Rayleigh. Parallèlement, Howard (1966) étudie la convection dans son état turbulent en proposant un modèle qualitatif pour la décrire. Il suggère que la dynamique du système convectif est contrôlée par les couches limites thermiques (CLT). Il y a deux CLT dans la convection Rayleigh-Bénard, une en bas et une en haut du système. En résumé, une couche limite thermique est une zone située proche d'une paroi horizontale, dans laquelle la conduction domine, et où l'énergie est transférée de ou vers l'extérieur à l'aide d'un fort gradient thermique. Howard (1966) indique que la couche limite thermique croît par conduction jusqu'à atteindre un seuil critique, probablement déterminé par le Ra_c du système, après cela cette couche se déstabilise créant une instabilité. Cette instabilité, l'analogue d'un panache ou de la subduction dans le cas de la Terre, entraîne avec elle de la matière issue de la couche limite thermique, laissant derrière elle une couche plus fine. Et la CLT peut enclencher un nouveau cycle de croissance. En suivant ce formalisme, Howard (1966) calcule le temps nécessaire pour créer une instabilité



FIGURE 1.20 – Motifs de convection stables en fonction du nombre de Rayleigh et du nombre d'onde. Le symbole 1 correspond à des rouleaux, le symbole 2 à une convection bimodale (visible sur la photographie en bas à droite), le symbole 3 à une instabilité en zigzag (visible sur la photographie en haut à droite), le symbole 4 à une instabilité menant à des rouleaux et le symbole 5 à une instabilité qui forme de manière intermittente des rouleaux. D'après Busse et Whitehead (1971).

par conduction, qu'il compare avec succès aux expériences de laboratoire menées par Townsend (1959).

Le second axe est l'étude des motifs de convection, et donc comment les courants convectifs s'organisent à l'intérieur du système. Friedrich Busse et John Whitehead ont fortement contribué au développement de ce domaine de recherche, le premier par le biais d'études théoriques et le second par des études expérimentales. Busse (1967) a calculé quel motif de convection va être stable, selon le nombre de Rayleigh et le nombre d'onde du motif. Effectivement à un nombre de Rayleigh donné, plusieurs types de cellules convectives sont stables, du moins pour une convection non turbulente, ce qui induit une dépendance de la condition initiale sur le résultat final. Il en résulte le "Ballon de Busse" (figure 1.20) qui a ensuite été démontré expérimentalement (Busse et Whitehead, 1971), en utilisant le dispositif expérimental développé par Chen et Whitehead (1968). Ce dispositif est assez simple, il consiste à produire du chauffage hétérogène à la base de la cuve. En effet il suffit d'insérer par dessus la plaque chauffante, une seconde plaque possédant des espaces laissant passer la chaleur, et d'autres l'arrêtant. De cette manière, le motif de la convection est forcé par la structure de chauffage hétérogène appli-



FIGURE 1.21 – Convection thermique provenant du premier modèle numérique (McKenzie *et al.*, 1973). Les lignes représentent des isotempératures.

quée, ce qui permet d'observer la stabilité d'un certain motif.

Les études précédentes portent sur la convection Rayleigh-Bénard, donc uniquement avec du chauffage par le bas. Cependant Holmes (1929) avait indiqué l'importance du chauffage volumique produit par la désintégration des éléments radioactifs présents dans la Terre. Tritton et Zarraga (1967), avec des expériences de laboratoire, et Roberts (1967), de manière analytique, ont étudié le système convectif avec uniquement du chauffage volumique. Roberts (1967) a introduit le nombre sans dimension régissant ce système, le nombre de Rayleigh-Roberts,

$$Ra_H = \frac{\rho g \alpha H d^5}{k \kappa \eta} \tag{1.4}$$

où H est le taux de chauffage volumique et k la conductivité thermique. Il a également calculé le seuil de stabilité et les différents motifs de convection stables. L'accord avec l'étude expérimentale est partiel (Tritton et Zarraga, 1967), nous développerons ce point dans les prochains chapitres de notre exposé.

Nous finissons ce paragraphe par l'apparition des premières simulations numériques de la convection terrestre (figure 1.21). Cette avancée notable a été menée à Cambridge par McKenzie *et al.* (1973, 1974). Les premières études étaient très modestes et visaient uniquement à modéliser le manteau supérieur, ce qui justifie la valeur faible du nombre de Rayleigh (~ 10^5). La géométrie est 2D cartésienne avec une résolution de 48×48 éléments et le modèle considère l'approximation de Boussinesq avec toutes les propriétés du fluide constantes. McKenzie *et al.* (1973) étudient l'influence des différentes sources de chaleur, c.à.d. chauffage par le bas et chauffage volumique, et ils trouvent un bon accord général avec les observations d'anomalies de gravité et de vitesses des plaques.


FIGURE 1.22 – Illustration de la convection en "drap" obtenue dans le cas avec uniquement du chauffage volumique. Le rouge correspond à la matière chaude, tandis que le bleu correspond à la matière froide. On peut voir une surface d'isotempérature afin de mieux visualiser le drap reliant les deux instabilités. Les détails du modèle numérique seront explicités dans les chapitres suivants.

1.2.2 Apparition des premiers centres de calcul : 1975-1992

La plupart des études précédentes considèrent l'approximation de Boussinesq. La phase 1975-1992 correspond donc à l'amélioration des modèles numériques jusqu'à aller au delà de l'approximation de Boussinesq, et donc au delà de ce que peuvent proposer des expériences de laboratoire. Cette progression s'est réalisée en parallèle avec l'augmentation de la puissance de calcul disponible.

Les années 70 ont vu le développement de la convection paramétrée (Sharpe et Peltier, 1978; Christensen, 1985), une approche basée sur la relation *Ra-Nu* que nous avons exposé dans le paragraphe précédent ainsi qu'un bilan d'énergie. Elle permet d'estimer l'évolution thermique de la Terre en remontant dans le temps à partir de l'état actuel. Sharpe et Peltier (1978) ont montré que le flux d'énergie à la surface actuel pouvait être expliqué par la convection, et ceci même sans prendre en compte les éléments radioactifs. Le modèle est cependant peu réaliste, les éléments radioactifs sont uniquement dans la croûte terrestre de sorte que le manteau et le noyau ont une contribution mineure dans le bilan d'énergie. D'ailleurs la taille de la graine solide est presque constante durant toute l'histoire de la Terre. Christensen (1985) complexifie le modèle en considérant la variation de la viscosité et le chauffage interne. Il conclut que le nombre de Nusselt est presque constant avec l'évolution de la Terre, et que la température du manteau durant l'Archéen devrait être 200°C plus élevée par rapport à aujourd'hui.

La complexification des modèles numériques a commencé par se faire via la géométrie, d'abord en 3D sphérique Baumgardner (1985), puis en 3D Cartésien (Houseman, 1988; Travis *et al.*, 1990). Ces études se sont focalisées sur les motifs de convection, ils ont observé une structure en "drap". Cette structure consiste en des instabilités, chaudes et froides, liées entre elles par des "draps" (figure 1.22). Les "draps" ont été assimilés aux zones de subduction observées à la surface, tandis

que les instabilités chaudes ont été assimilées aux traces de points chauds. Les simulations numériques ont également exploré les implications de variations des propriétés du fluide sur la convection.

- En commençant par les effets de la transition de phase à 660 km de profondeur. La grande question sous-jacente est : est-ce que la convection terrestre est double couche où mono couche ? Richter et McKenzie (1981) effectuent une étude combinée d'expériences de laboratoire et de simulations numériques en modélisant la transition de phase comme uniquement un saut de densité. Leurs résultats sont en faveur d'une convection double couche. En revanche Christensen et Yuen (1984), en se focalisant uniquement sur l'interaction entre un slab et la transition de phase, arrivent à une conclusion légèrement différente et montrent que les connaissances disponibles ne permettent pas de trancher ce débat. Liu *et al.* (1991) incluent la transition de phase dans un modèle de convection globale et ils observent une intermittence dans les instabilités chaudes. Les panaches sont influencés par la transition de phase ce qui induit un détachement de la tête du panache. Ce résultat a été rapproché à l'observation de l'intermittence du volcanisme de surface.
- La prise en compte de la compressibilité a été une étape importante, rendue possible par le modèle anélastique de Jarvis et McKenzie (1980), et suivie par de nombreuses autres études reprenant la même formulation de la compressibilité (Machetel et Yuen, 1989; Solheim et Peltier, 1990; Balachandar et al., 1992). Une conséquence importante de la compressibilité est de rendre la convection moins vigoureuse, la flottabilité des instabilités chaudes et froides est réduite. Cette baisse de la vigueur de la convection est accompagnée par une brisure de la symétrie de l'écoulement. La remontée de matière se fait par de larges instabilités, tandis que la descente de matériel froid se fait par des instabilités étroites.
- Les variations des propriétés du fluide avec la profondeur a également été étudiées. Par exemple, Hansen *et al.* (1991) ont pris en compte le changement du coefficient de dilatation thermique avec la profondeur prédit par Chopelas et Boehler (1989). Ils montrent l'existence d'une convection asymétrique avec des mouvements descendants plus forts que les mouvements ascendants, ce qui s'oppose à l'effet de la compressibilité. Ogawa *et al.* (1991) ajoutent une viscosité qui dépend fortement de la température résultant en une convection avec un couvercle stagnant.

1.2.3 De nos jours : 1993-2015

Jusqu'à ce point les complexités étaient principalement étudiées séparément. C'est Paul Tackley qui a progressivement inclus tous ces ingrédients dans un unique code, Stag3D. Tackley *et al.* (1993) ont commencé par considérer un code avec une géométrie 3D sphérique et la transition de phase à 660 km. Le manteau est considéré comme compressible, avec la dilatation thermique, la conductivité



FIGURE 1.23 – Simulation numérique de la convection thermochimique après l'équivalent de ~2 Ga. La figure du haut représente le champ de température, rouge est chaud et bleu est froid, superposé avec le champ de vitesse. La figure du bas montre les structures compositionnelles, la partie blanche correspond à la croûte. D'après Christensen et Hofmann (1994).

thermique et la viscosité qui dépendent de la profondeur. Ils trouvent que les panneaux plongeants sont stoppés à la transition de phase, et s'étalent avant de pénétrer dans le manteau inférieur en forme d'avalanche. Ce résultat apporte une preuve importante que la convection terrestre est mono couche. Par la suite Tackley et al. (1994) ajoutent la transition de phase à 410 km de profondeur, qui a uniquement l'effet de rendre les avalanches plus petites et plus nombreuses. Puis Paul Tackley s'est attaché à améliorer la rhéologie, d'abord en introduisant la dépendance de la viscosité à la température (Tackley, 1996), puis à la vitesse de déformation (Tackley, 1998a, 2000a,b). Le dernier ajout permet de simuler la présence de plaques tectoniques à la surface de la Terre (Trompert et Hansen, 1998). En effet une rhéologie purement visqueuse ne peut pas engendrer de processus d'auto-génération de plaques tectoniques. La solution est d'introduire un mécanisme permettant de produire un endommagement de la surface, celui ci a fortement été développé par Bercovici (1993, 1998). L'idée est que la contrainte augmente linéairement avec la déformation, jusqu'à un seuil critique à partir duquel la contrainte décroît lorsque la déformation augmente. Et donc les zones de fortes déformations sont associées à un affaiblissement de la contrainte engendrant une zone de subduction. Il résulte de ces améliorations successives un code de convection thermique incluant les principaux mécanismes influençant la dynamique du manteau terrestre.

La prochaine étape consiste à simuler la convection thermo-chimique. Christensen et Yuen (1984) et Christensen et Hofmann (1994) ont introduit dans un code numérique la notion de traceurs chimiques. Ces traceurs peuvent être passifs, c.à.d. qu'ils n'influencent pas le fluide, ou actifs avec par exemple une flottabilité différente du reste du fluide. Le dernier cas permet de modéliser la dynamique d'un système avec plusieurs compositions chimiques différentes. Cet outil est ex-



FIGURE 1.24 – Convection thermochimique après l'équivalent de 4.5 Ga. La différence de densité entre MORB et harzburgite est considérée à 1.35% au niveau de la CMB tandis que la différence entre MORB et matériel primitif est fixée à 165 kg/m³. D'après Nakagawa et Tackley (2014).

trêmement utile dans le cas de la Terre, vu qu'il permet, par exemple, de modéliser la subduction de la croûte océanique (figure 1.23), ou bien la présence de LLSVP (Tackley, 1998b). Samuel et Farnetani (2003) ont associé à chaque famille de traceurs une composition en éléments radioactifs différente, induisant un chauffage hétérogène. La modélisation des réservoirs chimiquement différents permet une validation des résultats numériques avec les observations géochimiques de surface. Xie et Tackley (2004) ont ajouté la génération de magmatisme à la surface, ce qui implique la différentiation du manteau en MORB, formant la croûte , et en harzburgite, et couplent le manteau avec un modèle paramétré de refroidissement du noyau.

L'augmentation de la complexité des modèles numériques se poursuit avec l'étude de la post-perovskite (Nakagawa et Tackley, 2004), de la transition de l'état de spin (Bower et al., 2009), et la prise en compte d'une minéralogie complète (Nakagawa et al., 2009). Clairement le nombre de phénomènes étudiés numériquement augmente exponentiellement, il est donc difficile d'en faire une liste exhaustive. Une attention particulière a été portée à améliorer la modélisation des continents, qui est certainement le manque le plus criant des modèles numériques actuels. Rolf et Tackley (2011) ont considéré les continents comme un réservoir chimique différent avec une flottabilité et une viscosité importante. Ce modèle permet d'obtenir des distributions d'âges de la lithosphère océanique en accord avec la Terre (Coltice et al., 2012). Cependant il existe au moins deux limitations, la première est que les continents sont imposés et non auto-générés, la seconde est la verticalité de la subduction, alors que dans la Terre les panneaux plongent obliquement. Rozel et al. (2011) et Foley et al. (2014) ont proposé de prendre en compte l'évolution de la taille de grains, afin de générer des plaques. Ces études, pour le moment préliminaires, pourraient dans le futur fournir une méthode robuste de génération de plaques tectoniques.

Pour résumer tous les "ingrédients" pris en compte dans les simulations numériques contemporaines, nous allons décrire un exemple d'étude récente, le travail de Nakagawa et Tackley (2014). Cette étude réalisée en géométrie 2D sphérique couple l'évolution du noyau et du manteau (figure 1.24). Le refroidissement du noyau est obtenu avec un modèle paramétré. Le manteau terrestre est considéré comme compressible et composé d'un ensemble de 80% d'harzburgite et de 20% de MORB, qui peut se différencier à la surface via le volcanisme. Ces deux compositions sont considérées comme un mélange de deux sous-systèmes : olivine et pyroxène-grenat. Chaque sous-système possède ses propres transitions de phases et propriétés physiques. Les propriétés physiques qui dépendent de la profondeur sont : densité, coefficient de dilatation thermique, paramètre de Grüneisen, diffusivité thermique et conductivité thermique, tandis que la viscosité dépend de la profondeur, de la température et de la déformation. Le taux de chauffage interne change avec le temps suivant la désintégration des éléments radioactifs. Ce modèle impose un réservoir plus dense, dit primordial, à la base du manteau.

1.3 Conclusion

Nous avons vu dans la section 1.1 que la Terre pouvait être décomposée en plusieurs sous-systèmes dynamiques, chacun possédant une dynamique complexe. Lorsque l'on additionne cela aux couplages entre systèmes, il semble presque impossible de simuler leur évolution temporelle correctement. Dans la section 1.2 nous avons détaillé comment s'est articulée l'étude du manteau terrestre, qui est le sous-système avec le plus d'influence sur l'évolution de la Terre. Les premières études se basaient sur un modèle très simplifié du manteau terrestre, et avec le temps les études ont intégré de plus en plus "d'ingrédients" supplémentaires. Le choix scientifique qui a été fait est de modéliser un système très complexe par un autre système très complexe. Ce choix est cependant discutable vu notre connaissance actuelle de la physique de la convection. Par exemple, à notre connaissance, nous ne sommes pas capable de prédire théoriquement les conditions pour lesquelles la convection devient turbulente, et ceci est même valable pour un cas très simple telle qu'une couche horizontale de fluide avec uniquement du chauffage interne et avec toutes les propriétés constantes. Il y a un manque de compréhension sur les processus physiques fondamentaux régissant la convection thermique. Il est donc légitime de se questionner sur le degrés de confiance à accorder aux résultats issus de modèles très complexes, sachant qu'il est difficile de savoir à quel point ces résultats sont robustes aux changements de paramètres.

Dans cette thèse nous avons donc choisi d'étudier la convection thermique avec deux niveaux différents, d'abord en étudiant un modèle simple, puis un modèle complexe en utilisant les outils développés dans l'étude du modèle simple. Nous allons donc débuter en étudiant une couche horizontale de fluide, chauffée intérieurement et refroidie par le haut, sous l'approximation de Boussinesq. Le chapitre 2 est dédié à la présentation de ce système dynamique, et de la convection thermique de manière générale, en nous appuyant sur des expériences de laboratoire et des simulations numériques. Dans le chapitre 3 nous allons établir des lois d'échelle reliant l'épaisseur et le saut de température de la CLT au nombre de Rayleigh. Dans un premier temps ces lois d'échelle vont être semi-empiriques, tout comme les études précédentes sur le sujet. Mais ensuite nous allons proposer des lois d'échelle purement théoriques, ce qui implique une connaissance plus précise de la convection thermique, et de la CLT en particulier. Le chapitre 4 est consacré à la structure horizontale de l'écoulement. Après avoir détaillé les différents motifs de convection stables, nous allons établir des lois d'échelle reliant le nombre d'instabilités ainsi que la distance moyenne entre plus proches instabilités au nombre de Rayleigh, pour ce faire les lois d'échelle développées dans le chapitre 3 sont utilisées. Le dernier chapitre consiste en l'étude des implications dynamiques de la transition de l'état de spin dans le ferropériclase. Nous débutons par effectuer un modèle thermodynamique de la transition de l'état de spin, cela nous fournit la densité en fonction de la température et de la pression, et nous introduisons ce modèle de densité dans le code numérique Stag3D.

Chapitre 2 Convection thermique

Sommaire

2.1	Présentation générale du système étudié	33
2.2	Mise en équation du système	34
2.3	Modèle numérique et expérimental	37
2.4	Les lois d'échelle régissant le système	40
2.5	Résultats expérimentaux et numériques	42
2.6	Conclusion	44

2.1 Présentation générale du système étudié

Dans ce chapitre, ainsi que dans les deux suivants, nous nous intéressons à un système convectif possédant uniquement du chauffage volumique. Ce système consiste en une couche horizontale de fluide infinie avec une température fixée en haut, tandis qu'une condition adiabatique, c.à.d. sans échange d'énergie, est appliquée en bas. Le fluide est chauffé intérieurement avec un taux de chauffage volumique *H* et la chaleur s'échappe par le haut, qui est la seule paroi non adiabatique. Le fluide est donc chauffé homogènement et refroidi par le haut.

Les paramètres importants du système sont regroupés dans la table 2.1. À partir de ces paramètres nous pouvons construire les nombres sans dimension qui régissent le système. Nous supposons que les propriétés du fluide sont constantes, ce qui entraîne l'absence de nombres sans dimension relatifs à la variation de ces propriétés. Le premier est le nombre de Prandtl,

$$Pr = \frac{\eta}{\rho\kappa},\tag{2.1}$$

qui représente le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement et la diffusivité thermique. Nous considérons par la suite le nombre de Prandtl comme infini, ce qui est une bonne approximation pour la convection à l'intérieur du manteau des planètes telluriques (Kraichnan, 1962). Ceci implique que le fluide ne possède pas d'inertie, et donc son mouvement s'arrête dès que les forces motrices s'arrêtent. Le second est le nombre de Rayleigh-Roberts (Roberts, 1967),

$$Ra_H = \frac{\rho g \alpha H d^5}{k \kappa \eta},\tag{2.2}$$

Nom	Symbole	Unité
Densité du fluide	ρ	kg m ⁻³
Accélération de la pesanteur à la surface de la Terre	g	$m s^{-2}$
Coefficient de dilatation thermique du fluide	α	K^{-1}
Taux de chauffage interne par unité de volume	Н	$W m^{-3}$
Hauteur du système	d	m
Conductivité thermique du fluide	k	$\mathrm{W}~\mathrm{m}^{-1}~\mathrm{K}^{-1}$
Diffusivité thermique du fluide	κ	$\mathrm{m}^2~\mathrm{s}^{-1}$
Viscosité du fluide	η	Pa s

 TABLE 2.1 – Propriétés contrôlant le système étudié.

qui représente le rapport entre la poussée d'Archimède, motrice pour la convection, et la dissipation visqueuse ainsi que la diffusivité thermique, qui s'opposent aux mouvements. Ce nombre sans dimension reflète donc l'importance de la convection par rapport à la conduction. Pour des faibles Ra_H , le transport de chaleur se fait uniquement par conduction. Lorsque Ra_H atteint un seuil de stabilité, appelé nombre de Rayleigh critique ($Ra_{H,cr}$), la convection démarre. La limite de stabilité peut être calculée analytiquement, en suivant les méthodes développées par Chandrasekhar (1961) et Roberts (1967). Pour des conditions limites de surfaces rigides, on a $Ra_{H,cr} = 2772$, et $Ra_{H,cr} = 868$ pour des conditions limites de vitesses libres. Le nombre de Rayleigh-Roberts est l'unique nombre sans dimension du système, il contrôle donc sa dynamique.

2.2 Mise en équation du système

Suivant les hypothèses faites dans la section précédente, nous considérons que les propriétés du fluide sont constantes, à l'exception du terme de la poussée d'Archimède pour lequel la dépendance de la densité à la température est prise en compte. Pour commencer, intéressons nous à la conservation de la matière. Soit dV un volume infinitésimal, situé à la position (x, y, z) et qui a pour longueur (dx, dy, dz). De manière évidente, la variation de la masse à l'intérieur de dV est égale à la matière rentrante moins la matière sortante. Soit *m* la masse de dV, on a donc

$$\mathrm{d}m = \frac{\partial m}{\partial t} \mathrm{d}t = \frac{\partial \rho}{\partial t} \mathrm{d}V \mathrm{d}t, \qquad (2.3)$$

la variation de masse pendant un temps d*t*. Considérons par exemple la surface qui a pour vecteur normal l'axe **x**. La masse qui rentre dans le volume d*V* pendant un temps d*t* est la masse située dans le volume $v_x(x)dtdydz$, où v_x est la composante selon l'axe **x** du vecteur vitesse (**v**) du volume infinitésimal. Et donc la masse entrante est $\rho(x)v_x(x)dtdydz$, et de manière similaire la masse sortante est $\rho(x+dx)v_x(x+dx)dtdydz$. Donc la variation de masse causée par le transport de matière via cette surface est,

$$\rho(x)v_{x}(x)dtdydz - \rho(x+dx)v_{x}(x+dx)dtdydz = -\frac{\partial\rho v_{x}}{\partial x}dtdV.$$
 (2.4)

En répétant ce raisonnement pour les trois axes, et en égalant cette expression avec la variation temporelle de masse nous obtenons que,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \tag{2.5}$$

Or nous supposons la densité comme constante, temporellement et spatialement, d'où la conservation de matière se résume à,

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0. \tag{2.6}$$

Cette équation est couramment appelée équation de continuité.

Le système vérifie également la conservation de la quantité de mouvement, $m\mathbf{v}$. D'après la relation fondamentale de la dynamique, la variation de la quantité de mouvement est égale à la somme des forces extérieures s'appliquant au système. Les forces agissantes sur dV sont : la force de pression, les contraintes et la poussée d'Archimède. La force de pression agit sur chacune des faces du volume infinitésimal, en effectuant le même raisonnement que pour l'équation de continuité, nous trouvons que la force résultante est $-\nabla p dV$, où p est la pression. Les contraintes imposées par le milieu extérieur sur le volume infinitésimal possèdent une résultante non nulle. Soit τ le tenseur des contraintes, τ_{ij} représente la composante selon l'axe i de la contrainte agissante sur la face ayant pour normal l'axe j. Il est à noter que le tenseur des contraintes est symétrique, c.à.d. $\tau_{ij} = \tau_{ji}$. Considérons la contrainte résultante selon l'axe **x**. D'abord pour la surface ayant pour normal l'axe **x**, la force résultante est,

$$\tau_{xx}(x+\mathrm{d}x)\mathrm{d}y\mathrm{d}z - \tau_{xx}(x)\mathrm{d}y\mathrm{d}z = \frac{\partial\tau_{xx}}{\partial x}\mathrm{d}V. \tag{2.7}$$

Avec le même raisonnement on peut en déduire que la résultante pour la surface ayant pour normal l'axe **y** et **z** est,

$$\tau_{xy}(y+\mathrm{d}y)\mathrm{d}x\mathrm{d}z - \tau_{xy}(y)\mathrm{d}x\mathrm{d}z = \frac{\partial\tau_{xy}}{\partial y}\mathrm{d}V, \qquad (2.8)$$

$$\tau_{xz}(z+\mathrm{d}z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y - \tau_{xz}(z)\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{\partial\tau_{xz}}{\partial z}\mathrm{d}V, \qquad (2.9)$$

respectivement. En combinant les équations 2.7, 2.8 et 2.9 on obtient que la résultante selon l'axe **x** est

$$\frac{\partial \tau_{xj}}{\partial j} \mathrm{d}V. \tag{2.10}$$

On répète le calcul pour les trois axes et on obtient finalement que les forces de contraintes sont $\nabla \cdot \tau$. La poussée d'Archimède est proportionnelle à la variation

Туре	Adimensionnement	Description
Distance	d	Hauteur de la cuve
Température	$\Delta T_H = H d^2/k$	Échelle reliée à la chaleur interne
Vitesse	$U = (\rho \alpha g \Delta T_H d^2) / \eta$	Vitesse de Stokes (visqueuse)
Pression	$(\eta U)/d$	Pression visqueuse
Temps	d/U	Échelle reliée à la vitesse visqueuse

 TABLE 2.2 – Résumé et description de l'adimensionnement choisi.

de masse induite par la température, cette dernière est $\rho \alpha \Delta T dV$, donc la poussée d'Archimède résultante est $\rho g \alpha \Delta T dV z$, où z est un vecteur unitaire vertical pointant vers le haut. Or la variation de la quantité de mouvement pendant un temps d*t* est la variation temporelle de celle-ci, à laquelle on ajoute la quantité de mouvement rentrante dans le volume, et on retranche celle qui sort. Par un raisonnement proche de celui effectué pour l'équation de continuité nous obtenons l'expression suivante,

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho g \alpha \Delta T \mathbf{z}.$$
(2.11)

Le tenseur des contraintes s'écrit de manière classique,

$$\tau_{ij} = 2\eta \varepsilon_{ij} + \lambda \varepsilon_{kk} \delta_{ij}, \qquad (2.12)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker, λ la seconde viscosité et

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial j} + \frac{\partial v_j}{\partial i} \right)$$
(2.13)

le tenseur des déformations. L'expression précédente induit en particulier que $\varepsilon_{kk} = \nabla \cdot \mathbf{v} = 0$, vu que l'on considère un fluide incompressible. Et donc le tenseur des contraintes s'exprime simplement par $\tau = 2\eta\varepsilon$, ce qui donne en intégrant cette expression dans l'équation 2.11,

$$\frac{\partial \rho \mathbf{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \otimes \mathbf{v}) = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \rho g \alpha \Delta T \mathbf{z}.$$
(2.14)

La dernière étape est d'adimensionner cette équation, pour ce faire nous utilisons les échelles typiques regroupées dans la table 2.2. Les variables sans dimension sont indiquées par une étoile, de ce processus résulte l'équation,

$$Ra_{H}Pr^{-1}\left(\frac{\partial \mathbf{v}^{*}}{\partial t^{*}} + \nabla^{*} \cdot (\mathbf{v}^{*} \otimes \mathbf{v}^{*})\right) = -\nabla^{*}p^{*} + \nabla^{*2}\mathbf{v}^{*} + \Delta T^{*}\mathbf{z}.$$
(2.15)

Pour un nombre de Prandtl supposé infini on obtient

$$0 = -\nabla^* p^* + \nabla^{*2} \mathbf{v}^* + \Delta T^* \mathbf{z}, \qquad (2.16)$$

l'équation de conservation de la quantité de mouvement pour un fluide avec un nombre de Prandtl infini sous l'approximation de Boussinesq.

Les processus dissipatifs sont négligés dans cette étude, il résulte donc que les variations temporelles de chaleur sont causées par l'advection, la conduction et le chauffage interne. D'après la loi de Fourier, l'échange de chaleur par conduction est $\nabla \cdot (k \nabla T)$. On peut donc écrire l'équation de la chaleur suivante

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T + H - \rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T, \qquad (2.17)$$

et ensuite l'adimensionner,

$$Ra_H \frac{\partial T^*}{\partial t^*} = \nabla^{*2} T^* + 1 - Ra_H \mathbf{v}^* \cdot \nabla^* T^*.$$
(2.18)

Les équations 2.6, 2.16 et 2.18 forment un système qui gouverne la dynamique du système convectif étudié.

2.3 Modèle numérique et expérimental

Nous étudions le système convectif à l'aide d'expériences de laboratoire ainsi que de simulations numériques. Les expériences de laboratoire, dont un schéma du dispositif est montré en figure 2.1, ont été réalisées au sein de l'IPGP par une équipe menée par Angela Limare. La particularité de nos expériences est d'utiliser un générateur à micro-ondes pour produire le chauffage volumique, un dispositif novateur décrit par Surducan *et al.* (2013) et Surducan *et al.* (2014). La complexité de cet outil réside dans la stabilité temporelle et l'homogénéité spatiale du chauffage. Un élément fondamental est la pièce permettant d'homogénéiser les microondes, dans un four à micro-ondes classique le chauffage est très hétérogène, c'est la raison pour laquelle une plaque tournante est disposée à l'intérieur du four, afin d'égaliser la chaleur reçue par les aliments. Dans le four expérimental, c'est une pièce possédant une géométrie très spécifique située en dessous de la cuve, qui tourne et homogénéise le champ de micro-ondes. Les côtés et le fond de la



FIGURE 2.1 – Schéma représentant le dispositif utilisé pour réaliser les expériences de laboratoire présentées dans ce chapitre. D'après Limare *et al.* (2015).



FIGURE 2.2 – Schéma très simplifié du modèle numérique utilisé. On peut voir une section verticale obtenue dans une de nos simulations numériques. Le rouge correspond à des températures chaudes et le bleu à des températures froides.

cuve expérimentale $(30 \times 30 \times 5 \text{ cm}^3)$ sont réalisés en poly(methyl methacrylate), ils sont donc aussi proches que possible d'une condition adiabatique. Le haut de la cuve est constitué d'un échangeur thermique en aluminium couplé à un bain thermostatique, induisant une température constante. Le fluide utilisé est un mélange d'eau et d'hydroxyethylcellulose, son nombre de Prandtl est supérieur à 300 ce qui est suffisant pour considérer l'approximation de *Pr* infini comme valide (Grossmann et Lohse, 2000, 2001; Davaille et Limare, 2007). Lors des expériences réalisées, la réduction maximale de viscosité due à la température est de 6.6, tandis que l'augmentation de l'expansivité thermique est de 5.2, suffisamment faible pour considérer l'approximation de Boussinesq valide au premier ordre.

