

Dynamique du fractionnement thermique et chimique lors de la différenciation des planètes telluriques

Victor Lherm

► To cite this version:

Victor Lherm. Dynamique du fractionnement thermique et chimique lors de la différenciation des planètes telluriques. Sciences de la Terre. Université de Lyon, 2021. Français. NNT: 2021LYSEN029 . tel-03377150

HAL Id: tel-03377150 https://theses.hal.science/tel-03377150

Submitted on 14 Oct 2021

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers. L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Numéro National de Thèse : 2021LYSEN029

Thèse de Doctorat de l'Université de Lyon opérée par **l'École Normale Supérieure de Lyon**

École Doctorale N°52 Physique et Astrophysique (PHAST)

Spécialité du doctorat : Géophysique Discipline : Sciences de la Terre

Soutenue publiquement le 22/07/2021, par :

Victor LHERM

Dynamique du fractionnement thermique et chimique lors de la différenciation des planètes telluriques

Devant le jury composé de :

COLTICE Nicolas	Professeur des Universités	École Normale Supérieure	Rannorteur
COLLICE, INICOLAS	r foresseur des Oniversites	Leole Normale Superieure	Rapporteur
Le Bars, Michael	Directeur de Recherche	Aix-Marseille Université	Rapporteur
Davaille, Anne	Directrice de Recherche	Université Paris-Saclay	Examinatrice
Micнauт, Chloé	Professeure des Universités	ENS de Lyon	Examinatrice
Olson, Peter	Professeur	University of New Mexico	Examinateur
SAMUEL, Henri	Chargé de Recherche	IPGP, Université de Paris	Examinateur
Deguen, Renaud	Professeur des Universités	Université Grenoble Alpes	Directeur

Résumé

Les planètes telluriques du système solaire se sont formées par l'accrétion successive de corps de plus en plus massifs. Simultanément, les planètes se sont différenciées en un noyau métallique entouré d'un manteau silicaté. Le métal apporté par les impacteurs est en déséquilibre thermodynamique avec les silicates de la proto-planète, ce qui produit des échanges métal-silicate conduisant à un fractionnement chimique et thermique entre le manteau et le noyau. Ce fractionnement est contraint par des données géochimiques, qui apportent également des informations sur la chronologie de l'accrétion et sur les conditions thermodynamiques de la différenciation. L'interprétation de ces données, ainsi que l'évolution thermique, chimique et magnétique des planètes et les conséquences géodynamiques qui en découlent, dépendent donc crucialement de l'efficacité d'équilibrage entre métal et silicates. L'objectif de cette thèse est d'étudier les échanges thermiques et chimiques dans les océans de magma afin de mieux contraindre l'efficacité d'équilibrage. La première partie s'intéresse à l'influence des impacts planétaires sur l'homogénéisation métal-silicate. Des expériences analogues en laboratoire permettent d'étudier l'évolution de la taille des cratères, le mélange produit pendant l'impact et le champ de vitesse associé à la cratérisation. La seconde partie s'intéresse à l'équilibrage métal-silicate pendant la phase post-impact, c'est-à-dire durant la migration du métal dans l'océan de magma, sous la forme d'un thermique turbulent. Des simulations numériques et des expériences permettent alors de mettre en évidence le rôle de l'étirement de la phase métallique sur l'équilibrage.

Abstract

During the formation of the solar system, terrestrial planets formed by the successive accretion of increasingly massive bodies. These planets simultaneously differentiate into a metal core surrounded by a silicate mantle. The metal core of the impactors is in thermodynamic disequilibrium with the silicates of the growing planet, which produces metal-silicate mass and heat transfers, and leads to a chemical and thermal fractionation between the mantle and the core. Fractionation is constrained by geochemical data, which also provide information on the chronology of accretion and on the thermodynamic conditions of differentiation. The interpretation of geochemical data, together with the thermal, chemical and magnetic evolution of the planets, and the resulting geodynamical consequences, depend crucially on the metalsilicate equilibration efficiency. The purpose of this thesis is therefore to study heat and mass transfers in magma oceans in order to better constrain the equilibration efficiency. The first part focuses on the influence of planetary impacts on metal-silicate equilibration. Analogue laboratory experiments are used to study the evolution of the crater size, the mixing produced during the impact and the cratering velocity field. The second part focuses on metal-silicate equilibration during the post-impact stage, *i.e.* during the migration of the metal phase in the magma ocean as a turbulent thermal. Numerical simulations and experiments are then used to determine the role of the metal phase stretching on the equilibration dynamics.

Remerciements

À travers ces quelques lignes j'aimerais remercier celles et ceux qui m'ont aidé, encouragé et soutenu, participant ainsi à faire des ces quelques années un enchaînement de bons moments! J'espère n'avoir oublié personne dans cette partie qui sera peut-être la plus scrutée du manuscrit!

En premier lieu, je tiens à remercier Renaud pour son encadrement, que j'ai énormément apprécié. Merci pour ta disponibilité sans faille, même pendant les mois difficiles des confinements, la qualité toujours excellente de nos échanges scientifiques, et tous les conseils avisés que tu as pu me donner. Un grand merci aussi pour toutes les conférences auxquelles tu m'as permis d'aller et qui furent extrêmement enrichissantes, tant sur le plan professionnel que personnel! Ce fut un réel plaisir et une réelle motivation de faire cette thèse sous ta direction.

Je voudrais également remercier les membres du jury, Nicolas Coltice, Michael Le Bars, Anne Davaille, Chloé Michaut, Peter Olson et Henri Samuel, d'avoir accepté d'évaluer mon travail.

Un grand merci aussi à Thierry, Maylis et Tanguy pour les différents échanges que nous avons pu avoir au cours de la thèse. J'espère sincèrement qu'ils continueront dans le futur ! Merci également à Jean-Baptiste W. et Vincent C. pour les discussions scientifiques constructives (en grande majorité, bien sûr !) que nous avons pu avoir autour d'une cuve fêlée ou d'un café. Merci aussi à Fabien D. pour son aide précieuse et hyper efficace, qui m'a toujours permis de résoudre les petits soucis informatiques du quotidien. Merci à Samuel M. pour les impressions de poster toujours parfaitement soignées et sa tolérance sur les deadlines. Merci enfin à Marc Moulin pour la fabrication des manips et à Judith Vatteville pour son aide sur la mise en place des méthodes expérimentales.

Je voudrais maintenant remercier toutes les personnes que j'ai eu la chance de rencontrer dans la splendide brique soviétique qu'est le bâtiment Géode, où j'ai pu assouvir ma passion des gouttes !

Mes premiers remerciements vont évidemment à Chloé et Rémi, deux êtres exceptionnels (surtout après trois Judas) avec qui j'ai eu l'honneur de partager la moitié (presque) des bureaux du R4, pour finalement échouer avec fracas dans le Bureau Des Plus Beaux (nouvellement rageux), aussi appelé le bureau 401 par les boomers. Merci Chloé pour tous les fous rires qu'on a pu avoir au labo (en filmant des clips d'anthologie dans des conditions parfois extrêmes) ou en conf à l'autre bout du monde. Merci Rémi pour toutes les discussions politiques : la start-up nation, les lacrymos et Usul, ça rapproche. Merci à tous les deux pour votre soutien indéfectible dans tous les moments difficiles (notamment les fins de raclette). Je voudrais également remercier Briscard, avec qui j'ai aussi partagé un bureau et un appartement (sans toi le confi-

nement aurait été bien trop calme). Merci pour les apéros confinés, la visite de Bergen, ton rire communicatif (sauf pour les voisins), et surtout pour m'avoir carry sur Dofus.

Merci aussi à la fine équipe de la Doua pour le fun permanent, les apéros au Condorcet (jamais avant 14h) et les soirées déjantées! Merci Cédric pour les discussions ciné de qualité (Marlène > Denise), le motoball, les raviolis et J-P Coffe. Merci Lucia pour la qualité toujours exceptionnelle de tes « TITRE! » et les virées en caddie à la Feyssine. Merci Robin, Anastasis, Selma, Sylvain, Clément, Mélissa et Maëlis pour les repas et les cafés partagés au R6, toujours dans la bonne humeur et sans jamais juger la bouffe des autres. Un jour, peut-être, tou.te.s les doctorant.e.s pourront manger au Domus.

Merci aussi à Elena, Samuel B., Valentine, Ivan, Matthieu, Navid, Arnauld, Véro, Vincent G., Marianne, Cécile, Vincent L., Thomas, Éric et Cathy, que j'ai croisé moins souvent mais avec qui il est toujours sympathique de prendre un café ou de partager un repas.

Également un très grand merci à celles et ceux qui ont eu la chance d'échapper au locaux flambant neufs du bâtiment Géode! Merci Delphine pour les après-midi jeu et les bières dans le Jaccu. Merci Pauline et Thomas pour le camping sous la pluie et les soirées Just Quiche que j'affectionne particulièrement. Merci Auguste et Léa pour les soirées Halloween (je vends un costume de petit pois, pas cher). Merci Anaïs et Thibaut pour les discussions autour d'une bière au Johnny's! Merci Momo pour les confs au Canada et aux États-Unis, désolé pour la rando des enfers dans les Rockies!

Merci enfin à tou.te.s les géologues de la promo de L3, Benjamin, Marie C., Marie L., Ophélie, Stan, Val, Hugo, Romain, J-B, Daphné, Thomas, j'en oublie sûrement, avec qui on a bien randonné en terrain et vomi sur le Thétys II!

Bon, mais la société n'étant pas exclusivement composée de géologues, il reste quand même pas mal de monde à remercier, et pas les moindres! D'abord, un immense merci à toute la famille Boa avec qui j'ai partagé et je partage toujours des week-ends mythiques, de pures semaines de vacances et des voyages inoubliables à l'autre bout du monde. Merci Paul d'avoir su endurer mon amour pour le fromage de chèvre, pour les débats interminables sur des sujets stériles, mais passionnants, et merci pour les dizaines de films du dimanche soir! Merci Emma pour tous les bons moments à Lyon autour d'un scone, ou avec du Norvegia au fin fond des Lofoten. Merci Yann pour les bivouacs magiques sous les étoiles et les randos de fou qu'on a partagé tous les deux. Merci Nono pour tous les Cascada qu'on a dansé ensemble, les brunchs, et autres réjouissances culinaires qu'on a partagé (fooood), et aussi ton soutien dans les moments pas évidents. Merci Félix pour tous les dés (plus il y en a mieux c'est, il parait) et les disques qu'on a lancé ensemble, et pour l'ambiance semi-calme du bus de Kerlann! Merci Mathieu pour tes pains d'épices et autres pâtisseries et pour les parties interminables de Zombicide. Merci Vincent pour les discussions photo et les nuits à photographier la voie lactée entre deux champs. Merci Loulou pour les soirées (oubliées pour certaines) en Festive où sur une terrasse d'Arequipa. Merci Théo pour les rigolades au bord de la piscine, du terrain de Mölkky, ou à bord de nos bolides en Islande. Merci Estelle, pour ABBA, les soirées dansantes et titine qui nous aura fait voir du pays! Merci Nathalie pour la colocation en A51 (Taniaaaa) et les bons moments au CR21. Merci Victor pour les soirées cocktails et les glissades dans les toboggans du WEI.

Merci également à Quentin (meilleur partenaire de bière-pong) pour les bouffées d'endorphine sur la Sainté-Lyon. Merci aussi à Flora pour la virée bostonienne, les soirées parisiennes et les pubs londoniens. Merci aux PhDisc pour les milliers de disques lancés en votre compagnie, et plus récemment, les dizaines d'énigmes résolues avec brio. D'ailleurs, *les clés de Blaise sont sous la table*.

Remontons maintenant un peu dans le temps à l'époque de la prépa ! Merci à Florian, Émile, Catherine et Madeleine pour les bons moments passés ensemble à Fénelon. La sortie du mercredi midi aux Rois de la Frite me manque un peu !

Continuant notre voyage de remerciements, nous arrivons finalement au lycée! Merci à Clément et Édouard, mes deux athlètes préférés avec qui nous avons réinventé l'histoire du BlackBerry. Merci aussi à Fabien et Behrouz pour votre amitié de longue date, ponctuée de nuits au parc Raspail et de belles soirées en Suède et aux Pays-Bas.

Pour terminer, un grand merci à ma famille et à leur soutien éternel. Merci Papa et Maman pour la curiosité et le goût pour l'aventure que vous avez su me transmettre. Merci enfin à mon frère Gaspard pour tous les bons moments et discussions politiques intenses qui ne manquent jamais de pimenter les vacances de Noël!

Table des matières

In	trod	luction générale	1
Ι	Pha	ase d'impact	9
In	trodu	iction	11
	Dim	ensionless numbers	11
	Expe	erimental planetary impacts	12
	Expe	erimental set-up	14
1	Étuc	de des cratères d'impact	17
	1.1	Introduction	17
	1.2	Backlighting	19
	1.3	Phenomenology of the cratering process	20
	1.4	Evolution of the crater size	24
		1.4.1 Energy conservation model	24
		1.4.2 Time evolution	27
		1.4.3 Energy partitioning and kinetic energy correction	27
		1.4.4 Maximum crater radius and opening time	29
		1.4.5 Low Froude number experiments	34
	1.5	Effect of the density ratio on the crater geometry	36
		1.5.1 Time evolution	36
		1.5.2 Maximum crater flattening	41
		1.5.3 Crater geometry models	43
	1.6	Impact-induced dispersion of the impactor's core	45
	1.7	Conclusion and perspectives	46
2	Étuc	de de l'instabilité de Rayleigh-Taylor induite par l'impact	51
	2.1	Introduction	51
	2.2	Laser-Induced Fluorescence	52
	2.3	Phenomenology of the Rayleigh-Taylor instability	54
	2.4	Evolution of the Rayleigh-Taylor instability	58
		2.4.1 Early-time wavelength	58
		2.4.2 Mixing layer thickness	61
	2.5	Metal-silicate equilibration during the impact	72
	2.6	Conclusion and perspectives	77
3	Étuc	de du champ de vitesse induit par l'impact	81
	3.1	Introduction	81

	3.2	Vélocimétrie par image des particules						
	3.3	Phénoménologie de la cinématique de cratérisation			86			
		3.3.1	Description de l'écoulement					86
		3.3.2	Diagnostique expérimental					86
	3.4	Modéli	sations du champ de vitesse					93
		3.4.1	Modèles publiés					93
		3.4.2	Modèle cinématique					96
		3.4.3	Modèle dynamique					100
	3.5	Conclu	sion et perspectives					104
	Anne	exe 3.A	Équations du modèle dynamique					109
		3.A.1	Modèle complet					109
		3.A.2	Modèle simplifié	•				109
Co	onclus	sion et j	perspectives					111
Ar	inexe	s						115
	Anne	exe I.A	Propriétés physiques des sels en solution aqueuse	_				115
	Anne	exe LB	Mesure des tensions de surface		•	•	•••	115
	Anne	exe LC	Mesure du rayon des gouttes					117
	Anne	exe I.D	Mesure des vitesses d'impact					118
			1					
Π	Ph	ase po	ost-impact					121
In	trodu	ction						123
	Sépa	ration n	nétal-silicate dans un thermique turbulent	•	•	•		123
	Équi	valence	entre échanges chimiques et thermiques	•				125
	Nom	bres sar	ns dimension	•	•	•		127
	Brass	sage (sti	rring) et mélange (<i>mixing</i>)	•	•	•		129
4	Étud	le num	érique du mélange post-impact					131
	4.1	Introdu	uction	•				131
	4.2	Numer	ical model	•				133
		4.2.1	Geometries	•				133
		4.2.2	Equations	•		•		133
		4.2.3	Numerical solver: Basilisk	•	•	•		135
	4.3	The pa	th toward equilibration in a magma ocean	•		•		136
		4.3.1	Regime diagram	•		•		136
		4.3.2	Equilibration times	•		•		138
	4.4	Equilib	pration in the building blocks of the fragmentation sequence .	•	•	•		138
		4.4.1	Stretched isolated sheets	•	•	•		140
		4.4.2	Stretched isolated ligaments	•	•	•		144
		4.4.3	Free-falling drops	•		•		147
	4.5	Equilib	pration in a turbulent thermal	•	•	•		148
		4.5.1	Deformation and stretching dynamic	•	•	•		148
		4.5.2	Equilibration time	•	•			148
		4.5.3	The role of stretching on equilibration	•	•	•		149
		4.5.4	Probability distribution functions of the scalar field	•	•	•		150
		4.5.5	Influence of the viscosity contrast					151

	4.5.6	Comparison with 3D simulations	. 154
4.6	Equilibr	ation in a magma ocean	. 155
4.7	Conclus	ion and perspectives	. 156
App	endix 4.A	Snapshots of the stretched isolated sheet	. 160
Appo	endix 4.B	Snapshots of the stretched isolated ligament	. 163
Appo	endix 4.C	Snapshots of the free-falling drop	. 167
5 Étuc	le expéri	imentale du mélange post-impact	175
5.1	Introduc	ction	. 175
5.2	Expérier	nces	. 177
	5.2.1	Dispositif expérimental	. 177
	5.2.2	Paramètres expérimentaux	. 179
	5.2.3	Diagnostique expérimental	. 181
5.3	Descript	tion de l'écoulement	. 183
5.4	Entraîne	ement turbulent dans un thermique	. 189
	5.4.1 ′	Taille et position	. 189
	5.4.2	Homogénéisation apparente	. 192
5.5	Cinémat	tique de l'écoulement	. 195
	5.5.1	Circulation	. 195
	5.5.2 ′	Taux de déformation	. 197
	5.5.3	Élongation des structures	. 202
	5.5.4	Spectre spatial d'énergie cinétique	. 204
5.6	Dynami	que du mélange	. 207
	5.6.1	Moments de la concentration	. 207
	5.6.2	Production des gradients de concentration	. 209
	5.6.3	Densité de probabilité de concentration	. 211
	5.6.4	Densité de probabilité des incréments de concentration	. 219
	5.6.5	Fonctions de structure	. 222
5.7	Hétérog	énéité de l'homogénéisation métal-silicates	. 223
5.8	Conclus	ion et perspectives	. 228
Anne	exe 5.A	Calibration intensité-concentration	. 230
Conclus	sion et p	erspectives	231
Conclu	usion g	énérale	233

237

Introduction générale

Accrétion

Les planètes telluriques du système solaire, telles que la Terre, se sont formées il y a environ 4.5 Ga par l'accrétion successive de corps de plus en plus massifs (e.g. Chambers, 2010; Lunine et al., 2011; Walsh et al., 2011). L'effondrement de la nébuleuse solaire provoque d'abord la formation d'un disque protoplanétaire composé de gaz et de poussières. Ces poussières micrométriques s'agglomèrent entre elles pour former des particules millimétriques à centimétriques sous l'action de forces électromagnétiques et de van der Waals (Poppe et al., 2000). Sous l'effet de mécanismes liés à la turbulence du disque protoplanétaire, ces particules s'agglomèrent localement pour donner très rapidement (1 ka) naissance à des corps kilométriques appelés des planétésimaux (Cuzzi et al., 2001; Johansen et al., 2007). Il s'ensuit une phase de croissance oligarchique, aussi appelée runaway growth, où les interactions gravitationnelles favorisent la croissance des planétésimaux les plus massifs au détriment des autres. Cela conduit rapidement (0.1 - 1 Ma) à la formation d'embryons planétaires dont la taille est comprise entre celle de la Lune et de Mars (Kokubo et Ida, 1996). Enfin, suite à l'épuisement du nombre de planétésimaux, les embryons entrent finalement en collision, sur une échelle de temps plus lente (10 - 100 Ma), produisant des impact géants, dont le dernier serait à l'origine de la Lune (Canup, 2012; Cuk et Stewart, 2012; Mastrobuono-Battisti et al., 2015).

Différenciation du noyau des planètes telluriques

La dynamique et la structure actuelle de la Terre et des autres planètes telluriques est en partie héritée des épisodes de différenciation concomitants à l'accrétion de la planète. La formation d'un noyau métallique riche en fer entouré d'un manteau silicaté se produit à partir de la séparation sous l'action de la gravité des matériaux immiscibles apportés par les impacteurs. A condition que l'une des phases soit liquide, cette séparation se produit en un temps négligeable devant le temps caractéristique d'accrétion. Par ailleurs, la phase métallique apportée par les impacteurs n'est probablement pas à l'équilibre thermodynamique avec les silicates du manteau de la planète en formation. Des échanges thermiques et chimiques entre métal et silicates sont donc susceptibles de se produire pendant la migration du métal vers le noyau (figure 1). Le partitionnement thermique et le fractionnement chimique entre le manteau et le noyau dépendent alors directement de la nature des processus physiques de séparation entre métal et silicates impliqués dans la différenciation (*e.g.* Stevenson, 1990; Wood <u>et al.</u>, 2006; Rubie <u>et al.</u>, 2015).

Pendant l'accrétion, les embryons planétaires subissent un chauffage intense ayant pour origine la désintégration d'isotopes radioactifs, en particulier le ²⁶Al et le ⁶⁰Fe, la réduction de l'énergie potentielle gravitationnelle du métal des impacteurs migrant vers le noyau de la planète en formation, et l'énergie cinétique libérée durant les impacts. Les impacteurs, d'abord indifférenciés, sont susceptibles de se différencier rapidement par chauffage radioactif lorsqu'au



FIGURE 1 – Schéma illustrant les différents processus de ségrégation métal-silicates pouvant se produire pendant la différenciation des planètes telluriques. Adapté à partir de Rubie <u>et al.</u> (2015).

moins une des deux phases est à l'état liquide, les modèles d'accrétion montrant d'ailleurs que la majorité de la masse de la Terre s'est accrétée à partir d'impacteurs différenciés (Kleine <u>et al.</u>, 2002; Scherstén <u>et al.</u>, 2006). L'énergie libérée par les impacts provoque la fusion répétée d'une fraction significative de la planète et conduit donc à la formation d'océans de magma profonds dont l'étendue dépend de la taille des impacteurs impliqués et est susceptible de couvrir l'intégralité de la surface planétaire. La durée de vie de ces océans de magma dépend de nombreux paramètres (*e.g.* Solomatov, 2015). En particulier, la présence d'une atmosphère (Abe, 1997) ou d'une croûte conductrice (Spohn et Schubert, 1991) augmente significativement leur durée de vie.

Pendant la dernière phase de l'accrétion, les événement catastrophiques et extrêmement énergétiques que sont les impacts géants provoquent à la fois la fusion de l'impacteur et de la surface planétaire, ce qui libère le noyau métallique de l'impacteur dans un océan de magma entièrement liquide (Tonks et Melosh, 1993). Cette étape correspond ainsi aux conditions initiales de l'écoulement à l'origine de la migration de la phase métallique vers le noyau. Juste

après l'impact, la phase métallique migre vers le noyau, sous l'effet de sa densité excédant celle des silicates environnants. L'écoulement, un thermique turbulent immiscible ¹ (figure 2), conduirait à la dispersion et à la fragmentation de la phase métallique (Deguen <u>et al.</u>, 2011, 2014; Landeau <u>et al.</u>, 2014), et pourrait ainsi former des gouttes centimétriques, permettant un équilibrage thermique et chimique efficace entre métal et silicates (*e.g.* Rubie <u>et al.</u>, 2003; Dahl et Stevenson, 2010; Samuel, 2012; Deguen <u>et al.</u>, 2014). L'équilibrage métal-silicates est favorisé dès la phase de cratérisation où l'ouverture et la fermeture du cratère suivant l'impact provoquent un étirement et un dispersion de la phase métallique (Kendall et Melosh, 2016). La phase métallique dispersée sédimente finalement à la base de l'océan de magma et forme une mare de métal (Stevenson, 1990).



FIGURE 2 – Thermique turbulent immiscible. Un volume de 169 mL d'une solution aqueuse de NaI ($\rho_1 = 1601 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$) chute dans de l'huile de silicone ($\rho_2 = 821 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ et $\mu_2 = 8.2 \times 10^{-4} \text{ Pa} \cdot \text{s}$), à Re = 5.5×10^4 , Bo = 3.4×10^4 , $\rho_1/\rho_2 = 1.95$, $\mu_1/\mu_2 = 1.2$. L'intervalle de temps entre chaque image est de 0.2 s et la largeur de chaque image est 19 cm. Adapté à partir de Deguen (2018).

Le métal, toujours à l'état liquide en raison de son point de fusion plus faible que celui des silicates environnants, migre alors vers le noyau en formation à travers la partie solide, ou partiellement fondue, du manteau (*e.g.* Stevenson, 1990; Rubie <u>et al.</u>, 2015). Trois processus de différenciation faisant intervenir des interactions solide-liquide sont alors susceptible d'intervenir : le diapirisme, la fracturation et la percolation. En comparaison avec la séparation métal-silicate dans l'océan de magma, ces processus semblent avoir une contribution négligeable à l'homogénéisation entre les phases.

La différence de densité entre la mare de métal et le manteau sous-jacent serait à l'origine d'instabilités de Rayleigh-Taylor provoquant la migration du métal vers le noyau par diapirisme (*e.g.* Karato et Murthy, 1997; Monteux <u>et al.</u>, 2009; Samuel <u>et al.</u>, 2010). De par le diamètre important de ces diapirs, de l'ordre de 1 à 10 km, le diapirisme ne semble pas contribuer significativement à l'équilibrage entre métal et silicates.

La mare de métal est aussi susceptible de migrer vers le noyau par fracturation, ou *diking* en anglais (*e.g.* Rubin, 1993, 1995; Stevenson, 2003). Si le contraste de viscosité entre le métal et les

^{1.} Un thermique turbulent immiscible est un écoulement diphasique (une phase métallique et une phase silicatée) à caractère tourbillonnaire dont la mise en mouvement provient de la différence de densité entre les phases. La flottabilité de l'écoulement peut provenir d'une différence de densité d'origine thermique ou compositionnelle. Le terme « thermique », *thermal* en anglais, est hérité des « thermiques atmosphériques », dont l'origine est lié à des différences de température dans la colonne d'air (Woodward, 1956, 1958, 1959).

silicates environnants est supérieur à $10^{11} - 10^{14}$, ce qui est le cas en considérant des viscosités respectivement égales à 10^{-2} Pa · s et 10^{19} Pa · s pour la phase métallique et la phase silicatée, les dikes métalliques sont alors susceptibles de migrer très rapidement à travers le manteau solide. Par exemple, un volume de métal correspondant à une sphère de 60 m de diamètre atteindrait le noyau à partir de la surface en seulement une semaine (Stevenson, 2003). La fracturation ne semble donc pas non plus contribuer significativement à l'équilibrage entre métal et silicates.

La percolation de la phase métallique dans la matrice silicatée est également susceptible de contribuer à la différenciation, à condition que l'angle de contact entre deux interfaces solideliquide s'intersectant avec une interface solide-solide au niveau d'un point triple n'excède pas 60° (Stevenson, 1990). Le mécanisme de percolation pourrait alors contribuer efficacement à l'équilibrage métal-silicate. Néanmoins, des expériences et de simulations numériques ont montré que dans les conditions thermodynamiques du manteau profond, l'angle de contact excède sa valeur critique (*e.g.* Rubie <u>et al.</u>, 2015), y rendant difficile la percolation. Par ailleurs, même dans des conditions où la percolation est possible, la phase métallique évolue vers une différenciation par diapirisme (Ricard et al., 2009; Srámek et al., 2010).

Fractionnement chimique et partitionnement thermique

L'homogénéisation thermique et chimique résultant de la ségrégation métal-silicate a d'importantes implications géodynamiques. Le partitionnement thermique détermine le contraste de température initial entre le noyau et le manteau, ce qui contrôle l'évolution magnétique et thermique de la planète (Williams et Nimmo, 2004; Monteux <u>et al.</u>, 2011). En particulier, ce partitionnement contrôle la formation et l'évolution des océans de magma précoces (*e.g.* Sun <u>et al.</u>, 2018), avec notamment la possibilité pour un océan de magma basal de se former (Labrosse <u>et al.</u>, 2007). Il affecte aussi le cycle des éléments volatiles dans le manteau, avec des conséquences sur la tectonique des plaques (Albarède, 2009).

Le fractionnement chimique contrôle la composition du manteau et du noyau et dépend du mode de ségrégation métal-silicates. Les échanges thermiques entre le manteau et le noyau étant très lents, la composition chimique de la Terre est le reflet des différentes étapes de la différenciation et peut être utilisée pour contraindre les processus physiques impliqués dans la ségrégation métal-silicate (*e.g.* Wood <u>et al.</u>, 2006). La nature et l'abondance des éléments légers et radioactifs (Gessmann et Wood, 2002; Corgne <u>et al.</u>, 2007; Bouhifd <u>et al.</u>, 2007; Badro <u>et al.</u>, 2015), ainsi que la quantité de magnésium (Badro <u>et al.</u>, 2016; O'Rourke <u>et al.</u>, 2017; Badro <u>et al.</u>, 2018) dans le noyau dépendent des conditions de pression P, de température Tet de fugacité d'oxygène fO_2 auxquelles métal et silicates se sont équilibrés (Siebert <u>et al.</u>, 2011, 2012; Fischer <u>et al.</u>, 2015) au moment de leur dernière interaction, pendant les différentes étapes de la différenciation.

L'existence d'une dynamo précoce (Tarduno <u>et al.</u>, 2010, 2015) dépend de la possibilité d'entretenir une convection thermique ou compositionnelle dans le noyau, et donc à la fois du partitionnement thermique et du fractionnement chimique. La production de chaleur par des éléments radioactifs (Nimmo <u>et al.</u>, 2004) et l'exsolution de magnésium dans le noyau (Badro <u>et al.</u>, 2016, 2018) sont des mécanismes pouvant y contribuer. Cependant, cette contribution pourrait avoir été insuffisante (Blanchard <u>et al.</u>, 2017; O'Rourke <u>et al.</u>, 2017). Une dynamo silica-tée dans un océan de magma basal pourrait alors expliquer l'existence d'un champ magnétique précoce (Ziegler et Stegman, 2013; Stixrude et al., 2020).

Contraintes géochimiques

Les seules données permettant de contraindre les mécanismes physiques de ségrégation métal-silicates pendant la différenciation des planètes telluriques sont des mesures géochimiques (figure 3). Ces données constituent un problème inverse permettant de déterminer les paramètres de l'accrétion et de la différenciation.



FIGURE 3 – Contraintes géochimiques (géochronomètres, coefficients de partage métalsilicates) utilisées pour déterminer les paramètres de l'accrétion et les conditions de la différenciation.

Les données géochimiques incluent d'une part des géochronomètres tels que les systèmes Hf-W et U-Pb, qui permettent en particulier d'estimer la durée de l'accrétion (e.g. Yin et al., 2002; Kleine et al., 2002, 2009; Rudge et al., 2010). D'autre part, pour chaque élément, le fractionnement chimique estimé entre le manteau et le noyau, obtenu à partir de modèles comparant les compositions estimées de la Terre dans son ensemble et de la Terre silicatée (manteau et croûte), peut être comparé aux mesures expérimentales des coefficients de partage obtenus en laboratoire. Cela permet de contraindre les conditions (P, T, fO_2) auxquelles se sont équilibrés métal et silicates à chaque étape de la différenciation (e.g. Murthy, 1991; Li et Agee, 1996; Chabot et al., 2005; Wood et al., 2006; Siebert et al., 2013). Les quantités cibles incluent le temps caractéristique d'accrétion t_a de la planète, la courbe d'accrétion M(t), c'est-à-dire l'évolution de la masse de la planète au cours du temps, les conditions (P, T, fO_2) d'homogénéisation métal-silicates pendant la migration du métal vers le noyau, ainsi que le degré d'équilibrage chimique entre la phase métallique et la phase silicatée. L'inversion des données géochimiques devrait permettre d'obtenir les quantités cibles, mais le problème inverse est en réalité sous-déterminé, avec un nombre de degrés de liberté bien supérieur au nombre de contraintes apportées par les données. Par conséquent, des hypothèses sont nécessaires pour mener à bien l'inversion, en particulier concernant la pression et la température d'équilibrage, la forme de la courbe d'accrétion, ou encore l'efficacité de l'équilibrage chimique entre métal et silicates.

Ce problème d'inversion sous-déterminée est bien illustré par le système Hf-W et son utilisation pour déterminer le temps caractéristique d'accrétion. L'hafnium est un élément lithophile ayant une affinité plus grande pour la phase silicatée, tandis que le tungstène est un élément sidérophile, ayant une affinité plus grande pour la phase métallique. Après équilibrage chimique, l'hafnium et le tungstène sont donc censés se retrouver dans les deux phases dans des proportions correspondant à leur coefficient de partage. Cependant, les mesures géochimiques montrent un excès de tungstène radiogénique dans la Terre silicatée (Kleine <u>et al.</u>, 2002; Yin <u>et al.</u>, 2002), ce dernier s'expliquant probablement par un mélange entre deux modèles extrêmes. D'une part, si la durée de l'accrétion et de la différentiation est du même ordre de grandeur que la demi-vie du ¹⁸²Hf, un excès de ¹⁸²W sera produit dans le manteau après la fin de la différentiation. D'autre part, si l'équilibrage chimique est incomplet, une partie du ¹⁸²W se retrouvera piégé dans le manteau malgré son caractère sidérophile. En cas d'équilibrage parfait entre métal et silicates, le chronomètre Hf-W prédit une durée d'accrétion de l'ordre de 30 Ma (Kleine et al., 2002; Yin et al., 2002). Cette durée est cependant allongée significativement en cas d'équilibrage imparfait (Kleine et al., 2004, 2009; Rudge et al., 2010) pour atteindre des valeurs dépassant 100 Ma. En raison de cette tendance inverse entre l'efficacité d'équilibrage et la durée de l'accrétion, une valeur précise est difficile à déterminer à partir du système Hf-W. En revanche, dans une certaine limite, ce système isotopique permet d'obtenir une borne inférieure pour le degré d'équilibrage k entre métal et silicates, à savoir $k \ge 0.36$ (Rudge et al., 2010).