Les simulations numériques sont réalisées avec le code Stag3D développé par Paul Tackley (Tackley et al., 1993; Tackley, 1996). Les schémas numériques utilisés par Stag3D ont été complétement décrits par Tackley (1994), par conséquent nous nous contentons de décrire le modèle utilisé. Le code résout les équations présentées dans la section précédente, le fluide possède donc un nombre de Prandtl infini et toutes ces propriétés sont constantes, à l'exception de l'effet de la température sur la densité pour la poussée d'Archimède. Nous reproduisons les conditions expérimentales en considérant des parois verticales imperméables, rigides et adiabatiques, ainsi que le même rapport d'aspect (figure 2.2). Les parois horizontales sont également imperméables et rigides, en revanche seulement le bas est adiabatique vu que l'on fixe la température du haut. La cuve expérimentale est modélisée par une boîte 3D Cartésienne divisée en 512 × 512 × 64 éléments, ce découpage permet d'obtenir des résultats qui sont indépendants de la résolution et du rapport d'aspect. La condition initiale de température est pour certain cas une température constante avec des perturbations aléatoires, mais dans la plupart des cas nous choisissons un champ de température obtenu pour une autre simulation numérique¹. La convection est déjà enclenchée ce qui réduit le temps de

^{1.} Nous avons vérifié que le résultat final ne dépend pas de la condition initiale de température.



FIGURE 2.3 – À gauche, profils de température obtenus dans une expérience de laboratoire (rouge) et dans une simulation numérique (bleu) pour $Ra_H = 10^{5.34}$. On représente le profil moyenné horizontalement (lignes continues) ainsi que les profils minimum et maximum (lignes tiretées) afin de montrer la dispersion de la température. D'après Limare *et al.* (2013). À droite, une illustration des données obtenues à l'aide d'une simulation numérique ($Ra_H = 10^{4.7}$). La figure porte seulement sur une portion du domaine, où l'on représente des sections verticales, et une surface d'isotempérature afin de bien visualiser l'instabilité froide issue de la couche limite thermique.

calcul nécessaire pour obtenir un état d'équilibre. Cet état d'équilibre se résume par un profil de température, ainsi qu'un flux de chaleur à la surface, qui fluctuent légèrement autour d'une valeur d'équilibre. Une fois l'état d'équilibre atteint, il est nécessaire de continuer à modéliser l'évolution du système pour obtenir une moyenne robuste des fluctuations.

Le couplage entre expériences de laboratoire et simulations numériques fournit un moyen de comparer, puis de valider, les résultats obtenus par ces deux méthodes. Limare et al. (2013) ont effectué cette validation croisée pour un Ra_H fixé, et ils ont trouvé une convection similaire (figure 2.3). En premier lieu la dynamique de la convection est identique, le système convectif se sépare en deux parties. La première partie est une Couche Limite Thermique (CLT) qui se forme à proximité de la paroi haute, cette couche possède un fort gradient thermique qui permet l'évacuation de la chaleur par conduction vers l'extérieur. Howard (1966) a proposé un modèle phénoménologique pour la dynamique de cette couche, celuici s'applique très bien à nos résultats. La CLT croît par conduction jusqu'à atteindre une épaisseur critique, symbolisée par un nombre de Rayleigh critique (Ra_{TBL}) , la couche devient alors instable et forme une instabilité froide qui plonge à l'intérieur de la cuve, entraînant une partie du matériel présent dans la CLT (figure 2.3). Ensuite la CLT croît de nouveau par conduction, enclenchant un nouveau cycle. La seconde partie du système dynamique est donc l'intérieur convectif, qui possède des instabilités froides qui focalisent le mouvement descendant. Par conservation de masse il y a également des mouvements montants, mais ceuxci sont plus diffus et surtout ils sont passifs. Ce sont les instabilités froides qui gouvernent la dynamique du système, et donc la CLT. Si on néglige les transferts de chaleur dans l'intérieur convectif, donc une condition adiabatique, il devrait avoir une température constante induit par le chauffage constant. Cependant les instabilités issues de la CLT refroidissent l'intérieur, le profil de température décroît donc légèrement avec la profondeur, il est dit sous-adiabatique. En second lieu le profil de température moyenné horizontalement est similaire avec les deux méthodes, Il y a uniquement une légère différence proche du bas. Ceci n'est pas surprenant vu que le champ de température expérimental est déterminé à l'aide de la technique dite "des isothermes", donc par l'interprétation des valeurs discrètes de température. Cette technique permet de résoudre correctement la CLT mais est moins précise en bas de la boîte, où la température varie peu. Par conséquent, pour l'étude de la dynamique de la CLT les expériences de laboratoire et numériques sont en total accord.

2.4 Les lois d'échelle régissant le système

Nous venons de voir que la CLT contrôle la dynamique du système convectif, il est donc utile de pouvoir déterminer sa structure thermique. Les expériences de laboratoire et les simulations numériques permettent de caractériser la CLT correspondant à un Ra_H fixé. Mais ce processus est long, à titre d'exemple une simulation numérique nécessite entre 10 000 heures de calcul à plus de 200 000 heures pour certaines simulations présentées dans cette thèse. Vu le temps nécessaire pour obtenir la structure thermique de la CLT pour un seul Ra_H , il est clair que l'on peut uniquement envisager d'avoir des données lacunaires. L'objectif est donc de pouvoir extrapoler les résultats obtenus à partir d'une base discrète de Ra_H , à tout Ra_H . L'avantage de cette méthode est de pouvoir également prédire la structure thermique de la CLT pour lequel il est difficile d'obtenir cette information par un autre moyen, que ça soit avec des expériences de laboratoire ou des simulations numériques. L'outil permettant d'extrapoler ces résultats est une loi d'échelle.

Ici nous intéressons plus particulièrement à l'épaisseur (δ_{TBL}) et au saut de température (ΔT_{TBL}) de la CLT. Vu que Ra_H est l'unique paramètre de contrôle de ce système convectif, ces deux caractéristiques de la CLT dépendent nécessairement de ce paramètre on peut donc écrire que

$$\frac{\Delta T_{TBL}}{\Delta T_H} = f_{\Delta T}(Ra_H), \qquad (2.19)$$

$$\frac{\delta_{TBL}}{d} = f_{\delta}(Ra_H), \qquad (2.20)$$

où $f_{\Delta T}$ et f_{δ} sont deux fonctions pour le moment indéterminées. Le but de ce paragraphe est de préciser les fonctions $f_{\Delta T}$ et f_{δ} . D'abord nous remarquons que le flux de chaleur (ϕ) s'échappant vers l'extérieur doit dépendre de ces deux propriétés et donc que

$$\phi \sim k \frac{\Delta T_{TBL}}{\delta_{TBL}}.$$
(2.21)

Or à l'état d'équilibre le flux de chaleur sortant par le haut représente l'énergie générée dans le volume d'où

$$\phi = Hd. \tag{2.22}$$

En combinant les deux dernières équations on obtient finalement

$$\frac{\Delta T_{TBL}}{\Delta T_H} \sim \frac{\delta_{TBL}}{d},\tag{2.23}$$

ce qui signifie que $f_{\Delta T} \sim f_{\delta}$.

Pour déterminer plus précisément ces relations nous devons effectuer un raisonnement dimensionnel. De nombreuses études ont réalisé ce type de calcul, en particulier pour une convection Rayleigh-Bénard (Townsend, 1964; Sotin et Labrosse, 1999), mais également appliqué au système avec uniquement du chauffage volumique (Jaupart et Mareschal, 2011; Limare *et al.*, 2015). Nous proposons ici une version modifiée mais fortement inspirée de nos prédécesseurs. À l'état d'équilibre, les variations temporelles du profil moyen de température sont négligeables. Par conséquent lorsque l'on moyenne l'équation d'énergie (2.18) on obtient un terme représentant l'advection, un second la conduction et le dernier la production de chaleur. La conduction étant négligeable à l'extérieur de la CLT, la base de la CLT vérifie donc un équilibre entre l'advection et la production de chaleur,

$$H \sim \rho C_p \frac{wT}{d},\tag{2.24}$$

où w est l'échelle typique de vitesse advective. L'hypothèse de nombre de Prandtl infini induit que l'inertie est négligeable. Donc la base de la CLT, qui caractérise la limite de stabilité du fluide, est donnée par un équilibre entre la poussée d'Archimède et les forces visqueuses,

$$\eta \frac{w}{\delta_{TBL}^2} \sim \rho \alpha g \Delta T_{TBL}, \qquad (2.25)$$

pour rappel la poussée d'Archimède est motrice tandis que les forces visqueuses s'opposent aux mouvements. À l'aide de l'équation 2.25 on extrait l'expression de la vitesse w que l'on introduit dans l'équation 2.24. Ensuite on convertit δ_{TBL} en ΔT_{TBL} en suivant la relation 2.23, pour obtenir que,

$$\frac{\Delta T_{TBL}}{\Delta T_H} \sim R a_H^{-1/4}.$$
(2.26)

On utilise une seconde fois la relation 2.23 afin d'obtenir ces deux lois d'échelle,

$$\frac{\Delta T_{TBL}}{\Delta T_H} = C_T R a_H^{-1/4}, \qquad (2.27)$$



FIGURE 2.4 – Simulation numérique conduite pour $Ra_H = 10^6$ et des conditions limites de surfaces rigide. (a) Profil de température moyen redimensionné pour correspondre aux expériences de laboratoire. (b) Profil moyen du flux de chaleur transporté par conduction (bleu) et par convection (vert). La ligne rouge correspond à la chaleur interne produite. La base de la couche limite thermique est déterminée comme le point où le flux de chaleur advectif est maximum. D'après Limare *et al.* (2015).

$$\frac{\delta_{TBL}}{d} = C_{\delta} R a_H^{-1/4}, \qquad (2.28)$$

où C_T et C_δ sont des constantes indéterminées qu'il est nécessaire d'obtenir à l'aide de résultats expérimentaux et/ou numériques.

Les lois d'échelle permettent de décrire la structure thermique du système convectif de manière simple. Le raisonnement qui donne naissance à ces expressions possède des approximations explicites et implicites. Leur domaine de validité est donc incertain, et doit être établi à l'aide d'expériences de laboratoire ou de simulations numériques. Le modèle considéré ici est très simple comparé aux systèmes naturels, une question importante est donc de savoir si les lois d'échelle sont également valides pour des modèles plus complexes.

2.5 Résultats expérimentaux et numériques

Cette section est donc consacrée à établir les lois d'échelle obtenues précédemment, pour cela nous présentons une partie des résultats constituant l'étude de Limare *et al.* (2015). Pour vérifier ces lois d'échelle il faut postuler une définition de la CLT, dans cette étude la limite de la CLT est fixée au point où le flux de chaleur advectif vertical est maximum. La figure 2.4 illustre un profil de température, ainsi que la contribution respective de la convection et de la conduction dans le transport de chaleur. Nous observons que le maximum du flux de chaleur advectif est effectivement un bon marqueur pour délimiter la CLT. Nous appliquons donc cette définition à nos résultats numériques et expérimentaux et nous reportons les résultats dans la figure 2.5. Les résultats issus des simulations numériques sont



FIGURE 2.5 – (a) Saut de température adimensionné subit par la couche limite thermique en fonction du nombre de Rayleigh-Roberts en échelle logarithmique. Nous reportons des données expérimentales (cercle) et numériques (carrée plein), tandis que la ligne noire correspond à un ajustement des données expérimentales, $\Delta T_{TBL} = 3.56\Delta T_H R a_H^{-1/4}$. (b) Épaisseur adimensionnée de la couche limite thermique en fonction du nombre de Rayleigh-Roberts en échelle logarithmique. L'ajustement des résultats expérimentaux donne, $\delta_{TBL} = 7.36dR a_H^{-1/4}$. Les données sont issues de Limare *et al.* (2015).

bien ajustés par les lois d'échelle 2.27 et 2.28. Comme prévu ΔT_{TBL} et δ_{TBL} diminuent avec Ra_H en suivant une loi de puissance en -1/4 et l'ajustement indique que $C_T = 3.41$ et $C_{\delta} = 7.08$. Les résultats expérimentaux sont au premier ordre en accords avec les résultats numériques, cependant ils possèdent une dispersion plus importante. Pour le saut de température, globalement l'équation 2.27 ajuste bien les données expérimentales avec C_T = 3.56. La dispersion importante des données est imputable aux écarts du modèle à l'approximation de Boussinesq. En effet lors de la présentation du dispositif nous avons indiqué que la viscosité et le coefficient de dilatation thermique du fluide dépendent de la température, l'approximation de Boussinesq n'est donc pas rigoureusement respectée. Nous avons effectué des simulations numériques en intégrant la variation de propriétés du fluide avec la température (se référer à Limare et al. (2015) pour les résultats). Celles-ci montrent qu'une partie de la dispersion peut-être attribuée aux effets non-Boussinesq. Il est probable que les incertitudes expérimentales jouent également un rôle dans cette variabilité. Les variations causées par les changements de propriétés du fluide sont relativement modestes, ce qui renforce l'utilité des lois d'échelle. Pour l'épaisseur de la CLT, la dispersion est également présente et on note également une légère variabilité pour les résultats numériques. L'exposant -1/4 ne semble pas optimal, d'ailleurs un ajustement des données avec un exposant libre privilégie un exposant -0.17. L'épaisseur semble un paramètre plus sensible et avec une variabilité plus grande que le saut de température.

2.6 Conclusion

Ce chapitre pose les bases théoriques nécessaires pour la compréhension des deux chapitres suivants. Nous avons commencé par une description simplifiée du système convectif étudié ici, ceci nous as amené à établir que le seul paramètre contrôlant le système était le nombre de Rayleigh-Roberts. Nous supposons donc que le nombre de Prandtl est infini et que les propriétés du fluide sont constantes, à l'exception de la variation de la densité avec la température dans la poussée d'Archimède. Suivant ce modèle nous avons établi les équations régissant le système, qui sont la conservation de la matière, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Elles sont résolues à l'aide d'un code numérique que nous avons décrit. Les simulations numériques s'accompagnent d'expériences de laboratoire, qui sont également décrites. Un des objectif de notre étude est d'établir des lois d'échelle qui caractérisent ce système convectif. Nous proposons donc un raisonnement théorique qui permet d'obtenir des lois d'échelle décrivant la structure thermique de la CLT. Ces lois d'échelle sont ensuite vérifiées avec des résultats numériques et expérimentaux.

Les lois d'échelle présentées ici sont bien connues et d'ailleurs bien étudiées (Kulacki et Nagle, 1975; Parmentier et Sotin, 2000; Deschamps *et al.*, 2012). Cependant plusieurs remarques peuvent être faites. En premier lieu, nous avons noté que pour la loi d'échelle reliant δ_{TBL} à Ra_H l'exposant obtenu est en désaccord avec la théorie. Ensuite, ces lois d'échelle sont semi-empiriques indiquant qu'une partie de la dynamique du système n'est pas comprise. Le chapitre 3 a pour but de s'attaquer à ces deux problématiques, et donc d'améliorer notre compréhension de la structure thermique de la CLT. Dans le chapitre 4, nous nous focalisons sur les lois d'échelle reliant le nombre d'instabilités et la distance moyenne entre instabilités à Ra_H .

Chapitre 3

Lois d'échelle théorique gouvernant la convection thermique

Sommaire

3.1	Propos préliminaires						
3.2	Introduction						
3.3	Scaling laws for the boundary layer of an internally heated viscous						
	fluid at infinite Prandtl number 50						
	3.3.1 Dimensional analysis						
	3.3.2 Empirical scaling laws						
3.4	A numerical investigation of scaling laws						
	3.4.1 Numerical model						
	3.4.2 Comparison with PS2000 results						
	3.4.3 Determination of the TBL based on heat fluxes 57						
3.5	Critical thermal boundary layer theory 58						
	3.5.1 Fully theoretically determined scaling laws						
	3.5.2 Comparison with numerical simulations						
3.6	Discussion						
3.7	Conclusion						

3.1 Propos préliminaires

Dans ce chapitre nous proposons des lois d'échelle théoriques reliant le saut de température (ΔT_{TBL}) et l'épaisseur (δ_{TBL}) de la Couche Limite Thermique (CLT) au nombre de Rayleigh-Roberts (Ra_H). Le mode opératoire pour établir des lois d'échelle n'a pas changé depuis les premières études de convection (Malkus, 1954). D'abord il faut, à l'aide de raisonnements dimensionnels, postuler la forme que devrait prendre la loi d'échelle. Les données, de laboratoire ou numériques, sont ensuite ajustées afin de déterminer les paramètres libres de la loi d'échelle. Ici nous proposons une approche innovante qui s'affranchit de ces paramètres libres, et donc notre compréhension du système dynamique s'en trouve améliorée.

Cette partie introductive vise à replacer l'article théorique suivant dans un cadre géophysique. En particulier quelles sont les applications de ces lois d'échelle

ainsi que leurs avantages et faiblesses. Nous allons voir que cette étude n'est pas une fin en soi, elle nécessite des développements supplémentaires avant de pouvoir être appliquée à une large gamme de problèmes géophysiques.

Dans l'introduction générale, nous avons notifié que les premières études portant sur les lois d'échelle établissaient la relation entre nombre de Nusselt (Nu) et nombre de Rayleigh (Ra) pour la convection Rayleigh-Bénard. Lorsque l'on étudie un système de type Rayleigh-Bénard, souvent on étudie en réalité trois systèmes distincts. Le système de type Rayleigh-Bénard est au centre, il va puiser de l'énergie dans un système dynamique situé au dessous de lui, cette énergie va être transportée et s'échapper par le haut dans un troisième système dynamique. Une question cruciale est donc d'évaluer la quantité d'énergie qui est transportée à travers les trois systèmes dynamiques. La relation Nu-Ra est la clef. Le nombre de Nusselt reflète le flux d'énergie à la surface adimensionné, et donc pour un état d'équilibre, il représente la quantité d'énergie qui est transportée.

Ici, le système convectif étudié possède uniquement du chauffage volumique, les enjeux sont donc totalement différents. Le flux d'énergie à la surface est a priori connu, et il correspond simplement à la quantité d'énergie interne produite. Il est donc inutile de s'intéresser au flux d'énergie à la surface, d'après nous, la première chose à caractériser dans ce système dynamique est sa structure thermique. Or nous avons vu dans le chapitre précédent qu'il était suffisant d'établir la structure thermique de la CLT, via des lois d'échelle, pour avoir un premier aperçu de la structure thermique du système convectif. L'application principale est probablement en planétologie comparée. L'utilisation de télescope permet la détection de nombreuses planètes, dans la plupart des cas nous disposons de peu d'information. Pour la plupart des planètes et des exoplanètes, on peut connaître leur rayon (d) et leur masse, on peut donc en déduire leur densité (ρ) et leur accélération de la gravité (g). On peut supposer que la planète soit tellurique avec une composition plus ou moins proche de la Terre, et donc en déduire un ordre de grandeur pour la viscosité (η), le coefficient de dilatation thermique (α), la conductivité thermique (k) et la diffusivité thermique (κ). La principale incertitude réside en l'estimation du taux de chauffage par unité de volume (H). Avec ces propriétés, nous sommes capable de calculer le Ra_H du système et donc de déduire sa structure thermique. Illustrons ceci par un exemple, plaçons nous dans la peau d'un être vivant sur l'exoplanète Kepler-186 f située à environ 500 années lumière de la Terre. Cet être intelligent observe la Terre, dans un premier temps il considère la planète avec une composition homogène et il mesure d = 6400 km, g = 9.81 m s⁻² et $\rho = 5500$ kg/m³ puis il estime $\eta = 10^{21}$ Pa s, $\alpha = 10^{-5}$ K⁻¹, k = 1 W m⁻¹ K⁻¹ et $\kappa = 10^{-6}$ m² s⁻¹. D'après Jaupart et al. (2007) la chaleur fournie par la désintégration des isotopes radioactifs dans le manteau terrestre est entre 9 et 17 TW, nous considérons ici la borne inférieure de 9 TW¹. Une fois dimensionnée par rapport à la Terre cette valeur induit que $H = 8.2 \times 10^{-9}$ W m⁻³, d'où comme première estimation nous

^{1.} Une valeur plus élevée renforce notre conclusion, on décide donc de prendre l'estimation basse.

obtenons que $Ra_H = 4.7 \times 10^{10}$. Nous allons montrer dans ce chapitre que les lois d'échelle s'expriment comme,

$$\Delta T_{TBL} / \Delta T_H = 0.5 (Ra_{H,cr} / Ra_H)^{1/4}, \qquad (3.1)$$

$$\delta_{TBL}/d = (Ra_{H,cr}/Ra_H)^{1/4},$$
(3.2)

avec $\Delta T_H = H d^2/k$ et $Ra_{H,cr}$ le nombre de Rayleigh critique. Pour cet exemple nous postulons la véracité de ces lois sans donner plus de détails. Donc en appliquant ces deux lois d'échelle à notre problème on trouve une CLT d'une épaisseur de ~75 km et avec un saut de température de ~2000 K. Il est clair que ces conditions causeraient l'existence d'une couche totalement fondue proche de la surface, ce qui est en désaccord avec l'hypothèse d'une composition homogène. Par conséquent une de nos hypothèses est inexacte, dans ce cas c'est l'existence du noyau qui réduit drastiquement Ra_H . Cette méthode nous fournit donc un premier test pour déterminer si un modèle est crédible ou non.

Physical Review E (submitted)

Fully determined scaling laws for volumetrically heated convective systems

Kenny Vilella^a and Édouard Kaminski^a

^a Institut de Physique du Globe de Paris, Sorbonne Paris Cité, 75005 Paris, France

Received XXX; received in revised form XXX; accepted XXX

Abstract

We focus on the determination of the scaling laws giving the thickness and the temperature difference in the thermal boundary layer, that governs the thermal behavior of a volumetrically heated convective system taken as a theoretical reference system for planetary mantles. Because such scaling laws are valid for a large range of control parameters, they provide an efficient tool to better understand the physics of heat transfer in natural systems of various scales. Using a theoretical description of the system at the onset of convection, we obtain for the first time fully determined scaling laws, i.e., scaling laws that do not involve any empirical free parameters. The model is in excellent agreement with 3D numerical simulations and paves the way to a deeper understanding of convective systems.

3.2 Introduction

The problem of the thermal evolution of terrestrial mantles is often tackled using the theoretical framework of Rayleigh-Bénard convection (RBC), and using both laboratory experiments (e.g., Davaille2005, 2005) and/or numerical simulations (e.g., Nakagawa et Tackley, 2014). RBC formalism is well suited for planets in which temperatures are kept constant at the surface and at the interface with the core. However the thermal evolution of coreless terrestrial planets is better modeled with only internal volumetrically heating (Elkins-Tanton et Seager, 2008). In planetary mantles, internal heating can originate from the heat released by the radioactive decay of long-lived radioactive isotopes (²³⁸U, ²³⁵U, ²³²Th and ⁴⁰K), as well as from the secular cooling of the planet, which can be formally treated as an additional source of volumetric heating (Krishnamurti, 1968; Weinstein et Olson, 1990). Furthermore, basal heating can also be treated as a third source of internal heating (Choblet et Parmentier, 2009). Hence a purely volumetrically heated convective system provides a suitable framework to study the dynamics of planetary thermal evolution.

The modeling of the thermal evolution of planetary convective mantles remains challenging and requires intensive numerical calculations and data analysis (Bello *et al.*, 2014) or complex analogic experiments with visualization techniques of high precision (Davaille *et al.*, 2011). Scaling laws provide a useful alternative to describe the physics of convective system, as well as a complementary tool to entangle the results of numerical models encompassing the whole complexity of terrestrial mantles. The interest of scaling laws for interpreting the dynamics of a convective system stems from their ability to describe the structure and evolution of so-called boundary layers. In this article, our aim is to provide a complete theoretical and quantitative description of the thermal boundary layer that drives the thermal evolution of an internally heated convective system.

3.3 Scaling laws for the boundary layer of an internally heated viscous fluid at infinite Prandtl number

3.3.1 Dimensional analysis

As a reference set-up for purely internally heated convective system, we shall consider a horizontal layer of fluid with a constant temperature imposed at the top boundary and an adiabatic bottom. The dynamics of the system, when it furthermore involves isoviscous and incompressible fluids, is characterized by two dimensionless numbers, the Rayleigh-Roberts number (Roberts, 1967) and the Prandtl number. The Prandtl number, Pr, is defined as the ratio of momentum diffusivity over heat diffusivity,

$$Pr = \frac{\eta}{\rho\kappa},\tag{3.3}$$

3.3. Scaling laws for the boundary layer of an internally heated viscous fluid at infinite Prandtl number 51



FIGURE 3.1 – A vertical slice of the dimensionless temperature field of a convective system. The calculation corresponds to $Ra_H = 10^{4.5}$ and free slip top and bottom boundary conditions. The birth of an instability is seen at the left side (blue arrow at left) and a fully developed instability is seen close to the center (red arrow). The hottest temperature profile is located between the two instabilities (black arrow). No instability is seen for the hot temperature profile because by construction the thermal boundary layer remains critically stable.

where η is the dynamic viscosity, ρ the density, and κ the thermal diffusivity. The Prandtl number quantifies the relative importance of inertia relative to viscous forces, inertia being negligible for $Pr \gg 1$. The Rayleigh-Roberts number, Ra_H , is defined as the ratio of the driving thermal buoyancy forces over thermal and viscous dissipations, or, equivalently, as the ratio of the rates of heat transfer by convection and heat transfer by conduction,

$$Ra_H = \frac{\rho g \alpha H d^5}{\lambda \kappa \eta},\tag{3.4}$$

where g is the acceleration of gravity, α the thermal expansion coefficient, H the rate of heat generation per unit volume, d the thickness, and λ the thermal conductivity. Ra_H primarily quantifies the vigor of convection, thus, above a threshold value, called the critical Rayleigh-Roberts number ($Ra_{H,cr}$), convection appears and develops in the heated fluid. For a given Ra_H larger than $Ra_{H,cr}$, the convective interior of the fluid consists of "active" downwellings, which transport the heat, and a rather "passive" upwelling return flow. The spatial organization of the flow can be stable over time, at small Ra_H , i.e., close to $Ra_{H,cr}$, and becomes time dependent for increasing Ra_H .

The convective interior of the fluid is well mixed (as shown in Fig. 3.1) and relatively thermally homogeneous, the change of temperature is restricted to a layer close to the top surface (Fig. 3.1). Indeed, in our volumetrically heated convective system, heat is provided homogeneously in the whole layer of fluid and escapes from its top by conduction, through a so-called "Thermal Boundary Layer" (TBL). The TBL is the thin layer that develops below the top surface and above the convective interior of the fluid. The abrupt change of temperature across the TBL as well as its thickness set the rate of heat transfer in the convective system. The thermal boundary layer of a convective system is an active structure and evolves as a function of time. Howard (1966) suggested that a TBL grows by conduction until it reaches a critical thickness at which it becomes unstable and breaks off to produce an instability. At that point, the "local" Rayleigh number of the TBL (Ra_{TBL}) is equal to a critical Rayleigh number.

One way to study the dynamics of the convective system, and more specifically to quantify heat transfer and induced thermal evolution, is to express the thickness of the TBL (δ_{TBL}) as well as the temperature difference across the TBL (ΔT_{TBL}) as a function of Ra_H and Pr using dimensionless scaling laws,

$$\Delta T_{TBL} / \Delta T_H = f_{\Delta T} (Ra_H, Pr), \qquad (3.5)$$

$$\delta_{TBL}/d = f_{\delta}(Ra_H, Pr), \qquad (3.6)$$

where $\Delta T_H = Hd^2/\lambda$ is the temperature scale of the system, and where $f_{\Delta T}$ and f_{δ} are unknown functions. The viscosity of planetary mantles is very large (~10²⁰ Pa s), yielding extremely high Pr (> 10²⁰). Such large Pr can be considered as infinite and do not play a role in the scaling law anymore (Grossmann et Lohse, 2000, 2001). Hence the determination of the scaling laws boils down to the determination of the thermal structure of the TBL as function of Ra_H only.

To determine the functions $f_{\Delta T}$ and f_{δ} , we follow a line of argument similar to the one proposed by Jaupart et Mareschal (2011). We first note that heat is transferred by conduction within the TBL. The surface heat flux (ϕ) can then be written, from a scaling analysis point of view, as

$$\phi \sim \lambda \frac{\Delta T_{TBL}}{\delta_{TBL}}.$$
(3.7)

At steady state, the surface heat flux is simply the heat generated in the layer of fluid, i.e., $\phi = Hd$, which yields

$$\frac{\Delta T_{TBL}}{\Delta T_H} \sim \frac{\delta_{TBL}}{d},\tag{3.8}$$

hence, $f_{\Delta T} \sim f_{\delta}$.

To gain further insights on the scaling laws, a quantitative description of the TBL is required. Following the theory proposed by Howard (1966), we first consider the TBL just before it breaks to give birth to an instability. At that stage, the thickness of the TBL corresponds to a balance between the buoyancy forces, which drive the flow, and the viscous forces which stabilize the layer of fluid inhibiting the fluid movements, i.e.,

$$\eta \frac{w}{\delta_{TBL}^2} \sim \rho \alpha g \Delta T_{TBL}, \qquad (3.9)$$

where w is a scale for the vertical velocity, which remains to be determined. We determine w from the equation of the energy conservation of the convective system,

$$\rho C_P \left(\frac{\partial T}{\partial t} + u \cdot \nabla T \right) = k \nabla^2 T + H.$$
(3.10)

where $C_P = \lambda / \rho \kappa$ is the heat capacity, *T* the temperature, *u* the fluid velocity, and *t* the time. In the convective fluid just underneath the lower bound of the TBL,

3.3. Scaling laws for the boundary layer of an internally heated viscous fluid at infinite Prandtl number 5

i.e., where $T(\delta_{TBL}) \sim \Delta T_{TBL}$), conduction is negligible, there is then a balance between vertical advection of heat and heat production, hence the energy conservation yields

$$H \sim \rho C_P \frac{wT}{d}.$$
 (3.11)

Combining Eqs. 3.4, 3.8 and 3.9, we obtain

$$\Delta T_{TBL} / \Delta T_H = C_T R a_H^{\beta_T}, \qquad (3.12)$$

$$\delta_{TBL}/d = C_{\delta} R a_H^{P_{\delta}}, \qquad (3.13)$$

where $\beta_T = \beta_{\delta} = -1/4$, whereas C_T and C_{δ} are (still) unknown dimensionless constants which cannot be constrained by a dimensional analysis.

3.3.2 Empirical scaling laws

To our knowledge, the determination of C_T and C_{δ} has been so far empirical and relies on numerical simulations (Parmentier et Sotin, 2000; Deschamps *et al.*, 2012) or laboratory experiments (Kulacki et Nagle, 1975; Limare *et al.*, 2015). Experiments are scarce because of the difficulties to achieve uniform volumetric heating at a rate kept constant over a long period of time in a large volume of fluid. Kulacki et Nagle (1975) used Joule heating in an aqueous solution, with $Pr \sim 7$, as a volumetric energy source. These experiments were designed specifically to measure the surface heat flux, so the temperature profile was constrained with only few temperature probes, which leads to large uncertainty on the scaling laws. More recently, Limare *et al.* (2013, 2015) used a microwave device to provide a well controlled volumetric heating in large Prantdl number fluids. These experimental results show however a large scattering, probably due to variations of viscosity and expansion coefficient with temperature. The comparison of the experimental results with the theoretical scaling confirm that $\beta_T = \beta_{\delta} = -1/4$ and yields $C_T = 3.56$ and $C_{\delta} = 7.36$.

Parmentier et Sotin (2000) (hereafter referred as PS2000) conducted 3D numerical simulations of a volumetrically heated convective system in a Cartesian box, with its top and bottom mechanical boundary conditions are free slip. Ra_H ranging from $10^{6.5}$ to $10^{9.5}$. The fluid is isoviscous, its Pr is taken as infinite while its Ra_H is ranging from $10^{6.5}$ to $10^{9.5}$, and all parameters except density do not depend on temperature. ΔT_{TBL} is taken as the maximum of the horizontally averaged temperature profile, and its evolution with Ra_H is fitted with a power-law. The authors found that the best fitting power-law is $\Delta T_{TBL}/\Delta T_H = 2.2312Ra_H^{-0.2448}$, which is very close to Eq. 3.12. However, they do not provide the results for δ_{TBL} , since they consider that $\phi = \lambda \Delta T_{TBL}/\delta_{TBL}$ and calculate δ_{TBL} following this expression. In their framework, the TBL is virtual, i.e., it does not represent a real temperature profile.