L'abondance des éléments sidérophiles (par exemple Cr, V, W, Ni ou encore Co) mesurée dans la Terre silicatée montre un enrichissement de ces éléments en comparaison avec les valeurs attendues à partir des coefficients de partage à basse température et basse pression (Murthy, 1991; Wood <u>et al.</u>, 2006). Cette situation, connue en tant que « problème de l'excès des éléments sidérophiles », correspond à un déséquilibre chimique entre le noyau et le manteau (Ringwood, 1966). Parmi les phénomènes permettant d'expliquer ce déséquilibre (*e.g.* Wood <u>et al.</u>, 2006; Rubie <u>et al.</u>, 2015), un équilibrage chimique à haute pression (30 - 60 GPa) et haute température (> 2000 K) dans un océan de magma profond permet de réduire la valeur des coefficients de partage des éléments sidérophiles et d'expliquer leur excès dans le manteau (*e.g.* Li et Agee, 1996; Chabot <u>et al.</u>, 2005; Righter, 2011; Siebert <u>et al.</u>, 2011, 2012). L'utilisation des coefficients de partage expérimentaux pour déterminer les conditions (P, T, fO_2) d'équilibrage entre métal et silicates dépend néanmoins d'un certain nombre d'hypothèses, en particulier le degré d'équilibrage chimique, les conditions d'oxydo-réduction et la composition chimique des impacteurs (Wood, 2008; Rubie et al., 2011).

L'abondance des éléments très sidérophiles (*Highly Siderophile Elements*, ou *HSE*), à savoir Re, Os, Ir, Ru, Pt, Rh, Pd et Au, dans la Terre silicatée ne peut cependant pas être expliquée exclusivement par un équilibrage à haute pression et haute température. En effet, les *HSE* ont majoritairement été extraits du manteau lors de la différenciation du noyau (O'Neill et Palme, 1998; Walker, 2009), leur abondance s'expliquant plutôt par un apport plus tardif de matériaux chondritique au cours d'une phase d'accrétion appelée le vernis tardif, dont la masse est égale à environ 0.5% de la masse totale du manteau (*e.g.* Walker <u>et al.</u>, 2015). Par ailleurs, le contenu en *HSE* de la Lune montre qu'elle a reçu une addition tardive différente de celle de la Terre. En effet, la Lune a reçu une plus faible quantité de *HSE* que la Terre en proportion de sa masse (Day <u>et al.</u>, 2007, 2010; Kruijer <u>et al.</u>, 2015). Cela pourrait s'expliquer par un vernis tardif sous la forme d'impacts géants impliquant des impacteurs avec un diamètre jusqu'à 3000 km (Bottke <u>et al.</u>, 2010; Raymond <u>et al.</u>, 2013). Dans ce cas, les impacteurs n'auraient pu toucher que la Terre, expliquant les différences observées sur le contenu des *HSE*.

Modèles géochimiques de différenciation

Comme l'a illustré le cas du chronomètre Hf-W, l'interprétation des données géochimiques dépend en particulier du degré d'équilibrage chimique k entre métal et silicates. Dans la plupart des modèles géochimiques de différenciation, ce degré d'équilibrage correspond à une fraction k du métal de l'impacteur en équilibre avec la phase silicatée et à une fraction 1 - k migrant vers le noyau sans échange chimique (*e.g.* Halliday, 2004; Kleine <u>et al.</u>, 2004; Rudge <u>et al.</u>, 2010). Cela implique que la fraction équilibrée de métal est mélangée avec l'intégralité du manteau. En réalité, seule une fraction du manteau est susceptible d'entrer en contact avec la phase métallique car le temps caractéristique de migration du métal vers le noyau est nettement inférieur au temps nécessaire pour homogénéiser le manteau (Deguen <u>et al.</u>, 2011; Morishima et al., 2013), même dans le cas d'un impact géant (Sasaki et Abe, 2007).

Afin de tenir compte de ce mélange partiel du manteau, les modèle géochimiques en boites peuvent être modifiés en ajoutant un paramètre Δ (Deguen et al., 2014), correspondant au

degré de dilution de la phase métallique dans la phase silicatée, et défini comme

$$\Delta = \frac{M_s}{M_m},\tag{1}$$

où M_s et M_m sont respectivement les masses de silicates et de métal équilibrées. Ainsi, le degré d'équilibrage chimique k utilisé classiquement dans les modèles géochimiques intervient maintenant dans une mesure plus complète de l'équilibrage métal-silicate, l'efficacité d'équilibrage \mathcal{E}_i . Cette efficacité correspond à la masse d'élément i effectivement échangé entre les deux phases, divisé par la masse optimale d'élément i si l'échange se fait à l'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire dans le cas d'une dilution infinie ($\Delta \rightarrow +\infty$). L'efficacité d'équilibrage dépend alors du coefficient de partage D_i de l'élément considéré et s'exprime comme

$$\mathcal{E}_i = \frac{k}{1 + D_i / \Delta}.$$
(2)

Dans le cas d'une dilution infinie, l'efficacité d'équilibrage tend vers k, ce qui correspond bien à l'approximation classique des modèles géochimiques. L'efficacité d'équilibrage dépend aussi du coefficient de partage, ce qui conduit à des efficacités plus élevées pour les éléments lithophiles. A noter que l'utilisation de l'efficacité d'équilibrage \mathcal{E}_i dans les modèles géochimiques classique (*e.g.* Rudge <u>et al.</u>, 2010) à la place du degré d'équilibrage k est assez simple car les équations de conservation des modèles en boites sont les même en substituant k par \mathcal{E}_i (Deguen <u>et al.</u>, 2014).

Problématique générale

L'évolution thermique et magnétique des planètes telluriques, les conséquences géodynamiques du fractionnement chimique et du partitionnement thermique, ainsi que l'interprétation des données géochimiques avec des modèles de conservation, dépendent toutes de l'efficacité d'équilibrage entre métal et silicates. Dans ce contexte, l'objectif général de cette thèse est d'étudier la dynamique physique des échanges thermiques et chimiques entre métal et silicates dans les océans de magma, en utilisant des méthodes expérimentales et numériques, afin de mieux contraindre l'efficacité d'équilibrage utilisée dans les modèles géochimiques.

La première partie s'intéresse à l'influence de l'impact sur l'homogénéisation métal-silicate, avant sa migration dans l'océan de magma sous l'effet de la différence de densité. Le chapitre 1 traite d'abord de l'étude des cratères d'impact en utilisant des expériences analogues permettant d'extrapoler les résultats aux cas d'impacts planétaires pertinents pour l'accrétion des planètes telluriques. Ces expériences permettent d'obtenir des lois d'échelle pour la taille des cratères générés lors de l'impact sur un océan de magma, et donc des informations sur la dispersion de la phase métallique au moment de l'impact. Le chapitre 2 traite ensuite le mélange lors de la phase d'impact, induit par une instabilité de Rayleigh-Taylor sphérique autour du cratère, en utilisant les mêmes expériences analogues. La quantification de ce mélange permet alors d'obtenir des lois d'échelle pour l'équilibrage métal-silicate induit par l'impact, en particulier le degré de dilution de la phase métallique pendant l'impact. Ces deux chapitres font l'objet d'une publication en préparation (Lherm <u>et al.</u>, 2020). Le chapitre 3 traite enfin de l'étude du champ de vitesse induit par l'impact en comparant des mesures de vitesse expérimentales avec des modèles analytiques. A terme, la validation de ces modèles permettrait d'améliorer la modélisation les éjectas produits lors d'impacts planétaires.

La seconde partie s'intéresse à l'équilibrage métal-silicate pendant la phase post-impact, c'est-à-dire pendant la migration de la phase métallique dans l'océan de magma sous la forme

d'un thermique turbulent. Le chapitre 4 traite du mélange post-impact avec des méthodes numériques. Ces simulations permettent de mettre en évidence le rôle de l'étirement de la phase métallique sur l'équilibrage thermique et chimique dans les structures fluides élémentaires constituant le thermique turbulent (lamelle, ligament, goutte). Elles permettent aussi d'obtenir des lois d'échelle pour le temps d'équilibrage entre métal et silicates. Ce chapitre fait l'objet d'une publication (Lherm et Deguen, 2018). Le chapitre 5 traite également du mélange postimpact mais cette fois avec des méthodes expérimentales. Les expériences se focalisent sur l'évolution des distributions de concentration, en relation avec la dynamique de l'étirement des structures dans le thermique turbulent, afin de mieux comprendre la dynamique de l'équilibrage métal-silicate dans les thermiques turbulents. Elles permettent d'obtenir des estimation du degré d'équilibrage entre métal et silicates.

A noter que les chapitres 1, 2 et 4, ainsi que certains chapitres introductifs sont rédigés en anglais suite à leur publication dans cette langue. Les chapitres 3 et 5, ainsi que le reste du manuscrit, sont en revanche rédigés en français.

Première partie Phase d'impact

Introduction

In this first part, we focus on the dynamics of the impact stage using analogue experiments. In particular, we focus on the evolution of the crater geometry (chapter 1), on the impactinduced mixing related to the growth of a spherical Rayleigh-Taylor (RT) instability around the crater boundary (chapter 2), and on the velocity field produced during the cratering process (chapter 3). In each chapter, we discuss potential geophysical implications resulting from the comparisons between our experiments and actual planetary impacts, in particular regarding impact-induced metal-silicate equilibration during the formation of the core.

In this introductory chapter, we first present the physics of impact cratering processes, in particular the relevant dimensionless numbers. Then, we focus on the analogy between impact cratering experiments involving the impact of a liquid drop on a deep liquid pool and planetary impacts during the formation of terrestrial planets. Finally, we describe the experimental setup we use in the following chapters to study the impact stage.

Dimensionless numbers

We expect that the impact dynamics of a liquid drop released above a deep liquid pool with a different density and viscosity depends on its impact velocity U_i and radius R_i , the densities ρ_1 and ρ_2 of the drop and the pool, the dynamic viscosities μ_1 and μ_2 of the drop and the pool, the surface tension at the air-pool interface σ , and the acceleration of gravity g (figure I.1). Since these eight parameters contain three fundamental units, the Vaschy-Buckingham theorem dictates that the impact dynamics depends on a set of five independent dimensionless numbers. We choose the following set:

Fr =
$$\frac{U_i^2}{gR_i}$$
, We = $\frac{\rho_1 U_i^2 R_i}{\sigma}$, Re = $\frac{\rho_2 U_i R_i}{\mu_2}$, ρ_1/ρ_2 , μ_1/μ_2 . (I.1)

The Froude number Fr is a measure of the relative importance of impactor inertia and gravity forces. It can also be interpreted as the ratio of the kinetic energy $\rho_1 R_i^3 U_i^2$ of the impactor to its gravitational potential energy $\rho_1 g R_i^4$ just before impact. The Weber number We compares the impactor inertia and interfacial tension at the air-liquid interface. The Reynolds number Re is the ratio between inertial and viscous forces. ρ_1/ρ_2 and μ_1/μ_2 compare respectively the density and the dynamic viscosity of the drop and the pool. Since surface tension depends on salt concentration, a surface tension ratio between the drop and the pool is also involved. However, we ignore this parameter because the Weber number is much larger than unity and because the surface tension of the drop only varies by a maximum of 20% compared to the pool (appendix I.B). We will also make use of a modified Froude number, and of a Bond number,

$$\operatorname{Fr}^* = \frac{\rho_1}{\rho_2} \frac{U_i^2}{gR_i}, \quad \operatorname{Bo} = \frac{\rho_2 gR_i^2}{\sigma}, \tag{I.2}$$

which can respectively be understood as the ratio of the kinetic energy of the impactor $\rho_1 R_i^3 U_i^2$ to the change of potential gravitational energy $\rho_2 g R_i^4$ associated with the opening of a crater of size R_i , and the ratio of buoyancy forces to interfacial tension at the air-liquid interface. The Bond number is related to the Weber number with Bo = We/Fr^{*}.



Figure I.1 – Schematic comparison between impact cratering laboratory experiments and actual planetary impacts.

Experimental planetary impacts

Planetary impacts are generally classified between a "strength regime" and a "gravity regime", depending on the resistance to deformation of the target material (*e.g.* Melosh, 1989). When the yield stress of the solid planetary surface, or the viscous stress of the magma ocean, are negligible in comparison with the impact-induced stress, planetary impacts are in the gravity regime. This typically happens when the impactor is larger than a few kilometers (Holsapple, 1993). In this case, the Reynolds number, the Weber number and the Bond number are expected to be larger than 10^{10} , due to kilometric impactors with impact velocities on the order of $10 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$. This leads to extremely turbulent impact conditions where surface tension effects are negligible. Assuming that the impact velocity is close to the escape velocity of the target planet, *i.e.* $U_i \simeq \sqrt{gR_t}$ with R_t the radius of the target, the modified Froude number thus scales as

$$\operatorname{Fr}^* \simeq \frac{\rho_1}{\rho_2} \frac{R_t}{R_i}.$$
(I.3)

 Fr^* is then on the order of 1 for impactors comparable in size with the target, but increases by several orders of magnitude for small colliding bodies, *e.g.* the Froude number is about 10^4 for a

1 km radius body impacting an Earth-sized planet. From the perspective of the impactor, small impacts are thus dynamically more extreme than giant impacts. Since the metal core of the impactor is mainly composed of iron, the density ratio and the viscosity ratio are respectively expected to be on the order of $\rho_1/\rho_2 \simeq 2$ and $\mu_1/\mu_2 \simeq 0.1$ (Solomatov, 2015).

Table I.1 compares the value of the dimensionless parameters in our drop impact experiments and in planetary impacts. Since experimental Reynolds numbers Re ≥ 2500 and Weber numbers We ≥ 60 are large, viscosity and surface tension are mostly negligible during crater opening. Although Re and We are much larger during planetary impacts than in our experiments, this means that the cratering process is governed by inertia and buoyancy forces, in both our experiments and planetary impacts. We thus focus on the gravity regime (*e.g.* Melosh, 1989), where the cratering dynamics depends mainly on two dimensionless parameters, the Froude number Fr and the density ratio ρ_1/ρ_2 .

Dimensionless number	Experiments	Planetary impacts
Fr	60 - 1200	$1 - 10^5$
Fr^*	60 - 2100	$1 - 10^5$
We	60 - 1300	$\gtrsim 10^{14}$
Во	0.7 - 1	$\gtrsim 10^{10}$
Re	2500 - 13500	$\gtrsim 10^{11}$
$ ho_1/ ho_2$	0.8 - 1.8	2
μ_1/μ_2	0.9 - 1.2	0.1

Table I.1 – Typical values of the main dimensionless parameters (equations I.1 and I.2) in the experiments, and typical planetary impacts. For planetary impacts, dimensionless numbers are estimated with a density of $4000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ for molten silicates, and of $8000 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ for molten metal, a dynamic viscosity of $0.1 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ for molten silicates, and of $0.01 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ for molten metal (Solomatov, 2015). Surface tension between air and molten silicates, and between air and molten metal, are taken to be $0.3 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ (Taniguchi, 1988) and $1.8 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$ (Wille et al., 2002), respectively. We assume the impact velocity to be one to three times the escape velocity (Agnor et Asphaug, 2004). We assume impactor to target radius ratio to be in the range $10^{-4} - 1$.

In order to characterise the crater geometry dynamics, the RT instability following the impact, and the velocity field produced by the impact, we vary the drop radius, drop density and impact velocity. In our experiments, we obtain Froude numbers and modified Froude numbers larger than unity, in the range $Fr \simeq 60 - 1200$ and $Fr^* \simeq 60 - 2100$, respectively. This corresponds to planetary target to impactor radius ratio in the range 30 - 600. We focus on six density ratios $\rho_1/\rho_2 \simeq \{0.8, 1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8\}$, allowing a quantitative investigation of the density effects, in comparison with a reference case without density contrast. The upper limit of our experimental density ratios is close to the density ratio expected during a planetary impact.