$\log(Ra_H)$	Resolution	Aspect	$\log \left(\Delta T_{TBL} / \Delta T_H \right)$	$\log \left(\Delta T_{TBL} / \Delta T_H \right)$	$\log (\delta_{TBL}/d)$	$\log (\delta_{TBL}/d)$
0		ratio	(rigid)	(free slip)	(rigid)	(free slip)
3.7	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	-0.338	-0.490	-0.010	-0.223
4	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	-0.435	-0.572	-0.199	-0.308
4.5	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	-0.546	-0.684	-0.308	-0.402
4.7	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	-0.585	-0.719	-0.367	-0.435
5	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	-0.639	-0.788	-0.412	-0.538
5.15	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	-0.679	-0.814	-0.474	-0.557
5.34	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-0.741	-0.882	-0.516	-0.637
5.5	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-0.779	-0.947	-0.541	-0.632
5.83	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-0.897	-1.030	-0.656	-0.682
6	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-0.944	-1.074	-0.670	-0.709
6.2	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-0.991	-1.125	-0.734	-0.787
6.5	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-1.062	-1.209	-0.767	-0.846
6.7	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-1.110	-1.251	-0.803	-0.873
6.8	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-1.135	-1.275	-0.837	-0.924
6.9	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-1.158	-1.300	-0.849	-0.951
7.15	$512 \times 512 \times 64$	6/6	-1.217	-1.363	-0.931	-1.044
8	$512 \times 512 \times 256$	4/4	-1.415	-1.578	-1.162	-1.311
8.5	$512\times512\times256$	4/4	-1.533	-1.691	-1.325	-1.320
9	$512\times512\times256$	4/4	-1.663	-1.831	-1.451	-1.591

TABLE 3.1 – Main parameters for different numerical simulations conducted for both rigid and free slip boundary conditions. We report the temperature difference across the thermal boundary layer and its thickness used in Fig. 3.6.

3.4 A numerical investigation of scaling laws

3.4.1 Numerical model

To complement the results of PS2000, and in particular to determine explicitly the evolution of δ_{TBL} as a function of Ra_H , we performed original numerical experiments. Our objectives are two fold : (i) first to expand the results of PS2000 to a wider range of Ra_H , in particular close to $Ra_{H,cr}$, and (ii) second to propose a theoretical interpretation of the values of C_T and C_{δ} provided by the experiments.

The numerical simulations are performed with the code Stag3D developed by Paul Tackley, and described in detail in Tackley (1994, 1996). The application of the code to volumetrically heated fluid is furthermore presented in Limare *et al.* (2015). We provide here only a brief description of the code. Stag3D solves the conservation equations for convection, under the Boussinesq approximation, for an infinite Prandtl number and constant fluid properties, using a finite difference (control volume) multigrid technique. For this study, the chosen setting is a fluid purely internally heated, in a 3D Cartesian box with constant temperature at the surface, and an adiabatic bottom boundary condition. The side boundaries are reflecting, whereas the top and bottom boundary conditions can be either rigid or free slip. The input parameter is Ra_H and ranges between $10^{3.7}$ and 10^9 . For computations performed at $Ra_H < 10^{5.5}$, convection is steady, so we use as initial condition a constant temperature in the whole box with random perturbations. For



FIGURE 3.2 – Evolution of the dimensionless temperature difference across the thermal boundary layer (ΔT_{TBL}) with the Rayleigh-Roberts number for free slip (red) and rigid (black) boundary conditions. ΔT_{TBL} is measured as the maximum of the horizontally averaged temperature profile. Error bars correspond to second-order temporal variation of the hot temperature profile in the numerical experiments. Solid black line gives the best fit of data at Rayleigh-Roberts numbers greater than 10⁵, for rigid boundaries, and the solid red line is the scaling law proposed by Parmentier et Sotin (2000) for free slip boundaries. The grey shaded areas correspond to the range of Rayleigh-Roberts numbers where the numerical results do not agree with the scaling laws.

increasing Ra_H , convection is time dependent, hence the steady state is reached when both horizontally average temperature and surface heat flux are constant (their fluctuations are zero) when averaged over several overturn times. In such cases, we use as initial condition a temperature field obtained for a previous - and smaller - Ra_H to reduce computational time. We carefully checked that the final result did not depend on the initial state. The selected aspect ratio and the space resolution of the grid (Tab. 3.1) guarantee both the development of a large number of convective cells (with a size that does not depend on the aspect ratio), and a sufficient resolution in the TBL (more than 6 points).

3.4.2 Comparison with PS2000 results

To compare previous studies of this convective system (Kulacki et Nagle, 1975; Deschamps *et al.*, 2012), and more specifically PS2000, we follow the same approach as PS2000 to determine the TBL by considering the horizontally averaged temperature profile, and we set the limit of the TBL as the point where the temperature is maximum. We then obtain both the thickness of the TBL (δ_{TBL}) and the temperature change across the TBL, $\Delta T_{TBL} = T(z = \delta_{TBL})$. The evolution of δ_{TBL} and ΔT_{TBL} with Ra_H are shown in the Fig. 3.2. The temperature drop across

TABLE 3.2 – Scaling constants for the Thermal Boundary Layer (TBL). We follow two determinations, the first one set the limit of the TBL as the point where the horizontally averaged temperature profile is maximum, the second as the point where the convective heat flux is equal to the conductive heat flux.

	maximum temperature				balance between convective			
	1				and conductive heat flux			
	C_T	β_T	C_{δ}	β_{δ}	C_T	β_T	C_{δ}	β_{δ}
Free slip, free exponent	2.467	-0.251	2.299	-0.168	2.360	-0.253	3.828	-0.251
Free slip, fixed exponent	2.426	-0.25	NA	NA	2.245	-0.25	3.761	-0.25
Rigid, free exponent	3.094	-0.244	2.129	-0.151	3.071	-0.247	4.659	-0.246
Rigid, fixed exponent	3.388	-0.25	NA	NA	3.206	-0.25	4.967	-0.25

the TBL is well explained by the Eq. 3.12, down to $Ra_H \sim 10^5$. The numerical results and the predictions of the scaling law diverge for $Ra_H < 10^5$. Deschamps *et al.* (2012) made the same observation for calculations performed in spherical geometry and postulated the occurrence of a different regime of convection to explain the observation. We find indeed that the transition from steady to transient convection occurs at $Ra_H \sim 10^5$ in our system, which gives support to the hypothesis of Deschamps *et al.* (2012). The related conclusion is that the description of the TBL proposed by PS2000 is intuitive, but a part of the dynamics of the convective system is missing.

To complement the results of PS2000 that were obtained for free slip mechanical conditions, we consider the case of rigid boundary conditions. To compare the results obtained for the two sets of boundary conditions, we fit the numerical results at $Ra_H > 10^5$, considering $\beta_T = -1/4$ or as a free parameter. The results given in Tab. 3.2 illustrate the agreement between the present study and PS2000 : PS2000 found $C_T = 2.414$ and we found $C_T = 2.426$ here. Furthermore we find that the constant C_T depends on the mechanical boundary conditions of the system (Choblet et Parmentier, 2009, as shown by) : $C_T = 2.426$ for free slip boundaries and $\beta_T = -1/4$, whereas $C_T = 3.388$ for rigid boundary conditions.

To our knowledge no theoretical explanation for this result is available in the literature.

The interpretation of the results are more complex when one consider the evolution of the thickness of the TBL as a function of Ra_H . Fig. 3.3 reveals several disagreements between the numerical results and the theoretical scaling. First, for $Ra_H \leq 10^4$, the scaling law grossly fails to predict δ_{TBL} . Second, for $10^5 < Ra_H < 10^8$, the exponent of the scaling law that provides the best fit to the data is $\beta_{\delta} = -0.168$ and $\beta_{\delta} = -0.151$ for free slip and rigid boundary conditions, respectively. These empirical values are far from the theoretical value of -1/4, and not consistent with the temperature scaling law exponent, which casts some doubts on the validity of the approach. Third, we note a change in the trend of the data at $Ra_H > 10^8$ for rigid boundary conditions. For these Rayleigh-Roberts numbers, the temperature in the convective interior of the fluid tends to reach the maximum value of the temperature that defines the TBL, in turn the TBL becomes



FIGURE 3.3 – Evolution of the dimensionless thickness of the thermal boundary layer (δ_{TBL}) with the Rayleigh-Roberts number for free slip (red) and rigid (black) boundary conditions. The base of the thermal boundary layer is set at the point where the horizontally averaged temperature profile is maximum. Error bars correspond to second-order temporal variation of the hot temperature profile in the numerical experiments. The solid lines give the best fit of data at Rayleigh-Roberts numbers greater than 10⁵. The grey shaded areas correspond to the range of Rayleigh-Roberts numbers where the numerical results do not agree with the scaling laws.

difficult to determine with a good accuracy.

3.4.3 Determination of the TBL based on heat fluxes

To go beyond the limitation of the method used by PS2000 to determine the TBL, in particular for the determination of its thickness, we consider an alternative method proposed in the literature. Some authors define the base of the TBL as the point where the convective heat flux is equal to the conductive heat flux. We use this definition and report the results in Fig. 3.4(a). The temperature of the base of the TBL is a bit smaller than the one determined using the method of PS2000, but the scaling law are quite similar (Tab. 3.2). In particular, the scaling obtained based on the data at $Ra_H > 10^5$ does not fit well the data at $Ra_H < 10^5$. The results are however much more different for the thickness, as shown in Fig. 3.4(b). The thicknesses obtained using the balance of heat fluxes are significantly smaller than the ones obtained using the method based on the maximum temperature. Furthermore, the thickness of the TBL based on the heat fluxes yields an exponent consistent with the theoretical value of -1/4, hence consistent with the exponent obtained for the temperature. As for temperature, a change of the mechanical boundary conditions changes the dimensionless constant in the scaling laws and the thickness is smaller for free slip boundaries ($C_{\delta} = 3.761$) than for



FIGURE 3.4 – (a), Evolution of the dimensionless temperature difference across the thermal boundary layer with the Rayleigh-Roberts number for free slip (red) and rigid (black) boundary conditions. The thermal boundary layer is set at the point where the convective heat flux equally balances the conductive heat flux calculated along the horizontally averaged temperature profile. Error bars correspond to second-order temporal variation of the hot temperature profile in the numerical experiments. Solid black line gives the best fit of data at Rayleigh-Roberts numbers greater than 10^5 for rigid boundary conditions, and the solid red line is the scaling law proposed by Parmentier et Sotin (2000) for free slip boundary conditions. (b), Evolution of the dimensionless thickness of the thermal boundary layer with the Rayleigh-Roberts number. The solid lines correspond to the theoretical scaling. The grey shaded areas correspond to the range of Rayleigh-Roberts numbers where the numerical results do not agree with the scaling laws.

rigid boundaries (C_{δ} = 4.967). But the scaling laws obtained at large Ra_H remains however still not valid for Ra_H smaller than 10⁵, which suggests a flaw in the approach followed do determine the TBL.

3.5 Critical thermal boundary layer theory

3.5.1 Fully theoretically determined scaling laws

Our aim is to find some theoretical arguments to go beyond the limitations of the previous empirical determinations of C_T and C_{δ} . To that aim, we propose to characterize the TBL (ΔT_{TBL} and δ_{TBL}) at the onset of convection, since at this stage the TBL is analytically determined. At the onset of convection Ra_H reaches a value called the critical Rayleigh number, $Ra_{H,cr}$. The value of $Ra_{H,cr}$ can be calculated using an analytic stability analysis that yields $Ra_{H,cr} = 868$ for free slip mechanical boundary conditions at top and bottom (Chandrasekhar, 1961) and $Ra_{H,cr} = 2772$ for rigid boundary conditions (Roberts, 1967). At the onset of convection the temperature profile is still the conductive profile; the temperature increases with depth and reaches a maximum of $0.5\Delta T_H$ at the bottom of the system (as shown in Fig. 3.5). Furthermore, at this stage the TBL is simply the whole



FIGURE 3.5 – Temperature profiles obtained at $Ra_H = 10^4$ and for free slip top and bottom boundary conditions. The thermal structure has reached a steady state, because the value of the Rayleigh number is not very large compared to the critical Rayleigh number. (a), The black line gives the horizontally averaged temperature profile, and the blue and red lines correspond to the coldest and hottest temperature at a given depth ("cold" and "hot" temperature profiles), respectively. The mean and hot temperature profiles show that large temperature variations only occur in the top thermal boundary layer, whereas temperature in the convective interior does not depend on z. The black dashed line represents the conductive temperature profile calculated in the case of a fluid purely internally heated and corresponds also to the temperature profile at the onset of convection. (b), Evolution of the dimensionless second derivative of temperature versus the dimensionless height, black : horizontally averaged temperature, red : hot temperature. The two squares mark the base of the thermal boundary layer defined as the closest point to the top boundary where the second derivative becomes zero (formally here it is smaller than 1% its minimum value along the profile). Using the hot temperature profile yields a significantly thinner and slightly hotter thermal boundary layer than using the averaged temperature profile.

layer of fluid, hence the TBL is fully analytically characterized and such that

$$\Delta T_{TBL} = 0.5 \Delta T_H, \qquad (3.14)$$

$$C_{\delta} = d. \tag{3.15}$$

Because convection occurs as soon as the critical Rayleigh-Roberts number is reached, the TBL should follow the theoretical law obtained for the dimensional analysis of convection at $Ra_{H,cr}$. Combining the results of equations 3.14 and 3.15 with

the scaling laws given in Eqs. 3.5 and 3.6, we obtain an explicit and analytical expression for C_T and C_{δ} ,

$$C_T = 0.5Ra_{H,cr}^{1/4}, \tag{3.16}$$

$$C_{\delta} = Ra_{H,cr}^{1/4}. \tag{3.17}$$

Using these theoretical expressions, the scaling laws can then be written as

$$\Delta T_{TBL} / \Delta T_H = 0.5 (Ra_{H,cr} / Ra_H)^{1/4}, \qquad (3.18)$$

$$\delta_{TBL}/d = (Ra_{H,cr}/Ra_H)^{1/4}.$$
 (3.19)

We have established scaling laws that do not involve any empirical parameters. They furthermore provide a physical interpretation for C_T and C_{δ} , and especially for their dependence on $Ra_{H,cr}$. As a matter of fact, since $Ra_{H,cr}$ depends on the boundary conditions (as shown by the stability analysis), we get a direct theoretical explanation for the dependence of C_T and C_{δ} on the boundary conditions found in previous studies (Choblet et Parmentier, 2009). However, the scalings have been obtained for a system seating just at the limit of stability between the convective and conductive regimes. The next step is thus to test the validity of the scaling laws for a fully developed convection (i.e., far from the limit of stability), using numerical simulations.

3.5.2 Comparison with numerical simulations

As already mentioned, previous studies determined the TBL using horizontally averaged temperature profile. Although meaningful for heat transfer, this averaging is likely to hide part of the dynamics of the TBL and may yield biased thickness and thermal structure of the TBL. To be more consistent with our framework, in which the TBL remains at a critical stage, we instead use the maximum instantaneous temperature at a given depth to determine the TBL. From this maximum temperature we construct a "hot temperature" profile, $T_{hot}(z)$, as illustrated in Fig. 3.1. We then note that the temperature in the TBL increases with depth (i.e., $\partial T_{hot}/\partial z > 0$) and becomes constant (or even slightly decreases) in the convective interior of the fluid underneath the TBL (Fig. 3.5). We thus use the second spatial derivative of the temperature that marks the change of $\partial T_{hot}/\partial z$ to set the limit between these two zones, and we define the base of the TBL as the closest point to the top boundary where the second derivative of the temperature equals zero (or actually where the second derivative is smaller than 1% of its minimum value along the profile).

Fig. 3.6(a) gives the temperature difference across the TBL, $\Delta T_{TBL} = T_{hot}(z = \delta_{TBL})$, determined using the method presented above applied to our numerical simulations at various Ra_H (Tab. 3.1), as well as our theoretical law given by Eq. 3.18. The agreement between the numerical results and the theoretical law is excellent and can be taken as a cross validation of both the theoretical scaling law as well as our method of determination of the TBL based on the hot temperature profile. We



FIGURE 3.6 – (a), Evolution of the dimensionless temperature difference across the thermal boundary layer with the Rayleigh-Roberts number for free slip (red) and rigid (black) boundary conditions. Error bars correspond to the (second-order) time evolution of the instantaneous hot temperature profile in the numerical experiments. Solid lines are the theoretical scaling laws defined in text. The two stars correspond to two test cases calculated with non symmetrical mechanical boundary conditions. (b), Evolution of the dimensionless thickness of the thermal boundary layer with the Rayleigh-Roberts number. The solid lines correspond to the theoretical scaling.

further note that our scaling laws remain valid at low Ra_H where the method used in previous studies failed to predict ΔT_{TBL} with the scaling laws fitted for large Rayleigh-Roberts numbers. Fig. 3.6(b) compares δ_{TBL} obtained in the numerical experiments (Tab. 3.1) with the theoretical scaling law of Eq. 3.19. Here again the agreement is very good, although the error bars are higher for δ_{TBL} than for ΔT_{TBL} because the thickness is more sensitive than the temperature to the numerical criterion used for the determination of the TBL.

3.6 Discussion

Our results yield several improvements to previous theoretical and numerical studies of convection in volumetrically heated systems. First, we have obtained fully theoretical scalings that do not require the empirical determination of free dimensionless parameters and that are valid for any Ra_H larger than $Ra_{H,cr}$. Second, the theoretical scalings provide a direct interpretation of the dependence of the scaling laws on the boundary conditions of the system. Our vision of the TBL bears important implications for the understanding of the physics of convection. In particular, it may end the long-standing controversy about the value of the local Rayleigh number at which the TBL becomes unstable (Ra_{TBL}). Early studies (Sharpe et Peltier, 1978; Schubert *et al.*, 1979) considered that Ra_{TBL} was simply $Ra_{H,cr}$. But few years later $Ra_{H,cr}$ was taken as an empirical parameter with no relation with Ra_{TBL} (Stevenson *et al.*, 1983). More recently numerical experiments (Sotin et Labrosse, 1999) obtained that Ra_{TBL} was a function of Ra_H which implied in turn that Ra_{TBL} could not be equal to (constant) $Ra_{H,cr}$. Within our framework, and using the definition of the Rayleigh number and Eqs. 3.18 and 3.19 we obtain

that in the TBL the Rayleigh-Roberts number is

$$Ra_{TBL} = (g\alpha\Delta T_{TBL}\delta_{TBL}^3)/(\kappa\nu) = 0.5Ra_{H,cr}$$
(3.20)

This result demonstrates that the Rayleigh number within the TBL is indeed constant hence not a function of Ra_H and keeps the value reached at the onset of convection (i.e., when $\delta_{TBL} = d$). This is consistent with our view that consider that the TBL always remains at the limit of stability. As already mentioned, the limit between conduction and convection, hence $Ra_{H,cr}$, depends on the mechanical boundary conditions that are imposed at the top and at the base of the fluid layer. But the stability of the TBL itself is likely to be also affected by the mechanical boundary condition at the base of the TBL, i.e., the mechanical interface with the convective interior, which is not known a priori. One could expect a mixed condition at this interface, intermediate between a rigid (solid) boundary and a free slip (convective fluid) boundary. In such an intermediate case, the critical Rayleigh number for the TBL should then be bracketed by the theoretical values of $Ra_{H,cr}$ for free slip and rigid conditions. We have seen however that this is not the case as Ra_{TBL} keeps the same value as the one calculated at the onset of convection (whatever the Ra_H of the system) for a given fixed boundary condition (either rigid or free slip). Therefore, the Rayleigh number of the TBL does not depend on the "effective" mechanical boundary condition at the base of the TBL. In order to better understand this rather counter intuitive result, we carried out a couple of numerical simulations at high Ra_H with asymmetrical boundary conditions, i.e., for different mechanical boundary conditions at the top and at the bottom of the system (Fig. 3.6). We find that the TBL properties (temperature and thickness, hence Ra_{TBL}) are the same as the ones obtained for symmetrical boundary conditions. We note in particular that Ra_{TBL} in the asymmetrical cases has the same value as the one obtained by the stability analysis performed for a symmetrical system with the same top boundary condition. In other words, if we consider for example the case with a free slip top boundary condition and a rigid bottom boundary condition, Ra_{TBL} is the same as the Rayleigh-Roberts number of the TBL in the case with free slip boundary conditions at top and bottom. This implies that the effective mechanical condition at the base of the TBL is the same as the one imposed at the upper boundary, and in turn that the convective interior of the system as little impact on the evolution of the TBL that rather follows its own internal dynamics. This last result, combined with the theoretical determination of the dimensionless constants in the scaling laws, then provides a complete view of the structure and dynamics of the TBL.

3.7 Conclusion

In the last decade, the dynamics of boundary layers in turbulent Rayleigh-Bénard convection have attracted a lot of attention (see Ahlers *et al.*, 2009; Chilla et Schumacher, 2012, and references therein). The majority of studies aim to es-
tablish the relationship between the Nusselt (Nu) and the Rayleigh number, especially the effects of the mechanical boundary conditions (van der Poel *et al.*, 2014), of the aspect ratio of the convective system (Zhou *et al.*, 2012; van der Poel *et al.*, 2014) and of the Prandtl number (Petschel *et al.*, 2013; Xia *et al.*, 2002) on the Nusselt-Rayleigh scaling laws relationship. The Nu-Ra relationship in Rayleigh-Bénard convection builds upon the determination of the thickness of the TBL (e.g., Verzicco et Sreenivasan (2008); Sun *et al.* (2008); Wagner *et al.* (2012)) based on the fact that the temperature at the base of the TBL is constant. In the present study, focused on volumetrically heated systems, a new method has been proposed to determine both the thickness and the temperature difference across the TBL based on

termine both the thickness and the temperature difference across the TBL based on a theoretical description of the TBL at the onset of convection. This approach, that yields fully theoretically determined scaling laws for the TBL, provides a direct interpretation of the influence of the boundary conditions on the dynamics of the TBL. A similar approach could be followed to determine the Nu-Ra relationship in mixed systems with both internal heating and fixed temperature at the base of the system and where the condition of a fixed temperature at the base of the TBL would not apply.

Acknowledgements

The interpretation of the results benefited from discussions with Stéphane Labrosse, Frédéric Deschamps and Alexandre Fournier. We would like to thank Angela Limare, Loic Fourel, Claude Jaupart and Cinzia Farnetani for very useful discussions on convection in internally heated systems. This work was supported by the TERRA-MWH project (ANR-11-ISO4-0004). Numerical computations were performed on the SCAPAD platform, IPGP, France and using HPC resources from GENCI-IDRIS (Grant 2013-047033).

Chapitre 4

Description des motifs de convection pour un fluide chauffé volumiquement

Sommaire

4.1 4.2	Introduction				
4.3	Results				
	4.3.1	Planform evolution			
	4.3.2	How to determine the horizontal organization of a convective planform?			
	4.3.3	What do these scaling laws tell us?			
4.4	Concl	usion			

in preparation

Description of horizontal planforms in a purely internally heated convective fluid

4.1 Introduction

Internally heated convection is ubiquitous in natural and industrial systems. In the Earth's mantle the dominant heat supply comes from the decay of radioactive isotopes (Holmes, 1929; McDonough et Sun, 1995; Jaupart *et al.*, 2007). Secular cooling of a convective system can be approximated by volumetric heating (Krishnamurti, 1968; Weinstein et Olson, 1990), and thus represents an additional source of internal heating. The coupling between volumetric heating and heating from below, e.g., from the core, has been extensively studied (Houseman, 1988; Travis *et al.*, 1990; Sotin et Labrosse, 1999; Deschamps et Tackley, 2010), and was successfully applied to many systems such as planetary mantles. The case with no heating from below, i.e. a system purely internally heated and cooled from above, is the most appropriate for planetary bodies without a hot liquid core.

Several studies focused on this convective system (Roberts, 1967; Tritton et Zarraga, 1967; Parmentier et Sotin, 2000; Ichikawa et al., 2006; Deschamps et al., 2012), in different geometrical configurations, Cartesian and spherical, and for a large range of Rayleigh numbers, thereby providing a description of the evolution of an internally heated convective system as a function of its Rayleigh number. Below a critical value of the Rayleigh number, $Ra_{H,cr}$, the fluid is in a conductive state (i.e. with a 1D thermal field), only for a Rayleigh number above $Ra_{H,cr}$ the system is in a convective state (i.e. with a 3D thermal field that can change with time). Roberts (1967) calculated the critical Rayleigh number separating the two regimes, and suggested that at the onset of convection the only stable pattern is square shaped, with cold instabilities at its centre and with a specific wave number. When the Rayleigh number is greater than approximately 10⁴, the hexagonal pattern becomes stable for a range of wave numbers. Ichikawa et al. (2006) observed the occurrence of a spoke pattern, which is equivalent to an hexagonal pattern where the centre downwelling is no longer cylindrical but rather star-shaped. Historically, Tritton et Zarraga (1967) were the first to observe experimentally hexagons, and more recently Takahashi et al. (2010) obtained spokes. At higher Rayleigh number, the pattern changes to a sheet-like structure (Ichikawa et al., 2006), i.e. downwellings are linked with sheets. Finally, the convection planform becomes transient (Parmentier et Sotin, 2000), and the convective system can be separated

Chapitre 4. Description des motifs de convection pour un fluide chauffé volumiquement

in two parts : (a) a top cold Thermal Boundary Layer (TBL) dominated by thermal conduction, where the temperature variation is abrupt, and (b) a convective interior characterized by an almost constant temperature with depth. Howard (1966) proposed that the TBL controls the dynamics of the convective system. The TBL grows by conduction, until its intrinsic Rayleigh number reaches a critical Rayleigh number (Vilella et Kaminski, 2015), and breaks off to produce a cold instability inducing transient convection. The instability removes a part of the TBL and moves laterally, while the TBL starts again to grow by conduction, and a new cycle initiates.

There are fewer numerical studies of purely internally heated convection than of Rayleigh-Bénard convection. Some were designed to establish scaling laws, assuming an infinite Prandtl number, and to describe the thermal structure of the TBL for both Cartesian (Parmentier et Sotin, 2000) and spherical (Deschamps et al., 2012) geometry. Alternatively, Ichikawa et al. (2006) and Glover et Generalis (2009) intensively investigated the different stable patterns of convection at low Prandtl number (Pr = 7) corresponding to the aqueous solution commonly used in laboratory experiments. Only Houseman (1988) considered the case of an infinite Prandtl number, which is more appropriate for mantle convection. He identified different patterns of convection, but without determining the Rayleigh numbers corresponding to the cell planforms transitions. Laboratory experiments also provide a fruitful set of data, although some discrepancies exist between studies. At intermediate Rayleigh numbers, a strong increase of cell size has been observed (Tritton et Zarraga, 1967; Schwiderski et Schwab, 1971; Tasaka et al., 2005; Takahashi et al., 2010), in agreement with numerical results (Ichikawa et al., 2006), whereas Carrigan (1982) and Limare et al. (2015) found an almost constant cell size. Ichikawa et al. (2006) claimed an experimental origin of this inconsistency because of temperature dependent viscosity. However, the first set of laboratory experiments used aqueous solutions with low Prandtl number (Pr = 7), whereas laboratory experiments by Carrigan (1982) and by Limare et al. (2015) used high Prandtl number fluids (Pr > 300). A key question is then : At high Prandtl number, does the cell size increase or not?

At large Rayleigh numbers, Parmentier et Sotin (2000) established scaling laws linking the number of instabilities (*N*) to the Rayleigh number (Ra_H). Their theoretical model indicates that the scaling law should be a -1/4 power-law. To check this prediction, they counted instabilities, for each numerical simulations, observed on a horizontal slice of the temperature field. The numerical results agree with the theory, since *N* varies as $Ra_H^{-1/4}$. However, their visual definition of the instabilities might induce a bias in the number of instabilities. they defined visually instabilities inducing a biased number. A question is therefore, how sensitive are the results to the way of defining an instability?

To answer these questions, we conducted a complete set of numerical simulations of volumetric heating convection, assuming an infinite Prandtl number. The Rayleigh number ranges from $10^{3.7}$ to 10^9 , and we consider both rigid or free slip boundary conditions. Since convection for Pr > 100 is equivalent to an infinite Prandtl number case (Kraichnan, 1962), our results can be compared with Carrigan (1982) and Limare *et al.* (2015).

We find the different patterns of convection described above, i.e., square shaped pattern, spokes pattern, sheet-like structure and transient convection. Our complete set of numerical simulations enables us to describe in detail the evolution of the horizontal structure. In particular, we determine the stability domain of each pattern of convection for both sets of boundary conditions. We also investigate the scaling laws linking the number of instabilities and the average spacing between instabilities to the Rayleigh number. We find that the coefficient (C_N) and the exponent (β_N) linking N to Ra_H (i.e. $N = C_N Ra_H^{\beta_N}$, as detailed later) can vary depending on the criteria used to identify an instability. This aspect, which has been generally neglected, induces variations on the scaling laws that are carefully quantified in our work.

The resulting $N-Ra_H$ relationship can then be applied to natural systems, such as planetary mantles, to better constrain the internal properties using surface observations. The surface of a planetary body may possess marks that reflect instabilities in the deep interior. For instance, gravity and topography anomalies on Venus have revealed the presence of, at least, 9 instabilities (Smrekar et Stofan, 1999). The number of instabilities within Venus' mantle provides a first order approximation of its Rayleigh number, and in turn gives insights on mantle properties. However, given the sensitivity of the scaling law to the way we used to define an instability, a key question is to which extent can we trust the value of Ra_H obtained from N.

4.2 Numerical model

We study convection in a horizontal layer of an incompressible and isoviscous fluid, purely internally heated and cooled from above, confined in a Cartesian box. The temperature at the top is kept constant, whereas the base is adiabatic. The convective system is controlled by two dimensionless numbers, the Rayleigh-Roberts number,

$$Ra_H = \frac{\rho g \alpha H d^5}{\eta \kappa k} \tag{4.1}$$

and the Prandtl number,

$$Pr = \frac{\eta}{\rho\kappa},\tag{4.2}$$

where ρ is density, g gravity, α thermal expansion, H the internal heating rate, d the fluid thickness, η viscosity, κ thermal diffusivity, k thermal conductivity. All fluid properties are assumed to be constant, except density that depends on temperature in the buoyancy force, which corresponds to Boussinesq approximation. We further assume the case of an infinite Pr, hence the convective system is controlled by one (equation 4.1) dimensionless number.



FIGURE 4.1 – Representation of a regular square pattern (a) and hexagonal pattern (b). Red dots correspond to the downwelling centre, whereas the black lines separate the different cells.

We conduct numerical simulations using the code Stag3D (Tackley, 1996) in Cartesian geometry. We solve the three dimensionless conservation equations governing the convective system : the conservation of mass, the conservation of momentum and the conservation of energy. The lateral boundary conditions are reflecting for the velocity, and the top and bottom boundary conditions can be either rigid or free slip. At low Ra_H , we use as initial condition a constant temperature in the whole box with random perturbations. At large Ra_H , when convection is time dependent, our initial condition is the temperature field of a statistically steady solution obtained at smaller Ra_{H} . This enables us to reduce computational time and we carefully verified that the final result does not depend on the initial state. The selected aspect ratio and grid resolution (provided in table 4.1) guarantee the development of a large number of convective cells. Once statistical steady state is reached, i.e., both average temperature and heat flux are stable besides some fluctuations, several overturn times are further required to have a good average of these fluctuations. Our new set of simulations expands Vilella et Kaminski (2015) results, in order to determine precisely the planform evolution (reported in table 4.1).

4.3 Results

4.3.1 Planform evolution

Here we study the evolution of the convective cell structure for a large range of Ra_H . Following an analytic calculation (Roberts, 1967), the first convective

TABLE 4.1 – Main parameters of numerical simulations. We also report the results presented in figure 4.6, "NA" means we are not able to measure the property while "None" means we do not conduct the corresponding numerical simulations.

Ra _H	Resolution	Aspect ratio	Ν	Ν	D_{avg}/d	D_{avg}/d
			rigid	free slip	rigid	free slip
10 ^{3.7}	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	0.195	0.148	2.190	2.844
10^{4}	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	0.231	0.152	2.104	2.740
$10^{4.25}$	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	0.227	None	2.236	None
$10^{4.35}$	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	0.234	None	2.146	None
$10^{4.45}$	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	0.230	0.137	2.075	2.764
$10^{4.5}$	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	0.238	0.121	1.998	3.185
$10^{4.55}$	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	0.223	0.121	2.125	3.239
$10^{4.65}$	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	None	0.117	None	3.339
$10^{4.7}$	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	0.230	0.117	2.084	3.293
10^{5}	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	NA	NA	NA	NA
$10^{5.15}$	$1024 \times 1024 \times 64$	16/16	NA	NA	NA	NA
$10^{5.34}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	NA	NA	NA	NA
$10^{5.5}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	NA	0.811	NA	1.022
$10^{5.83}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	1.349	1.132	0.715	0.852
10^{6}	$512 \times 512 \times 64$	6/6	1.755	1.210	0.643	0.806
$10^{6.2}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	2.063	1.371	0.578	0.744
$10^{6.5}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	2.580	1.648	0.508	0.660
$10^{6.7}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	2.984	1.826	0.464	0.630
$10^{6.8}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	3.135	1.861	0.445	0.615
$10^{6.9}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	3.425	1.993	0.422	0.588
$10^{7.15}$	$512 \times 512 \times 64$	6/6	3.882	2.262	0.373	0.558
10^{8}	$512 \times 512 \times 256$	4/4	6.716	3.646	0.268	0.409
$10^{8.5}$	$512 \times 512 \times 256$	4/4	9.109	4.399	0.208	0.356
109	512 × 512 × 256	4/4	14.766	6.335	0.176	0.296

cells should be square shaped (figure 4.1a), with downwelling instabilities at their centres. At increasing Ra_H , the planform composed of hexagon cells with downwelling instabilities at their centres (figure 4.1b) should be stable (Roberts, 1967) We thus expect to observe these two convection planforms in the convective system.

We first report the main results for a convective system when its top and bottom velocity boundary conditions are free slip (figure 4.2). The first planform of convection (figure 4.2a) is composed of downwellings with an axisymmetrical shape that extends over the whole layer of fluid (figure 4.3). We find a planform (figure 4.2a-b) that is distorted compared to the square pattern (figure 4.1a), probably because of the finite horizontal size of the box. Indeed instabilities have a varying size and some of them merge with another one, therefore it is difficult to conclusively determine the shape of the convection planform. As Ra_H increases the planform continuously deforms until obtaining a distinguishable spoke pattern (figure 4.2c-f). A spoke consists of a central downwelling with six small branches associated to an hexagonal pattern, but some of downwellings have only five branches and form pentagonal cells. Again, we note the difference with the regular hexagonal pattern (figure 4.1b). Roberts (1967) showed that hexagonal cells with different wavelengths are stable at a given Ra_H , therefore the irregular pattern may result for coupling of hexagonal patterns with different wavelengths. This specific structure is seen close to the surface and reduces to an axisymmetric instability at greater depths (figure 4.3). The progressive lengthening of the spoke pattern associated to the shortening of the centre downwelling produces a transition towards a sheet-like structure. Figure 4.2e shows the spokes merging together to form a connected structure, which is present in the whole layer of fluid (figure 4.3). The sheet-like structure is time dependent, and their location is varying with time. However it does at a very low rate compared to the typical overturn time. Some cold instabilities with an axisymmetric shape are preferentially localized on the edges of the sheets (figure 4.2g). These instabilities move faster than the sheets, indicating the coexistence of transient convection and a sheet-like structure. At high Ra_H , all the structures become transient (figure 4.2h) and the planform exhibits some elongated instabilities due to their fast lateral movement. Elongated structures become longer and more abundant with increasing Ra_H , reaching a connected structure close to the top boundary (figure 4.2i). In this connected structure instabilities are attracted, as soon as they appear, by already established instabilities. The life cycle of an instability can be summarised as follows : An instability emerges from the TBL and sinks into the convective interior. Then elongated structures appear and link the instability to its nearest neighbours. Once instabilities are connected they move and coalesce. So the whole structure is moving following the appearance of new instabilities.

We conduct the same study with rigid boundary conditions and we find a similar planform evolution with Ra_H (figure 4.4), hence we note here only the main differences between the two cases. The stability domains of convection planforms are different for each set of boundary conditions. For instance, at $Ra_H = 10^5$, there

72



FIGURE 4.2 – Evolution of the convection planform with the Rayleigh-Roberts number, when the top and bottom velocity boundary conditions are free slip. We show the thermal field for a horizontal plane, the depth and the color scale is changing in each panel in order to better visualize. The blue color corresponds to cold material while red color corresponds to hot material. The black scale under each panel is the typical size of an instability calculated as twice the thickness of the thermal boundary layer (Vilella et Kaminski, 2015). Note the change of resolution and aspect ratio for the figures g–i (see table 4.1).



FIGURE 4.3 – Temperature field for free slip boundary conditions, at different Rayleigh-Roberts numbers and at different depths. The aspect ratio and the position is identical in all snapshots in order to show the vertical structure of the instabilities. Each panel corresponds to a square with its sides measuring about three times the depth of the Cartesian box.



FIGURE 4.4 – Similar to figure 4.2 but for rigid boundary conditions. The resolution and the aspect ratio change for the figures g–i (see table 4.1).

is transient convection for free slip boundary conditions, whereas there is a stable sheet-like structure in the rigid case. This result was expected, since the beginning of convection, characterized by $Ra_{H,cr}$, changes with boundary conditions (Chandrasekhar, 1961). It is difficult to define accurately the transitions between the different structures for both cases. For instance, in the rigid case (figure 4.4) all transitions seem continuous with a slight deformation of the cell pattern with increasing Ra_H . We also note that instabilities are smaller and more numerous in the rigid case than in the free slip case.

Figure 4.5 schematically summarizes our observations on the evolution of convective patterns. Note that we do not provide the uncertainty on the Ra_H defining each transition, because, as we explained in the previous paragraph, uncertainties are large. The comparison between the two cases with different mechanical

Chapitre 4. Description des motifs de convection pour un fluide chauffé volumiquement



76

FIGURE 4.5 – Evolution of the heat transfer regime with the Rayleigh-Roberts number for both rigid (black bar) and free slip (red bar) boundary conditions. The grey area corresponds to the conductive regime (CR). Transitions to squares are calculated with analytic stability analysis (Roberts, 1967), whereas other transitions are based on observations of figure 4.2 and figure 4.4.

boundary conditions shows that the transition from sheets to transient convection is clearly correlated with the transition from conduction to squares, since the ratio of Ra_H between the two transitions is equal for both cases. In other words, if we use the theoretical scaling laws developed by Vilella et Kaminski (2015) we find that, when transient convection appears, the TBL has the same thermal structure, i.e. thickness (δ_{TBL}) and temperature jump (ΔT_{TBL}), in both cases. The thickness of the TBL when transient convection appears is about 25 % of the box depth. Following this result we suggest that the beginning of transient convection is controlled by the vertical extent of the convective interior. At low Ra_H , there is a thick TBL, therefore cold instabilities in the convective interior are constrained by the vertical extent between the TBL and the bottom of the box. At greater Ra_H , the vertical extent of the convective interior becomes large enough to have transient convection. Figure 4.5 shows that the transition from squares to spokes pattern and the occurrence of the connected structure are happening at lower Ra_H in the rigid case than in free slip case. A better understanding of the transition between convective planforms requires to characterize them in details.

4.3.2 How to determine the horizontal organization of a convective planform?

This paragraph establishes the scaling laws governing the horizontal structure of the convective system. More specifically, we attempt to build scaling laws linking Ra_H to the average spacing between instabilities (D_{avg}) , as well as to the number of instabilities per unit of area (*N*). We assume a power-law dependency on Ra_H , which is reasonable since it is valid for temperature and Nusselt number for a large variety of convective systems (Grossmann et Lohse, 2000; Parmentier et Sotin, 2000). Therefore, dimensionless scaling laws can be written as

$$D_{avg}/d = C_D R a_H^{\beta_D}, \tag{4.3}$$

$$N = C_N R a_H^{\beta_N}, \tag{4.4}$$



FIGURE 4.6 – (a), Evolution of the number of instabilities per unit of area (*N*) with the Rayleigh-Roberts number (Ra_H) for both free slip (red) and rigid (black) boundary conditions. The selection of instabilities is done with the algorithm based on the temperature defined in text, with $p_C = 0.3$. Error bars correspond to the time variability of the number of instabilities in the numerical experiments. The solid lines are the best fit of the data, $N = 0.0501Ra_H^{0.232}$ for free slip boundary conditions and $N = 0.0326Ra_H^{0.289}$ for rigid boundary conditions. (b) Evolution of the average spacing between instabilities (D_{avg}) with the Rayleigh-Roberts number (Ra_H) for both free slip (red) and rigid (black) boundary conditions. The solid lines are the best fit of the data, $D_{avg} = 5.796Ra_H^{-0.143}$ for free slip boundary conditions and $D_{avg} = 9.056Ra_H^{-0.192}$ for rigid boundary conditions.

where C_D , C_N , β_D and β_N are dimensionless constants.

The key point to determine these scaling laws is to build a set of criteria that allows for a robust selection of instabilities. We first consider the horizontal planform located at mid-depth, for which we draw the closed contour lines of value $T_{mean} - p_C(T_{mean} - T_{min})$, where p_C is a constant, T_{mean} and T_{min} are the average and minimum temperature of the planform, respectively. This criterion was used by previous studies (Labrosse, 2002; Galsa et Lenkey, 2007) to detect instabilities in Rayleigh-Bénard system. We mark off as an instability, every point corresponding to the lowest temperature within each area enclosed by a contour line. From this selection we measure D_{avg} as the distance between two nearest instabilities averaged over all instabilities and over time. We also measure the temporally averaged N without distinguishing the instabilities on the sides from the ones located far from the sides. We tested that if we count the instabilities on the sides of the box as a half, this has only a minor effect on the results.

To illustrate the output of the detective method, Figure 4.6 shows the evolution of N and D_{avg} , for $p_C = 0.3$. As explained later, the results do change with p_C but the main conclusions remain the same. At low Ra_H , N and D_{avg} are almost constant, in agreement with laboratory experiments by Carrigan (1982) and Limare *et al.* (2015). This is a specific aspect of the spoke pattern : the efficiency of heat transfer increases, following the increase of Ra_H , without increasing the number of instabilities. This is surprising, since a well-known result is that the

Chapitre 4. Description des motifs de convection pour un fluide chauffé volumiquement

efficiency of heat transfer in a convective fluid increases where the spatial scale decreases. Therefore the spoke cells use a different physical process to increase the amount of heat advected. We observe in figure 4.2c-f that the typical size of a spoke does not change with increasing Ra_H , however the size of the centre downwelling is decreasing (figure 4.3). Thus the spoke shape enables to increase the heat transfer efficiency, without decreasing the convective cell size. As expected, where transient convection begins, N increases with Ra_H , while D_{avg} decreases with Ra_H . The results are well-fitted by the scaling laws 4.3 and 4.4 (figure 4.6). There are however some slight disagreements at $Ra_H \sim 10^{5.5}$, probably because there is a combination of transient convection and a sheet-like structure. One may note that we do not use the algorithm for the numerical experiments exhibiting a sheet-like structure, since instabilities are not distinct. A surprising result is that the power-law depends on the boundary conditions, unlike the scaling laws governing the thermal structure of the TBL (Vilella et Kaminski, 2015). Since this result may be an artefact caused by the selection of instabilities, now we investigate the effect of changing p_C .

The study presented in figure 4.6 provides the best-fit parameters, namely β_N , β_D , C_N and C_D , from the scaling laws 4.3 and 4.4, and obtained for a specific value p_C . Now we reproduce this study for p_C spanning from 0.1 to 0.7, a conservative range since instabilities have a lower temperature than average, and $p_C = 0.7$ implies a selection with only very few instabilities. For each value of p_C we fit the resulting D_{avg} and N, as it was done in figure 4.6, hence we obtain a set of best-fit parameters. We report the evolution of the best-fit parameters with p_C in figure 4.7 (solid lines).

We first observe that, except for some specific values of p_C , β_N and β_D depend on the boundary conditions. The difference between the two power-laws is ~ 0.05 , which is not negligible, indicating that is a robust feature. The second observation is that scaling laws highly depend on p_C , for instance β_N , for rigid boundary conditions, ranges from 0.1 to 0.3 (solid black line, figure 4.7a). This result is valid for both boundary condition and for both N and D_{avg} . The variations of the bestfit parameters with p_C are larger for rigid boundary conditions than for free slip. Since instabilities appear to be more closely spaced in the rigid case than in the free slip one (figure 4.2 and figure 4.4), the selection of instabilities is probably more sensitive to the value of p_C in the rigid case. The large variations of the best-fit parameters imply large uncertainties on scaling laws, therefore it requires to limit the range of plausible value for p_C . Figure 4.8 shows the coefficient of determination (R^2), for each fit, as a function of p_C . Clearly the value of R^2 decreases sharply, for the case with rigid boundary conditions, at $p_C > 0.45$. The observation of the selection of instabilities for $p_C > 0.45$ shows that an increasing proportion of instabilities are not selected, since the criterion becomes too restrictive. We assure the relevance of our selection of instabilities by limiting our study to $0.1 < p_C < 0.45$. In this whole range, at a given p_C , β_N and β_D differ with the boundary conditions (see figure 4.7), a possible reason may be our choice of the horizontal planform. Instabilities are generated at the TBL and sink into the convective interior. Howe-



FIGURE 4.7 – Evolution of the best-fit parameters, for both the number of instabilities per area (C_N and β_N) and the average spacing between instabilities (C_D and β_D) as we illustrate in figure 4.6, with the parameter defining the selection of instabilities (p_C) for both free slip (red) and rigid (black) boundary conditions. The selection of instabilities is done for a planform located at mid-depth (solid lines) or just beneath the top thermal boundary layer (dashed lines).



FIGURE 4.8 – Evolution of the coefficient of determination (R^2) with the parameter defining the selection of instabilities (p_C) , for both the number of instabilities per area (a) and the average spacing between instabilities (b), considering free slip (red) or rigid (black) boundary conditions.

ver, the thickness of the TBL varies with Ra_H and with the boundary conditions (Vilella et Kaminski, 2015), hence to consider the planform at mid-depth, for any value of Ra_H and any boundary conditions, may induce a biased number of instabilities. When the planform is located close to the TBL, the algorithm enables the selection of small instabilities that do not sink to the bottom of the box. When the planform is located at mid-depth, because instabilities come from the TBL, the algorithm would only select instabilities that extend, at least, from the TBL to mid-depth. We study again the evolution of the best-fit parameters with p_C , except we choose the planform located just beneath the TBL, and we report the result in figure 4.7 (dashed lines). The depth of the planform modifies the results, but it only partially modifies our conclusions, since β_D and β_N still differ with the boundary conditions for any p_C .

It appears difficult to pick a specific value of p_C , since we have no reason to distinguish a specific selection of instabilities. However, we can decide to select only instabilities with a large vertical extent. In this case we expect to obtain a single scaling law for any depth below the TBL. We note that at $p_C \sim 0.3$, for both boundary conditions, β_N and C_N are independent of the planform location (figure 4.7), whereas this result is also valid at $p_C \sim 0.25$ for β_D and C_D . At $p_C \sim 0.3$, the scaling laws are only slightly affected by the depth where the planform is located, hence we select this value as our favourite value. This result agrees well with the study of Parmentier et Sotin (2000), conducted for free slip boundary conditions. They counted the number of instabilities per area as a function of Ra_H in a planform located at mid-depth for $10^8 < Ra_H < 3 \times 10^9$, and in a planform located just beneath the TBL for $3 \times 10^6 < Ra_H < 10^8$. They found that the best-fit power-law for N is 0.24, at low Ra_H , and 0.21, at greater Ra_H , which is close to the 0.232 exponent we find for $p_C \sim 0.3$. They imputed the two different exponents to the decrease of numerical resolution, whereas our results suggest that this is caused by the different



FIGURE 4.9 – Compilation of the best-fit of the number of instabilities per area (a) and the average spacing between instabilities (b) as a function of the Rayleigh-Roberts number, for p_C ranging from 0.1 to 0.45 and for both free slip (red) or rigid (black) boundary conditions. The selection of instabilities is done in a planform located at mid-depth. Blue lines correspond to the case where $p_C = 0.3$.

planform locations.

Because of the large variations of the best-fit parameters as a function of p_C (figure 4.7), it is not straightforward to assess uncertainties on scaling laws caused by uncertainties on the selection of instabilities. We report in figure 4.9 the whole set of best-fit obtained for $0.1 < p_C < 0.45$. Despite the strong variations of the best-fit parameters with p_C , the scaling laws exhibit reasonable variations, in particular for $Ra_H < 10^8$ where the variations of N and D_{avg} with p_C are minor. However the amplitude of variations increases with Ra_H (figure 4.9), for instance at $Ra_H = 10^9$ the variations due to p_C , illustrated by the black and red areas, are as large as the variations due to the boundary conditions, i.e. the gap between the two areas. The selection of instabilities is more sensitive to p_C at high Ra_H than at low Ra_H , indeed with increasing p_C the selection of instabilities becomes more and more restrictive. Therefore β_N decreases with p_C (figure 4.7a) to balance the lower number of selected instabilities, while C_N increases (figure 4.7b) since at lower Ra_H the number of selected instabilities is not affected by the change of p_C .

4.3.3 What do these scaling laws tell us?

In the introduction we asked to which extent can we trust the value of Ra_H obtained from N. To answer this question, we now apply our results to a coreless planetary body internally heated and cooled from above. Geophysical measurements of its topography and gravity field should enable to detect the number of instabilities extending from the near surface to the deep interior. However, because of surface processes, such as tectonic movements or volcanoes, and compositional heterogeneities, only the strongest instabilities, with a large vertical extent, would be detected. In our results, the study of a planform located at mid-depth implicitly guarantees the selection of instabilities with a large vertical extent, since they originate from the top TBL and are continuous all the way to mid-depth.



FIGURE 4.10 – A zoom of the temperature field located at mid-depth obtained when the velocity boundary conditions are rigid, at the left for $Ra_H = 10^9$ and at the right for $Ra_H = 10^6$. The blue color corresponds to cold material while red is hot. The color scale depends on the maximum and minimum temperature value of the planform. We also show the selection of instabilities with the yellow circles, for $p_C = 0.1$ at the top and for $p_C = 0.45$ at the bottom. We provide the value of the number of instabilities per unit of surface (*N*) obtained for the whole planform and temporally averaged.

We gauge the method reliability by establishing the maximum uncertainty that is expected for rigid boundary conditions, because it has higher variation of Nwith p_C (figure 4.9). We select different cases corresponding to the extreme values of Ra_H (i.e. $Ra_H = 10^6$ and $Ra_H = 10^9$) and p_C (i.e. $p_C = 0.1$ and $p_C = 0.45$, which are the two limits for the range of value previously determined as relevant). Figure 4.10 reports the temperature field as well as the selection of instabilities obtained for the 4 different cases. At $Ra_H = 10^6$ varying p_C does not induce any variation in N. Instabilities are easily distinguishable because they have a regular cylindrical shape associated to a strong temperature variation. At $Ra_H = 10^9$, the selection of instabilities clearly changes, since N varies from 9.3 to 14.4 for $p_C = 0.1$ and $p_C = 0.45$, respectively. For a low value of p_C , the algorithm selects few instabilities with a small temperature difference, that are probably not buoyant, and, more importantly, that do not have a temporal and spatial continuity. These features would not be detected at the surface as an instability. We also note that at high Ra_H and for high p_C few large and buoyant instabilities are not selected. In fact at increasing Ra_{H} , instabilities become more and more irregular and are affected by fast lateral movements. As a consequence, their temperature difference is less important than at lower Ra_H (figure 4.9), therefore making their detection more difficult.

At a given convective state of the planetary body, the number of detected instabilities would change with the detecting method. For instance, the resolution of the gravity and topography fields would affect the results. At first order, we assume that changing the detecting method is equivalent to change the value of p_C . With this assumption, we can then assess a range of possible values for Ra_H resulting to a specific detected number of instabilities. Imagine we detect in a planetary body 6 instabilities per unit of surface. We can then estimates the Ra_H of the planetary body by looking in the figure 4.9 the possible values of Ra_H for $log_{10}(N = 6) = 0.78$. That yields to the estimation $Ra_H = 10^{7.8} - 10^{8.25}$ for the planetary body. Therefore, this method provides a useful way to obtain, at first order, the Rayleigh number of a convective planetary body.

4.4 Conclusion

We performed 3D numerical simulations of an infinite Prandtl number layer of fluid heated from within, assuming the Boussinesq approximation. The first step was to investigate the convection planform evolution with the Rayleigh-Roberts number, which is the only controlling parameter. For both free slip and rigid boundary conditions, we found a similar evolution beginning with a conductive state. With increasing Ra_H conduction is inefficient for supporting the heat transport, thus convection begins with a square-shaped pattern. Instabilities progressively become star-shaped close to the surface, with six small branches coming from their centres and pointing towards other instabilities. These star-shaped instabilities are naturally associated with a hexagon pattern. Branches create connection between instabilities, so, at greater Ra_H , a sheet-like structure appears composed of cylindrical instabilities linked by sheets. These patterns are stable with time, and at $Ra_H \sim 10^{5.5}$, the exact value depends on boundary conditions, convection becomes transient as suggested by Howard (1966). We observed again the occurrence of a connected structure at $Ra_H > 10^8$, however we cannot know if it is the last pattern of convection.

Transient convection begins for the same thickness of the TBL whatever the boundary conditions. This indicates the role of the convective interior in the determination of the planform of convection. For a thin convective interior, instabilities are constrained by the bottom of the box, hence they are stable over time. As Ra_H increases, the thickness of the convective interior increases, until obtaining transient convection.

We then established scaling laws linking Ra_H to D_{avg} and to N. Instabilities do not have a specific definition, so we varied the way of selecting the instabilities and we found large variations of the resulting scaling laws. However, in most of cases the power-laws differ with the boundary conditions and with the depth of the chosen planform. It is therefore difficult to select one instability definition rather than another one. To solve this issue , we decided to propose a range of plausible scaling laws, which includes uncertainties due to the selection of instabilities. This result is less strong than a single scaling law, but is closer to the reality and can illustrate the temporal variability of the population of instabilities.

CHAPITRE 5 Introduction

Sommaire

5.1	Propos	préliminaires	
	5.1.1	La transition de l'état de spin	
	5.1.2	Les contraintes observationnelles	
5.2	Introd	uction	
5.3	Density models		
	5.3.1	Average spin state of iron in ferropericlase	
	5.3.2	Iron content in ferropericlase and perovskite	
	5.3.3	Density as a function of temperature and pressure 97	
5.4	Mantle	e convection model 98	
5.5	Result	s	
5.6	Discus	sion	

5.1 Propos préliminaires

Les chapitres précédents ont élaboré une description détaillée et complète d'un système convectif comportant uniquement du chauffage interne. D'un point de vue théorique, c'est toujours enrichissant d'améliorer notre connaissance sur les mécanismes fondamentaux qui régissent un système dynamique. Cependant, la distinction entre la physique et les mathématiques réside dans l'application de cette connaissance. En physique, les études théoriques ont pour finalité d'être utilisées pour modéliser ou expliquer un phénomène naturel, c'est pourquoi nous avons proposé quelques exemples d'applications. À ce stade, la différence de complexité entre un système naturel et notre système convectif de référence est trop importante pour nous permettre de réaliser des applications de grandes envergures. Nous devons progressivement enrichir notre système de référence de nouveaux éléments, mais ce chemin est long et tortueux.

Une alternative est d'utiliser les méthodes utilisées dans l'étude de ce système de référence, à des systèmes incluant toute la complexité des systèmes naturels. Nous n'avons pas la prétention de comprendre et analyser tous les mécanismes gouvernant leur dynamique. Par contre, ces études fournissent de précieuses informations qui, une fois couplées à des résultats de sismologie, de géochimie, etc,



FIGURE 5.1 – Représentation d'une maille élémentaire du ferropériclase. Les sphères blanches représentent l'ion O^{2-} situé dans les nœuds du cristal et les sphères rouges représentent l'ion Fe²⁺ ou l'ion Mg²⁺ situé dans les lacunes octaédriques. Une des lacunes est illustrée par le polyèdre bleu. D'après Lin *et al.* (2013).

permettent de discriminer plusieurs modèles possibles. Ici, nous étudions la transition de l'état de spin que subit le fer présent dans le ferropériclase. Ce phénomène a été découvert théoriquement par Fyfe (1960) et observé dans les minéraux composant le manteau terrestre par Badro *et al.* (2003) et Badro *et al.* (2004). Les études numériques sur ce sujet (Bower *et al.*, 2009; Shahnas *et al.*, 2011) ont révélé un effet fort de la transition de l'état de spin sur la dynamique du manteau inférieur. Les résultats semblent en contradiction avec les observations sismologiques, telles que le modèle PREM (Dziewonski et Anderson, 1981). Notre étude réévalue les implications de la transition de l'état de spin, et réconcilie les observations sismologiques, les expériences de pétrologie expérimentales et les modèles numériques de la dynamique terrestre.

5.1.1 La transition de l'état de spin

Dans ce chapitre nous modélisons donc la transition de l'état de spin que subit le Fe²⁺ présent dans le ferropériclase. Le ferropériclase est un minéral avec une structure cristalline de type cubique à faces centrées (figure 5.1), un ion O^{2-} est présent à chaque nœud alors que des ions Fe²⁺ ou Mg²⁺ sont disposés dans les lacunes octaédriques. La structure électronique de l'ion Fe²⁺, qui nous intéresse ici, est 1s2 2s2 2p6 3s2 3p6 4s0 3d6, et la dernière sous couche est dégénérée due à son environnement électronique (figure 5.2). La sous couche 3d se décompose donc en deux niveaux énergétiques, le niveau énergétique le plus bas avec 3 orbitales et le plus haut avec 2 orbitales. Les 6 électrons présents dans cette sous couche peuplent en priorité la couche avec la plus faible énergie, afin de minimiser l'énergie totale du système. À pression et température ambiantes, les électrons remplissent d'abord toutes les orbitales et ensuite forment des paires d'électrons. Ce qui nous donne l'état de Spin Haut (SH) comportant dans la couche énergétique basse une paire d'électrons et deux électrons célibataires, et deux électrons



FIGURE 5.2 – Schéma de la sous couche électronique 3d du Fe²⁺ présent dans une lacune octaédrique du ferropériclase. À gauche l'état de spin haut stable à pression ambiante, et à droite l'état de spin bas stable pour des pressions plus élevées. Les flèches correspondent aux 6 électrons peuplant cette sous couche électronique.

célibataires dans la couche énergétique haute.

Lorsque la pression augmente, la quantité d'énergie séparant les deux souscouches augmente également. À un certain point l'écart d'énergie entre les deux sous couches devient égal à l'énergie nécessaire pour appareiller deux électrons. Par conséquent, l'état avec 3 paires d'électrons peuplant la sous couche de plus faible énergie devient stable, cet état est appelé l'état de Spin Bas (SB). Le passage de l'état SH à SB s'appelle la transition de l'état de spin. Cette transition s'accompagne donc du dépeuplement de la couche énergétique la plus haute, qui est également la plus éloignée. Ceci cause donc une réduction de volume du Fe²⁺ et donc du cristal dans son ensemble, vu que le cristal est capable de se comprimer plus facilement. La conséquence directe est donc une augmentation de la densité du ferropériclase. Le changement de la configuration électronique du Fe²⁺ couplé à sa réduction de volume entraîne une variation de nombreuses propriétés. En premier lieu le module d'élasticité isostatique et le coefficient de dilatation thermique, qui mesurent comment le volume du cristal réagit, respectivement, à la pression et à la température. En second lieu les propriétés telles que la viscosité, la diffusivité thermique, la conductivité thermique et électrique sont modifiées, mais cela ne semble pas suffisant pour impacter la dynamique. L'effet principal de la transition de l'état de spin est, a priori, sur le volume du ferropériclase.

5.1.2 Les contraintes observationnelles

Une contrainte forte sur la structure et la composition du manteau inférieur résulte de l'étude des ondes sismiques. Le temps de trajet des ondes P et S procure, après inversion, un modèle 1D des vitesses des ondes P et S dans le manteau. Ces profiles, combinés à l'hypothèse que les processus dans le manteau sont adiabatiques, astreint le profil moyen de densité (Dziewonski et Anderson, 1981). La mesure directe des vitesses sismiques est possible et elle a été réalisée à l'aide de diverses méthodes (Crowhurst *et al.*, 2008; Antonangeli *et al.*, 2011; Murakami *et al.*, 2012). Cependant la période et la longueur des ondes utilisées en laboratoire sont très éloignées de celles que possèdent les ondes sismiques (figure 5.3). Il est donc nécessaire d'extrapoler les résultats expérimentaux, et ce processus est source d'erreurs qui s'additionnent aux incertitudes expérimentales. Le profil de densité moyen semble donc un moyen plus sûre pour discriminer différents modèles entre eux. L'utilisation de ces observations sismiques se fait en trois étapes :

- On suppose une composition et structure pour le manteau inférieur.
- On effectue des expériences de pétrologie, à haute pression et haute température, pour obtenir les propriétés thermodynamiques de cette composition.
- On couple ces propriétés thermodynamiques à une équation d'état, afin d'obtenir un modèle de densité que l'on peut comparer au profil de densité issu de PREM (Dziewonski et Anderson, 1981).

La composition du manteau que l'on suppose au départ est déterminante, et plusieurs compositions peuvent expliquer les observations. Nous avons indiqué dans l'introduction que le modèle pyrolitique était généralement admis, cependant Ricolleau *et al.* (2009) et Murakami *et al.* (2012) montrent que le modèle pyrolitique ne possède pas un profil de densité en accord avec PREM. Mais il existe plusieurs paramètres qui peuvent réconcilier les profils de densité issus du modèle pyrolitique et de PREM. Murakami *et al.* (2012) ont changé la proportion de ferropériclase et de perovskite présente dans la pyrolite afin d'obtenir un bon accord entre mesures et observations. Le profil de température est également un paramètre important, les études considèrent traditionnellement le géotherme de Brown et Shankland (1981) alors que ce profil sous-estime très probablement la température du manteau (Deschamps et Trampert, 2004). Il y a également le par-



FIGURE 5.3 – Comparaison des fréquences et longueurs d'onde utilisées dans les dispositifs expérimentaux mesurant la vitesse des ondes élastiques à haute pression et les ondes sismiques. D'après Lin *et al.* (2013).

titionnement en fer, que nous étudions ici, qui permet de modifier la densité de l'ensemble. Globalement les variations de densité associées aux changements de ces paramètres sont assez faibles, de l'ordre de 2% (Jackson, 1998), le profil de densité est donc une contrainte assez bonne sur la composition et la structure du manteau inférieur.