During planetary impacts, several effects neglected in our experiments may affect the dynamics of the cratering process, the related RT instability and the resulting impact velocity field. First, most of the Earth mass was accreted from differentiated bodies (Kleine <u>et al.</u>, 2002; Scherstén <u>et al.</u>, 2006), leading to impactors with two layers. In our experiments, we only have impacting drops with a single layer. Then, immiscibility between metal and silicates is not present in our experiments with miscible fluids. Furthermore, surface tension between air and water is an inherent phenomenon of our experiments but is negligible in planetary impacts. However, surface tension effects are likely small in both our experiments and planetary impacts since inertial forces exceed widely interfacial forces. The Mach number, defined as the ratio between the impact velocity and the sound velocity (P-wave velocity) in the magma ocean, is expected to be larger than unity during a planetary impact (e.g. Stixrude et al., 2009), whereas it is typically smaller than 3×10^{-3} in our experiments. We thus neglect compressibility effects such as the conversion of kinetic energy into heat, and formation and propagation of shock waves. In our experiments, we have not investigated the effects of impact angles, responsible for a crater asymmetry. For planetary impacts, vertical impacts are unlikely, the maximum probability being a 45° angle (Shoemaker, 1961). Pressure and temperature effects are also neglected in our experiments. Planetary impacts, in particular the most energetic at the end of the accretion, may result in an increased miscibility between metal and silicates (Morard et Katsura, 2010), with potential consequences on the fragmentation of the metal phase. Finally, the viscosity ratio between metal and silicates is also smaller than the experimental viscosity ratio by one order of magnitude. Although in this regime viscosity does not affect the crater size evolution, it remains nonetheless a crucial parameter regarding the RT instability wavelength.

Experimental set-up

In these experiments, we release a liquid drop in the air above a deep liquid pool contained in a $16 \times 16 \times 30$ cm glass tank (figure I.2a). The pool level is exactly set at the top of the tank. The aim is to minimise the thickness of the meniscus on the side of the tank in order to obtain an image of the crater all the way to the surface.

We generate the drop using a needle supplied with fluid by a syringe driver at a slow and steady pace. When the weight of the drop exceeds the surface tension forces, the drop comes off. We used a metallic needle with an inner diameter of 1.6 mm and a nylon plastic needle with an inner diameter of 4.7 mm, generating two series of drop size with typical radius in the range 1.4 - 2.0 mm and 2.0 - 2.7 mm, respectively. We calculate the exact drop size, which depends on the drop density, for each experiment based on a careful calibration using precise mass measurements of dozens of drops, independent density measurement, and assuming the drop is spherical. We validate this method using high-speed pictures of the drop prior to impact where we can directly measure the drop radius (appendix I.C).

Typical impact velocities are in the range $1 - 5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$. We calculate the impact velocity for each experiment using a calibrated free-fall model for the drop, including a quadratic drag. We also validate this method using high-speed pictures of the drop prior to impact where we can directly measure the drop velocity (appendix I.D).

Concerning fluids, we use an aqueous solution of caesium chloride CsCl ($\rho_1 = 998 - 1800 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $\mu_1 = 0.9 \times 10^{-3} - 1.2 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$) and pure ethanol ($\rho_1 = 790 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $\mu_1 = 1.2 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$) in the drop, and water ($\rho_2 = 998 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$, $\mu_2 = 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$) in the pool. The density is measured for each experiments using an Anton Paar DMA 35 Basic densitometer. Surface tension between the air, the pool, and the drop are measured using the pendant drop method (appendix I.B). The surface tension at the air-water interface is $\sigma = 72.8 \pm 0.4 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$. We obtain viscosities using data from Haynes (2016) (appendix I.A).

Since the typical measurement error on density is less than 0.1%, we neglect errors on density. We also neglect errors on viscosity since the typical error in data from Haynes (2016) is less than 0.01%. Concerning surface tension we calculate errors in a temperature controlled



Figure I.2 – (a) Schematic view of the drop impact experimental set-up, including backlight, LIF and PIV configuration set-up. (b) Snapshot obtained using the backlight configuration. (c) Snapshot obtained using the LIF configuration. (d) Snapshots obtained using the PIV configuration.

environment (appendix I.B). We propagate uncertainties on fluid properties and impact parameters to uncertainties on the dimensionless numbers (equations I.1 and I.2).

We use three imaging configurations, backlight, Laser-Induced Fluorescence (LIF), and Particle Image Velocimetry (PIV) configurations, most suited to determine the crater geometry (chapter 1), characterise mixing (chapter 2), and measure the impact-induced velocity field (chapter 3), respectively (figure I.2). In the backlight configuration, we use a LED panel to image the crater shape. In the LIF configuration, a laser sheet excites the fluorescent dye contained in the impacting drop. A long-pass filter allows to remove the laser wavelength to keep only the fluorescence wavelengths. In the PIV configuration, we seed the tank with particles and we use a band-pass filter to isolate the laser wavelength. In all configurations, we position the camera at the same height as the water surface. We record images at 1400 Hz with a 2560×1600 pixels resolution, and a 12 bits dynamic range, using a high-speed Phantom VEO 640L camera and a Tokina AT-X M100 PRO D Macro lens.

1

Étude des cratères d'impact

1.1 Introduction

The dynamics of impact craters depends directly on the nature of both the impactor and the target. This involves diverse configurations such as a solid impactor onto a solid granular material (*e.g.* van der Meer, 2017), a solid impactor onto a deep liquid pool (*e.g.* Truscott <u>et al.</u>, 2014), a liquid impactor onto a solid surface (*e.g.* Josserand et Thoroddsen, 2016), a liquid impactor onto a shallow liquid layer of finite thickness (*e.g.* Berberović <u>et al.</u>, 2009), a liquid impactor onto a deep liquid pool (*e.g.* Rein, 1993), and all other possible combinations. This cratering processes cover a wide variety of applications, including engineering applications such as water entry of projectiles (Clanet <u>et al.</u>, 2004) or spray painting (Hines, 1966), and Earth sciences applications such as oily marine aerosol production by raindrops (Murphy <u>et al.</u>, 2015), spray generation from raindrop impacts on seawater and soil (Zhou <u>et al.</u>, 2020), and planetary impact craters (Melosh, 1989).

Depending on impact parameters such as the drop radius, impact velocity, impact angle, ambient gravity, and physical properties of the fluids such as surface tension, density and viscosity, a wide variety of drop impact scenario emerges (Rein, 1993). In particular, the drop can interact with the liquid surface of the target under four main regimes: floating (*e.g.* Reynolds, 1881; Leng, 2001), bouncing (*e.g.* Ching <u>et al.</u>, 1984; Zhbankova et Kolpakov, 1990), coalescence (*e.g.* Schotland, 1960; Jayaratne et Mason, 1964) and splashing (*e.g.* Macklin et Metaxas, 1976; Leng, 2001). Floating, bouncing and coalescence are a consequence of surface tension and can only occur at small Weber numbers. At large Weber numbers, drop impacts are in the splashing regime, the main features of which are the formation of a liquid crown above the crater and the rise of a liquid central jet produced when the crater collapses.

In the following chapters, we focus on the impact of liquid drops on a deep liquid pool, and particularly on the splashing regime, the most relevant regime regarding impacts on planetary surfaces (Maxwell, 1977; Melosh, 1989; Holsapple, 1993). Using early high-speed methods, Worthington (1908) first reported the key features of the splashing regime. This regime was then extensively investigated, regarding in particular the scaling of the maximum crater size (Engel, 1966; Leng, 2001), the time evolution of the transient crater (Engel, 1967; Morton et al., 2000; Bisighini et al., 2010), the evolution and fragmentation of the fluid crown (Okawa et al., 2006; Krechetnikov et Homsy, 2009; Zhang et al., 2010; Agbaglah et al., 2013), the formation and fragmentation of the central peak (Fedorchenko et Wang, 2004; Ray et al., 2015), and underwater acoustic properties of the impact (Prosperetti et Oguz, 1993). Furthermore, the effects of immiscibility (Lhuissier et al., 2013; Jain et al., 2019), viscoplasticity (Jalaal et al., 2019), impact angles (Okawa et al., 2006; Gielen et al., 2017), and thickness of the target layer (Berberović et al., 2009) on impact dynamics have been examined. Based on these experiments, several models of the crater size evolution were developed, using energy conservation (*e.g.* Engel, 1966, 1967) or momentum conservation in an irrotational flow (*e.g.* Bisighini et al., 2010).

Despite these various experiments, the influence of the density contrast between the drop and the pool has never been investigated, in particular regarding the effects of density on the evolution of the average crater size and of the crater geometry. In particular, we observe that when a liquid drop strikes a less dense liquid pool, the center of mass of the cavity is indeed entrained downward due to the density difference, modifying the average size and the shape of the crater with a vertical stretching (figure 1.1).



Figure 1.1 – Comparison between a crater produced by the vertical impact of a liquid drop onto a liquid pool with the same density, and onto a less dense liquid pool. The center of mass of the cavity is entrained downward in the density difference case. A spherical Rayleigh-Taylor instability develops around the crater when it decelerates, which results in mushroom-shaped plumes growing radially outward (chapter 2).

Cratering processes have also been extensively investigated in the context of planetary impacts on solid surfaces (Melosh, 1989). This includes for example the analysis and scaling of crater dimensions (Holsapple et Schmidt, 1987; Holsapple, 1993; Wünnemann et al., 2008) and the dynamics of ejecta deposits (Maxwell, 1977; Barnhart et Nimmo, 2011; Kurosawa et Takada, 2019). Planetary impacts have also been investigated in the context of planets accretion, both experimentally (Landeau et al., 2021) and numerically (Canup, 2012; Cuk et Stewart, 2012; Kendall et Melosh, 2016; Nakajima et al., 2020). Experiments and numerical simulations are complementary since experiments allow to capture small-scale processes crucial to metal-silicate equilibration, whereas numerical simulations, more realistic on a large scale (*e.g.* sphericity, oblique impact, self-gravitation), fail to capture these processes due to their resolution limit typically around 10 km (*e.g.* Kendall et Melosh, 2016).

In this chapter, we use the backlighting method to obtain the time evolution of the average crater radius and the shape of the crater, as a function of the density ratio and the Froude number. We derive an energy model for the evolution of the crater radius, velocity, and acceleration and compare it with experiments. We obtain scaling laws for the maximum crater radius and the crater opening time, and compare it to low Froude number experiments. We then investigate the effect of the density ratio on the shape of the crater. Using these scaling

laws, we investigate the impact-induced dispersion of impactor cores during the differentiation of terrestrial planets, where the density ratio between metal and silicates is approximately 2. Understanding the cratering dynamics, in particular the evolution of the crater deceleration, is a required step in the understanding of the RT instability dynamics, and consequently impact-induced metal-silicate equilibration (chapter 2).

1.2 Backlighting

In the backlight configuration (figure 1.2), we measure the evolution of the mean crater radius and shape. The crater is illuminated from behind by a LED backlight panel and appears dark owing to refraction of light at the air-water interface. Image processing involves spatial calibration using a sight, background removal, intensity threshold, image binarization, and allows us to determine the crater boundary.



Figure 1.2 – Detection of the crater boundary. The green solid line corresponds to the fitted crater boundary using a set of shifted Legendre polynomials up to degree l = 5. The red dash-dotted line corresponds to the degree l = 0, *i.e.* the mean crater radius \overline{R} . The red dashed line corresponds to the degree l = 1.

We then fit the crater boundary radius $R(\theta, t)$, which depends on the polar angle θ and time t, using a set of shifted Legendre polynomials \tilde{P}_l up to degree $l_{max} = 5$

$$R(\theta, t) = \sum_{l=0}^{l_{max}} a_l \tilde{P}_l(\cos \theta), \qquad (1.1)$$

where a_l are the fitted coefficients. The shifted Legendre polynomials are an affine transformation of the standard Legendre polynomials $\tilde{P}_l(x) = P_l(2x-1)$, and are orthogonal on [0, 1], -

i.e. on a half-space. In particular, we obtain the mean crater radius from the l = 0 coefficient, *i.e.* $\bar{R} = a_0$.

Uncertainties are dominated by the extrinsic variability between experiments in the same configuration. We repeat each experiment at least four times consecutively in order to estimate uncertainties on dimensionless parameters and target quantities. This allows to include uncertainties resulting from reflections and refraction at the crater boundary.

In comparison, we neglect intrinsic uncertainties related to the spatial resolution of the camera, the spatial calibration, and image processing. Spatial resolution of the camera, *viz* 30 px/mm, is adequate given the size of the target, allowing this uncertainty to be neglected. We also neglect spatial calibration errors, typically around 0.2 px. Finally, given the camera resolution and dynamic range, we obtain a good contrast on the crater and the impacting drop, which allows to neglect errors related to image processing.

1.3 Phenomenology of the cratering process

In this section, we describe the cratering process using three reference cases where $\rho_1/\rho_2 = 1.0$ (figure 1.3), $\rho_1/\rho_2 = 0.8$ (figure 1.4) and $\rho_1/\rho_2 = 1.8$ (figure 1.5), which allows to discuss the influence of the density ratio.

The impact of the drop first causes the formation of an impact crater with a flat-bottomed shape due to the spreading of the drop on the water surface during the impact (figure 1.3a, i). The liquid of the drop is deformed and accumulates on the crater floor (figure 1.3b, i) on a timescale $t/(R_i/U_i) \simeq 2 - 3$, akin to previous results (*e.g.* Engel, 1961, 1962). This impact phase, in particular the flat-bottomed shape of the cavity, is relatively independent of the density ratio since in the gravity regime the early impact dynamics is mainly controlled by the inertia of the impacting drop (figures 1.3, 1.4 and 1.5).

As the crater grows, the cavity becomes hemispherical, on a timescale $t/(R_i/U_i) \simeq 10$, as a result of the overpressure produced at the contact point between the impacting drop and the surface (figure 1.3a, ii-iii). The liquid of the drop then spreads on the crater sides toward the surface, producing a layer with an approximately uniform thickness on the surface of the crater (figure 1.3b, ii-iii). When $\rho_1/\rho_2 > 1$, the liquid of the drop penetrates the less dense surrounding pool, which results in mushroom-shaped plumes growing radially outward (figure 1.5b, ii-iv). Chapter 2 focuses on this RT instability produced when the crater deceleration exceeds the ambient gravity. When $\rho_1/\rho_2 < 1$, the liquid of the drop may spread faster than in the case without density contrast (figure 1.4b, i-iii). Since the crater deceleration exceeds the ambient vertical gravity, the effective gravity is radial and directed outwards. The liquid of the drop is thus expected to behave as a density current and spread over the crater boundary.

The impact also produces a cylindrical fluid crown (Fedorchenko et Wang, 2004) (figure 1.3a, i-iv), along with a surface wave propagating radially outward from the crater (Leng, 2001) on the horizontal surface. As can be seen from the concentration field (figure 1.3b, i-iv), the fluid of the drop mostly accumulates on the surface of the crater, leaving the crown mainly composed of fluid from the pool. As soon as the crown decelerates, the cylindrical sheet produces liquid ligaments around the crown rim, which eventually fragment into drops (figure 1.3a, ii-iii) (Krechetnikov et Homsy, 2009; Zhang et al., 2010; Agbaglah et al., 2013).

When the crater reaches its maximum size, the crater is almost hemispherical in the case without density contrast (figure 1.3a, iv). When $\rho_1/\rho_2 > 1$, the crater cavity is entrained downward, which stretches vertically the crater (figure 1.5a, iv). On the contrary, when $\rho_1/\rho_2 < 1$, the crater is slightly stretches horizontally (figure 1.4a, iv).



Figure 1.3 – Liquid drop impact onto a deep liquid pool without density contrast ($\rho_1/\rho_2 = 1$ and Fr = 481). In the backlight configuration (a), we use a LED panel to image the crater shape. In the LIF configuration (b), a laser sheet excites the fluorescent dye contained in the impacting drop.



Figure 1.4 – Liquid drop impact onto a deep liquid pool with density contrast ($\rho_1/\rho_2 = 0.8$ and Fr = 588). In the backlight configuration (a), we use a LED panel to image the crater shape. In the LIF configuration (b), a laser sheet excites the fluorescent dye contained in the impacting drop.

-



Figure 1.5 – Liquid drop impact onto a deep liquid pool with density contrast ($\rho_1/\rho_2 = 1.8$ and Fr = 542). In the backlight configuration (a), we use a LED panel to image the crater shape. In the LIF configuration (b), a laser sheet excites the fluorescent dye contained in the impacting drop.

-
After reaching its maximum size, the crater starts to collapse due to buoyancy forces (figure 1.3a, v). The resulting converging flow leads to the formation of a thick upward jet which, in view of the concentration field (figure 1.3b, vi), appears to be made mostly of liquid from the drop. When $\rho_1/\rho_2 > 1$, the mixing layer produced during crater opening is entrained and stretched by the cavity when the crater closes (figure 1.3b, v-vi).

In the generic description above, we focus on the large Froude and Weber numbers limit. As We decreases, several features related to surface tension effects arise. A capillary wave (figure 1.6, ii-vi) develop on the crater surface (Pumphrey et Elmore, 1990; Morton et al., 2000). This control the opening and closing timescales of the cavity, and the shape of the crater. When the capillary wave converges at the bottom of the crater (figure 1.6, vi-vii), a bubble is entrapped by the pinching of the cavity (Oguz et Prosperetti, 1990; Pumphrey et Elmore, 1990; Elmore et al., 2001). When the crater collapses, the resulting convergent flow gives a thin high-speed jet (Morton et al., 2000; Leng, 2001), which rapidly fragments into droplets (figure 1.6, viii-x).