Les études numériques précédentes se sont focalisées sur des modèles avec des variations de densité importantes. Bower *et al.* (2009) considèrent une augmentation de densité de 2.3% tandis que Shahnas *et al.* (2011) étudient différent modèles possédant des augmentations de densité comprises entre 1.6% et 5.4%. Les implications sur la dynamique sont éventuellement dramatiques avec, par exemple, un retournement complet du manteau prédit par Shahnas *et al.* (2011) ou une augmentation de température de 15% (Bower *et al.*, 2009). Ces résultats font totalement abstraction des observations qui contraignent le manteau, une différence de densité de 5% par rapport à PREM est impossible. La transition de l'état de spin peut augmenter la flottabilité des panaches et des panneaux plongeants, donc augmenter les amplitudes de densité à une profondeur donnée, mais le profil de densité moyen suit nécessairement PREM.

Dans cette étude nous avons attribué une grande importance à suivre les contraintes observationnelles. Les résultats sont donc moins dramatiques que pour Bower *et al.* (2009) et Shahnas *et al.* (2011), mais plus en accord avec les observations.

Earth and Planetary Science Letters 417 (2015) 57-66

Spin state transition and partitioning of iron : Effects on mantle dynamics

Kenny Vilella^{*a*}, Sang-Heon Shim^{*b*}, Cinzia G. Farnetani^{*a*}, James Badro^{*a*,*c*}

^a Institut de Physique du Globe de Paris, Sorbonne Paris Cité, 75005 Paris, France

^b School of Earth and Space Exploration, Arizona State University, Tempe 85281, USA

^c Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne, CH-1015 Lausanne, Switzerland

Received 23 July 2014; received in revised form 17 December 2014; accepted 10 February 2015

Abstract

Experimental studies at pressure and temperature conditions of the Earth's lower mantle have shown that iron in ferropericlase (Fp) and in Mg-silicate perovskite (Pv) undergoes a spin state transition. This electronic transition changes elastic and transport properties of lower mantle minerals and can play an important role on mantle convection. Here we focus on the geodynamic effect of the spin-induced density modifications caused by the volume collapse of Fp and by the variation of Fe partitioning (K^{Pv-Fp}) between Fp and Pv. Since K^{Pv-Fp} behaviour strongly depends on alumina content we explore two end-member compositions, one Al-bearing (with 4.7 wt% Al₂O₃ in Pv) and the other Al-free. We use the theoretical model by Sturhahn et al. (2005) to calculate the spin configuration of Fp over a range of pressure-temperature conditions, and use experimental results to model Fe partitioning. We then apply the Mie-Grüneisen-Debye equation of state to obtain the density of the mineral assemblages. The calculated amplitude of the density change across the spin state transition is less than 1%, consistent with experiments by Mao et al. (2011); our density profiles differs from PREM by less than 1.5%. The spin-induced density variations are included in a three dimensional convection code (Stag3D) for a compressible mantle. We find small temperature differences between models with and without spin state transitions, since over billions of years the relative temperature difference is less than 50 K. However the relative RMS vertical velocity difference differs by up to 15% for an Al-free system, but only by less than 6% for an Al-bearing system.

5.2 Introduction

The widely accepted pyrolitic compositions consist of approximately 18 vol% ferropericlase (Mg,Fe)O (hereafter called Fp), 75 vol% Mg-silicate perovskite (Mg,Fe)(Al,Si)O₃ (hereafter called Pv), and 7 vol% Ca-silicate perovskite CaSiO₃ (hereafter called CaPv) (Ringwood, 1982; Irifune, 1994; Irifune *et al.*, 2010). Even if the uncertainties in the composition of the lower mantle are considered, current experiments at high pressure and temperature, coupled with equations of state (Jackson, 1998; Ricolleau *et al.*, 2009; Murakami *et al.*, 2012) cannot fully explain density and seismic velocities inferred by seismic models such as PREM (Dziewonski et Anderson, 1981). The disagreement reveals the large uncertainties that still affect composition, temperature, and physical properties in the lower mantle.

Fyfe (1960) suggested that the electronic structure of Fe^{2+} in the octahedral coordination can change at high pressure. For example, the 3d orbitals of Fe²⁺ in Fp, which is surrounded by six oxygen atoms, split in two different groups with different energies : three orbitals (t_{2g}) with a lower energy and two orbitals (e_{2g}) with a higher energy (see Li et al., 2004, Fig. 4). Following the Hund's rule, at ambient condition, the stable state has two unpaired electron in two t_{2g} orbitals, two unpaired electrons in two e_{2g} orbitals, and two paired electrons in a t_{2g} orbital. This configuration is the high spin (HS) state. With compression, the splitting of the two energy levels can increase and at some point the energy gap becomes large enough to stabilize the state with six paired electrons in the t_{2g} orbitals. This configuration is the low spin (LS) state. Sherman (1988) and Burns (1993), with a crystal field theory, as well as Cohen et al. (1997), with a band theory, predicted the occurrence of such change in spin state at the pressure-temperature conditions of the Earth's lower mantle. Badro et al. (2003) found a spin state transition in Fp at a pressure range $\sim 60-70$ GPa and at ambient temperature. At higher temperatures, theoretical models (Sturhahn et al., 2005; Tsuchiya et al., 2006) predicted that the spin state transition should occur at higher pressure and over a broad range of pressure, as confirmed by Lin et al. (2007a). Iron spin state transitions occur also in Pv (Badro et al., 2004; Jackson et al., 2005), but it is more complex because of two different crystallographic sites, an octahedral and a dodecahedral, and two different oxidation state of iron, Fe²⁺ and Fe³⁺, (see Lin et al., 2013; Badro, 2014, and reference therein).

Spin state transitions alter the elastic and transport properties (Jackson *et al.*, 2006; Lin *et al.*, 2006, 2007*b*, 2013; Crowhurst *et al.*, 2008; Goncharov *et al.*, 2008, 2009; Antonangeli *et al.*, 2011; Ammann *et al.*, 2011) thereby affecting mantle dynamics. Moreover the lower mantle density is modified by the volume collapse due to the lower volume of Fe^{2+} in LS state, and by the spin state induced modification of Fe partitioning between Fp and Pv. Bower *et al.* (2009) and Shahnas *et al.* (2011) calculated the property changes induced by the Fe²⁺ spin state transition in Fp, and conducted numerical simulations to quantify the effect on mantle dynamics. Both studies found increased mantle temperature and enhanced flow velocity. However, Bower *et al.* (2009) assumed a pure Fp composition and Shah-

nas *et al.* (2011) neglected Fe partitioning, so that both studies use a simplified lower mantle composition.

Here we use a theoretical model (Sturhahn *et al.*, 2005) coupled to an equation of state (Jackson et Rigden, 1996) to build a density model including the Fe²⁺ spin state transition in Fp. The dominant chemical components (e.g., FeO, MgO, MgSiO₃, Fe₂O₃, Al₂O₃, etc.) are included in order to provide realistic thermodynamic properties of the mineral assemblages (Fp, Pv, and CaPv). We apply an equation of state to these minerals to obtain their density as a function of pressure and temperature. This approach enables us to explore different compositions and to calculate the corresponding density profile.

A new aspect of our work is to consider the spin state induced Fe partitioning between Pv and Fp (K^{Pv-Fp}). Recent experiments have shown different behaviours of K^{Pv-Fp} for an olivine composition (Kobayashi *et al.*, 2005; Sinmyo *et al.*, 2008; Auzende *et al.*, 2008; Sakai *et al.*, 2009) and pyrolitic compositions (Irifune, 1994; Kesson *et al.*, 1998; Wood, 2000; Murakami *et al.*, 2005; Irifune *et al.*, 2010; Sinmyo et Hirose, 2013). Therefore we study two end-member compositions, an Al-bearing and an Al-free pyrolite, with their corresponding Fe partitioning. We assume that in the Al-free system Fe partitioning follows the same behaviour as in the olivine composition. The calculated density profile in the lower mantle fits PREM density (Dziewonski *et Anderson*, 1981) within 1.5%, using Brown *et* Shankland (1981) geotherm, and it is consistent with high temperature experiments (Mao *et al.*, 2011). The density models are then included in the convection code Stag3D (Tackley, 1996) to quantify the long term impact of the Fe spin state transition on mantle convection.

5.3 Density models

This paragraph presents how we calculate : (a) the average spin sate of Fe^{2+} in Fp, (b) the iron content of Fp and Pv, considering Fe partitioning, and (c) the density variations induced by the spin state transition for two end-member lower mantle compositions.

5.3.1 Average spin state of iron in ferropericlase

Following Sturhahn *et al.* (2005) we calculate the average Fe²⁺ spin configuration in Fp by minimizing the Helmholtz free energy : F = U - TS. Note that by considering the Helmholtz free energy, rather than the Gibbs free energy, Sturhahn *et al.* (2005) implicitly neglect work variations during the spin state transition. Only LS state Fe²⁺ ions interact with each other, thus the internal energy is

$$U = -NJ_{\rm LS}\eta_{\rm LS}^2 + N(\eta_{\rm LS}E_{\rm LS} + \eta_{\rm HS}E_{\rm HS}),$$
(5.1)

where *N* is the number of Fe²⁺ in Fp, E_{LS} and E_{HS} are the energy levels of LS state and HS state, respectively, J_{LS} is the coupling LS state-LS state, η_{LS} and η_{HS} the fractions of Fe²⁺ in LS state and HS state, respectively, with $\eta_{LS} + \eta_{HS} = 1$. The entropy of the crystal can be written as

$$S = -k_B N \left[\eta_{\rm LS} \ln \left(\frac{\eta_{\rm LS}}{g_{\rm LS}} \right) + \eta_{\rm HS} \ln \left(\frac{\eta_{\rm HS}}{g_{\rm HS}} \right) \right], \tag{5.2}$$

where k_B is the Boltzmann constant, g_{LS} and g_{HS} are the energy degeneracies of the electronic configuration. The free energy is then :

$$F = N \left\{ -J_{\rm LS} \eta_{\rm LS}^2 + \eta_{\rm HS} E_{\rm HS} + \eta_{\rm LS} E_{\rm LS} + k_B T \left[\eta_{\rm LS} \ln \left(\frac{\eta_{\rm LS}}{g_{\rm LS}} \right) + \eta_{\rm HS} \ln \left(\frac{\eta_{\rm HS}}{g_{\rm HS}} \right) \right] \right\}.$$
(5.3)

To find the equilibrium state at a given condition we solve

$$\frac{\partial F}{\partial \eta_{\rm LS}} = 0. \tag{5.4}$$

By using the normalized equation, we express Eq. 5.4 as :

$$0 = \eta_{\rm LS} \left[1 + \frac{g_{\rm HS}}{g_{\rm LS}} \exp(-2\beta J_{\rm LS} \eta_{\rm LS}) \exp(\beta (E_{\rm LS} - E_{\rm HS})) \right] - 1,$$
(5.5)

with $\beta = k_B T$. J_{LS} depends on the iron content and volume, E_{LS} and E_{HS} depend on volume (Sturhahn *et al.*, 2005), the remaining parameters are assumed to be constant. The solution of Eq. 5.5 provides the fraction of LS state as a function of iron content, volume, and temperature. For further details on the parameters values please refer to Sturhahn *et al.* (2005).

The next step is to convert volume to pressure using the Mie-Grüneisen-Debye equation of state (Jackson et Rigden, 1996) and the parameters listed in Tables 5.1 and 5.2. At ambient temperature we use the third order Birch-Murnaghan equation of state :

$$P = \frac{3K_{T0}}{2} \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{7/3} - \left(\frac{V_0}{V} \right)^{5/3} \right]$$

$$\left\{ 1 - \frac{3}{4} (4 - K'_{T0}) \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right] \right\} + \Delta P_{th},$$
(5.6)

while the effect of temperature is added via a thermal pressure :

$$\Delta P_{th} = \frac{\gamma(V)}{V} [E_{th}(V,T) - E_{th}(V,T_0)], \qquad (5.7)$$

where the subscript zero indicates ambient conditions for volume V_0 , temperature T_0 , isothermal bulk modulus K_{T0} and its pressure derivative K'_{T0} . The Grüneisen parameter depends on volume :

$$\gamma(V) = \gamma_0 \left(\frac{V}{V_0}\right)^q,\tag{5.8}$$

where *q* is assumed to be a constant. The vibrational energy is calculated from the Debye model,

$$E_{th} = \frac{9nRT^4}{\theta^3} \int_0^{\theta/T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx,$$
 (5.9)

n is the number of atoms per formula unit, *R* is the gas constant, and θ is the Debye temperature :

$$\theta = \theta_0 \exp\left(\frac{\gamma_0 - \gamma(V)}{q}\right). \tag{5.10}$$

Experimental results at ambient temperature show that K_{T0} for FeO could change with the spin state, however the pressure range of the LS state is too small to determine K_{T0} precisely (see Lin *et al.*, 2013, for more details). At higher temperature, Mao *et al.* (2011) found a K_{T0} difference within the error bars. The change of K_{T0} for FeO due to spin state transition seems to have a minor effect on the lower mantle density, therefore we use the same value for both spin states. This set of equations enables us to calculate the average spin state as a function of iron content, temperature and pressure.

5.3.2 Iron content in ferropericlase and perovskite

Fe partitioning is measured with the Fe-Mg exchange coefficient between Pv and Fp,

$$K^{\mathrm{Pv-Fp}} = \frac{\left(\frac{\mathrm{Fe}}{\mathrm{Mg}}\right)_{\mathrm{Pv}}}{\left(\frac{\mathrm{Fe}}{\mathrm{Mg}}\right)_{\mathrm{Fp}}} = \frac{\frac{1}{x_{\mathrm{Fp}}} - 1}{\frac{1}{x_{\mathrm{Pv}}} - 1},$$
(5.11)

where x_{Pv} and x_{Fp} are the molar iron concentration in Pv and Fp, respectively.

Experimental studies have shown that Fe partitioning depends strongly on Al content, perhaps because of the coupled substitution of Al and Fe³⁺ in Pv and absence of such substitution for Fp (Navrotsky, 1999). For the Al-free system, the solid lines in Figure 5.4a highlight two different behaviours : Kobayashi *et al.* (2005) and Sinmyo *et al.* (2008) found an almost constant partitioning with pressure, whereas Auzende *et al.* (2008) and Sakai *et al.* (2009) showed that Fe partitioning decreases dramatically at ~70 GPa, the pressure at which the spin state transition occurs in Fp. For the Al-bearing system, Figure 5.4b shows the main experimental data as compiled by Irifune *et al.* (2010). A sharp increase of the partitioning at ~25 GPa (Irifune, 1994; Wood, 2000) is followed by a sharp decrease at ~40 GPa. At higher pressure the results are conflicting : Kesson *et al.* (1998) and Murakami *et al.* (2005) measured a constant partitioning, while Sinmyo et Hirose (2013) found an increase of Fe partitioning above 90 GPa.

Given the striking difference between the Al-free (Figure 5.4a) and the Albearing (Figure 5.4b) cases, we build two end-member models for lower mantle composition. Our first composition, called Al-free, has a classical lower mantle mineral volume proportion : 75% Pv, 18% Fp and 7% CaPv, with 8 wt% FeO in the



FIGURE 5.4 – Fe partitioning between Pv and Fp versus pressure. (a) For the Alfree system the experimental results (solid lines) are from : Kobayashi *et al.* (2005) (purple); Sinmyo *et al.* (2008) (orange); Auzende *et al.* (2008) (green); Sakai *et al.* (2009) (black). (b) For the Al-bearing system data by : Irifune *et al.* (2010) (open circles); Irifune (1994) (open squares); Wood (2000) (squares); Kesson *et al.* (1998) (circles); Murakami *et al.* (2005) (open triangles); Sinmyo et Hirose (2013) (triangles). In both panels the blue dashed line represents the constant partitioning used in the Reference-models without spin state transition, whereas the red dashed line represents the variable K^{Pv-Fp} used in our models with spin state transition (see text).

bulk composition. All iron is assumed to be Fe^{2+} . Our second composition, called Al-bearing, differs from the previous one by the addition of 4.7 wt% Al₂O₃ and by assuming that 60% of iron in Pv is Fe^{3+} , the remaining is Fe^{2+} . Ferrous iron enters into Pv as $FeSiO_3$, ferric iron enters into Pv as $FeAlO_3$. If there is an excess of Fe^{3+} , Fe_2O_3 enters into Pv, whereas if there is an excess of Al, Al₂O₃ enters into Pv.

These compositions are used in the models that include the spin state transition and a variable partitioning coefficient, as shown in Figure 5.4 (red dashed lines), as well as in the corresponding reference models (called Reference Al-free and Reference Al-bearing), which are calculated without spin state transition and with a constant partitioning coefficient, as shown in Figure 5.4 (blue dashed lines). The underlying assumption is that the change of partitioning is caused by the spin state transition. Badro *et al.* (2005) provide a thermodynamic argument for the Al-free system, and find that

$$K^{\mathrm{Pv-Fp}} = K_0 \exp\left(-\frac{\Delta V(P - P_{tr})}{RT}\right),\tag{5.12}$$

where $\Delta V = 1.36 \text{ cm}^3/\text{mol}$ is the FeO volume difference between HS and LS states (Fei *et al.*, 2007) and P_{tr} is the pressure of the spin state transition. The red dashed line in Figure 5.4a is calculated using Eq. 5.12, which is in agreement with experimental results by Auzende *et al.* (2008) and by Sakai *et al.* (2009). For the Al-bearing system, we use a fit of experimental results by Irifune *et al.* (2010).

Compounds	K_{T0} (GPa)	$V_0 ({\rm cm}^3{ m mol}^{-1})$
MgO	160 ^a	11.25 ^a
FeO (LS)	150 ^b	10.82 ^b
FeO (HS)	150	12.18 ^b
MgSiO ₃	261 ^c	24.43 ^c
$0.85 Mg SiO_3$ - $0.15 Fe SiO_3$	259 ^c	24.58 ^c
0.915MgSiO ₃ -0.085Fe ₂ O ₃	237 ^d	24.95 ^d
0.90MgSiO ₃ -0.10FeAlO ₃	262 ^e	24.80 ^e
0.90MgSiO ₃ -0.10Al ₂ O ₃	244 ^e	24.66 ^e
CaSiO ₃	236 ^f	27.45 ^f

TABLE 5.1 – Isothermal bulk modulus (K_{T0}) and volume (V_0) at ambient conditions for several compounds.

^a Speziale *et al.* (2001).

^b Fei *et al.* (2007).

^c Lundin *et al.* (2008).

^d Catalli *et al.* (2010).

^e Catalli *et al.* (2011).

^f Shim *et al.* (2000*b*).

5.3.3 Density as a function of temperature and pressure

We calculate the density of each mineral using the average spin configuration and the Mie-Grüneisen-Debye equation of state detailed in Eq. 5.6 (standard values are listed in Tables 5.1 and 5.2). The composition of each mineral species changes with pressure and temperature because of variations in Fe partitioning. The initial volume and bulk modulus (V_0 and K_{T0}) are obtained by linear interpolation between the Mg- and Fe- end-members. We then calculate the density of the rock as the weighted average of constituent mineral densities.

The relative density difference ($\Delta \rho = 100(\rho_{\text{Spin}} - \rho_{\text{Ref}})/\rho_{\text{Spin}}$) between the mo-

TABLE 5.2 - Equation of state parameters for lower mantle minerals : Perovskite(Pv), Ferropericlase (Fp) and Ca-Perovskite (CaPv).

Parameter	Pv	Fp	CaPv
K'_{T0}	3.7 ^a	4 ^b	3.9 ^c
θ_0 , (K)	1100 ^a	673 ^b	1000 ^c
γ_0	1.4 ^a	1.41 ^b	1.92 ^c
9	1.4 ^a	1.3 ^b	0.6 ^c

^a Fiquet *et al.* (2000).

^b Jackson et Niesler (1982).

^c Shim *et al.* (2000*a*).

del with spin state transition and variable K^{Pv-Fp} and the corresponding reference model is shown for Al free (Figure 5.5a) and Al bearing (Figure 5.5b) compositions. As found by theoretical and experimental studies, the spin state transition is sharp at low temperature and broad at high temperature. At 1200 < T < 1800 K, our transition is sharper than experimental results (Komabayashi et al., 2010; Mao et al., 2011), but the difference vanishes at higher temperatures (T > 2000 K) appropriate to the lower mantle. The amplitude of the density change is ~0.8% for Al-free system and only ~0.5% for Al-bearing system, this difference is due to the Fe partitioning. In Figure 5.5b the peak of $\Delta \rho$ at 35 GPa is due to Fe partitioning and clearly reflects the K^{Pv-Fp} trend shown is Figure 5.4b. Finally, we note that the calculated density changes are comparable with those found in experimental results, although a slight mismatch still exists. For example, at T = 2000 K we find the same density change as Mao et al. (2011), but our transition occurs at a pressure 10 GPa lower. This seems acceptable, given that a similar mismatch is observed between experimental studies (for a review see Lin et Tsuchiya, 2008). At a given pressure, the density change varies with temperature, so the temperature derivative of density is affected by the spin state transition. Therefore, the thermal expansivity, defined as $\alpha = (-1/\rho)(\partial \rho/\partial T)_p$, is also affected by the spin state transition. At lower mantle temperatures, α is locally increased up to ~40%. We also note that the mismatch between our density profile and PREM density, using Brown et Shankland (1981) geotherm, is less than 0.6% for reference models. Furthermore we conducted a number of simulations (not shown here) to gauge the effect of uncertainties in experimental results and found that they induce only small variations (less than 0.1%) in relative density differences, suggesting that our results are robust.

5.4 Mantle convection model

We include the calculated lower mantle density in a three dimensional geodynamic model. The code Stag3D (Tackley, 1996) in cartesian geometry solves the non-dimensional equations governing mantle convection, assuming the truncated anelastic approximation. The equations are : conservation of mass

$$\nabla \bullet (\overline{\rho} \underline{v}) = 0, \tag{5.13}$$

conservation of momentum

$$\nabla \bullet \underline{\sigma} - \nabla p = Ra\overline{\rho\alpha}T'\widehat{z}, \tag{5.14}$$

conservation of energy

$$\overline{\rho}C_p \frac{DT}{Dt} = -Di_s \overline{\alpha}\overline{\rho}T' v_z + \nabla \bullet (\overline{k}\nabla T) + \overline{\rho}H + \frac{Di_s}{Ra}\underline{\sigma} : \underline{\dot{\varepsilon}}.$$
(5.15)

 \overline{k} is the depth-dependent thermal conductivity, $\overline{\alpha}$ the depth-dependent thermal expansivity and $\overline{\rho}$ the depth-dependent density. T is temperature, $T' = T - T_{ref}$


FIGURE 5.5 – Relative density difference (%) between the model with spin state transition and the reference model (without spin state transition), as a function of pressure and temperature, for (a) Al-free, and (b) Al-bearing compositions. The geotherm (black line) is from our numerical simulations, and the dotted area corresponds to the range of possible lower mantle temperatures by Deschamps et Trampert (2004), inferred from seismic models combined with experimental mineralogy data.

the temperature anomaly with respect to the adiabatic temperature T_{ref} , p the dynamic pressure, \underline{v} the velocity vector, H the internal heating rate, C_p the specific heat capacity, $\underline{\sigma}$ the deviatoric stress tensor, $\underline{\dot{\varepsilon}}$ the strain rate tensor, $\underline{\hat{z}}$ is a unit vector in the vertical direction. The truncated anelastic approximation neglects the variations of temperature due to the dynamic pressure, therefore we use the dynamic pressure rather than the total pressure. The two non-dimensional numbers are the surface dissipation number $Di_s = \alpha_s gD/C_p$ and the Rayleigh number $Ra = \rho g \alpha \Delta T D^3 / \eta \kappa$ (see Table 5.3). To include our lower mantle density models (ρ_{model}) we must modify the equation of conservation of momentum, since the thermal expansivity depends on depth and spin state transition (i.e., on temperature). We modify the equation of momentum as follows

$$\nabla \bullet \underline{\underline{\sigma}} - \nabla p = Ra \frac{\Delta \rho_{model}}{\Delta \rho_{th}} \widehat{z}, \qquad (5.16)$$

where $\Delta \rho_{th} = \alpha \Delta T$ and $\Delta \rho_{model} = \rho_{model}(T_{ref}, p) - \rho_{model}(T, p)$. With this formulation the thermal expansivity does not appear explicitly. We approximate mantle viscosity via the following equation,

$$\eta(T,d) = \eta_0 \exp(d\Delta\eta_d) \exp\left(\frac{13.8}{T+0.88}\right),$$
(5.17)

Symbol	Parameter	Value	Dimensionless
			value
Ra_0^{a}	Surface Rayleigh number	10^{7}	N/A
Di _s ^b	Surface dissipation number	1.18	N/A
$ ho_0$	Surface density	3300 kg m^{-3}	1.
g	Gravity	9.81 m s ⁻²	1.
α_0	Surface expansivity	$5 \times 10^{-5} \text{ K}^{-1}$	1.
ΔT	Superadiabatic temperature	2500 K	1.
d	Mantle thickness	2890 km	1.
κ_0	Surface thermal diffusivity	$7 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$	1.
$C_{P,0}$	Surface heat capacity	$1200 \ \mathrm{J \ kg^{-1} \ K^{-1}}$	1.
η_0	Reference viscosity	1.4×10^{22} Pa s	1.
H	Internal heating rate	$7.38 \times 10^{-12} \text{ W kg}^{-1}$	15.5 ^c
Δho_{410}	Density change at 410 km	198 kg m ⁻³	0.06
Δho_{660}	Density change at 660 km	462 kg m^{-3}	0.14
γ_{660}	Clapeyron slope at 410 km	-2.5 MPa K^{-1}	-0.066
<i>¥</i> 660	Clapeyron slope at 660 km	2.5 MPa K^{-1}	0.066

 TABLE 5.3 – Mantle parameters used in the numerical simulations.

^a $Ra_0 = \rho g \alpha \Delta T D^3 / \eta \kappa$.

^b $Di_s = \alpha_s g D / C_p$.

^c Corrected for Cartesian geometry, see Tackley (1996) for further details.

providing a four orders of magnitude variation with temperature and a tenfold increase from the surface to the core mantle boundary (CMB), for $\Delta \eta_d = 2.3$. At 660 km depth the viscosity increases by a factor 30 due to the phase transition. Numerical values of the Clapeyron slope and of the density change induced by the phase transitions at 660 km and 410 km depth are given in Table 5.3.

The modelled domain is divided in $1024 \times 1024 \times 128$ elements, providing a spatial resolution of ~22.6 km. The boundary conditions at top and bottom are free slip velocity and constant temperature (300 K and 4000 K, respectively), the side boundaries are periodic. The temperature field at equilibrium (i.e. after the equivalent of 15 Ga) is used as initial condition for the different numerical simulations. The four models are run for further 20 Ga and we avoid any influence of the initial condition by conducting time averages only over the last 7 Ga.

5.5 Results

Figure 5.6 shows snapshots of the anomaly of potential temperature for the Albearing case and its corresponding reference case. Convection in both snapshots seems to be identical. Some cold downwellings are stopped at 660 km depth and create avalanches that reach the lower mantle (Figure 5.7). Hot upwellings are also stopped at 660 km depth and form secondary plumes that reach the surface



Potential temperature anomaly (K)

FIGURE 5.6 – Potential temperature anomaly $(T - T_m)$, where T_m is the average temperature) for the Al-bearing case with the spin state transition (a) and without (b), the two isosurfaces (-450 K and 200 K) highlight downwellings and upwellings. For graphical reasons the cold isosurface (blue) is transparent at shallow depths and the temperature scale is truncated.

(Figure 5.7).

The temperature field is averaged horizontally and temporally in order to calculate the relative temperature difference between models with and without spin state transition. The temperature difference (Figure 5.8a) is almost constant in the whole mantle and varies sharply close to the surface and to the CMB. For the Albearing composition, the temperature increases by $\sim 0.6\%$, equivalent to a ~ 20 K difference at ~2500 km depth. The temporally averaged surface heat loss for the reference case is 42.7 TW, in the range of value inferred by Jaupart et al. (2007), and increases to 43.2 TW with the spin state transition. Therefore the spin state transition slightly increases the efficiency of heat transfer. For the Al-free composition, the effects are similar but more significant with a temperature increase of ~1.6%, equivalent to a ~50 K difference at ~2500 km depth. The temporally averaged surface heat loss for the reference case is 42.7 TW and 43.8 TW with the spin state transition, this $\sim 2.5\%$ difference is much smaller than the uncertainty for the Earth (the range of plausible values by Jaupart et al. (2007) is 43-49 TW). Since the temperature profile is close in both models, the corresponding relative density difference (Figure 5.8b) reflects the density change due to the spin state transition found in Figure 5.5. In the Al-free case the relative density difference increases at \sim 100 GPa and deeper, but decreases in the lowermost \sim 150 km (125 < P < 135 GPa) because the sharp temperature rise in the thermal boundary



FIGURE 5.7 – Vertical cross-section of the anomaly of potential temperature (top) and the density change induced by the spin state transition (bottom) for a typical slab (left) and a typical plume (right). Temperature anomaly is defined as $T - T_m$, where T_m is the average temperature. The density change is equivalent to the spin state : blue is HS state, red is LS state. These results are extracted from the Al-free case.

layer reduces the extent of LS state (as shown by the geotherm in Figure 5.5). In the Al-bearing case the relative density increases at ~40 GPa, is almost constant to ~100 GPa and then increases to the CMB.

Figure 5.7 shows a slice of the temperature field and the density change induced by the spin state transition. In plumes the LS to HS transition occurs at greater depth, so that the surrounding mantle is in LS state while the plume center is in HS state. This lateral density difference increases plume buoyancy and should enhance the upwelling velocity. In slabs the HS to LS transition occurs at shallower depth, thus the surrounding mantle is in HS state while the slabs center is in LS state. The increased lateral density difference should enhance the downwelling velocity. We first study the RMS vertical flow velocity by separating upwelling and downwelling material with a criterion solely based on the vertical velocity. Note that only in the next paragraph we will focus on plumes and slabs by introducing a further criterion based on the excess of temperature. Figure 5.9a shows that for the Al-free system the spin state transition modifies the vertical velocity of both upwelling and downwelling material throughout the whole mantle. In particular, the RMS vertical velocity difference for upwelling is 5–15% faster in the lowermost mantle (i.e., D>2300 km), it remains constant (~5% faster) throughout the



FIGURE 5.8 – (a) Horizontally and temporally averaged temperature difference relative to reference (%) for the Al-free case (orange line) and for the Al-bearing case (purple line). (b) A typical relative density difference horizontally averaged (%) for the Al-free case (orange line) and for the Al-bearing case (purple line). The pressure scale is extracted from numerical simulations.

lower mantle and decreases only in the upper mantle. For downwellings the relative velocity difference is 4–17% faster throughout the lower mantle, reaching a peak value of ~17% at ~2400 km. For the sum of the two contributions the relative velocity difference increases with depth, reaching ~15% at the CMB. For the Al-bearing system (Figure 5.9b), the effects of the spin state transition are similar. The main difference bears on the amplitude of the velocity difference, which is less significant for this composition (up to ~6% for upwellings, up to ~8% for downwellings and up to ~6% for the whole convective fluids) in agreement with the lower density change (Figure 5.8b). Surprisingly the relative velocity difference does not seem to be affected by the change of Fe partitioning at 30 GPa.

Note that averages for downwellings and upwellings material, so defined by the vertical velocity, cannot provide detailed information on slabs and plumes, which represent only a small fraction of the whole convective material. To focus on plumes and slabs we need to use a temperature based criterion (Labrosse, 2002). A point (x, y, z) belongs to a plume if :

$$T(x, y, z) > T_{mean}(z) + p_{h,T}[T_{max}(z) - T_{mean}(z)]$$
(5.18)

or to a slab if :

$$T(x, y, z) < T_{mean}(z) + p_{c,T}[T_{min}(z) - T_{mean}(z)],$$
(5.19)



FIGURE 5.9 – Horizontally and temporally averaged relative RMS vertical velocity difference (%) versus depth (km). For both Al-free (a) and Al-bearing (b) system, we represent the downwelling velocity (blue lines), the upwelling velocity (red lines), selected as negative or positive flow velocity, respectively, and the velocity of the whole convective fluid (black lines). The pressure scale is extracted from numerical simulations.

where T_{mean} , T_{min} and T_{max} are the averaged, the minimum and the maximum temperature at a given depth, respectively, $p_{c,T} = p_{h,T} = 0.45$ are constants, the chosen value is from Galsa et Lenkey (2007). We apply this algorithm across all the lower mantle, except for the last 50 km close to the bottom boundaries, since slabs do not penetrate the thermal boundary layers. For the Al-free system (Figure 5.10a), with the spin state transition plumes are faster (up to 20%) in the lowermost mantle (D<2100 km) but become slower (up to -10%) once they reach shallow depths (700<D<2100 km), whereas slabs are faster (up to 30%) in the whole lower mantle. For the Al-bearing system (Figure 5.10b) the trends are similar, but the relative velocity difference is reduced to ~15%, showing how important is to include Al in lower mantle composition models. We find that the effect of the spin state transition is to increase slabs and plumes vertical velocities at depths greater than 2100 km (i.e., P>100 GPa). These results show that the simple reasoning presented above, which predicts the vertical velocity solely on the local lateral density difference, is valid at first order but some disagreements remain. For instance plumes and slabs are affected by the spin state transition at the top of the lower mantle, whereas for this pressure-temperature condition there is no lateral density difference. This result is not surprising, since at infinite Prandtl number the whole convective fluid is immediately affected by a local change. Slabs could be faster in the whole mantle because their deepest part, which is undergoing the spin state transition, is able to



FIGURE 5.10 – Horizontally and temporally averaged relative RMS vertical velocity difference (%) versus depth (km). For both Al-free (a) and Al-bearing (b) system, we represent the impact of spin state transition in the lower mantle on slabs (blue lines) and on plumes (red lines), selected via the method explained in the text. The pressure scale is extracted from numerical simulations.

pull down the whole slab.

We also calculated the averaged time required to travel the lower mantle depth. We found that the spin state transition slightly slows down plumes (2.8% for Albearing system and 0.3% for Al-free), but accelerates slabs (8.3% for Albearing system and 14.1% for Al-free). Overall, for an Alfree composition, with the spin state transition the RMS vertical velocity is faster in the lower mantle, which implies an enhanced convection. However, the effects of spin state transition on temperature are small compared with our uncertainties. For example the plausible geotherm inferred by Deschamps et Trampert (2004) has an uncertainty of ~500 K, which is large compared with the 50 K difference caused by the spin state transition. For an Albearing composition the amplitude of the relative change of average temperature and velocity is lower and becomes not significant. When we focus on slabs and plumes, rather than study the average vertical flow velocity, we find that the effect of the spin state transition is to enhance their vertical velocity.

5.6 Discussion

We conducted numerical simulations of mantle convection with and without the density change induced by the spin state transition in Fp. A novel aspect of our approach is to consider that iron content in Fp varies with pressure and temperature, as indicated by recent experiments on iron partition coefficient (K^{Pv-Fp}) between Fp and Pv. Since the experiments show a different behaviour of K^{Pv-Fp} depending on alumina content, we explored two end-member mantle compositions, one Al-free (i.e., 75% Pv, 18% Fp, and 7% CaPv) and one Al-bearing, with 4.7 wt% Al₂O₃. The advantage of calculating lower mantle density using experimental measurements of single phase minerals is that we can consider several cases, each with a plausible mantle mineralogy. Our calculated density profiles fit PREM density within 1.5%, and are consistent with recent high temperature experimental data (Komabayashi et al., 2010; Mao et al., 2011). We have shown that for plausible lower mantle compositions, the global density increase of ~0.7% induced by the spin state transition in Fp has a minor effect on mantle temperature. More precisely, spatially and temporally averaged mantle temperatures differ by less than 50 K between models with and without spin state transition, whereas the total surface heat loss differs by less than 2.5%. For Al-free composition, flow velocity is significantly affected by the spin state transition, since RMS vertical velocity of downwellings and upwellings differ by ~17% and ~15%, respectively. However, for Al-bearing composition, the average flow velocity is moderately affected (differ by less than $\sim 6\%$).

Bower *et al.* (2009) found a more important effect of the spin state transition on mantle temperatures (up to 10%) and on the vertical flow velocity (up to 25% while we find up to 15% for Al-free system). There are two reasons for this difference. First, Bower *et al.* (2009) explored the effect of a 2–4% density increase. This value is appropriate for pure Fp (Lin et Tsuchiya, 2008), but it is certainly excessive for a lower mantle composition with ~20% Fp. The second reason concerns the range of acceptable values for mantle potential temperature. Petrological studies (e.g., Putirka (2005) and references therein) indicate that mantle potential temperature is around 1550 K, whereas Bower *et al.* (2009) geotherm is only at ~1050 K. The role of the spin state transition is thereby enhanced, since at low temperatures the transition is sharper.

Numerical simulations by Shahnas *et al.* (2011) include depth dependent properties and consider a plausible lower mantle composition. Shahnas *et al.* (2011) calculate Fp density anomalies caused by the spin state transition, but do not explore different compositions, nor the role of spin driven Fe partitioning. Their density change induced by the spin state transition is relatively high (~1.8%), if we consider that recent experiments find a 1.5–2% density variation for pure Fp (Mao *et al.*, 2011; Lin *et al.*, 2013). Shahnas *et al.* (2011) simulations without postperovskite (PPv) can be compared to our results and indeed show a minor effect on mantle temperature (with a maximum of 3 % variation at 1000 km depth) and on the radial mass flux. Only for more extreme models, which reduce to a pure Fp lower mantle, and in presence of the PPv transition, the authors conclude that mantle mixing is enhanced. Shahnas *et al.* (2011) conclusions are similar to ours, however they did not show the effect on vertical flow velocity, since velocity variations were only inferred from lateral density changes.

In the following we discuss under which conditions it is possible to infer fluid

velocity uniquely from local lateral density changes. The simple relation between ascent velocity (V_z) and lateral density change ($\Delta \rho$) was shown by Batchelor (1954) for a steady laminar plume :

$$V_z \propto \frac{r_p^2 \Delta \rho g}{\eta},\tag{5.20}$$

where r_p is the plume radius. However, this expression is valid under a number of restrictive conditions : First, it is valid only far from the source and the interfaces; Kaminski et Jaupart (2003) have shown that the velocity is constant only at a distance from the interface corresponding to five times the plume radius. For example, if $r_p = 100$ km, Eq. 5.20 holds 500 km above the CMB and 500 km below the 660 km discontinuity. Second, it is valid only if the source of buoyant material provides a constant flux over time. Clearly this condition is not satisfied for mantle convection, where time varying plate velocities induce a varying influx at subduction zones. Third, to obtain this constant ascent velocity, we need to make the assumption of zero pressure on the sides of the plume conduit. This implies that the conduit must be straight and continuous, because bending of the conduit induces compression and decompression (Garel *et al.*, 2014). It is clear that mantle plumes and slabs are not straight and continuous. Thus the simple relation between lateral $\Delta \rho$ and vertical flow velocity may have limited applications in the Earth's mantle.

Since the presence of alumina in the lower mantle is widely accepted, the Albearing system is the most plausible composition. For this composition, the density change induced by the spin state transition in Fp is small (< 0.5%) as well as its impact on dynamics. This is coherent with seismic observations that do not exhibit any mantle layering at the depth range corresponding to the spin state transition. Our results confirm that there is no disagreement between seismic observations and experimental results at high pressure-temperature conditions. The enhanced convection in the lowermost mantle is a robust consequence of the spin state transition, that could affect the stability of the two Large Low Shear Velocity Provinces (LLSVP) beneath Africa and the Pacific (Garnero et McNamara, 2008). The nature of LLSVP is subject of debates, some authors claim a thermal origin (Schuberth et al., 2009; Davies et al., 2012), while most of studies introduce a chemically distinct reservoir (Deschamps et Tackley, 2008, 2009; Li et al., 2014) related to recycled basaltic crust or iron rich primitive material. The significant increase of slabs and plumes velocity in the deepest part of the mantle may imply a destabilization of such reservoirs. However, this suggestion is speculative because of the poor knowledge of the lowermost mantle coupled to the complexity of mantle dynamics.

Finally, we note that we did not explore all the implications of spin state transitions, hence our conclusions could change with the addition of new features. First, we consider only the spin state transition in Fp, whereas spin state transitions also occurs in Pv and in PPv. To the best of our knowledge there is no experimental study at high pressure and temperature for these two minerals, thus it is difficult to build a robust model of spin state transitions. We also choose to not include the PPv in our numerical simulations, unlike Shahnas *et al.* (2011), because the coexistence of Fp, Pv and PPv with their corresponding Fe partitioning (see Lin *et al.*, 2013; Badro, 2014, and reference therein) would add more complexities. Second, Fe partitioning could have some major consequences on the Earth's mantle, since iron content changes dramatically the radiative thermal conductivity (Goncharov *et al.*, 2010), the electrical conductivity (Dobson et Brodholt, 2000), and may change the viscosity, which is a key parameter for dynamics (Naliboff et Kellogg, 2007). Ammann *et al.* (2011) find a negligible effect of spin state transitions on viscosity, but the effect of Fe partitioning on viscosity is unknown. Figure 5.4 showed that important variations of Fe partitioning are likely to occur in the lower mantle, therefore in a future study we will explore the implications of a viscosity change associated to a Fe partitioning change.

Fe partitioning may also be important to understand yet unexplained observations, for example Ricolleau *et al.* (2009) highlighted that a typical pyrolitic composition has a density profile with a steeper slope than PREM density; this disagreement cannot be resolved by considering uncertainties of both PREM and experimental results and requires another explanation. Cobden *et al.* (2009) used mineral physics constraints with their corresponding uncertainties to interpret seismic data. They concluded that the seismic observations can be explained with a superadiabatic geotherm combined to a gradual change of the bulk chemistry. They suggested an increase of the MORB proportion with depth, and they indicated that a Fe-enrichment is also possible. One can speculate that a higher superadiabatic geotherm coupled to an increase of Fe partitioning due to temperature could provide an explanation to seismic observations. Understanding to which extent Fe partitioning affects the lower mantle requires further work and experimental results on effects of temperature, alumina content and bulk iron (Mao *et al.*, 1997; Sakai *et al.*, 2009; Irifune *et al.*, 2010).

Acknowledgements

We thank Rhodri Davies and an anonymous reviewer for their thorough and constructive comments that improved the paper. We also thank John Brodholt for his editorial handling. Numerical computations were performed on the S-CAPAD platform, IPGP, France and using HPC resources from GENCI-IDRIS (Grant 2013-047033). This is IPGP contribution 3612.

Chapitre 6

Perspectives et conclusions

Sommaire

6.1	Extension des lois d'échelle théoriques 109		
	6.1.1	Géométrie sphérique	
	6.1.2	Convection Rayleigh-Bénard	
	6.1.3	Notre Graal : Combinaison de chauffage par le bas et de chauffage volumique	
6.2	Concl	usion	

6.1 Extension des lois d'échelle théoriques

6.1.1 Géométrie sphérique

Notre objectif est d'étendre les lois d'échelle théoriques présentées dans le chapitre 3 à des cas plus complexes. La première étape est d'étudier le système convectif en géométrie sphérique, et pour cela Frédéric Deschamps nous a fourni l'évolution temporelle des champs de vitesse et de température utilisés dans Deschamps *et al.* (2012). Nous suivons ici le cadre théorique qu'ils ont proposé en le couplant à celui que nous avons élaboré.

La géométrie sphérique possède un nombre sans dimension supplémentaire (f), qui mesure l'importance relative entre le rayon du noyau et le rayon de la sphère :

$$f = \frac{r_c}{r_c + 1},\tag{6.1}$$

où r_c est le rayon du noyau adimensionné par l'épaisseur de la couche de fluide. La principale conséquence du changement de géométrie est que, dorénavant, le flux de chaleur à la surface dépend de f. Pour illustrer cette dépendance considérons une couche de fluide horizontale d'épaisseur d et de surface unitaire. La quantité adimensionnée d'énergie produite en dessous de cette unité de surface est égale à Hd, donc le flux de chaleur à la surface est Hd. Maintenant, considérons une sphère de rayon d, la quantité d'énergie produite est $4/3\pi d^3H$, tandis que la surface de la sphère est de $4\pi d^2$, donc le flux de chaleur à la surface est réduit à Hd/3. Or la structure thermique de la couche limite thermique (CLT) dépend du flux d'énergie qu'elle transporte. Par conséquent, si nous voulons comparer des cas avec différentes valeurs de f, alors nous devons corriger H afin d'obtenir un même

flux de chaleur à la surface, ce qui est équivalent à une même production de chaleur. Nous choisissons de redimensionner la production d'énergie interne afin de la rendre équivalente au même système mais en géométrie Cartésienne. Soit deux sphères concentriques de rayon D et R_c avec $D > R_c$, et soit ϕ le flux de chaleur à la surface. Par conservation, l'énergie produite dans le volume s'échappe par le haut, d'où

$$4\pi D^2 \phi = \frac{4}{3}\pi H (D^3 - R_c^3). \tag{6.2}$$

Avec une géométrie Cartésienne équivalente, donc une couche de fluide d'une épaisseur $D - R_c$, nous avons simplement que $\phi = H_{VH}(D - R_c)$, où H_{VH} est le taux de production de chaleur interne équivalent. En couplant ces deux équations nous obtenons que,

$$H_{VH} = \frac{H}{3} \left(\frac{D^2 + DR_c + R_c^2}{D^2} \right) = \frac{H}{3} (1 + f + f^2), \tag{6.3}$$

et pour simplifier les relations nous posons,

$$a_f = \frac{1+f+f^2}{3}.$$
 (6.4)

Dans la suite de notre étude, nous considérons les propriétés du système équivalent possédant une géométrie Cartésienne, les paramètres suivants sont donc transformés en

$$Ra_{VH} = a_f Ra_H, \tag{6.5}$$

$$\Delta T_{VH} = a_f \Delta T_H. \tag{6.6}$$

Ce système équivalent devrait vérifier les lois d'échelle théoriques proposées dans le chapitre 3, qui se résument dans ce cas à,

$$\frac{\Delta T_{TBL}}{\Delta T_{VH}} = 0.5 \left(\frac{Ra_{H,cr}}{Ra_{VH}}\right)^{1/4},\tag{6.7}$$

$$\frac{\delta_{TBL}}{d} = \left(\frac{Ra_{H,cr}}{Ra_{VH}}\right)^{1/4}.$$
(6.8)

On confronte donc maintenant ces lois d'échelle avec les simulations numériques réalisées par Deschamps *et al.* (2012) pour des conditions limites de vitesses libres. À l'exception de la géométrie, les simulations que nous avons présenté dans les chapitres 3 et 4 sont très proches de ce jeu de simulations. Par conséquent, nous transcrivons ici uniquement les paramètres importants des différents modèles dans la table 6.1. La détermination de la CLT que nous avons proposé dans le chapitre 3 est appliquée à toutes les simulations numériques, et nous reportons les résultats ainsi que les lois d'échelle théoriques dans la figure 6.1. Encore une fois l'accord entre les lois théoriques et les résultats sont très bons, ce qui démontre la

f	Ra_{VH}	Résolution
0.40	3.3×10^{4}	$128 \times 384 \times 64$
0.55	1.62×10^4	$128 \times 384 \times 64$
0.55	$1. \times 10^{5}$	$128 \times 384 \times 64$
0.55	3.2×10^{5}	$128 \times 384 \times 64$
0.55	$5. \times 10^{5}$	$128 \times 384 \times 64$
0.55	$1. \times 10^{6}$	$128 \times 384 \times 64$
0.55	3.2×10^6	$128 \times 384 \times 64$
0.55	$5.6 imes 10^6$	$128 \times 384 \times 64$
0.55	$1. \times 10^{7}$	$128 \times 384 \times 64$
0.55	3.2×10^7	$128 \times 384 \times 64$
0.55	$1. \times 10^{8}$	$128 \times 384 \times 128$
0.70	$5. \times 10^{5}$	$128 \times 384 \times 64$
0.70	$1. \times 10^{6}$	$128 \times 384 \times 64$
0.70	3.2×10^6	$128 \times 384 \times 64$
0.70	$1. \times 10^{7}$	$128 \times 384 \times 64$
0.70	3.2×10^{7}	$128 \times 384 \times 64$
0.70	$7. \times 10^8$	$192 \times 576 \times 128$

TABLE 6.1 – Récapitulatif des principaux paramètres des simulations numériquesutilisées ici et effectuées par Deschamps et al. (2012).

robustesse de notre cadre théorique. Après avoir corrigé H des effets géométriques, il semble que la géométrie n'influe pas sur les résultats. Les observations réalisées en géométrie Cartésienne restent valides pour la géométrie sphérique :

- Pour $Ra_{VH} < 10^5$, les simulations de Deschamps *et al.* (2012) couplées à notre détermination de la CLT suivent bien les lois d'échelle théoriques. En revanche, lorsque Deschamps *et al.* (2012) ont considéré le profil moyen de température, il n'était pas possible de décrire toutes les données avec une unique loi d'échelle.
- Les fluctuations temporelles associées à δ_{TBL} sont plus importantes que celles associées à ΔT_{TBL} .

Par contre, pour $Ra_{VH} > 10^7$, il y a une légère différence entre les résultats et la loi théorique concernant ΔT_{TBL} . Cela n'est pas un effet de la géométrie vu que certaines données sont pour f = 0.70 et d'autres pour f = 0.55. L'écart est toutefois relativement faible et ne remet pas en question notre prédiction.

6.1.2 Convection Rayleigh-Bénard

La convection Rayleigh-Bénard correspond à une couche horizontale de fluide confinée entre deux parois isothermes. La température haute est plus froide que la température basse, ce qui induit nécessairement un transfert de chaleur du bas vers le haut. La dynamique du système est décrite, lorsque l'on considère un



FIGURE 6.1 - (a) Saut de température adimensionné subit par la couche limite thermique en fonction du nombre de Rayleigh-Roberts en échelle logarithmique. Nous reportons les données numériques obtenues par Deschamps *et al.* (2012), ainsi que nos lois d'échelle théoriques (lignes noires). (b) Épaisseur adimensionnée de la couche limite thermique en fonction du nombre de Rayleigh-Roberts en échelle logarithmique.

fluide incompressible, isovisqueux et possédant un nombre de Prandtl infini, par le nombre de Rayleigh,

$$Ra = \frac{\rho \alpha g \Delta T d^3}{\eta \kappa},\tag{6.9}$$

qui représente le rapport entre la poussée d'Archimède et les forces visqueuses multipliées par la diffusivité thermique. Plus simplement, *Ra* quantifie la vigueur de la convection. Pour de faibles valeurs de *Ra*, le fluide est statique et le transport de chaleur se fait par conduction. À partir d'une certaine valeur seuil, nommée nombre de Rayleigh critique (Ra_{cr}), la convection commence, et le transport de chaleur à l'intérieur du fluide se réalise à l'aide d'instabilités issues des CLT situées en haut et en bas de la couche de fluide. En effet, la structure thermique du système est marquée par deux sauts abrupts de température aux deux extrémités du système, tandis que l'intérieur convectif possède une température constante. La structure géométrique du système possède une symétrie horizontale qui se reflète dans sa dynamique. Effectivement les deux CLT sont équivalentes d'un point de vue thermique avec un saut de température égal à $0.5\Delta T$. Par conséquent, pour ce système convectif, nous pouvons seulement établir des lois d'échelle reliant l'épaisseur de la CLT au nombre de Rayleigh.

Townsend (1964) a montré que $Nu \sim Ra^{1/3}$, or Nu est le rapport entre le flux de chaleur à la surface (ϕ) et le flux conductif, $k\Delta T/d$. Le flux de chaleur à la surface s'exprime, comme nous l'avons indiqué dans le cadre du chauffage interne, comme

$$\phi \sim k \frac{\Delta T_{TBL}}{\delta_{TBL}} = 0.5 k \frac{\Delta T}{\delta_{TBL}}.$$
(6.10)

On obtient donc finalement que $\delta_{TBL} \sim Ra^{-1/3}$. Vu que les deux CLT sont équivalentes, leur épaisseur devrait être identique et suivre la loi suivante,

$$\delta_{TBL} = C_{\delta} dR a^{-1/3}, \tag{6.11}$$

 TABLE 6.2 – Récapitulatif des principaux paramètres des simulations numériques

 de la convection Rayleigh-Bénard utilisées. Pour chaque cas une simulation est

 réalisée avec des conditions limites de vitesses libres et l'autre pour des surfaces

 rigides.

$\log(Ra)$	Résolution	Aspect ratio
4	$512 \times 512 \times 64$	10/10
5	$512 \times 512 \times 64$	8/8
6	$384\times384\times192$	4/4
7	$256\times256\times256$	2/2

avec C_{δ} une constante inconnue.

Encore une fois nous considérons le système à sa limite de stabilité ($Ra = Ra_c$). Ra_c dépend des conditions limites : $Ra_c = 657.5$ pour des conditions de vitesses libres imposées sur les parois haute et basse, alors que $Ra_c = 1707.8$ dans le cas de surfaces rigides. À $Ra = Ra_c$ nous supposons que les deux CLT occupent la totalité de la couche du fluide. Autrement dit pour $Ra = Ra_c$, on a $\delta_{TBL} = 0.5d$, nous pouvons donc évaluer la constante C_{δ} à $0.5Ra_{cr}^{-1/3}$, induisant la loi théorique suivante,

$$\delta_{TBL} = 0.5d \left(\frac{Ra_{cr}}{Ra}\right)^{1/3}.$$
(6.12)

Moore (2008) a également proposé une loi d'échelle théorique, mais d'une part il y a un facteur $0.5^{2/3}$ entre notre loi d'échelle et la sienne, d'autre part il ne confronte pas la loi théorique avec ses résultats numériques, c'est donc impossible de quantifier l'écart entre les deux.

Nous effectuons des simulations numériques afin de vérifier cette loi théorique pour une large gamme de Ra. Nous reprenons le modèle numérique présenté dans le chapitre 3, en suppléant le chauffage volumique par du chauffage par le bas, c.à.d. nous fixons la température en bas du système. La table 6.2 montre le Ra, la résolution et le rapport d'aspect utilisés dans les simulations numériques. Nous devons adapter la détermination de la CLT à ce nouveau système convectif. Pour la couche limite du haut, nous utilisons le profil maximum de température, qui, pour rappel, illustre la température maximale à chaque profondeur, et dont l'utilisation a été validée dans le cas du chauffage volumique. Par symétrie, nous caractérisons la couche limite du bas avec le profil minimum de température, c.à.d. la température minimale à chaque profondeur. Les différents profils de température sont représentés dans la figure 6.2a. Nous observons qu'effectivement la structure thermique possède une forte symétrie. Pour le système convectif possédant seulement du chauffage interne, la température sous la CLT est constante, c'est pourquoi l'utilisation de la seconde dérivée spatiale du profil de température est judicieuse. Pour la convection Rayleigh-Bénard, le profil de température est plus complexe, cette méthode devient donc inappropriée. Une inflexion de la température est visible



FIGURE 6.2 – Les données sont obtenues pour $Ra = 10^5$ et des conditions limites de surfaces rigides. (a) Les profils de température "minimum" (ligne bleue) et "maximum" (ligne rouge) correspondent, respectivement, à la plus basse et plus haute température adimensionnée. La ligne noire illustre le profil moyen de température. (b) Évolution de la première dérivée spatiale du profil de température minimum et maximum. Les carrées illustrent notre détermination de la couche limite thermique.

à la base de la CLT, nous préférons donc ici nous focaliser sur la première dérivée spatiale de la température, qui est équivalente à un flux de chaleur conductif. Nous fixons la base de la CLT au point où $\partial T/\partial z = 0$, plus précisément au point le plus proche de la paroi où $\partial T/\partial z$ est égale 0, avec une déviation autorisée de 5% de sa valeur minimale (figure 6.2b).

Nous appliquons cette définition de la CLT à nos simulations numériques et nous reportons les résultats dans la figure 6.3. Les résultats numériques sont en parfait accord avec les lois d'échelle théoriques (lignes solides), pour les deux jeux de conditions limites et pour toute la gamme de *Ra* étudiée. Ces simulations numériques sont préliminaires, d'où la gamme restreinte de *Ra* représentée. Toutefois nous pensons que les preuves apportées sont suffisantes pour avoir une confiance forte en l'applicabilité de notre cadre théorique à la convection Rayleigh-Bénard.

6.1.3 Notre Graal : Combinaison de chauffage par le bas et de chauffage volumique.

Le manteau terrestre ainsi que la plupart des manteaux planétaires possèdent deux sources de chaleur. Une source de chaleur volumique issue de la désintégration des isotopes radioactifs, et une source de chaleur par le bas provenant de la convection dans le noyau. Ce système est donc une combinaison des deux sys-



FIGURE 6.3 – Épaisseur adimensionnée de la couche limite thermique en fonction du nombre de Rayleigh-Roberts en échelle logarithmique. Le système convectif est ici en configuration Rayleigh-Bénard, le carré plein illustre donc la couche limite thermique du haut tandis que le carré vide celle du bas. Les lignes sont les lois d'échelle théoriques développées dans le texte.

tèmes de référence que nous avons précédemment étudiés. Vu que la structure thermique et la dynamique de ces systèmes de référence sont très différentes l'une de l'autre, il semble difficile de prédire le résultat de leur couplage. Nous ne possédons pas encore une connaissance suffisante du système pour proposer une théorie permettant d'expliquer les résultats numériques, nous résumons donc ici les observations et résultats de base qui vont nous permettre, à l'avenir, d'étendre notre cadre théorique à ce système convectif.

6.1.3.1 Présentation du système convectif

Nous considérons un système identique au système Rayleigh-Bénard étudié précédemment, auquel on ajoute du chauffage volumique avec un taux *H*. La dynamique de ce nouveau système est donc contrôlée par deux nombres sans dimension, le nombre de Rayleigh, issu du système sans source de chaleur interne, et le nombre de Rayleigh-Roberts, correspondant à une couche de fluide possédant uniquement du chauffage interne. Traditionnellement le nombre de Rayleigh-Roberts est remplacé par,

$$H_{RB} = \frac{Ra_H}{Ra} = \frac{\Delta T_H}{\Delta T} = \frac{Hd^2}{k\Delta T},$$
(6.13)

le taux de chauffage volumique adimensionné.

Pour un *Ra* fixé, suffisamment élevé pour avoir du transport de chaleur par convection, la structure thermique du fluide convectif varie fortement avec H_{RB} Pour $H_{RB} = 0$ le système se réduit à la convection Rayleigh-Bénard, donc la couche du fluide possède deux CLT symétriques, une à chaque extrémité, et un intérieur

convectif avec une température moyenne égale à $0.5\Delta T$. Des instabilités chaudes sont générées à la CLT basse, tandis que celle du haut génère des instabilités froides. Lorsque $H_{RB} > 0$ on a une brisure de symétrie dans le système, ceci se voit aisément en effectuant un bilan d'énergie. Soit Q_{top} le flux de chaleur qui s'échappe par le haut et Q_{bot} le flux de chaleur qui est fourni par le bas, on a donc $Q_{top} = Q_{bot} + Hd$. La quantité de chaleur échangée avec l'extérieur est différente en haut et en bas, et conséquemment la structure thermique des deux CLT. L'énergie produite dans le volume compense une partie de la chaleur provenant du milieu extérieur, d'où un affaiblissement de la CLT basse qui se manifeste par une baisse du saut de température et une augmentation de son épaisseur. Ainsi, les instabilités chaudes deviennent moins vigoureuses que les instabilités froides. À partir d'une valeur seuil de H_{RB} , le chauffage volumique va devenir la seule source de chaleur, et l'énergie produite dans le volume va s'échapper par les parois haute et basse. De cette manière, le système convectif possède uniquement des instabilités froides, et un mouvement de retour passif enclenché par les instabilités. La dynamique de ce système convectif s'apparente au cas possédant uniquement du chauffage volumique, cependant les différentes conditions limites thermiques de la paroi basse sont susceptibles de modifier la physique du système.

6.1.3.2 Lois d'échelle gouvernant le système

Pour établir la forme générale des lois d'échelle gouvernant la structure thermique des CLT, utilisons sur les résultats précédemment explicités, en commençant par le saut de température que subit la CLT haute. Nous avons vu que si $H_{RB} = 0$ alors le saut de température est $\Delta T_{TBL,top} = 0.5\Delta T$, nous généralisons ce résultat à tout H_{RB} sous la forme,

$$\Delta T_{TBL,top} = 0.5\Delta T + f_{\Delta T}(H_{RB}, Ra), \qquad (6.14)$$

avec $f_{\Delta T}$ une fonction inconnue. En suivant le raisonnement suivi pour le cas possédant uniquement du chauffage interne, nous exprimons,

$$f_{\Delta T}(H_{RB}, Ra) \sim \Delta T_H Ra_H^{-1/4} = \Delta T H_{RB} (H_{RB} Ra)^{-1/4} = \Delta T H_{RB}^{3/4} Ra^{-1/4}.$$
 (6.15)

Il résulte donc que,

$$\frac{\Delta T_{TBL,top}}{\Delta T} = 0.5 + C_{T,top} H_{RB}^{3/4} R a^{-1/4}, \tag{6.16}$$

où $C_{T,top}$ est une constante indéterminée, et de manière analogue on obtient pour la CLT basse que,

$$\frac{\Delta T_{TBL,bot}}{\Delta T} = 0.5 - C_{T,bot} H_{RB}^{3/4} R a^{-1/4}, \tag{6.17}$$

où $C_{T,bot}$ est une constante indéterminée. Les lois d'échelles ont été vérifiées à l'aide de simulations numériques pour de nombreuses configurations géométriques. Par exemple Moore (2008) a vérifié ce résultat à l'aide de simulation numériques en 2D Cartésien, tandis que Sotin et Labrosse (1999), en 3D Cartésien, et Deschamps et Tackley (2010), en 3D sphérique, ont étudié la température moyenne de tout le volume et ont appliqué cette loi semi-empirique avec succès.

En revanche, à notre connaissance, aucune forme générale est disponible pour l'épaisseur de la CLT, et les précédentes études numériques n'ont pas abordé ce point. Nous avons constaté que pour la convection Rayleigh-Bénard et pour la convection avec uniquement de la chaleur interne, la nombre de Rayleigh de la CLT ne dépend pas de Ra ou bien de Ra_H . C'est d'ailleurs la base de notre théorie, la CLT reste à sa limite de stabilité. Nous supposons que ce résultat est valide pour ce système convectif, ce qui nous permet d'évaluer δ_{TBL} . En effet,

$$Ra_{TBL} = \frac{\rho \alpha g \Delta T_{TBL} \delta_{TBL}^3}{\eta \kappa} = Ra \left(\frac{\Delta T_{TBL}}{\Delta T}\right) \left(\frac{\delta_{TBL}}{d}\right)^3, \tag{6.18}$$

et vu que Ra_{TBL} est constant, on obtient donc une loi d'échelle générique valide pour les deux CLT qui s'exprime comme,

$$\frac{\delta_{TBL}}{d} = C_{\delta} R a^{-1/3} \left(\frac{\Delta T_{TBL}}{\Delta T} \right)^{-1/3},\tag{6.19}$$

où C_{δ} est une constante indéterminée.