1.4 Evolution of the crater size

Experiments in the backlight configuration provide the time evolution and the maximum of the mean crater radius. We derive an energy model for the evolution of the crater radius, velocity, and acceleration and compare it with experiments. We then obtain scaling laws for the maximum crater radius and the crater opening time. This is a required step in the understanding of the RT instability dynamics (chapter 2).

1.4.1 Energy conservation model

We use an energy conservation model (Engel, 1966, 1967; Leng, 2001) accounting for the density difference between the impacting drop and the targeted pool. We assume a hemispherical crater associated with an incompressible and irrotational flow. Since the crater opening dynamics is mainly driven by impactor inertia and gravity forces (Re ≥ 2500), viscous dissipation is not included into the model. The terms related to the formation of the crown and the surface wave during the impact, in particular their potential, kinetic, and surface energies, are not explicitly included either in the model.

On the basis of these assumptions, the sum of the crater potential energy E_p , the crater surface energy E_{σ} , and the crater kinetic energy E_k , at any instant of time is equal to the impacting drop kinetic energy E_i just before the impact. The potential energy of the crater is

$$E_p = \iiint \rho_2 g z \mathrm{d}V = \int_0^{\bar{R}} \rho_2 g \pi \left(\bar{R}^2 - z^2\right) z \mathrm{d}z = \frac{1}{4} \pi \rho_2 g \bar{R}^4, \tag{1.2}$$

where z is the depth. The crater surface energy corresponds to the formation of a new surface due to crater opening. This energy is related to the difference between the initially planar surface area of the pool $\pi \bar{R}^2$ and the hemispherical surface area of the cavity $2\pi \bar{R}^2$, *i.e.*

$$E_{\sigma} = \sigma \left(2\pi \bar{R}^2 - \pi \bar{R}^2 \right) = \sigma \pi \bar{R}^2. \tag{1.3}$$

The crater kinetic energy corresponds to the kinetic energy of the pool fluid below the initial surface and is related to the flow velocity potential. A radial velocity potential of the form $\Phi = -A/r$, solution of the Laplace equation $\nabla^2 \Phi = 0$, is able to satisfy the boundary conditions.



Figure 1.6 – Liquid drop impact onto a deep liquid pool without density contrast at small Froude number ($\rho_1/\rho_2 = 1.0$ and Fr = 94).

At the crater boundary, the radial velocity is $u_r(r = \bar{R}) = (\partial \Phi / \partial r)_{r=\bar{R}} = \bar{R}$, giving $A = \bar{R}\bar{R}^2$ and

$$\Phi = -\frac{\bar{R}\bar{R}^2}{r}.$$
(1.4)

The radial velocity, the tangential velocity, and the resultant velocity are respectively

$$\begin{cases} u_{r} = \frac{\dot{R}\bar{R}^{2}}{r^{2}}, \\ u_{\theta} = 0, \\ ||\boldsymbol{u}|| = \sqrt{u_{r}^{2} + u_{\theta}^{2}} = \frac{\dot{R}\bar{R}^{2}}{r^{2}}. \end{cases}$$
(1.5)

The crater kinetic energy is then

$$E_{k} = \iiint \frac{1}{2} \rho_{2} ||\boldsymbol{u}||^{2} \mathrm{d}V = \int_{\bar{R}}^{+\infty} \pi \rho_{2} \dot{\bar{R}}^{2} \bar{R}^{4} \frac{1}{r^{2}} \mathrm{d}r = \pi \rho_{2} \bar{R}^{3} \dot{\bar{R}}^{2}.$$
(1.6)

The impacting drop kinetic energy is

$$E_i = \frac{2}{3}\pi\rho_1 R_i^3 U_i^2.$$
 (1.7)

Energy conservation between E_p , E_σ , E_k and E_i gives

$$\frac{1}{4}\rho_2 g \bar{R}^4 + \sigma \bar{R}^2 + \xi \rho_2 \bar{R}^3 \dot{\bar{R}}^2 = \frac{2}{3} \phi \rho_1 R_i^3 U_i^2, \qquad (1.8)$$

where ϕ and ξ are fitted parameters. The coefficient ϕ corresponds to a correction parameter accounting for the terms not included in the model, *i.e.* viscous dissipation and crown energy terms. The coefficient ξ is a correction parameter accounting for the difference between the deliberately simplified velocity potential used in the model and the true flow.

Normalising the crater radius and opening velocity by the impacting drop radius R_i and velocity U_i , respectively, energy conservation becomes

$$\frac{1}{4}\frac{1}{\mathrm{Fr}^*}\bar{R}^4 + \frac{1}{\mathrm{Fr}^*\mathrm{Bo}}\bar{R}^2 + \xi \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^{-1}\bar{R}^3\dot{\bar{R}}^2 = \frac{2}{3}\phi,\tag{1.9}$$

where \bar{R} and \bar{R} are dimensionless.

For each experiment, we calculate ϕ at $\overline{R} = R_{max}$. Assuming that the velocity field vanishes simultaneously in the pool (Prosperetti et Oguz, 1993), the crater kinetic energy vanishes when the crater reaches its maximum size, which gives an estimate of ϕ independent of the crater opening velocity field

$$\phi = \frac{3}{2} \frac{1}{\text{Fr}^*} R_{max}^2 \left(\frac{1}{4} R_{max}^2 + \frac{1}{\text{Bo}} \right).$$
(1.10)

Knowing the amount of energy delivered to the pool after the impact, we fit the time evolution of the mean crater radius to the experiments with equation 1.9 using a least-square method, the kinetic energy correction parameter ξ being a fit parameter. Knowing ϕ and ξ , we solve the ordinary differential equation 1.9 using the boundary condition $\bar{R}(1) = 1$. This condition assumes that the crater radius is initially the same as the drop radius, at $t = R_i/U_i$.

1.4.2 Time evolution

Figure 1.7 compares the fitted energy model with experimental data, in three reference cases, with and without density difference between the impacting drop and the pool. In both cases, the fitted mean crater radius, opening velocity, and acceleration are in close agreement with the experimental data. In the $\rho_1/\rho_2 = 0.8$, $\rho_1/\rho_2 = 1.0$ and $\rho_1/\rho_2 = 1.8$ cases, we have $\phi = 0.49$ and $\xi = 0.42$, $\phi = 0.36$ and $\xi = 0.34$, and $\phi = 0.39$ and $\xi = 0.34$, respectively.

At early times, the crater potential and surface energies may be neglected in comparison with the crater kinetic energy. The kinetic energy of the impactor is then balanced by the crater kinetic energy in equation 1.9. Using these assumptions, a power-law scaling for the crater evolution is obtained

$$\bar{R}(t) = [Q(t-1)+1]^{2/5}$$

$$\bar{R}(t) = \frac{2}{5}Q [Q(t-1)+1]^{-3/5} , \qquad (1.11)$$

$$\ddot{R}(t) = -\frac{6}{25}Q^2 [Q(t-1)+1]^{-8/5}$$

where $Q = \left(\frac{25}{6}\frac{\phi}{\xi}\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^{1/2}$. This scaling consistently verifies the imposed boundary condition $\bar{R}(1) = 1$. The scaling depends on the density ratio ρ_1/ρ_2 , and on the correction parameters ϕ and ξ . It is in agreement with experimental data at early times (figure 1.7, dashed lines), and similar scaling laws from previous works (Leng, 2001; Bisighini et al., 2010).

At late times, the crater velocity becomes very small. If surface tension can be neglected, taking the time derivative of equation 1.9, and then making the assumption $\dot{R} = 0$ gives

$$\ddot{\bar{R}} = -\frac{1}{2} \frac{1}{\mathrm{Fr}\xi}.$$
(1.12)

Using $\bar{R}(t_{max}) = R_{max}$ and $\dot{\bar{R}}(t_{max}) = 0$ as boundary conditions, we obtain a quadratic solution

$$\ddot{R}(t) = -\frac{1}{2} \frac{1}{\text{Fr}\xi}
\dot{R}(t) = -\frac{1}{2} \frac{1}{\text{Fr}\xi} (t - t_{max})
\ddot{R}(t) = R_{max} - \frac{1}{4} \frac{1}{\text{Fr}\xi} (t - t_{max})^2$$
(1.13)

This scaling is in good agreement with experimental data at late times using experimental values for the boundary conditions (figure 1.7, dash-dotted lines). Using scaling laws for R_{max} and t_{max} (determined in section 1.4.4), the late-time quadratic evolution of the mean crater radius may be fully predicted as function of Fr, ϕ , ξ , and ρ_1/ρ_2 .

1.4.3 Energy partitioning and kinetic energy correction

Figure 1.8a shows the correction parameter ϕ as a function of the Weber number. Since the energy is partitioned between the impacting drop and the target, and that several energy sinks such as crown energy and viscous dissipation are neglected in the model, we expect ϕ to be smaller than unity. In our experiments, the energy partitioning coefficient is indeed $\phi = 0.39 \pm 0.06$, in agreement with previous works where experimental data are fitted using a partitioning coefficient in the range 0.2 - 0.6, depending on the Froude number (Engel, 1966; Olevson, 1969; Leng, 2001). T



Figure 1.7 – Time evolution, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i , of the mean crater radius \bar{R} normalised by the drop radius R_i (a), the mean crater velocity \dot{R} normalised by the impact velocity U_i (b), and the mean crater acceleration \ddot{R} normalised by the acceleration of gravity g (c), for three impact parameters. Circles and solid lines correspond respectively to experimental data and fitted energy model (equation 1.9). Dashed lines and dashed-dotted lines correspond respectively to early-time power-law solution (equation 1.11) and late-time quadratic solution (equations 1.13) for the $\rho_1/\rho_2 = 1.8$ and Fr = 542 experiment.

In our experiments, Fr and We are highly correlated since Bo does not vary by a large amount. The coefficient ϕ is found to be a decreasing function of both Fr and We, which scales in particular as

$$\phi = \mathrm{We}^{-0.157 \pm 0.002}.$$
 (1.14)

This implies that as the impactor inertia increases, the relative importance of the neglected energy sink terms increases. This may be explained by a change in the energy balance between the crater energy and the crown energy (Olevson, 1969). As the impactor inertia increases, the relative importance of the surface energy of the crater and the crown decreases, while the potential energy of the crater and the kinetic energy of the crown increases, resulting in a global increase of the crown energy to the expense of the crater. According to Olevson (1969), the energy within the crown increases with We faster than the energy within the crater, which would imply that ϕ is a decreasing function of We. The drop deformation upon impact may also increase with impactor inertia, and with it the energy required for this deformation, decreasing to this extent the energy delivered to the pool.

 ϕ is relatively independent of the density ratio when $\rho_1/\rho_2 \ge 1$, but it increases significantly when $\rho_1/\rho_2 < 1$, in particular when We $\lesssim 300$. This might be explained by changes in the energy balance discussed above due to different properties between ethanol and water, in particular with a decreased surface tension. As We increases, the inertia of the impactor becomes relatively more important than surface tension effects, which may explain why ϕ is independent of the density ratio when We $\gtrsim 300$. ϕ also slightly increases with the drop size. On average, ϕ is 5% larger in the large drop size series than in the small drop size series.

Figure 1.8b shows the kinetic energy correction parameter ξ , as a function of the Weber number. It accounts for the difference between the deliberately simplified velocity potential used in the model 1.4 and the true flow. Since the crater boundary is not hemispherical and the crown is necessarily generated by a tangential velocity field, the true velocity potential cannot be purely radial. ξ is very likely a function of time, but we assume it to be constant. In our experiments, the kinetic energy correction parameter is smaller than unity with $\xi =$ 0.35 ± 0.05 . This means that the velocity model overestimates the crater kinetic energy in the energy balance. Except for the $\rho_1/\rho_2 = 0.8$ ethanol experiments, we do not observe any resolvable trend between ξ , We and ρ_1/ρ_2 . As for the correction parameter ϕ , ξ is larger at small Weber number but decreases towards the same value as for $\rho_1/\rho_2 \geq 1$ when We increases.

1.4.4 Maximum crater radius and opening time

As a first step, we neglect the surface tension term in equation 1.9, *i.e.* we assume $Bo \rightarrow +\infty$. Assuming that the available impact kinetic energy is fully converted into crater potential energy, *i.e.* neglecting the kinetic energy term in equation 1.9, we obtain a scaling for the maximum crater radius in the limit without surface tension

$$R_{max}^{*}(\text{Bo} \to +\infty) = \left(\frac{8}{3}\right)^{1/4} \phi^{1/4} \text{Fr}^{*^{1/4}}.$$
 (1.15)

Figure 1.9a shows the maximum crater size in our experiments as a function of a leastsquare best-fit power law scaling in the form

$$\frac{R_{max}}{R_i} = c_1 \operatorname{Fr}^{*^{c_2}}.$$
(1.16)



Figure 1.8 – Energy partitioning parameter ϕ (a), and crater kinetic energy correction parameter ξ (b), as a function of the Weber number We. The solid line gives the best-fit power-law scaling (equation 1.14). Colors scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 . Circles and crosses correspond respectively to large and small drop size series.

The exponent $c_2 = 0.23 \pm 0.004$ for Fr^{*} is close to the theoretical 1/4 prediction of equation 1.15, and is in agreement with previous works on liquids (Prosperetti et Oguz, 1993; Leng, 2001; Bisighini et al., 2010) and granular materials (Walsh et al., 2003; Takita et Sumita, 2013). The prefactor $c_1 = 1.10 \pm 0.03$ is close to the value predicted by the model (equation 1.15). Since $\phi = 0.39 \pm 0.06$ in our experiments, the predicted model prefactor is indeed equal to 1.01 ± 0.04 . The prefactor c_1 is also consistent with those obtained in previous works (*e.g.* $c_1 = 1.1$ in Leng (2001)).

We now turn to estimating the crater opening time, defined as the time t_{max}^* at which the maximum crater size is reached. Having neglected surface tension, we integrate equation 1.9 between t = 0 and $t = t_{max}^*(Bo \to +\infty)$ to obtain

$$t_{max}^{*}(\mathrm{Bo} \to +\infty) = \xi^{1/2} \left(\frac{\rho_{1}}{\rho_{2}}\right)^{-1/2} \int_{0}^{R_{max}^{*}(\mathrm{Bo} \to +\infty)} \frac{\bar{R}^{3/2}}{\left(\frac{2}{3}\phi - \frac{1}{4}\frac{\bar{R}^{4}}{\mathrm{Fr}^{*}}\right)^{1/2}} \mathrm{d}\bar{R}.$$
 (1.17)

Using equation 1.15 for $R^*_{max}(Bo \to \infty)$ and integrating, we obtain the crater opening time in the limit of negligible surface tension effect

$$t_{max}^{*}(\text{Bo} \to +\infty) = \frac{1}{2} \left(\frac{8}{3}\right)^{1/8} \text{B}\left(\frac{1}{2}, \frac{5}{8}\right) \left(\frac{\rho_{1}}{\rho_{2}}\right)^{-1/2} \phi^{1/8} \xi^{1/2} \text{Fr}^{*^{5/8}},$$
(1.18)

where **B** is the beta function.

Figure 1.9b shows the opening time in our experiments as a function of a least-square best-fit power law scaling in the form

$$\frac{t_{max}}{R_i/U_i} = c_1(\rho_1/\rho_2)^{c_2} \operatorname{Fr}^{*^{c_3}}.$$
(1.19)



Figure 1.9 – (a) Experimental maximum crater radius R_{max} , normalised by the drop radius R_i , as a function of the least-squares best-fit power-law scaling, using the modified Froude number Fr^* . (b) Experimental crater opening time t_{max} , normalised by the drop free-fall time R_i/U_i , as a function of the least-squares best-fit power-law scaling, using the density ratio ρ_1/ρ_2 and the modified Froude number Fr^* . Colors scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 . Circles and crosses correspond respectively to large and small drop size series.

The exponent $c_2 = -0.64 \pm 0.02$ for ρ_1/ρ_2 is slightly larger than the theoretical -1/2 prediction of equation 1.18. This high value is related to ethanol experiments where $\rho_1/\rho_2 < 1$ since we obtain $c_2 = -0.53 \pm 0.03$ if we consider only experiments where $\rho_1/\rho_2 \ge 1$. This deviation from the theoretical -1/2 prediction when we include ethanol experiments may be related to the horizontal stretching of the crater, due to a faster spreading of the liquid of the drop. The exponent $c_3 = 0.61 \pm 0.01$ for Fr^{*} is close to the 5/8 = 0.625 prediction of equation 1.18, and agrees with previous works at $\rho_1/\rho_2 = 1$ (Leng, 2001; Bisighini et al., 2010). The prefactor $c_1 = 0.88 \pm 0.05$ is close to the value predicted by equation 1.18. Since $\phi = 0.39 \pm 0.06$ and $\xi = 0.35 \pm 0.05$ in our experiments, the prefactor predicted by the model is indeed equal to 0.80 ± 0.07 . The prefactor c_1 is also consistent with prefactors obtained in previous works (*e.g.* $c_1 = 0.59$ in Leng (2001)).

We now consider the effect of surface tension on the maximum crater size and crater opening time. With only the kinetic energy term set to zero in equation 1.9, we obtain the maximum crater radius including surface tension

$$R_{max}^* = R_{max}^* (\text{Bo} \to +\infty) \left[\sqrt{1 + \frac{3}{2} (\sqrt{\text{Fr}^* \phi} \text{Bo})^{-2}} - \frac{\sqrt{6}}{2} (\sqrt{\text{Fr}^* \phi} \text{Bo})^{-1} \right]^{1/2}.$$
 (1.20)

This scaling depends on the dimensionless parameter $(\sqrt{Fr^*\phi Bo})^{-1}$, which brings in the effect of surface tension on the cratering dynamics. When $Bo \to +\infty$, we have $(\sqrt{Fr^*\phi}Bo)^{-1} \to 0$ and we retrieve the scaling without surface tension (equation 1.15).

Figure 1.10a shows the maximum crater radius normalised by the maximum crater ra-

۲

dius scaling without surface tension $R_{max}/R_{max}^*(Bo \to +\infty)$, as a function of $(\sqrt{Fr^*\phi}Bo)^{-1}$. This corresponds to the ratio between experimental data and the scaling law without surface tension (equation 1.15). As expected, this scaling without surface tension overestimates the experimental maximum crater radius because it neglects surface energy. This overestimate decreases with $(\sqrt{Fr^*\phi}Bo)^{-1}$, *i.e.* when surface tension effects become negligible in comparison with impactor inertia and gravity forces. The difference between experimental data and the scaling law without surface tension is properly corrected by equation 1.20, using the surface tension term.



Figure 1.10 – (a) Maximum crater radius normalised by the maximum crater radius scaling without surface tension R_{max}/R^*_{max} (Bo $\rightarrow +\infty$) (equation 1.15), as a function of $1/(\sqrt{\phi \text{Fr}^*\text{Bo}})$. The solid line corresponds to the surface tension correction of equation 1.20. (b) Crater opening time normalised by the crater opening time scaling without surface tension t_{max}/t^*_{max} (Bo $\rightarrow +\infty$) (equation 1.18), as a function of $1/(\sqrt{\phi \text{Fr}^*\text{Bo}})$. The solid line corresponds to the surface tension correction of equation 1.23. Colors scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 . Circles and crosses correspond respectively to large and small drop size series.

We finally obtain an expression for the crater opening time by integrating equation 1.9 between t = 0 and $t = t^*_{max}$

$$t_{max}^* = \xi^{1/2} \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^{-1/2} \int_0^{R_{max}^*} \frac{\bar{R}^{3/2}}{\left(\frac{2}{3}\phi - \frac{\bar{R}^2}{\mathrm{Fr}^*\mathrm{Bo}} - \frac{1}{4}\frac{\bar{R}^4}{\mathrm{Fr}^*}\right)^{1/2}} \mathrm{d}\bar{R}.$$
 (1.21)

Writing $\tilde{R} = \bar{R}/R^*_{max}$, this gives

$$t_{max}^* = t_{max}^* (\text{Bo} \to +\infty) \frac{4}{\text{B}\left(\frac{1}{2}, \frac{5}{8}\right)} \int_0^1 \frac{f(x)^{5/4} \tilde{R}^{3/2}}{\left[1 - \tilde{R}^4 + 2xf(x)(\tilde{R}^4 - \tilde{R}^2)\right]^{1/2}} \mathrm{d}\tilde{R}, \qquad (1.22)$$

where $f(x) = \sqrt{1 + x^2} - x$ and $x = (2 \text{Fr}^* \phi \text{Bo}^2/3)^{-1/2}$. Using a first-order Taylor expansion

in $(\sqrt{\mathrm{Fr}^*\phi\mathrm{Bo}})^{-1}$, we obtain the crater opening time including surface tension

$$t_{max}^{*} = t_{max}^{*}(\text{Bo} \to \infty) \left[1 - \frac{\sqrt{6}}{8} \frac{\text{B}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{8}\right)}{\text{B}\left(\frac{1}{2}, \frac{5}{8}\right)} (\sqrt{\text{Fr}^{*}\phi}\text{Bo})^{-1} + \mathcal{O}\left((\sqrt{\text{Fr}^{*}\phi}\text{Bo})^{-2} \right) \right].$$
(1.23)

Figure 1.10b shows the crater opening time normalised by the crater opening time scaling without surface tension $t_{max}/t_{max}^*(Bo \to +\infty)$, as a function of $(\sqrt{Fr^*\phi}Bo)^{-1}$. This corresponds to the ratio between experimental data and the scaling law without surface tension (equation 1.18). Although this scaling law without surface tension is close to the experimental opening time, it increasingly overestimates experiments as $(\sqrt{Fr^*\phi}Bo)^{-1}$ increases, *i.e.* when surface tension effects become significant. When surface energy is significant, we indeed expect the crater to open slower, on a protracted timescale. The difference between experimental data and the scaling law without surface tension is corrected in part by equation 1.23, which predicts a reasonable evolution with $(\sqrt{Fr^*\phi}Bo)^{-1}$ and gives an average relative error of 10% in comparison with experiments. These residual differences between experimental and predicted crater opening time, including surface tension, may result from integration in equations 1.21-1.22, where we assume that the energy partitioning ϕ and the kinetic energy correction ξ are independent of time. This also explains why residual differences of the maximum crater radius are smaller. Since we obtain the maximum crater radius assuming that the kinetic energy term of equation 1.9 vanishes, we predict the maximum crater radius without time integration.



Figure 1.11 – (a) Mean crater radius normalised by the maximum crater radius scaling $\bar{R}/R^*_{max}(Bo \rightarrow +\infty)$, as a function of time normalised by the crater opening time $t/t^*_{max}(Bo \rightarrow +\infty)$, with scaling laws neglecting surface tension. (b) Mean crater radius normalised by the maximum crater radius scaling \bar{R}/R^*_{max} , as a function of time normalised by the crater opening time t/t^*_{max} , with scaling laws including surface tension. The thick solid line corresponds to the solution of equation 1.9 when $1/(\sqrt{\phi Fr^*Bo}) = 0$, *i.e.* without surface tension. Colors scale as $1/(\sqrt{\phi Fr^*Bo})$. Solid and dashed lines correspond respectively to large and small drop size series.

These scaling laws, with and without surface tension, are now discussed by normalising the time evolution of the crater radius for all experiments (figure 1.11). Figure 1.11a shows the crater radius normalised by the scaling laws neglecting surface tension (equations 1.15 and 1.18). With this normalisation, we expect the experimental crater radius to collapse on the case without surface tension (figure 1.11a, red line). However, this is not the case, we indeed obtain a residual dependency on the dimensionless parameter related to surface tension $(\sqrt{Fr^*\phi}Bo)^{-1}$. Figure 1.11b shows the crater radius normalised by the scaling laws including

time as $\tilde{t} = t/t^*_{max}(Bo \to +\infty)$ in equation 1.9. This gives

better than when surface tension effects are neglected (figure 1.11a). Although the maximum crater radius collapses tightly, we obtain a residual dispersion of the experimental crater radius at early times when surface tension effects are significant. This dispersion is explained by renormalising the crater radius as $\tilde{R} = \bar{R}/R_{max}^*(Bo \to +\infty)$ and

surface tension (equations 1.20 and 1.23). We find that experimental crater radius collapse

$$\tilde{R}^{4} + \frac{\sqrt{6}}{\sqrt{\mathrm{Fr}^{*}\phi}\mathrm{Bo}}\tilde{R}^{2} + \frac{16}{\mathrm{B}\left(\frac{1}{2},\frac{5}{8}\right)^{2}}\tilde{R}^{3}\left(\frac{\mathrm{d}\tilde{R}}{\mathrm{d}\tilde{t}}\right)^{2} = 1.$$
(1.24)

The surface tension term depends on $(\sqrt{\mathrm{Fr}^* \phi} \mathrm{Bo})^{-1}$, which results in the significant residual dispersion of the experimental crater radius at early times. This remains correct when we normalise equation 1.9 with scaling laws including surface tension, although the surface tension term depends on $(\sqrt{\mathrm{Fr}^* \phi} \mathrm{Bo})^{-1}$ in a different way. We also obtain a residual dispersion of the crater radius at late times. Since the energy model (equation 1.9) applies only during the opening of the crater, we expect the experimental crater radius to collapse only when $t < t^*_{max}(\mathrm{Bo} \to +\infty)$, which explains this dispersion at later times.

1.4.5 Low Froude number experiments

Since our experiments are restricted to $Fr \gtrsim 60$, we now validate the scaling law for the maximum crater radius (equation 1.20) using low Froude numbers experiments in the range $Fr \simeq 4 - 100$ (Landeau et al., 2021). These experiments involve the impact of larger impactors, where $R_i \simeq 3$ cm, which result in lower Froude numbers without significant surface tension (We $\gtrsim 5 \times 10^4$) and viscosity (Re $\gtrsim 1 \times 10^3$) effects. The impacting liquid is initially held into a latex balloon. This balloon is released onto a needle above the surface, which ruptures the latex membrane and releases a nearly spherical volume.

Figure 1.12 shows the cratering process for two low Froude numbers experiments (Fr $\simeq 6$ and Fr $\simeq 100$). As in drop impact experiments, the crater first opens (figure 1.12b-c and 1.12j-k), before it collapses and produces a central jet (figure 1.12d-e and 1.12l-m), which eventually collapses (figure 1.12f-g and 1.12n-o). As expected, the cratering conditions are much more turbulent than in the drop experiments, in particular regarding the dynamics of the crown and the jet formation and collapse. In these experiments, the density of the drop is slightly larger than the density of the pool ($\rho_1/\rho_2 \simeq 1.02$), which leads, as in the drop experiments, to the formation of the mushroom-shaped instabilities around the crater. The cratering dynamics of these low Froude number experiments is similar to drop experiments at larger Froude numbers, with an initial flat-bottomed crater, which becomes hemispherical as the crater grows.

In order to validate our scaling law for the maximum crater radius at low Froude numbers, we compare the maximum crater depth H obtained in large volume experiments with our experiments, at $\rho_1/\rho_2 = 1.0$. In our experiments, the maximum crater depth is defined as the maximum value H_{max} of $H(t) = \sum_{l=0}^{l_{max}} a_l(t)$. For a given experiment, H_{max} is slightly larger than R_{max} since the crater is often stretched vertically, with positive a_1 (section 1.5).



Figure 1.12 – Low Froude number experiments with large volume impactor ($R_i \simeq 3$ cm). Froude numbers are Fr $\simeq 6$ (first line) and Fr $\simeq 100$ (second line). The density ratio is $\rho_1/\rho_2 \simeq 1.02$ in both experiments. Figure after Landeau et al. (2021).

Figure 1.13a shows the maximum crater depth as a function of the Froude number, for the large volume experiments (triangles), the large drop series experiments (circles) and the small drop series experiments (crosses). Drop impact experiments align with a $Fr^{0.20\pm0.01}$ power-law whereas large volume experiments align with a $Fr^{0.24\pm0.01}$ power-law, consistently with the $Fr^{1/4}$ theoretical prediction when $Bo \rightarrow +\infty$ (equation 1.15).

This difference in power-law exponents may be explained by the correction parameter ϕ and by second order surface tension effects modifying the crater depth in drop impact experiments. In our drop experiments, the correction parameter ϕ is expected to reduce the power-law exponent below 1/4 (equation 1.15), since ϕ depends on the Weber number as $\phi = \text{We}^{-0.157}$ (equation 1.14), and consequently on the Froude number. This accounts for the energy partitioning between the impacting drop and the pool, and the fact that several energy sinks such as crown energy and viscous dissipation are neglected in the energy conservation model. In the large volume experiments, ϕ appears to be independent of the Froude number with a power-law exponent close to 1/4. Since the impactor radius is much larger than in our drop experiments, energy sinks related to the formation of the crown and viscosity are expected to be relatively less important in the energy balance. Consequently, we may assume that ϕ is independent of the Froude number in the large impactor experiments. This assumption is supported by the close agreement between the fitted power-law $H_{max}/R_i = 1.13 \pm 0.05 \text{Fr}^{0.24\pm0.01}$ and the theoretical prediction of equation 1.15 with a constant correction parameter ($\phi = 0.4 \pm 0.1$), *i.e.* $H_{max}/R_i = 1.02 \pm 0.06 \text{Fr}^{0.25}$.

In addition to the effect of the correction parameter ϕ , we can include the surface tension term of the energy conservation equation (equation 1.9) and obtain the maximum crater radius scaling of equation 1.20. Figure 1.13b shows the maximum crater depth as a function of the maximum crater radius scaling R^*_{max} . In our drop impact experiments, R^*_{max} includes a variable correction parameter with $\phi = We^{-0.157}$ and surface tension effects with a Bond number in the range Bo $\simeq 0.4 - 1.0$, depending on the exact size of the drop. In the large impactor experiments, R^*_{max} includes a constant correction parameter as $\phi = 0.4$ and surface



Figure 1.13 – (a) Maximum crater depth H_{max} , normalised by the radius of the drop R_i , as a function of the Froude number. The solid line and the dashed line correspond to power-law scalings $H_{max}/R_i = 1.36 \pm 0.06 \text{Fr}^{0.20\pm0.01}$ and $H_{max}/R_i = 1.13\pm0.05 \text{Fr}^{0.24\pm0.01}$, respectively. (b) Maximum crater depth H_{max} , normalised by the radius of the drop R_i , as a function of the maximum crater radius scalings R_{max}^* (equation 1.20). The density ratio is $\rho_1/\rho_2 = 1.0$ for all experiments. Circles, crosses and triangles correspond respectively to our experiments with large and small drop size series, and large volume impactor experiments (Landeau et al., 2021). The green diamond is the maximum crater depth $H_{max}/R_i = 4$ in an axisymmetric hypervelocity impact simulation of Kendall et Melosh (2016) for Fr = 135.

tension effects with Bo = 120, which corresponds to a 3 cm impactor radius. Large volume and drop experiments align on a slope 1 line, which means that the scaling explains the differences between the two types of experiments, by considering both ϕ and surface tension effects. The scaling underestimates the experimental crater depth by 6% on average, which is expected since the crater is typically stretched vertically when it reaches its maximum size (section 1.5).

1.5 Effect of the density ratio on the crater geometry

1.5.1 Time evolution

In the energy conservation model, we assume that the crater is hemispherical (section 1.4). However, this assumption is only verified at specific times, and depends on the density difference between the impacting drop and the surrounding pool (*e.g.* figures 1.3, 1.4 and 1.5).

Figure 1.14 shows the fitted coefficients of the shifted Legendre decomposition of the crater boundary (equation 1.1) as a function of time for density ratios in the range $\rho_1/\rho_2 = 0.8 - 1.8$. These coefficients correspond to increasingly small scale deviations from the hemispherical shape of the crater. For example, the coefficient a_1 corresponds to a deformation of the crater, linear in $\cos \theta$, with respect to an hemisphere. When $a_1 > 0$, the crater is stretched vertically, resulting in a cavity pulled downward. When $a_1 < 0$, the crater is stretched horizontally, resulting in a cavity spread out laterally.

In each experiment, we normalise the fitted coefficients by the mean crater radius, *i.e.* the



Figure 1.14 – Time evolution, normalised by the crater opening time t_{max} , of the fitted coefficients a_l normalised by the mean crater radius $\bar{R} = a_0$, for l = 1 (a), l = 2 (b), l = 3 (c) and l = 4 (d). a_l are obtained using a shifted Legendre polynomials decomposition of the crater boundary (equation 1.1). Experiments are clustered by density ratio group, the extent of which (shaded area) is defined by the standard deviation of the experiments in that group. Solid lines correspond to the mean value in the density ratio group. Colors scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 .

.



Figure 1.15 – Time evolution snapshots of the crater, normalised by the crater opening time t_{max} , when $\rho_1/\rho_2 = 0.8$ and Fr = 590 (a), $\rho_1/\rho_2 = 1.0$ and Fr = 410 (b), $\rho_1/\rho_2 = 1.8$ and Fr = 540 (c). The dashed line corresponds to the fitted crater boundary. Solid lines correspond to the shifted Legendre polynomials decomposition of the fitted crater boundary, using increasingly higher degrees (l = 0, 1, 2, 3, 4).

degree zero coefficient a_0 . Using this normalisation, we quantify the deviation between the actual geometry of the crater and a hemisphere. We also normalise time by the experimental crater opening time t_{max} . We thus expect experiments with different opening timescale to collapse on the same curve. We cluster experiments by density ratio group, the extent of which corresponding to the variability between experiments at different Froude numbers. We obtain residual differences which mainly depend on the density ratio between the drop and the pool, showing the crucial influence of the density on the crater geometry.