6.1.3.3 Conditions initiales convectives

Une étape importante de notre théorie est la détermination de la structure thermique des CLT à la limite de stabilité. Il est aisé de déterminer le profil de température conductif à l'aide de l'équation de la conservation de l'énergie (2.18). Dans l'état d'équilibre la vitesse du fluide est nulle ainsi que les variations temporelles des propriétés du fluide. L'équation de conservation de l'énergie se résume donc à,

$$\nabla^2 T = -H_{RB},\tag{6.20}$$

avec pour conditions limites T(0) = 1 et T(1) = 0, ce qui nous mène à

$$T(z) = (1 - z)(0.5H_{RB}z + 1), \tag{6.21}$$

où z est la hauteur de la particule de fluide. La figure 6.4 représente le profil de température conductif pour différentes valeurs de H_{RB} . En l'absence de chauffage interne, $H_{RB} = 0$, nous obtenons un gradient linéaire de température correspondant au cas conductif du système Rayleigh-Bénard. Avec l'augmentation du chauffage interne, $0 < H_{RB} < 2$, la température de l'intérieur convectif croît, ceci à pour conséquence de renforcer la CLT du haut et d'affaiblir celle du bas, jusqu'à, pour $H_{RB} = 2$, retrouver la condition initiale du système avec uniquement de la production de chaleur interne, et donc de supprimer la CLT du bas. Pour $H_{RB} > 2$ la nature du système change radicalement, vu que le maximum de la température est atteint à l'intérieur du fluide conductif, induisant une couche intrinsèquement stable à la base du fluide.



FIGURE 6.4 – Profils verticaux de la température adimensionnée calculés pour le cas où la chaleur est transportée uniquement par conduction. Plusieurs valeurs de H_{RB} sont choisies illustrant les différents profils de température.

Cette différence doit se réfléchir dans la détermination de la CLT à sa limite de stabilité. Lorsque H_{RB} < 2, plusieurs manières de décrire cette séparation sont possibles. On peut par exemple fixer cette séparation au point où les deux CLT possèdent un nombre de Rayleigh identique. L'obtention de cette limite nécessite la recherche des racines d'un polynôme de degrés 4, a priori il n'existe donc pas de solution simple. Le cas H_{RB} = 2 est plus simple, vu que la CLT du haut représente toute l'épaisseur du fluide, comme c'est le cas pour le système possèdant uniquement du chuaffage volumique. Or avec la méthode explicitée auparavant, les valeurs de δ_{TBL} à la limite de stabilité ne sont pas continues à H_{RB} = 2, vu que pour ce cas la CLT du bas disparaît et possède donc une épaisseur nulle, cette discontinuité semble difficile à justifier. Pour $H_{RB} > 2$, la séparation entre les deux CLT est probablement le maximum du profil de température, vu qu'il sépare la zone thermiquement stable de la zone instable. Cependant, il est difficile de prédire avec certitude de quelle manière la convection commence. Il est donc primordial d'étudier le système à sa limite de stabilité, et d'observer comment la convection s'organise pour différentes valeurs de H_{RB}. Seulement après cette observation, nous pouvons proposer les lois d'échelle théoriques gouvernant ce système convectif.

La prochaine étape sera de décrire avec précision la limite de stabilité du sys-

tème, d'une part les valeurs de H_{RB} et Ra où la convection démarre, d'autre part quelle est la structure du système. C'est une des avancées notables de notre théorie, il est uniquement nécessaire d'étudier la convection à sa limite de stabilité, donc pour des nombre de Rayleigh relativement bas, ce qui nécessite moins de ressources numériques que pour une convection turbulente.

6.2 Conclusion

Ce manuscrit a commencé par l'étude d'un système convectif de référence consistant en une couche horizontale de fluide chauffée homogènement et refroidie par le haut. Nous avons appliqué l'approximation de Boussinesq et de nombre de Prandtl infini, par conséquent le nombre de Rayleigh-Roberts est l'unique paramètre qui gouverne la dynamique du système. La chapitre 2 expose les résultats théoriques de base, tel que la mise en équation ou bien la construction des lois d'échelle régissant la structure thermique du système convectif. Les lois d'échelle sont semi-empiriques, plus précisément la théorie permet leur détermination à une constante multiplicative près, que l'on évalue à l'aide d'expériences de laboratoire et de simulations numériques. Cependant, la présence de constantes inconnues met en lumière un manque de compréhension et donc de connaissance.

Nous avons par la suite (chapitre 3) résolu ce problème en proposant des lois d'échelle purement théoriques, et les vérifiant à l'aide de nos simulations numériques. L'hypothèse fondamentale de notre théorie et que la couche limite thermique se déstabilise toujours lorsqu'elle atteint un même seuil critique, peu importe la valeur de Ra_H du système. Sous cette hypothèse nous étudions le système lorsque la convection démarre, correspondant à un nombre de Rayleigh critique que l'on peut obtenir analytiquement. Dans ce cas précis, la couche limite thermique est totalement déterminée nous fournissant un point d'ancrage pour les lois d'échelle, d'où la détermination des constantes multiplicatives. Les études précédentes se sont focalisées sur le profil moyen de température, or ce profil ne permet pas de visualiser la couche limite thermique juste avant sa déstabilisation, il représente plutôt un état moyen de la couche limite thermique. Afin d'être cohérent avec notre théorie il faut étudier le profil maximum de température, constitué de la température maximale à chaque profondeur. Cette nouvelle façon d'observer la couche limite thermique appliquée à nos résultats numériques est en parfaite accord avec les prédictions théoriques. De plus, la théorie semble fonctionner pour une large gamme de système convectif (chapitre 6), indiquant l'utilité du raisonnement pour des cas plus complexes.

L'étude de ce système de référence est conclue par l'observation des motifs de convection, et leur évolution avec Ra_H . Nous caractérisons les motifs de convection en établissant les lois d'échelle reliant le nombre d'instabilités, et la distance moyenne entre instabilités, au nombre de Rayleigh-Roberts. Les résultats sont très sensibles au mode opératoire choisi pour sélectionner les instabilités. Par exemple, la profondeur ou le critère pour discriminer les instabilités l'une de l'autre ont une

forte influence. En conséquence, nous proposons une gamme de valeurs possibles plutôt qu'une unique et subjective loi d'échelle.

La deuxième partie de cette thèse porte sur un modèle incluant toute la complexité du manteau terrestre. Nous nous focalisons sur les implications d'une complexité récemment découverte, la transition de l'état de spin du fer présent dans le ferropériclase. Cette transition électronique s'accompagne d'une augmentation de la densité du ferropériclase. L'innovation de notre modèle est la prise en compte du partitionnement en fer entre la perovskite et le ferropériclase, qui dépend fortement de la présence ou non de Al_2O_3 . Nous étudions donc deux pyrolites, une possédant de l' Al_2O_3 et l'autre non, sachant que la présence d'aluminium dans le manteau terrestre ne fait aucun doute. En présence d'aluminium, nos résultats numériques montrent un effet mineur sur la dynamique, avec, par exemple, une vitesse de fluide qui varie par moins de 6% en ajoutant la transition électronique. En revanche, en l'absence d'aluminium, la vitesse moyenne des instabilités chaudes et froides est fortement affectée (~15%). Il est donc primordial d'inclure de l'aluminium dans les compositions de manteau terrestre étudiées.

Bibliographie

- Y. Abe, *Thermal and chemical evolution of the terrestrial magma ocean*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 100, (1997), 27–39. (Cité en page 10.)
- G. Ahlers, S. Grossmann et D. Lohse, *Heat transfer and large scale dynamics in turbulent Rayleigh-Benard convection*. Reviews of Modern Physics, 81, (2009), 503–537. (Cité en page 62.)
- D. Alfe, M. J. Gillan et G. D. Price, *Thermodynamics from first principles : temperature and composition of the Earth's core*. Mineralogical Magazine, 67, (2003), 113–123. (Cité en page 19.)
- M. W. Ammann, J. P. Brodholt et D. P. Dobson, *Ferrous iron diffusion in ferro*periclase across the spin transition. Earth and Planetary Science Letters, 302, (2011), 393–402. (Cité en pages 92 et 108.)
- E. Anders et M. Ebihara, *Solar-system abundances of the elements*. Geochimica et Cosmochimica Acta, 46, (1982), 2363–2380. (Cité en page 7.)
- E. Anders et N. Grevesse, *Abundances of the elements : Meteoritic and solar*. Geochimica et Cosmochimica Acta, 53, (1989), 197–214. (Cité en page 7.)
- D. Andrault, N. Bolfan-Casanova, G. Lo Nigro, M. A. Bouhifd, G. Garbarino et M. Mezouar, Solidus and liquidus profiles of chondritic mantle : Implication for melting of the Earth across its history. Earth and Planetary Science Letters, 304, (2011), 251–259. (Cité en page 10.)
- D. Antonangeli, J. Siebert, C. M. Aracne, D. L. Farber, A. Bosak, M. Hoesch, M. Krisch, F. J. Ryerson, G. Fiquet et J. Badro, *Spin crossover in ferropericlase at high pressure : A seismologically transparent transition ?* Science, 331, (2011), 64–67. (Cité en pages 87 et 92.)
- S. Anzellini, A. Dewaele, M. Mezouar, P. Loubeyre et G. Morard, *Melting of Iron at Earth's Inner Core Boundary Based on Fast X-ray Diffraction*. Science, 340, (2013), 464–466. (Cité en page 19.)
- N. Arndt et A. Davaille, *Episodic Earth evolution*. Tectonophysics, 609, (2013), 661–674. (Cité en page 12.)
- A. L. Auzende, J. Badro, F. J. Ryerson, P. K. Weber, S. J. Fallon, A. Addad, J. Siebert et G. Fiquet, *Element partitioning between magnesium silicate perovskite and ferropericlase : New insights into bulk lower-mantle geochemistry*. Earth and Planetary Science Letters, 269, (2008), 164–174. (Cité en pages 93, 95 et 96.)
- J. Badro, *Spin transitions in mantle minerals*. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 42, (2014), 231–248. (Cité en pages 92 et 108.)

- J. Badro, G. Fiquet, F. Guyot, J. P. Rueff, V. V. Struzhkin, G. Vankó et G. Monaco, *Iron partitioning in Earth's mantle : Toward a deep lower mantle discontinuity*. Science, 300, (2003), 789–791. (Cité en pages 86 et 92.)
- J. Badro, J. P. Rueff, G. Vankó, G. Monaco, G. Fiquet et F. Guyot, *Electronic transitions in perovskite : Possible nonconvecting layers in the lower mantle.* Science, 305, (2004), 383–386. (Cité en pages 86 et 92.)
- J. Badro, G. Fiquet et F. Guyot, *Thermochemical state of the lower mantle : New in*sights from mineral physics, tome 160 de Geophysical Monograph Series, 241–260 (AGU, 2005). (Cité en page 96.)
- S. Balachandar, D. A. Yuen et D. Reuteler, *Time-dependent three dimensional com*pressible convection with depth-dependent properties. Geophysical Research Letters, 19, (1992), 2247–2250. (Cité en page 28.)
- G. K. Batchelor, *Heat convection and buoyancy effects in fluids*. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 80, (1954), 339–358. (Cité en page 107.)
- J. R. Baumgardner, *Three-dimensional treatment of convective flow in the earth's mantle*. Journal of Statistical Physics, 39, (1985), 501–511. (Cité en page 27.)
- L. Bello, N. Coltice, T. Rolf et P. J. Tackley, On the predictability limit of convection models of the Earth's mantle. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 15, (2014), 2319–2328. (Cité en page 50.)
- D. Bercovici, *A simple model of plate generation from mantle flow*. Geophysical Journal International, 114, (1993), 635–650. (Cité en page 29.)
- D. Bercovici, Generation of plate tectonics from lithosphere-mantle flow and voidvolatile self-lubrication. Earth and Planetary Science Letters, 154, (1998), 139– 151. (Cité en page 29.)
- J. D. Bernal, *Hypothesis on the 20° discontinuity*. Observatory, 59, (1936), 268. (Cité en page 13.)
- F. Birch, *Elasticity and constitution of the Earth's interior*. Journal of Geophysical Research, 57, (1952), 227–286. (Cité en pages 13, 18 et 20.)
- J. Boussinesq, Théorie analytique de la chaleur mise en harmonie avec la thermodynamique et avec la théorie mécanique de la lumière, Tome II (Gauthier-Villars, Paris, 1903). (Cité en page 22.)
- D. J. Bower, M. Gurnis, J. M. Jackson et W. Sturhahn, *Enhanced convection and fast plumes in the lower mantle induced by the spin transition in ferropericlase*. Geophysical Research Letters, 36, (2009), L10306. (Cité en pages 30, 86, 89, 92 et 106.)
- R. Brett, *The Earth's core : Speculations on its chemical equilibrium with the mantle.* Geochimica et Cosmochimica Acta, 35, (1971), 203–221. (Cité en page 19.)

- J. M. Brown et T. J. Shankland, *Thermodynamic parameters in the Earth as determined from seismic profiles*. Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society, 66, (1981), 579–596. (Cité en pages 88, 93 et 98.)
- K. E. Bullen, *An Introduction to the Theory of Seismology* (Cambridge University Press, Cambridge, U. K., 1947). (Cité en pages 13 et 16.)
- R. G. Burns, *Mineralogical Applications of Crystal Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, U. K., 1993). (Cité en page 92.)
- F. H. Busse, On the stability of two-dimensional convection in a layer heated from below. Journal of Mathematical Physics, 46, (1967), 140–150. (Cité en page 25.)
- F. H. Busse et J. A. Whitehead, *Instabilities of convection rolls in a high Prandtl number fluid*. Journal of Fluid Mechanics, 47, (1971), 305–320. (Cité en page 25.)
- P. Byerly, *The Montana earthquake of June 28, 1925 G.M.C.T.* The Bulletin of the Seismological Society of America, 16, (1926), 209–65. (Cité en page 12.)
- H. Bénard, Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide. Deuxième partie : Procédés mécaniques et optiques d'examen; lois numériques des phénomènes. Revue Générale des Sciences pures et appliquées, 11, (1900a), 1309–1328. (Cité en page 22.)
- H. Bénard, Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide. Première partie : description génnérale des phénomènes. Revue Générale des Sciences pures et appliquées, 11, (1900b), 1261–1271. (Cité en page 22.)
- C. R. Carrigan, Multiple-scale convection in the Earth's mantle : a three-dimensional study. Science, 215, (1982), 965–967. (Cité en pages 68, 69 et 77.)
- K. Catalli, S. H. Shim et V. B. Prakapenka, *Thickness and Clapeyron slope of the postperovskite boundary*. Nature, 462, (2009), 782–786. (Cité en page 16.)
- K. Catalli, S. H. Shim, V. B. Prakapenka, J. Zhao, W. Sturhahn, P. Chow, Y. Xiao, H. Liu, H. Cynn et W. J. Evans, Spin state of ferric iron in MgSiO₃ perovskite and its effect on elastic properties. Earth and Planetary Science Letters, 289, (2010), 68–75. (Cité en page 97.)
- K. Catalli, S. H. Shim, P. Dera, V. B. Prakapenka, J. Zhao, W. Sturhahn, P. Chow, Y. Xiao, H. Cynn et W. J. Evans, *Effects of the Fe³⁺ spin transition on the properties of aluminous perovskite — new insights for lower-mantle seismic heterogeneities*. Earth and Planetary Science Letters, 310, (2011), 293–302. (Cité en page 97.)
- S. Chandrasekhar, *Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability* (Clarendo Press, New York, 1961). (Cité en pages 23, 34, 58 et 75.)
- M. M. Chen et J. A. Whitehead, Evolution of two-dimensional periodic Rayleigh convection cells of arbitrary wave-numbers. Journal of Fluid Mechanics, 31, (1968), 1–15. (Cité en page 25.)

- F. Chilla et J. Schumacher, *New perspectives in turbulent Rayleigh-Benard convection*. European Physical Journal E, 35, (2012), 58. (Cité en page 62.)
- G. Choblet et E. M. Parmentier, *Thermal convection heated both volumetrically and from below : Implications for predictions of planetary evolution*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 173, (2009), 290–296. (Cité en pages 50, 56 et 60.)
- A. Chopelas et R. Boehler, *Thermal expansion measurements at very high pressure, systematics, and a case for a chemically homogeneous mantle.* Geophysical Research Letters, 16, (1989), 1347–1350. (Cité en page 28.)
- U. R. Christensen, *Thermal evolution models for the Earth*. Journal of Geophysical Research, 90, (1985), 2995–3007. (Cité en page 27.)
- U. R. Christensen et A. W. Hofmann, Segregation of subducted oceanic crust in the convecting mantle. Journal of Geophysical Research, 99, (1994), 19867–19884. (Cité en page 29.)
- U. R. Christensen et D. A. Yuen, *The interaction of a subducting lithospheric slab with a chemical or phase boundary*. Journal of Geophysical Research, 89, (1984), 4389–4402. (Cité en pages 28 et 29.)
- L. Cobden, S. Goes, M. Ravenna, E. Styles, F. Cammarano, K. Gallagher et J. A. D. Connolly, *Thermochemical interpretation of 1-D seismic data for the lower mantle : The significance of nonadiabatic thermal gradients and compositional heterogeneity.* Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 114, (2009), B11309. (Cité en page 108.)
- R. E. Cohen, I. I. Mazin et D. G. Isaak, *Magnetic collapse in transition metal oxides at higher pressure : Implications for the Earth.* Science, 275, (1997), 654–657. (Cité en page 92.)
- N. Coltice, T. Rolf, P. J. Tackley et S. Labrosse, *Dynamic Causes of the Relation Between Area and Age of the Ocean Floor*. Science, 336, (2012), 335–338. (Cité en page 30.)
- K. Condie, Earth as an Evolving Planetary System (Elsevier, Amsterdam, 2011). (Cité en page 11.)
- J. C. Crowhurst, J. M. Brown, A. F. Goncharov et S. D. Jacobsen, *Elasticity of* (*Mg*,*Fe*)O through the spin transition of iron in the lower mantle. Science, 319, (2008), 451–453. (Cité en pages 87 et 92.)
- A. Davaille et A. Limare, *Laboratory studies of mantle convection*, tome 7 de *Treatise on Geophysics*, 89–165 (Elsevier, 2007). (Cité en page 38.)
- A. Davaille, A. Limare, F. Touitou, I. Kumagai et J. Vatteville, Anatomy of a laminar starting thermal plume at high Prandtl number. Experiments in Fluids, 50, (2011), 285–300. (Cité en page 50.)

- Davaille2005, *On the transient nature of mantle plumes*. Geophysical Research Letters, 32, (2005), L14309. (Cité en page 50.)
- D. R. Davies, S. Goes, J. H. Davies, B. S. A. Schuberth, H. P. Bunge et J. Ristema, *Reconciling dynamic and seismic models of Earth's lower mantle : The dominant role of thermal heterogeneity*. Earth and Planetary Science Letters, 353–354, (2012), 253–269. (Cité en pages 17 et 107.)
- F. Deschamps et P. J. Tackley, *Searching for models of thermo-chemical convection that explain probabilistic tomography I. Principles and influence of rheological parameters.* Physics of the Earth and Planetary Interiors, 171, (2008), 357–373. (Cité en pages 17 et 107.)
- F. Deschamps et P. J. Tackley, Searching for models of thermo-chemical convection that explain probabilistic tomography II - Influence of physical and compositional parameters. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 176, (2009), 1–18. (Cité en pages 17 et 107.)
- F. Deschamps et P. J. Tackley, *Temperature and heat flux scalings for isoviscous thermal convection in spherical geometry*. Geophysical Journal International, 182, (2010), 137–154. (Cité en pages 67 et 117.)
- F. Deschamps et J. Trampert, *Towards a lower mantle reference temperature and composition*. Earth and Planetary Science Letters, 222, (2004), 161–175. (Cité en pages 19, 88, 99 et 105.)
- F. Deschamps, C. Yao, P. J. Tackley et C. Sanchez-Valle, *High Rayleigh number thermal convection in volumetrically heated spherical shells*. Journal of Geophysical Research, 117, (2012), E09006. (Cité en pages 44, 53, 55, 56, 67, 68, 109, 110, 111 et 112.)
- D. P. Dobson et J. P. Brodholt, *The electrical conductivity of the lower mantle phase magnesiowüstite at high temperatures and pressures*. Journal of Geophysical Research, 105, (2000), 531–538. (Cité en page 108.)
- A. Dziewonski et D. L. Anderson, *Preliminary earth reference model*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 25, (1981), 297–356. (Cité en pages 14, 15, 16, 86, 87, 88, 92 et 93.)
- A. M. Dziewonski, B. H. Hager et R. J. O'Connell, *Large-scale heterogeneities in the lower mantle*. Journal of Geophysical Research, 82, (1977), 239–255. (Cité en page 17.)
- L. T. Elkins-Tanton, *Linked magma ocean solidification and atmospheric growth for Earth and Mars*. Earth and Planetary Science Letters, 271, (2008), 181–191. (Cité en page 10.)
- L. T. Elkins-Tanton et S. Seager, *Coreless Terrestrial Exoplanets*. The Astrophysical Journal, 688, (2008), 628–635. (Cité en page 50.)

- Y. W. Fei, L. Zhang, A. Corgne, H. C. Watson, A. Ricolleau, Y. Meng et V. B. Prakapenka, *Spin transition and equations of state of (Mg, Fe)O solid solutions*. Geophysical Research Letters, 34, (2007), L17307. (Cité en pages 96 et 97.)
- G. Fiquet, A. Dewaele, D. Andrault, M. Kunz et T. Le Bihan, *Thermoelastic properties* and crystal structure of MgSiO₃ perovskite at lower mantle pressure and temperature conditions. Geophysical Research Letters, 27, (2000), 21–24. (Cité en page 97.)
- G. Fiquet, A. L. Auzende, J. Siebert, A. Corgne, H. Bureau, H. Ozawa et G. Garbarino, *Melting of Peridotite to 140 Gigapascals*. Science, 329, (2010), 1516–1518. (Cité en page 10.)
- B. J. Foley, D. Bercovici et L. T. Elkins-Tanton, *Initiation of plate tectonics from post-magma ocean thermochemical convection*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 119, (2014), 8538–8561. (Cité en page 30.)
- W. S. Fyfe, *The possibility of d-electron uncoupling in olivine at high pressures*. Geochimica et Cosmochimica Acta, 19, (1960), 141–143. (Cité en pages 86 et 92.)
- A. Galsa et L. Lenkey, Quantitative investigation of physical properties of mantle plumes in three-dimensional numerical models. Physics of Fluids, 19, (2007), 116601. (Cité en pages 77 et 104.)
- F. Garel, S. Goes, D. R. Davies, J. H. Davies, S. C. Kramer et C. R. Wilson, Interactions of subducted slabs with the mantle transition-zone : A regime diagram from 2-D thermo-mechanical models with a mobile trench and an overriding plate. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 15. (Cité en page 107.)
- E. J. Garnero et A. K. McNamara, *Structure and Dynamics of Earth's Lower Mantle*. Science, 320, (2008), 626–628. (Cité en pages 16, 17, 18 et 107.)
- G. M. C. Glover et S. C. Generalis, *Pattern Competition in Homogeneously Heated Fluid Layers*. Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, 3, (2009), 164–174. (Cité en page 68.)
- H. Gomi, K. Ohta, K. Hirose, S. Labrosse, R. Caracas, M. J. Verstraete et J. W. Hernlund, *The high conductivity of iron and thermal evolution of the Earth's core*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 224, (2013), 88–103. (Cité en page 21.)
- A. F. Goncharov, B. D. Haugen, V. V. Struzhkin, P. Beck et S. D. Jacobsen, *Radiative thermal conductivity in the Earth's lower mantle*. Nature, 456, (2008), 231–234. (Cité en page 92.)
- A. F. Goncharov, P. Beck, V. V. Struzhkin, B. D. Haugen et S. D. Jacobsen, *Thermal conductivity of lower-mantle minerals*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 174, (2009), 24–32. (Cité en page 92.)

- A. F. Goncharov, V. V. Struzhkin, J. A. Montoya, S. Kharlamova, R. Kundargi, J. Siebert, J. Badro, D. Antonangeli, F. J. Ryerson et W. Mao, *Effects of composition, structure, and spin state on the thermal conductivity of the Earth's lower mantle.* Physics of the Earth and Planetary Interiors, 180, (2010), 148–153. (Cité en page 108.)
- S. P. Grand, R. D. van der Hilst et S. Widiyantoro, *High resolution global tomography : a snapshot of convection in the Earth*. Geological Society of America TODAY, 7, (1997), 2–7. (Cité en pages 15 et 16.)
- D. H. Green et A. E. Ringwood, *Mineral assemblages in a model mantle composition*. Journal of Geophysical Research, 68, (1963), 937–945. (Cité en page 7.)
- S. Grossmann et D. Lohse, *Scaling in thermal convection : a unifying theory*. Journal of Fluid Mechanics, 407, (2000), 27–56. (Cité en pages 38, 52 et 76.)
- S. Grossmann et D. Lohse, *Thermal convection for large Prandtl numbers*. Physical Review Letters, 86, (2001), 3316–3319. (Cité en pages 38 et 52.)
- A. L. Hales, Convection currents in the Earth. Geophysical Supplements to the Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 3, (1936), 372–379. (Cité en page 23.)
- U. Hansen, D. A. Yuen et S. E. Kroening, *Effects of depth-dependent thermal expan*sivity on mantle circulations and lateral thermal anomalies. Geophysical Research Letters, 18, (1991), 1261–1264. (Cité en page 28.)
- D. L. Hartmann (Academic Press, San Diego, U. S., 1994). (Cité en page 4.)
- N. A. Haskell, *The Motion of a Viscous Fluid Under a Surface Load*. Physics, 6, (1935), 265–269. (Cité en page 23.)
- H. H. Hess, *Comment on mountain building*. Transactions American Geophysical Union, 32, (1951), 528–531. (Cité en page 23.)
- R. D. van der Hilst, S. Widiyantoro et E. R. Engdahl, *Evidence for deep mantle circulation from global tomography*. Nature, 386, (1997), 578–584. (Cité en pages 15 et 16.)
- A. Holmes, XVIII Radioactivity and Earth Movements. Transactions of the Geological Society of Glasgow, 18, (1929), 559–606. (Cité en pages 22, 23, 26 et 67.)
- A. Holmes (The Ronald Press Company, New York, 1945). (Cité en page 22.)
- G. Houseman, *The dependence of convection planform on mode of heating*. Nature, 332, (1988), 346–349. (Cité en pages 27, 67 et 68.)
- L. N. Howard, Convection at high Rayleigh number. Dans H. Gortler, rédacteur, Proceedings of the 11th International Congress on Applied Mechanics, 1109–1115 (Springer-Verlag, New York, 1966). (Cité en pages 24, 39, 51, 52, 68 et 84.)

- H. Ichikawa, K. Kurita, Y. Yamagishi et T. Yanagisawa, Cell pattern of thermal convection induced by internal heating. Physics of Fluids, 18, (2006), 038101. (Cité en pages 67 et 68.)
- T. Irifune, *Absence of an aluminous phase in the upper part of the Earth's lower mantle.* Nature, 370, (1994), 131–133. (Cité en pages 92, 93, 95 et 96.)
- T. Irifune, T. Shinmei, C. A. McCammon, N. Miyajima, D. C. Rubie et D. J. Frost, *Iron partitioning and density changes of pyrolite in Earth's lower mantle.* Science, 327, (2010), 193–195. (Cité en pages 92, 93, 95, 96 et 108.)
- I. Jackson, *Elasticity, composition and temperature of the Earth's lower mantle : a reappraisal*. Geophysical Journal International, 134, (1998), 291–311. (Cité en pages 89 et 92.)
- I. Jackson et H. Niesler, *The elasticity of periclase to 3 GPa and some geophysical implications*. Dans *High-Pressure Research in Geophysics*, tome 12, 93–113 (1982). (Cité en page 97.)
- I. Jackson et S. M. Rigden, Analysis of P-V-T data : constraints on the thermoelastic properties of high-pressure minerals. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 96, (1996), 85–112. (Cité en pages 93 et 94.)
- J. M. Jackson, W. Sturhahn, G. Y. Shen, J. Y. Zhao, M. Y. Hu, D. Errandonea, J. D. Bass et Y. W. Fei, A synchroton Mössbauer spectroscopy study of (Mg,Fe)SiO₃ perovskite up to 120~GPa. American Mineralogist, 90, (2005), 199–205. (Cité en page 92.)
- J. M. Jackson, S. V. Sinogeikin, S. D. Jacobsen, H. J. Reichmann, S. J. Mackwell et J. D. Bass, *Single-crystal elasticity and sound velocities of (Mg*_{0.94}*Fe*_{0.06})*O ferropericlase to 20 GPa*. Journal of Geophysical Research, 111, (2006), B09203. (Cité en page 92.)
- G. T. Jarvis et D. P. McKenzie, *Convection in a compressible fluid with infinite Prandtl number*. Journal of Fluid Mechanics, 96, (1980), 515–583. (Cité en page 28.)
- C. Jaupart et J. C. Mareschal, *Heat generation and transport in the Earth* (Cambridge University Press, Cambridge, 2011). (Cité en pages 41 et 52.)
- C. Jaupart, S. Labrosse et J. C. Mareschal, *Temperatures, heat and energy in the mantle of the Earth*, tome 7 de *Treatise on Geophysics*, 253–303 (Elsevier, 2007). (Cité en pages 8, 12, 46, 67 et 101.)
- M. Javoy, *The integral enstatite chondrite model of the Earth*. Geophysical Research Letters, 22, (1995), 2219–2222. (Cité en page 8.)
- M. Javoy, *Chemical earth models*. Comptes Rendus de l'Académie des Sciences, 329, (1999), 537–555. (Cité en page 9.)

- M. Javoy, E. Kaminski, F. Guyot, D. Andrault, C. Sanloup, M. Moreira, S. Labrosse, A. Jambon, P. Agrinier, A. Davaille et C. Jaupart, *The chemical composition of the Earth : Enstatite chondrite models*. Earth and Planetary Science Letters, 293, (2010), 259–268. (Cité en page 8.)
- H. Jeffreys (Cambridge University Press, Cambridge, 1929). (Cité en pages 18 et 22.)
- H. Jeffreys, *The instability of a compressible fluid heated below*. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 26, (1930), 170–172. (Cité en page 22.)
- H. Jeffreys, *The times of P, S and SKS, and the velocities of P and S*. Geophysical Supplements to the Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 4, (1939), 498–533. (Cité en pages 13 et 16.)
- L. R. Johnson, *Array measurements of P velocities in the upper mantle*. Journal of Geophysical Research, 72, (1967), 6309–6325. (Cité en page 13.)
- E. Kaminski et C. Jaupart, *Laminar starting plumes in high-Prandtl-number fluids*. Journal of Fluid Mechanics, 478, (2003), 287–298. (Cité en page 107.)
- J. F. Kasting et J. L. Siefert, *Life and the evolution of Earth's atmosphere*. Science, 296, (2002), 1066–1068. (Cité en page 21.)
- T. Katsura, H. Yamada, O. Nishikawa, M. Song, A. Kubo, T. Shinei, S. Yokoshi, Y. Aizawa, T. Yoshino, M. J. Walter, E. Ito et K. Funakoshi, *Olivine-wadsleyite transition in the system (Mg,Fe)*₂SiO₄. Geophysical Research Letters, 109, (2004), B02209. (Cité en page 15.)
- L. H. Kellogg, B. H. Hager et R. D. van der Hilst, *Compositional Stratification in the Deep Mantle*. Science, 283, (1999), 1881–1884. (Cité en page 17.)
- S. E. Kesson, J. D. Fitz Gerald et J. M. Shelley, *Mineralogy and dynamics of a pyrolite lower mantle*. Nature, 393, (1998), 252–255. (Cité en pages 93, 95 et 96.)
- L. Knopoff, *The convection current hypothesis*. Review of Geophysics, 2, (1964), 89–122. (Cité en page 23.)
- Y. Kobayashi, T. Kondo, E. Ohtani, N. Hirao, N. Miyajima, T. Yagi, T. Nagase et T. Kikegawa, Fe-Mg partitioning between (Mg, Fe)SiO₃ post-perovskite, perovskite, and magnesiowüstite in the Earth's lower mantle. Geophysical Research Letters, 32, (2005), L19301. (Cité en pages 93, 95 et 96.)
- T. Komabayashi, K. Hirose, Y. Nagaya, E. Sugimura et Y. Ohishi, *High-temperature compression of ferropericlase and the effect of temperature on iron spin transition*. Earth and Planetary Science Letters, 297, (2010), 691–699. (Cité en pages 98 et 106.)