At early times of the crater opening phase $(t/t_{max} \leq 0.2)$, the crater cavity has a flatbottomed shape, with negative a_1 (figure 1.14a). The evolution of this early flattened shape is independent of the density ratio, as expected since this early-time penetration stage is mainly governed by inertia (*e.g.* Berberović et al., 2009). In detail, the crater is also significantly deformed at higher degrees with a significant variability between experiments (figure 1.14b-d), probably inherited from the variability in exact impact conditions (*e.g.* shape of the impacting drop, turbulence). This initial flat-bottomed cavity, produced by the spread of the drop on the surface of the pool, gradually becomes hemispherical as a result of the overpressure produced at the contact point between the impacting drop and the surface (figure 1.15a-c, i). The magnitude of a_1/a_0 indeed decreases with time during this stage (figure 1.14a).

The crater continues to be stretched vertically until $t/t_{max} \simeq 0.5$, which leads to increasingly positive a_1/a_0 (figure 1.14a), *i.e.* vertically stretched cavity (1.15a-c, ii). This may be explained by the uneven distribution of the liquid of the drop around the crater cavity. The liquid of the drop first accumulates at the bottom of the crater, before it quickly spreads on the crater floor, producing a layer with an approximately uniform thickness. Since the deceleration of the crater is approximately radial, the initial excess of mass at the bottom of the crater produces a weight force with a resultant directed downward. This force pulls the crater downward, explaining the vertical stretching of the cavity and positive a_1 during crater opening. When the liquid of the drop is uniformly distributed around the cavity, the weight force is radial, which only contributes to the expansion of the cavity without distorting it.

The magnitude of the vertical stretching increases with the density ratio between the drop and the pool (figure 1.16a), as expected since the net weight force increases with the density of the drop. In the $\rho_1/\rho_2 < 1$ case, the liquid of the drop may induce an upward force since it is lighter than the surrounding. This may reduce the vertical stretching of the crater before the liquid of the drop spreads over the cavity.

When $Fr \leq 200$, the maximum vertical stretching is significantly larger than in the large Fr limit, with $0.2 \leq a_1/a_0 \leq 0.3$. In this low Weber and low Froude number limit, surface tension effects become significant in comparison with the impactor's inertia, and a capillary wave is expected to develop at the cavity interface (*e.g.* Pumphrey et Elmore, 1990; Leng, 2001). This capillary wave propagates downward and deforms the crater vertically, which explains the large values of a_1/a_0 (figure 1.17, i-v). When the capillary wave converges at the bottom of the crater, a bubble is entrapped by the pinching of the cavity (figure 1.17, vi).

The time at which a_1/a_0 reaches a maximum (figure 1.15a-c, ii) is independent of the density ratio and is the same as the $\rho_1/\rho_2 = 1$ case (figure 1.16b). This time decreases with the Froude number, converging towards $t/t_{max} \simeq 0.4$ when Fr $\gtrsim 500$. At low Froude numbers, the time required to reach the maximum vertical deformation of the crater is protracted, since the deformation of the cavity is driven by the capillary wave which migrates toward the bottom of the crater during $t/t_{max} \simeq 1.3$ (figure 1.17).

At late times of the crater opening phase $(0.5 \leq t/t_{max} \leq 1)$, the cavity starts to flatten, with decreasing a_1/a_0 (figure 1.14a). As the opening velocity of the crater decreases, buoyancy forces become significant, resulting in the horizontal stretching of the cavity. When $\rho_1/\rho_2 = 1$,



Figure 1.16 – (a) Maximum value of the normalised crater flattening a_1/a_0 as a function of the density ratio ρ_1/ρ_2 . Colors scale as the Froude number Fr. (b) Time at which the normalised crater flattening a_1/a_0 is maximum, normalised by the opening time of the crater t_{max} , as a function of the Froude number Fr. Colors scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 . Circles and crosses correspond respectively to large and small drop size series.



Figure 1.17 – Time evolution snapshots of the crater, normalised by the crater opening time t_{max} , when $\rho_1/\rho_2 = 1.0$ and Fr = 94. The dashed line corresponds to the fitted crater boundary. Solid lines correspond to the shifted Legendre polynomials decomposition of the fitted crater boundary, using increasingly higher degrees (l = 0, 1).

the crater flattens to give an approximately hemispherical crater at $t/t_{max} \simeq 1$ (figure 1.15b, iii). When $\rho_1/\rho_2 > 1$, the crater flattens without reaching a hemispherical crater at $t/t_{max} \simeq 1$ (figure 1.15c, iii) since at early times the crater was more stretched vertically than in the case without density contrast. When $\rho_1/\rho_2 < 1$, the crater flattens faster than in the case without density contrast, leading to a crater slightly stretched horizontally at $t/t_{max} \simeq 1$ (figure 1.15a, iii). This may be explained by the faster spread of the liquid of the drop around the crater boundary since it behaves as a density current.

During the opening of the crater, the cavity is also deformed to higher degrees, with positive a_2/a_0 (figure 1.14b). Given the relative amplitude of the positive a_2/a_0 with respect to a_1/a_0 , this corresponds to a second order deviation from the hemispherical shape, with verticalised crater boundary close to the surface. The values of a_2/a_0 increases with the density ratio, consistently with the vertical stretching of the crater. When $\rho_1/\rho_2 > 1$, the cavity is deformed with slightly positive a_3/a_0 , increasing with the density ratio, whereas when $\rho_1/\rho_2 \leq 1$, a_3/a_0 is close to zero (figure 1.14c). Higher degrees ($l \geq 4$) are close to zero for all density ratios (figure 1.14d).

After the crater has reached its maximum size $(t/t_{max} \gtrsim 1)$, the mean crater radius starts to decrease (figure 1.15a-c, iv-v). a_1/a_0 decreases at a rate larger than in the opening stage of the crater (figure 1.14a). Horizontal stretching of the crater is accelerated, as expected since buoyancy forces are now prevailing. When the density ratio increases, horizontal stretching of the crater is reduced and delayed, as a result of the increased vertical stretching of the cavity during the crater opening stage (figure 1.15a-c, iv). The shape of the crater then increasingly deviates from a hemispherical shape as the cavity closes. At $t/t_{max} \simeq 1.5$, higher degrees eventually deviate from zero (figure 1.14b-d). In addition to the negative value of a_1/a_0 , they correspond to the formation of the central peak (figure 1.15a-c, v).

1.5.2 Maximum crater flattening

In the same way as for the maximum crater radius (section 1.4), we now turn to estimating the flattening of the crater when it reaches its maximum size at $t = t_{max}$. As shown in figure 1.18, the density ratio modify the geometry of the crater when it reaches its maximum size. In particular, the crater is hemispherical when $\rho_1/\rho_2 = 1$, stretched horizontally when $\rho_1/\rho_2 < 1$, and increasingly stretched vertically when $\rho_1/\rho_2 > 1$.

Figure 1.19 shows the normalised crater flattening a_1/a_0 at $t = t_{max}$ as a function of the density ratio and the Froude number. As expected, the crater flattening at maximum opening increases with the density ratio (figure 1.19a). The crater flattening at maximum opening also increases when the Froude number decreases (figure 1.19b). As already discussed, this corresponds to a deformation of the cavity increasingly driven by the capillary wave propagating downward.

In figure 1.20a, we obtain a power-law scaling for the maximum crater flattening. We normalise the maximum crater flattening as $(1 + a_1/a_0)/(1 - a_1/a_0)$ in order to obtain only positive values, and fit a power-law scaling in the form $c_1 \operatorname{Fr}^{c_2}(\rho_1/\rho_2)^{c_3} \operatorname{Bo}^{c_4}$. As expected, we obtain a strong positive dependency on the density ratio, with $c_3 = 0.47 \pm 0.02$, consistently with figure 1.19a. We also obtain a negative dependency on the Froude number with $c_2 = -0.14 \pm 0.01$, consistently with figure 1.19b. A residual negative dependency on the Bond number is obtained, with $c_4 = -0.11 \pm 0.02$. Given the definition of the Bond number (equation I.2), this is mainly related to the two series of drop size used in our experiments. This means that when the radius of the impacting drop increases, but conserving the same kinetic energy, the vertical stretching of the crater is slightly reduced.



Figure 1.18 – Snapshots of the crater when it reaches its maximum size at $t = t_{max}$, when $\rho_1/\rho_2 = 0.8$ and Fr = 590 (a), $\rho_1/\rho_2 = 1.0$ and Fr = 410 (b), $\rho_1/\rho_2 = 1.4$ and Fr = 610 (c), $\rho_1/\rho_2 = 1.8$ and Fr = 540 (d). The dashed line corresponds to the fitted crater boundary. Solid lines correspond to the shifted Legendre polynomials decomposition of the fitted crater boundary, using increasingly higher degrees (l = 0, 1, 2, 3, 4).



Figure 1.19 – Normalised crater flattening a_1/a_0 when the crater reaches its maximum size at $t = t_{max}$ as a function of the density ratio ρ_1/ρ_2 (a) and the Froude number Fr (b). Colors scale respectively as Fr (a) and ρ_1/ρ_2 (b). Circles and crosses correspond respectively to large and small drop size series.



Figure 1.20 – (a) Experimental renormalised crater flattening $(1+a_1/a_0)/(1-a_1/a_0)$ when the crater reaches its maximum size at $t = t_{max}$, as a function of the least-squares best-fit power-law scaling, using the Froude number Fr, the density ratio ρ_1/ρ_2 and the Bond number Bo. (b) Experimental time at which the normalised crater flattening a_1/a_0 is maximum, normalised by the opening time of the crater t_{max} , as a function of the least-squares best-fit power-law scaling, using the Froude number Fr, the density ratio ρ_1/ρ_2 and the Bond number Bo. Colors scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 . Circles and crosses correspond respectively to large and small drop size series.

In figure 1.20a, we obtain a power-law scaling in the form $c_1 \operatorname{Fr}^{c_2}(\rho_1/\rho_2)^{c_3} \operatorname{Bo}^{c_4}$ for the time at which the vertical stretching of the crater is maximum. As expected from figure 1.16b, we obtain a negative dependency on the Froude number, with $c_2 = -0.39 \pm 0.03$. We also obtain a positive and a negative dependency on the density ratio and the Bond number, with $c_3 = 0.14 \pm 0.07$ and $c_4 = -0.14 \pm 0.05$, respectively.

1.5.3 Crater geometry models

In order to interpret experimental data such as the time evolution of the shape of the crater and the maximum flattening of the cavity, models accounting for the crater geometry, and the effect of the density ratio, are required. Since the energy conservation models assume a hemispherical crater (*e.g.* section 1.4 and Engel, 1966, 1967), these models are not designed to analyse the crater geometry.

A more suitable model to study the shape of the cavity is based on momentum conservation for an incompressible and irrotational flow. For example, Bisighini <u>et al.</u> (2010) model the evolution of the crater cavity, without initial density contrast, using a radially expanding sphere of which the center of mass is allowed to translate vertically. The potential flow around the cavity is then defined as the superposition of the radially expanding flow produced by the cavity expansion and the flow past a translating sphere. Using the unsteady Bernoulli equation and a dynamic boundary condition, they obtain a system of ordinary differential equations for

the normalised radius of the sphere α and the vertical coordinate of the center of the sphere ζ

$$\begin{cases} \ddot{\alpha} = -\frac{3}{2}\frac{\dot{\alpha}^2}{\alpha} - \frac{2}{\alpha^2 We} - \frac{1}{Fr}\frac{\zeta}{\alpha} + \frac{7}{4}\frac{\dot{\zeta}^2}{\alpha} \\ \ddot{\zeta} = -3\frac{\dot{\alpha}\dot{\zeta}}{\alpha} - \frac{9}{2}\frac{\dot{\zeta}^2}{\alpha} - \frac{2}{Fr} \end{cases}$$
(1.25)

We solve this initial value problem numerically by choosing suitable initial conditions to fit the experimental shape of the crater (l = 0, 1). Figure 1.21 shows the result of this fit in three cases involving different density ratios. Although we obtain a good agreement with experimental data, this initial value problem strongly depends on the initial conditions we choose. The physical interpretation of these initial conditions is ambiguous. For example, when $\rho_1/\rho_2 = 1$, the fitted initial conditions are $\alpha = 4.0$, $\dot{\alpha} = -2.6$, $\zeta = -3.2$ and $\dot{\zeta} = 6.1$. The initial velocities of the sphere expansion and the center of mass of the crater are very large in comparison with the impact velocity. The sphere initially shrinks (negative $\dot{\alpha}$) to compensate for the very quick downward translation of the sphere center (positive $\dot{\zeta}$). Furthermore, the influence of the density ratio is only considered through the initial conditions on α and ζ , without directly considering the influence of the drop liquid layer on the crater geometry.



Figure 1.21 – Average crater radius a_0 normalised by the drop radius R_i (a), and normalised crater flattening a_1/a_0 (b), as a function of time normalised by the drop free-fall time R_i/U_i , for three impact parameters. Solid lines correspond to the model of Bisighini et al. (2010) (equation 1.25).

In addition to the lack of physical constraints regarding the initial conditions and the influence of the density ratio, the model of Bisighini et al. (2010) has two main limitations. First, the spherical shape of the crater is imposed, whereas the geometry of the cavity is expected to result from the flow dynamics. Then, the dynamic boundary condition is linearized near the bottom of the cavity ($\theta = 0$), which is suitable to model the crater depth but inadequate to obtain the shape of the cavity. New models thus have to be developed to interpret properly the crater geometry evolution and the role of density contrast. Since the shape of the cavity is closely linked to the velocity field produced around the crater, we deal with these models in chapter 3 where we experimentally measure velocity fields.

1.6 Impact-induced dispersion of the impactor's core

Metal-silicate equilibration between impactor cores and the primitive mantle occurs mainly in magma oceans due to the liquid-liquid interactions between phases. The metal phase migrates toward the core as a turbulent thermal where efficient metal-silicate equilibration is expected to occur. This equilibration crucially depends on the initial size of the turbulent thermal (Deguen et al., 2011, 2014), dictated by the size of the impactor's core. However, the initial size of the turbulent thermal is expected to be larger than the size of the impactor's core due to impact-induced dispersion (Kendall et Melosh, 2016; Landeau et al., 2021).

In the context of planetary impacts, the Froude number is given by

$$Fr = 2\frac{R_t}{R_i}\frac{U_i^2}{U_e^2}$$
(1.26)

where R_i and U_i are respectively the impactor radius and velocity, $U_e = \sqrt{2gR_t}$ is the escape velocity, and R_t is the radius of the target planet. The impact velocity of colliding bodies during accretion is typically one to three times the escape velocity (Agnor et al., 1999; Agnor et Asphaug, 2004), which means that the Froude number depends mainly on the impactor to target radius ratio. The Froude number is about 1 for giant impacts, comparable in size to the target, but increases by several order of magnitude for small colliding bodies.

In order to estimate the dispersion of the metal phase, we consider the maximum radius R_{max} of the impact crater as a first-order approximation of the actual initial size of the turbulent thermal. Using the experimental scaling law for the maximum crater radius (equation 1.16) and equation 1.26, we calculate the maximum crater radius as a function of the impactor to target radius ratio R_i/R_t (figure 1.22). We use $\rho_m/\rho_s = 2$ to match the density contrast realistic differentiated impactors. Since the metal phase dispersion is influenced by the closure of the crater, the formation and the collapse of the central peak (Landeau et al., 2021), this estimate has limitations. Since the Froude number increases when the impactor to target radius ratio decreases, it means that a smaller colliding body will create a larger crater, relative to its size, than a giant impactor. For example, impactors with a 10 km and 100 km radius impacting an Earth-sized target (figure 1.22, triangle and circle, respectively) will respectively create a crater 6.7 and 3.9 times its own size, *i.e.* 67 km and 390 km in radius.

Several giant impact scenarios have been proposed to explain the formation of the Moon (*e.g.* Canup, 2004; Cuk et Stewart, 2012). We expect the canonical impact scenario with a Mars-sized impactor (Canup, 2004) to create a crater 1.7 times its own size, *i.e.* 5500 km in radius (figure 1.22, square). In contrast, we predict that the fast-spinning and smaller impactor proposed by Cuk et Stewart (2012) creates a crater 2.6 times its own size, *i.e.* 6100 km in radius (figure 1.22, diamond). Given the size of the craters, we expect the sphericity of the impactor and the target to influence crucially the impact dynamics, these maximum crater sizes should be considered carefully. Furthermore, these giant impacts scenario involve large impactor to target radius, corresponding to an extrapolated range of Froude number, *i.e.* Fr < 60 (figure 1.22, dashed lines), which is outside of the experimental Froude number range.