- R. H. Kraichnan, *Turbulent thermal convection at arbitrary Prandtl number*. Physics of Fluids, 5, (1962), 1374–1389. (Cité en pages 33 et 69.)
- R. Krishnamurti, *Finite amplitude convection with changing mean temperature. Part* 1. *Theory*. Journal of Fluid Mechanics, 33, (1968), 445–455. (Cité en pages 50 et 67.)
- F. A. Kulacki et M. E. Nagle, *Natural convection in a horizontal fluid layer with volumetric energy sources*. Journal of Heat Transfer, 97, (1975), 204–211. (Cité en pages 44, 53 et 55.)
- S. Labrosse, *Hotspots, mantle plumes and core heat loss*. Earth and Planetary Science Letters, 199, (2002), 147–156. (Cité en pages 77 et 103.)
- S. Labrosse, J. P. Poirier et J. L. Le Mouël, *The age of the inner core*. Earth and Planetary Science Letters, 190, (2001), 111–123. (Cité en page 20.)
- S. Labrosse, J. W. Hernlund et N. Coltice, *A crystallizing dense magma ocean at the base of the Earth's mantle*. Nature, 450, (2007), 866–869. (Cité en page 10.)
- T. Lay et D. V. Helmberger, A lower mantle S-wave triplication and the shear velocity structure of D". Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society, 75, (1983), 799–837. (Cité en page 16.)
- I. Lehmann, *P*'. Bureau Central Seismoloque International Travaux Scientifique A, 14, (1936), 87–115. (Cité en page 20.)
- J. Li, V. V. Struzhkin, H. K. Mao, J. Shu, R. J. Hemley, Y. Fei, B. Mysen, P. Dera, V. Prakapenka et G. Shen, *Electronic spin state of iron in lower mantle perovskite*. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 101, (2004), 14027–14030. (Cité en page 92.)
- Y. Li, F. Deschamps et P. J. Tackley, The stability and structure of primordial reservoirs in the lower mantle : insights from models of thermochemical convection in threedimensional spherical geometry. Geophysical Journal International, 199, (2014), 914–930. (Cité en pages 17 et 107.)
- Z. Q. Li et H. G. Leighton, *Global climatologies of solar radiation budgets at the surface and in the atmosphere from 5 years of ERBE data*. Journal of Geophysical Research : Atmosphere, 98, (1993), 4919–4930. (Cité en page 6.)
- A. Limare, E. Surducan, V. Surducan, C. Neamtu, E. Di Giuseppe, K. Vilella, C. G. Farnetani, E. Kaminski et C. Jaupart, *Microwave-based laboratory experiments for internally-heated mantle convection*. Dans M. D. Lazar et S. Garabagiu, rédacteurs, *Processes in Isotopes and Molecules (PIM2013)*, tome 1565, 14–18 (2013). (Cité en pages 39 et 53.)

- A. Limare, K. Vilella, E. Di Giuseppe, C. Farnetani, E. Kaminski, E. Surducan, S. V., C. Neamtu, L. Fourel et C. Jaupart (2015). *Microwave-heating laboratory experiments for planetary mantle convection*. (Cité en pages 37, 41, 42, 43, 53, 54, 68, 69 et 77.)
- J. F. Lin et T. Tsuchiya, *Spin transition of iron in the Earth's lower mantle*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 170, (2008), 248–259. (Cité en pages 98 et 106.)
- J. F. Lin, S. D. Jacobsen, W. Sturhahn, J. M. Jackson, J. Zhao et C. S. Yoo, Sound velocities of ferropericlase in the Earth's lower mantle. Geophysical Research Letters, 33, (2006), L22304. (Cité en page 92.)
- J. F. Lin, G. Vankó, S. D. Jacobsen, V. Iota, V. V. Struzhkin, V. B. Prakapenka, A. Kuznetsov et C. S. Yoo, *Spin transition zone in Earth's lower mantle*. Science, 317, (2007*a*), 1740–1743. (Cité en page 92.)
- J. F. Lin, S. T. Weir, D. D. Jackson, W. J. Evans, Y. K. Vohra, W. Qiu et C. S. Yoo, Electrical conductivity of the lower-mantle ferropericlase across the electronic spin transition. Geophysical Research Letters, 34, (2007b), L16305. (Cité en page 92.)
- J. F. Lin, S. Speziale, Z. Mao et H. Marquardt, *Effects of the electronic spin transitions of iron in lower mantle minerals : Implications for deep mantle geophysics and geochemistry*. Reviews of Geophysics, 51, (2013), 244–275. (Cité en pages 86, 88, 92, 95, 106 et 108.)
- L. G. Liu, Silicate perovskite from phase transformations of pyrope-garnet at high pressure and temperature. Geophysical Research Letters, 1, (1974), 277–280. (Cité en page 14.)
- M. Liu, D. A. Yuen, W. Zhao et S. Honda, Development of Diapiric Structures in the Upper Mantle Due to Phase Transitions. Science, 252, (1991), 1836–1839. (Cité en page 28.)
- D. R. Lowe et M. M. Tice, *Tectonic controls on atmospheric, climatic, and biological evolution* 3.5-2.4 *Ga.* Precambrian Research, 158, (2007), 177–197. (Cité en page 21.)
- S. Lundin, K. Catalli, J. Santillán, S. H. Shim, V. B. Prakapenka, M. Kunz et Y. Meng, *Effect of Fe on the equation of state of mantle silicate perovskite over 1 Mbar*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 168, (2008), 97–102. (Cité en page 97.)
- P. Machetel et D. A. Yuen, *Penetrative convective flows induced by internal heating and mantle compressibility*. Journal of Geophysical Research, 94, (1989), 10609–10626. (Cité en page 28.)
- W. V. R. Malkus, Discrete Transitions in Turbulent Convection. Proceedings of the Royal Society of London, 225, (1954), 185–195. (Cité en pages 24 et 45.)

- H. K. Mao, Y. Wu, L. C. Chen et J. F. Shu, *Static compression of iron to 300 GPa and Fe*_{0.8}*Ni*_{0.2} *alloy to 260 GPa : Implications for composition of the core.* Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 95, (1990), 21737–21742. (Cité en page 19.)
- H. K. Mao, G. Shen et R. J. Hemley, *Multivariable dependence of Fe-Mg partitioning in the lower mantle.* Science, 278, (1997), 2098–2100. (Cité en page 108.)
- W. L. Mao, H. K. Mao, W. Sturhahn, J. Y. Zhao, V. B. Prakapenka, Y. Meng, J. F. Shu, Y. W. Fei et R. J. Hemley, *Iron-rich post-perovskite and the origin of ultralow-velocity zones*. Science, 312, (2006), 564–565. (Cité en page 17.)
- Z. Mao, J. F. Lin, J. Liu et V. B. Prakapenka, *Thermal equation of state of lower-mantle ferropericlase across the spin crossover*. Geophysical Research Letters, 38, (2011), L23308. (Cité en pages 91, 93, 95, 98 et 106.)
- G. Masters et D. Gubbins, *On the resolution of density within the Earth*. Physics of the Earth and Planetary Interior, 140, (2003), 159–167. (Cité en page 20.)
- G. Masters, G. Laske, H. Bolton et A. Dziewonski, The relative behavior of shear velocity, bulk sound speed, and compressional velocity in the mantle : implications for chemical and thermal structure, tome 117 de Geophysical Monograph Series, 63–87 (AGU, 2000). (Cité en page 17.)
- E. A. Mathez et J. D. Webster (Columbia University Press, New York, U. S., 2004). (Cité en pages 4 et 7.)
- W. F. McDonough et S. S. Sun, *The composition of the Earth*. Chemical Geology, 120, (1995), 223–253. (Cité en pages 8, 9 et 67.)
- D. P. McKenzie, J. M. Roberts et N. O. Weiss, *Numerical models of convection in the earth's mantle*. Tectonophysics, 19, (1973), 89–103. (Cité en page 26.)
- D. P. McKenzie, J. M. Roberts et N. O. Weiss, *Convection in the earth's mantle : towards a numerical simulation*. Journal of Fluid Mechanics, 62, (1974), 465–538. (Cité en page 26.)
- A. K. McNamara, E. J. Garnero et S. Rost, *Tracking deep mantle reservoirs with ultralow velocity zones*. Earth and Planetary Science Letters, 299, (2010), 1–9. (Cité en pages 17 et 18.)
- J. X. Mitrovica et A. M. Forte, A new inference of mantle viscosity based upon joint inversion of convection and glacial isostatic adjustment data. Earth and Planetary Science Letters, 225, (2004), 177–189. (Cité en page 15.)
- W. B. Moore, *Heat transport in a convecting layer heated from within and below*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 113, (2008), B11407. (Cité en pages 113 et 116.)

- M. Murakami, K. Hirose, K. Kawamura, N. Sata et Y. Ohishi, *Post-Perovskite Phase Transitionin MgSiO*₃. Science, 304, (2004), 855–858. (Cité en page 16.)
- M. Murakami, K. Hirose, N. Sata et Y. Ohishi, Post-perovskite phase transition and mineral chemistry in the pyrolitic lowermost mantle. Geophysical Research Letters, 32, (2005), L03304. (Cité en pages 93, 95 et 96.)
- M. Murakami, Y. Ohishi, N. Hirao et K. Hirose, *A perovskitic lower mantle inferred from high-pressure, high-temperature sound velocity data*. Nature, 485, (2012), 90–94. (Cité en pages 87, 88 et 92.)
- T. Nakagawa et P. J. Tackley, *Effects of a perovskite-post perovskite phase change near core-mantle boundary in compressible mantle convection*. Geophysical Research Letters, 31, (2004), L16611. (Cité en page 30.)
- T. Nakagawa et P. J. Tackley, *Influence of initial CMB temperature and other parameters on the thermal evolution of Earth's core resulting from thermochemical spherical mantle convection*. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 11, (2010), Q06001. (Cité en page 11.)
- T. Nakagawa et P. J. Tackley, *Influence of combined primordial layering and recycled MORB on the coupled thermal evolution of Earth's mantle and core*. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 15, (2014), 619–633. (Cité en pages 10, 17, 30 et 50.)
- T. Nakagawa, P. J. Tackley, F. Deschamps et J. A. D. Connolly, Incorporating selfconsistently calculated mineral physics into thermo-chemical mantle convection simulations in a 3D spherical shell and its influence on seismic anomalies in Earth's mantle. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 10, (2009), Q03004. (Cité en pages 17 et 30.)
- T. Nakagawa, P. J. Tackley, F. Deschamps et J. A. D. Connolly, *The influence of MORB* and harzburgite composition on thermo-chemical mantle convection in a 3-D spherical shell with self-consistently calculated mineral physics. Earth and Planetary Science Letters, 296, (2010), 403–412. (Cité en page 17.)
- J. B. Naliboff et L. H. Kellogg, *Can large increases in viscosity and thermal conductivity preserve large-scale heterogeneity in the mantle*? Physics of the Earth and Planetary Interiors, 161, (2007), 86–102. (Cité en page 108.)
- A. Navrotsky, *A lesson from ceramics*. Science, 284, (1999), 1788–1789. (Cité en page 95.)
- S. Ni, E. Tan, M. Gurnis et D. Helmberger, *Sharp sides to the African superplume*. Science, 296, (2002), 1850–1852. (Cité en page 17.)
- M. Niazi et D. L. Anderson, Upper mantle structure of western North America from apparent velocities of P waves. Journal of Geophysical Research, 70, (1965), 4633– 4640. (Cité en page 13.)

- R. Nomura, K. Hirose, K. Uesugi, Y. Ohishi, A. Tsuchiyama, A. Miyake et Y. Ueno, Low core-mantle boundary temperature inferred from the solidus of pyrolite. Science, 343, (2014), 522–525. (Cité en page 10.)
- M. Ogawa, G. Schubert et A. Zebib, *Numerical simulations of three-dimensional thermal convection in a fluid with strongly temperature-dependent viscosity*. Journal of Fluid Mechanics, 233, (1991), 299–328. (Cité en page 28.)
- R. D. Oldham, *The constitution of the interior of the Earth, as revealed by earthquakes.* The Quarterly journal of the Geological Society of London, 62, (1906), 456–475. (Cité en page 18.)
- E. M. Parmentier et C. Sotin, Three-dimensional numerical experiments on thermal convection in a very viscous fluid : Implications for the dynamics of a thermal boundary layer at high Rayleigh number. Physics of Fluids, 12, (2000), 609–617. (Cité en pages 44, 53, 55, 58, 67, 68, 76 et 80.)
- C. L. Pekeris, *Thermal Convection in the Interior of the Earth*. Geophysical Supplements to the Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, 3, (1935), 343–367. (Cité en page 23.)
- W. R. Peltier, Postglacial variations in the level of the sea : Implications for climate dynamics and solid-Earth geophysics. Reviews of Geophysics, 36, (1998), 603–689. (Cité en pages 8 et 15.)
- K. Petschel, S. Stellmach, M. Wilczek, J. Lulff et U. Hansen, Dissipation Layers in Rayleigh-Benard Convection : A Unifying View. Physical Review Letters, 110, (2013), 114502. (Cité en page 63.)
- E. P. van der Poel, R. Ostilla-Monico, R. Verzicco et D. Lohse, *Effect of velocity boundary conditions on the heat transfer and flow topology in two-dimensional Rayleigh-Benard convection*. Physical Review E, 90, (2014), 013017. (Cité en page 63.)
- J. P. Poirier, *Light elements in the Earth's outer core : A critical review*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 85, (1994), 319–337. (Cité en page 19.)
- J. Proudman, On the Motion of Solids in a Liquid Possessing Vorticity. Proceedings of the Royal Society of London, 92, (1916), 408–424. (Cité en page 19.)
- K. D. Putirka, Mantle potential temperatures at Hawaii, Iceland, and the mid-ocean ridge system, as inferred from olivine phenocrysts : Evidence for thermally driven mantle plumes. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 6, (2005), Q05L08. (Cité en page 106.)
- L. Rayleigh, On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side. Philosophical Magazine, 32, (1916), 529–546. (Cité en page 22.)
- Y. Ricard, M. Richards, C. Lithgow-Bertelloni et Y. Le Stunff, *A geodynamic model of mantle density heterogeneity*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 98, (1993), 21895–21909. (Cité en page 15.)
- F. M. Richter et D. P. McKenzie, *On some consequences and possible causes of layered mantle convection*. Journal of Geophysical Research, 86, (1981), 6133–6142. (Cité en page 28.)
- A. Ricolleau, Y. Fei, E. Cottrell, H. Watson, L. Deng, L. Zhang, G. Fiquet, A. L. Auzende, M. Roskosz, G. Morard et V. B. Prakapenka, *Density profile of pyrolite under the lower mantle conditions*. Geophysical Research Letters, 36, (2009), L06302. (Cité en pages 88, 92 et 108.)
- A. E. Ringwood, *The Olivine-Spinel Transition in the Earth's Mantle*. Nature, 178, (1956), 1303–1304. (Cité en page 14.)
- A. E. Ringwood, *The constitution of the mantle I : Thermodynamics of the olivine-spinel transition*. Geochimica et Cosmochimica Acta, 13, (1958), 303–321. (Cité en page 14.)
- A. E. Ringwood, *A model for the upper mantle*. Journal of Geophysical Research, 67, (1962), 857–867. (Cité en page 7.)
- A. E. Ringwood, *Phase transformations and differentiation in subducted lithosphere : Implications for mantle dynamics basalt petrogenesis and crustal evolution.* Journal of Geology, 90, (1982), 611–643. (Cité en page 92.)
- A. E. Ringwood et A. Major, *High-pressure reconnaissance investigations in the system* $Mg_2SiO_4 - MgO - H_2O$. Earth and Planetary Science Letters, 2, (1967), 130–133. (Cité en page 14.)
- A. E. Ringwood et M. Seabrook, *High-pressure phase transformations in germanate pyroxenes and related compounds*. Journal of Geophysical Research, 68, (1963), 4601–4609. (Cité en page 14.)
- J. Ritsema, H. J. van Heijst et J. H. Woodhouse, *Global transition zone tomography*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 109, (2004), B02302. (Cité en page 17.)
- P. H. Roberts, *Convection in horizontal layers with internal heat generation. Theory.* Journal of Fluid Mechanics, 30, (1967), 33–49. (Cité en pages 26, 33, 34, 50, 58, 67, 70, 72 et 76.)
- T. Rolf et P. J. Tackley, Focussing of stress by continents in 3D spherical mantle convection with self-consistent plate tectonics. Geophysical Research Letters, 38, (2011), L18301. (Cité en page 30.)

- A. Rozel, Y. Ricard et D. Bercovici, A thermodynamically self-consistent damage equation for grain size evolution during dynamic recrystallization. Geophysical Journal International, 184, (2011), 719–728. (Cité en page 30.)
- T. Sakai, E. Ohtani, H. Terasaki, N. Sawada, Y. Kobayashi, M. Miyahara, M. Nishijima, N. Hirao, Y. Ohishi et T. Kikegawa, *Fe-Mg partitioning between perovskite* and ferropericlase in the lower mantle. American Mineralogist, 94, (2009), 921– 925. (Cité en pages 93, 95, 96 et 108.)
- H. Samuel et C. G. Farnetani, *Thermochemical convection and helium concentrations in mantle plumes*. Earth and Planetary Science Letters, 207, (2003), 39–56. (Cité en page 30.)
- G. Schubert, P. Cassen et R. E. Young, *Subsolidus convective cooling histories of terrestrial planets*. Icarus, 38, (1979), 192–211. (Cité en page 61.)
- G. Schubert, D. L. Turcotte et P. Olson (Cambridge University Press, Cambridge, 2001). (Cité en page 13.)
- B. S. A. Schuberth, H. P. Bunge et J. Ristema, *Tomographic filtering of high-resolution mantle circulation models : Can seismic heterogeneity be explained by temperature alone ?* Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 10. (Cité en pages 17 et 107.)
- E. W. Schwiderski et H. J. A. Schwab, *Convection experiments with electrolytically heated fluid layers*. Journal of Fluid Mechanics, 48, (1971), 703–719. (Cité en page 68.)
- M. H. Shahnas, W. R. Peltier, Z. Wu et R. Wentzcovitch, *The high-pressure electronic spin transition in iron : Potential impacts upon mantle mixing*. Journal of Geophysical Research, 116, (2011), B08205. (Cité en pages 86, 89, 92, 106 et 108.)
- H. Sharpe et W. R. Peltier, *Parameterized mantle convection and the Earth's thermal history*. Geophysical Research Letters, 5, (1978), 737–740. (Cité en pages 27 et 61.)
- D. M. Sherman, *High-spin to low-spin transition of iron (II) oxides at high pressures : Possible effects on the physics and chemistry of the lower mantle,* tome 7 de *Advances in Physical Geochemistry* (Springer, New York, 1988). (Cité en page 92.)
- S. H. Shim, T. S. Duffy et G. Shen, *The equation of state of CaSiO₃ perovskite to 108 GPa at 300 K*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 120, (2000*a*), 327–338. (Cité en page 97.)
- S. H. Shim, T. S. Duffy et G. Shen, The stability and P—V—T equation of state of CaSiO₃ perovskite in the Earth's lower mantle. Journal of Geophysical Research, 105, (2000b), 25955–25968. (Cité en page 97.)
- P. L. Silveston, Wärmedurchgang in waagerechten Flüssigkeitsschichten. Forschung auf dem Gebiet des Ingenieurwesens A, 24, (1958), 59–69. (Cité en page 24.)

- R. Sinmyo et K. Hirose, *Iron partitioning in pyrolitic lower mantle*. Physics and Chemistry of Minerals, 40, (2013), 107–113. (Cité en pages 93, 95 et 96.)
- R. Sinmyo, K. Hirose, D. Nishio-Hamane, Y. Seto, K. Fujino, N. Sata et Y. Ohishi, Partitioning of iron between perovskite/postperovskite and ferropericlase in the lower mantle. Journal of Geophysical Research, 113, (2008), B11204. (Cité en pages 93, 95 et 96.)
- S. E. Smrekar et E. R. Stofan, Origin of Corona-Dominated Topographic Rises on Venus. Icarus, 139, (1999), 100–115. (Cité en page 69.)
- K. M. Soderlund, E. M. King et J. M. Aurnou, *The influence of magnetic fields in planetary dynamo models*. Earth and Planetary Science Letters, 333–334, (2012), 9–20. (Cité en page 19.)
- L. P. Solheim et W. R. Peltier, *Heat transfer and the onset of chaos in a spherical, axisymmetric, anelastic model of whole mantle convection*. Geophysical & Astrophysical Fluid Dynamics, 53, (1990), 205–255. (Cité en page 28.)
- C. Sotin et S. Labrosse, Three-dimensional thermal convection in an iso-viscous, infinite Prandtl number fluid heated from within and from below : applications to the transfer of heat through planetary mantles. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 112, (1999), 171–190. (Cité en pages 41, 61, 67 et 117.)
- S. Speziale, C. S. Zha, T. S. Duffy, R. J. Hemley et H. K. Mao, Quasi-hydrostatic compression of magnesium oxide to 52 GPa : Implications for the pressure-volume-temperature equation of state. Journal of Geophysical Research, 106, (2001), 515–528. (Cité en page 97.)
- D. J. Stevenson, T. Spohn et G. Schubert, *Magnetism and thermal evolution of the terrestrial planets*. Icarus, 54, (1983), 466–489. (Cité en page 61.)
- L. Stixrude et C. Lithgow-Bertelloni, *Thermodynamics of mantle minerals? II. Phase equilibria*. Geophysical Journal International, 184, (2011), 1180–1213. (Cité en page 14.)
- W. Sturhahn, J. M. Jackson et J. F. Lin, *The spin state of iron in minerals of Earth's lower mantle*. Geophysical Research Letters, 32, (2005), L12307. (Cité en pages 91, 92, 93 et 94.)
- C. Sun, Y. H. Cheung et K. Q. Xia, *Experimental studies of the viscous boundary layer* properties in turbulent Rayleigh-Benard convection. Journal of Fluid Mechanics, 605, (2008), 79–113. (Cité en page 63.)
- E. Surducan, C. Neamtu, V. Surducan, A. Limare et E. Di Giuseppe, Microwaves Heating in a Specific Experimental Configuration. Dans M. D. Lazar et S. Garabagiu, rédacteurs, Processes in Isotopes and Molecules (PIM2013), tome 1565, 161–163 (2013). (Cité en page 37.)

- E. Surducan, V. Surducan, A. Limare, C. Neamtu et E. Di Giuseppe, Microwave heating device for internal heating convection experiments, applied to Earth's mantle dynamics. Review of Scientific Instruments, 85, (2014), 124702. (Cité en page 37.)
- P. J. Tackley (1994). Three-dimensional models of mantle convection : Influence of phase transitions and temperature-dependent viscosity. Thèse de doctorat, California Institute of Technology. (Cité en pages 38 et 54.)
- P. J. Tackley, Effects of strongly variable viscosity on three-dimensional compressible convection in planetary mantles. Journal of Geophysical Research, 101, (1996), 3311–3332. (Cité en pages 29, 38, 54, 70, 93, 98 et 100.)
- P. J. Tackley, Self-consistent generation of tectonic plates in three-dimensional mantle convection. Earth and Planetary Science Letters, 157, (1998a), 9–22. (Cité en page 29.)
- P. J. Tackley, Three-dimensional simulations of mantle convection with a thermochemical CMB boundary layer : D"? Dans M. Gurnis, M. E. Wysession, E. Knittle et B. A. Buffett, rédacteurs, The Core-Mantle Boundary Region, 231–253 (AGU, 1998b). (Cité en page 30.)
- P. J. Tackley, Self-consistent generation of tectonic plates in time-dependent, threedimensional mantle convection simulations. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 1. (Cité en page 29.)
- P. J. Tackley, Self-consistent generation of tectonic plates in time-dependent, threedimensional mantle convection simulations 2. Strain weakening and asthenosphere. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 1. (Cité en page 29.)
- P. J. Tackley, Dynamics and evolution of the deep mantle resulting from thermal, chemical, phase and melting effects. Earth-Science Reviews, 110, (2012), 1–25. (Cité en page 17.)
- P. J. Tackley, D. J. Stevenson, G. A. Glatzmaier et G. Schubert, *Effects of an endo-thermic phase transition at 670 km depth in a spherical model of convection in the Earth's mantle.* Nature, 361, (1993), 699–704. (Cité en pages 28 et 38.)
- P. J. Tackley, D. J. Stevenson, G. A. Glatzmaier et G. Schubert, *Effects of multiple phase transitions in a 3-dimensional spherical model of convection in Earth's mantle.* Journal of Geophysical Research, 99, (1994), 15877–15901. (Cité en page 29.)
- J. Takahashi, Y. Tasaka, Y. Murai, Y. Takeda et T. Yanagisawa, *Experimental study* of cell pattern formation induced by internal heat sources in a horizontal fluid layer. International Journal of Heat and Mass Transfer, 53, (2010), 1483–1490. (Cité en pages 67 et 68.)
- E. Tan et M. Gurnis, *Metastable superplumes and mantle compressibility*. Geophysical Research Letters, 32, (2005), L20307. (Cité en page 18.)

- Y. Tasaka, Y. Kudoh, Y. Takeda et T. Yanagisawa, *Experimental investigation of natu*ral convection induced by internal heat generation. Journal of Physics : Conference Series, 14, (2005), 168–179. (Cité en page 68.)
- S. Tateno, K. Hirose, N. Sata et Y. Ohishi, *Determination of post-perovskite phase transition boundary up to 4400 K and implications for thermal structure in D" layer.* Earth and Planetary Science Letters, 277, (2009), 130–136. (Cité en page 16.)
- F. B. Taylor, *Bearing of the tertiary mountain belt on the origin of the earth's plan*. Geological Society of America Bulletin, 21, (1910), 179–226. (Cité en page 22.)
- G. I. Taylor, *Motion of Solids in Fluids When the Flow is Not Irrotational*. Proceedings of the Royal Society of London, 93, (1917), 99–113. (Cité en page 19.)
- S. R. Taylor et S. M. McLennan, 312 (Blackwell, Oxford, U. S., 1985). (Cité en page 9.)
- S. R. Taylor et S. M. McLennan, *The geochemical evolution of the continental crust*. Reviews of Geophysics, 33, (1995), 241–265. (Cité en page 11.)
- C. Thomas, E. J. Garnero et T. Lay, *High-resolution imaging of lowermost mantle structure under the Cocos plate*. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 109, (2004), B08307. (Cité en page 16.)
- I. N. Tolstikhin, J. D. Kramers et A. W. Hofmann, A chemical Earth model with whole mantle convection : The importance of a core ?mantle boundary layer (D") and its early formation. Chemical Geology, 226, (2006), 76–99. (Cité en page 17.)
- T. H. Torsvik, M. A. Smethurst, K. Burke et B. Steinberger, *Large igneous provinces generated from the margins of the large low-velocity provinces in the deep mantle.* Geophysical Journal International, 167, (2006), 1447–1460. (Cité en page 18.)
- A. A. Townsend, *Temperature fluctuations over a heated horizontal surface*. Journal of Fluid Mechanics, 209–241. (Cité en page 25.)
- A. A. Townsend, *Natural convection in water over an ice surface*. Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society, 90, (1964), 248–259. (Cité en pages 24, 41 et 112.)
- B. Travis, S. Weinstein et P. Olson, *Three-dimensional convection planforms with internal heat generation*. Geophysical Research Letters, 17, (1990), 243–246. (Cité en pages 27 et 67.)
- K. E. Trenberth, J. T. Fasullo et J. Kiehl, *Earth's Global Energy Budget*. Bulletin of the American Meteorological Society, 90, (2009), 311. (Cité en page 4.)
- D. J. Tritton et M. N. Zarraga, Convection in horizontal layers with internal heat generation. Experiments. Journal of Fluid Mechanics, 30, (1967), 21–31. (Cité en pages 26, 67 et 68.)

- R. Trompert et U. Hansen, Mantle convection simulations with rheologies that generate plate-like behaviour. Nature, 395, (1998), 686–689. (Cité en page 29.)
- T. Tsuchiya, R. M. Wentzcovitch, da Silva C. R. S. et S. de Gironcoli, Spin transition in magnesiowüstite in Earth's lower mantle. Physical Review Letters, 96, (2006), 198501. (Cité en page 92.)
- W. D. Urry, Significance of radioactivity in geophysics Thermal history of the Earth. Transactions, American Geophysical Union, 30, (1949), 171–180. (Cité en page 7.)
- R. Verzicco et K. R. Sreenivasan, A comparison of turbulent thermal convection between conditions of constant temperature and constant heat flux. Journal of Fluid Mechanics, 595, (2008), 203–219. (Cité en page 63.)
- K. Vilella et E. Kaminski (2015). *Fully determined scaling laws for volumetrically heated convective systems*. (Cité en pages 68, 70, 73, 76, 78 et 80.)
- S. Wagner, O. Shishkina et C. Wagner, *Boundary layers and wind in cylindrical Rayleigh-Benard cells*. Journal of Fluid Mechanics, 697, (2012), 336–366. (Cité en page 63.)
- A. Wegener (Braunschweig, Vieweg, 1915). (Cité en page 22.)
- S. A. Weinstein et P. Olson, *Planforms in thermal convection with internal heat sources at large Rayleigh and Prandtl numbers*. Geophysical Researh Letters, 3, (1990), 239–242. (Cité en pages 50 et 67.)
- Q. Williams, J. Revenaugh et E. Garnero, A correlation between ultra-low basal velocities in the mantle and hot spots. Science, 281, (1998), 546–549. (Cité en page 17.)
- B. J. Wood, *Phase transformations and partitioning relations in peridotite under lower mantle conditions*. Earth and Planetary Science Letters, 174, (2000), 341–354. (Cité en pages 14, 93, 95 et 96.)
- J. A. Wood, *Chondrules and the Origin Of the Terrestrial Planets*. Nature, 194, (1962), 127–130. (Cité en page 7.)
- K. Q. Xia, S. Lam et S. Q. Zhou, *Heat-flux measurement in high-Prandtl-number turbulent Rayleigh-Benard convection*. Physical Review Letters, 88, (2002), 064501. (Cité en page 63.)
- S. Xie et P. J. Tackley, *Evolution of helium and argon isotopes in a convecting mantle*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 146, (2004), 417–439. (Cité en page 30.)
- Y. Ye, S. H. Gu, C. ans Shim, Y. Meng et V. Prakapenka, *The postspinel boundary in pyrolitic compositions determined in the laser-heated diamond anvil cell*. Geophysical Research Letters, 41, (2014), 3833–3841. (Cité en page 15.)

Q. Zhou, B. F. Liu, C. M. Li et B. C. Zhong, Aspect ratio dependence of heat transport by turbulent Rayleigh-Benard convection in rectangular cells. Journal of Fluid Mechanics, 710, (2012), 260–276. (Cité en page 63.)