Since the maximum crater radius decreases when the impactor to target radius ratio increases, the relative dispersion of the metal phase induced by the impact is expected to be larger for small planetesimals, than for giant impactors. F



Figure 1.22 – Maximum crater radius R_{max} , normalised by the impactor radius R_i , as a function of the impactor to target radius R_i/R_t (equation 1.26), for several impact velocities U_i , and using $\rho_m/\rho_s = 2$. Triangle: impactor of 10 km in radius onto an Earth-sized target. Circle: impactor of 100 km in radius onto an Earth-sized target. Square: canonical Moon-forming impact with a Mars-sized impactor (Canup, 2004). Diamond: fast-spinning Earth Moon-forming impact with a fast ($U_i = 2U_e$) and small ($R_i/R_t = 0.37$) impactor (Cuk et Stewart, 2012). Dashed lines correspond to an extrapolated range of Froude number, *i.e.* Fr < 60, which is outside of the experimental Froude number range.

1.7 Conclusion and perspectives

In this chapter, we used a backlighting method to visualize the crater produced after the impact of a drop on a deep liquid pool. After a phenomenological description of the cratering process, we obtained the time evolution of average crater radius, as a function of the density ratio and the Froude number, and compared it to an energy conservation model. In particular, we obtained scaling laws for the maximum crater radius and the crater opening time, and compared them with low Froude number experiments. We also investigated the effect of the density ratio between the impacting drop and the pool on the shape of the crater. We eventually used the scaling laws of the maximum crater radius as a first estimate of the dispersion of the metal phase induced by planetesimal impacts during the formation of terrestrial planets.

From a geophysical perspective, several aspects that may influence the opening dynamics of the crater are neglected in our experiments and have to be investigated using experimental or numerical methods. They include compressibility effects with the propagation of an impact shock-wave and melting processes (Kendall et Melosh, 2016), oblique impact effects with an asymmetric crater and modifications of the central peak properties (Leneweit et al., 2005; Gielen et al., 2017), differentiated impactor effects with the existence of a mantle around the impactor's core, and immiscibility effects with the possible fragmentation of the metal phase,

as well as viscosity and diffusivity contrasts between phases (Jain et al., 2019).

From a fluid dynamics perspective, particular aspects of the cratering process are still poorly understood and have to be further investigated. For example, this is the case for the formation mechanism of surface bubbles above the crater, following the closure of the fluid crown, when the Weber number reaches a critical value. Figure 1.23 shows snapshots from an experiment in which such a bubble forms. The liquid crown produced during the impact closes on itself as the crown expands. This produces a transient toroidal bubble crossed by the central peak, before it destabilises to form a long-lasting surface bubble.

The surface bubble was first described by Worthington (1908) for drop impact experiments with We ≥ 1000 . Several authors then observed the surface bubble for impact velocity close to the terminal velocity (Franz, 1959; Engel, 1966). In addition, this surface bubble was never observed in low Weber number cases (Mutchler et Hansen, 1970), a lower limit for the Weber number being We ≥ 740 (Hallett et Christensen, 1984). More recently, the influence of the pool temperature on the lower limit for bubble surface formation was investigated, with a room temperature critical Weber number being We ≥ 1200 (Xu et al., 2018).

Figure 1.24 shows the probability of crown closure as a function of the Weber number $We = \rho_1 U_i^2 R_i / \sigma$ and the density ratio ρ_1 / ρ_2 . In our experiments, the critical Weber number is $We \simeq 900$. This critical value mainly depends on the surface tension of the pool and on the inertia of the impactor, whereas it is independent of the density ratio and the drop size.

We now turn to describe the formation of the surface bubble (figure 1.23). A detailed description can be found in Worthington (1908) and more recently in Xu et al. (2018).

After the impact, the fluid crown first grows radially and vertically outward, producing a cylindrical thin-walled fluid sheet (figure 1.23, i-ii). This curved cylindrical wall is expected to contract inward under the action of surface tension. Furthermore, the crown loses mass and momentum as it grows under the action of gravity, which results in a thinner crown wall at the top. Since less liquid has to be accelerated at the top, the crown thus contracts faster at the top than at the bottom (figure 1.23, iii-iv). In addition, the rim of the crown is pulled toward the cylindrical sheet by surface tension and increases in size as it entrains fluid from the sheet. This thick rim is expected to contract faster than the thin sheet below, which contributes to the differential contraction of the crown. This promotes the gradual closure of cylindrical sheet and the formation of the surface bubble by the entrapment of air inside the crown (figure 1.23, v).

Crown closure occurs only if the time required to contract and ultimately close the crown is smaller than the time it takes for the rim to collapse under the action of gravity. At low Weber number, the kinetic energy of the impactor is insufficient to allow the closure of the crown before the rim collapses. As the Weber number increases, the time it takes for the rim to collapse is protracted, and at a critical Weber number, eventually becomes longer than the closure time of the crown.

After the crown closes, a high-speed downward jet can break thought the crater floor (figure 1.23, vi-vii). The collapse of the crater then merges with the downward jet of the crown, producing a transient toroidal bubble around the central liquid column (figure 1.23, viii). The toroidal bubble eventually destabilises, which gives a relatively stable surface bubble (figure 1.23, ix-x).

Most of the works investigating crown closure only give a qualitative description of the formation process (*e.g.* Worthington, 1908; Franz, 1959; Engel, 1966), or only focus on the critical Weber number (*e.g.* Mutchler et Hansen, 1970; Hallett et Christensen, 1984; Xu <u>et al.</u>, 2018), for a narrow range of density, viscosity and surface tension. The role of surface tension, viscosity and density of both the pool and the drop still have to be investigated regarding the



Figure 1.23 – Formation of a surface bubble after a liquid drop impact onto a deep liquid pool without density contrast ($\rho_1/\rho_2 = 1.0$ and Fr = 918).



Figure 1.24 – Probability of crown closure as a function of the Weber number $We = \rho_1 U_i^2 R_i / \sigma$ and the density ratio ρ_1 / ρ_2 .

critical Weber number and the dynamics of the crown. Although mainly made of the fluid of the pool, the fluid of the crown is indeed a mixture with the fluid of the drop.

As an example, figure 1.25 shows the fluid crown at the moment it closes, for different density ratios. As the density ratio increases, the growth of the crown is damped, with a reduced maximum height. A consequence of this is the lack of long-lasting surface bubble formation following the closure of the crown. This may be related to increased surface tension and density of the fluid of the crown due to the entrainment of the fluid of the drop. This may change the contraction and the collapse time of the crown. This may also be related to the dynamics of the cavity, which is increasingly entrained downward with the density ratio (section 1.5). This may interact with the growth of the crown through surface tension effects. In any event, a dynamical model explaining the evolution and closure of the crown may be useful to disentangle the influence of these different parameters.



Figure 1.25 – Snapshots of the fluid crown at the moment it closes, for different density ratios, at a given Froude number ${\rm Fr}\simeq900.$

Étude de l'instabilité de Rayleigh-Taylor induite par l'impact

2.1 Introduction

Rayleigh-Taylor (RT) instability occurs at the interface between two fluids of different densities, when subjected to an acceleration directed toward the denser fluid. In a gravitational field, an interface separating a dense fluid supported by a lighter one is unstable (Rayleigh, 1899). In this situation, which we refer as "static", the average position of the interface does not vary with time. If the interface is accelerated in the direction from the lighter to the denser fluid, which in a frame of reference moving with the interface translates into a fictitious force directed toward the lighter fluid, the configuration is also unstable (Taylor, 1950). In this situation, which we refer as "dynamic", the average position of the interface varies in time. In both cases, infinitesimal perturbations at the interface will grow in time, leading to the interpenetration of the fluids, and to the reduction of their combined potential energy.

The RT instability was first investigated at planar interfaces using theoretical, numerical, and experimental methods, both in the early-time linear (*e.g.* Emmons <u>et al.</u>, 1960; Chandrasekhar, 1961; Tryggvason, 1988) and the subsequent non-linear regimes (*e.g.* Linden <u>et al.</u>, 1994; Dalziel <u>et al.</u>, 1999; Dimonte, 1999). However, various phenomena such as inertial confinement fusion (ICF) experiments (*e.g.* Lindl, 1998; Thomas et Kares, 2012), supernovae explosions (*e.g.* Arnett <u>et al.</u>, 1989; Schmidt, 2006), detonation of explosive charges (*e.g.* Balakrishnan et Menon, 2011), and collapsing bubbles (*e.g.* Prosperetti, 1977; Lin <u>et al.</u>, 2002), involve RT instabilities at spherical interfaces. The spherical configuration was initially investigated in static and dynamic cases, regarding the early-time linear stability of spherical interfaces between two inviscid fluids (Bell, 1951; Plesset, 1954; Mikaelian, 1990). Viscosity effects responsible for energy dissipation at small-scale were also investigated in both cases (Chandrasekhar, 1955; Prosperetti, 1977; Mikaelian, 2016). Turbulent mixing related to the late-time non-linear RT instability dynamics was also investigated for spherical interfaces (Youngs et Williams, 2008; Thomas et Kares, 2012; Lombardini et al., 2014).

We are interested here in an instability we have observed in experiments in which a denserthan-water drop impacts a deep pool of water. Figure 2.1 shows a snapshot from one such experiment, at a time when the impact of the drop has produced a sizeable crater. It can be seen from the picture that the liquid from the drop, which covers the crater floor, has developed mushroom-shaped structures penetrating radially into the water pool. We interpret these structures as resulting from a spherical RT instability associated with the deceleration of the crater floor. The dynamics of the RT instability depends crucially on the acceleration history of the interface (Mikaelian, 1990; Dimonte et Schneider, 2000). In the case of a drop impact, this is dictated by the crater opening dynamics, which depends on the impact parameters (chapter 1). \sim



Figure 2.1 – Crater produced by the vertical impact of a liquid drop onto a less dense liquid pool. A spherical Rayleigh-Taylor instability develops around the crater when it decelerates, which results in the mushroom-shaped plumes growing radially outward.

In this chapter, we use LIF to obtain the time evolution of the mixing layer, as a function of the density ratio and the Froude number. After a phenomenological description of the RT instability, we use a linear stability analysis model to obtain theoretical instability wavelength at early times, which we compare to experiments. We then use the acceleration history of the cratering process obtained using the energy conservation model (chapter 1) to characterise the mixing layer dynamics and derive a model for the evolution of the mixing layer thickness. We eventually apply the mixing properties of this impact-related instability to the differentiation of terrestrial planets. We estimate the mass of silicates that equilibrates with the metal of the impactors during crater opening, in particular during potential Moon-forming impacts.

2.2 Laser-Induced Fluorescence

In the LIF configuration, a vertical laser sheet (532 nm) excites the fluorescent dye (Rhodamine 6G) contained in the fluid of the drop (figure 2.2). The fluorescent dye then re-emits light between 500 nm and 700 nm. This emission signal is then recorded by the camera and isolated from the laser signal with a long-pass filter (> 540 nm). We generate the laser sheet using a 10 W Nd:YAG continuous laser in combination with a divergent cylindrical lens and a telescope, producing a 1 mm thick sheet. We divert the laser sheet vertically using a 45° mirror beneath the tank. In order to isolate the mixing layer, we process images with spatial calibration using a sight, background removal, and laser sheet corrections, removing sheet inhomogeneities. We then filter and remove artefacts due to reflections on the surface and on the air-water interface. In particular, we carefully remove the internal reflection of the mixing layer (*e.g.* figure 2.3). We eventually obtain the dye concentration field in the mixing layer, using its direct proportionality to the measured field of light intensity.

Using this LIF method, we measure the thickness of the mixing layer and the number of plumes produced by the RT instability (figure 2.3). As for the backlight configuration, we fit the position of the crater boundary $R(\theta, t)$, corresponding to the inner boundary of the mixing layer, using a set of shifted Legendre polynomials up to degree l = 5. We then define a local frame of reference $(e'_r, e_{\theta'})$, where e'_r is normal to the fitted crater boundary and e'_{θ} is tangent



Figure 2.2 – Absorption and emission spectrum of the fluorescent dye used in the experiments (Rhodamine 6G). We use a long-pass filter (> 540 nm) to remove the wavelength of the laser (532 nm).

to it. For each polar position θ about the crater boundary, we calculate the local mean position of the mixing layer $\langle r' \rangle$, using the position of the pixels in the local frame of reference (r', θ) and the corresponding concentration field c

$$\langle r' \rangle(\theta) = \frac{\int r' c(r', \theta) dr'}{\int c(r', \theta) dr'}.$$
(2.1)

We then calculate the local standard deviation $\sigma_{r'}$ about the local mean position of the mixing layer

$$\sigma_{r'}(\theta) = \sqrt{\frac{\int \left[r' - \langle r' \rangle(\theta)\right]^2 c(r', \theta) \mathrm{d}r'}{\int c(r', \theta) \mathrm{d}r'}}.$$
(2.2)

We eventually obtain the mixing layer thickness \boldsymbol{h} with

$$h = \frac{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} 2\sigma_{r'} R^2 |\sin\theta| w(\theta) \mathrm{d}\theta}{\int_{-\pi/2}^{\pi/2} R^2 |\sin\theta| w(\theta) \mathrm{d}\theta},$$
(2.3)

using a weighted average where $w = 1/[1 + \exp\{k(|\theta| - \theta_0)\}]$ is a symmetric logistic weight function whose steepness is k = 30 and sigmoid's midpoint is $\theta_0 = \pi/3$. The logistic function allows to give more weight to the bottom of the crater, between $\theta = 0$ and $\theta = \theta_0$, and less to the top of the crater, close to $\theta = \pm \pi/2$. The use of such a weight function is motivated by the polar dependency of the LIF signal quality. Close to the surface, *i.e.* at $\theta = \pm \pi/2$, the pixels intensity is reduced and imaging of the mixing layer undergoes significant perturbations, leading to a poor estimate of its extent. The crater is indeed illuminated from below, so that the laser sheet undergoes absorption (due to the fluorescent dye) and refraction (due to small scale variations of the index of refraction) as it goes through the mixing layer. Imaging of the mixing layer close to the surface may also be perturbed directly by the air-water interface, causing reflection of the laser sheet. All these effects can be amplified since the crater is not hemispherical. If the drop is denser than the pool, the crater is stretched downward, leading \sim

after a while to an ellipsoidal crater centred below the surface of the pool. The path of the laser sheet through the mixing layer is thus geometrically increased, and is more likely to cross the air-water interface.



Figure 2.3 – Detection of the mixing layer. The solid line corresponds to the fitted crater boundary using a set of Legendre polynomials up to degree l = 5. Dashed lines correspond to the weighted average mixing layer boundaries, calculated using the second moment of the concentration about the mean position of the layer. Blue arrows indicate the position of the plumes produced by the instability.

We also count manually the number of plumes produced by the RT instability for each experiment at the same dimensionless time $t/(R_i/U_i) \sim 10$ (figure 2.3, inset). This time was chosen from visual inspections, which suggest that at this time the plumes have not yet interacted significantly with each others, which is relevant since this number of plume is to be compared with theoretical results from a linear stability analysis.

As in the backlight configuration, uncertainties are dominated by the extrinsic variability between experiments in the same configuration, and hence, we repeat each experiment at least four times consecutively. We neglect intrinsic uncertainties related to the spatial resolution of the camera, the spatial calibration and image processing since as in the backlight configuration, they are still comparatively small.

2.3 Phenomenology of the Rayleigh-Taylor instability

The presence of an instability affecting the interface between the drop and surrounding is evidenced by the comparison of experiments without and with a density contrast between the drop and pool liquids, as shown with snapshots in figure 2.4. We will also base our description on figure 2.5, which shows composite images obtained from sequences of LIF images from these two experiments. They are built by extracting from each LIF image a column of pixels centred on the crater vertical axis of symmetry, before juxtaposing them to show the LIF intensity as a function of vertical position and time. This provides a qualitative picture of the evolution of the radial dispersion of the liquid drop.

The early time evolution of the drop liquid is similar in both experiments up to $t/(R_i/U_i) \sim$ 10. The liquid from the drop spreads over the crater floor to form a thin layer of approximately uniform thickness (figure 2.4 (i-ii) and figure 2.5). In the experiment with no density contrast (figures 2.4a,b and 2.5a), the thickness of the layer keeps decreasing with time as the crater grows. This is a direct consequence of the crater expansion, the liquid of the drop being redistributed over an increasingly large surface area.

The behaviour of the layer is markedly different when the drop is denser than the pool. Figures 2.4c,d and 2.5b show that the thickness of the dyed layer increases with time at $t/(R_i/U_i) \gtrsim 10$, while small scale corrugations of the interface evolve into radially growing plumes. The fine scale structure of the layer as seen from the LIF concentration field (figure 2.4d, iii-iv) is reminiscent of the structure of mixing layers observed in Rayleigh-Taylor experiments in planar configurations (*e.g.* Dalziel et al., 1999).

These observations can be rationalised as follows. During the crater opening phase, the rate at which the crater grows gradually decreases with time, which results in a deceleration of the boundary between the drop layer and the surrounding liquid. This situation is known to be unstable with respect to Rayleigh-Taylor instability when the liquid from the drop is heavier than the liquid from the pool (Taylor, 1950). Measurements of the crater acceleration as a function of time (figure 1.7c of chapter 1) shows that the deceleration of the crater boundary can be more than ten times larger than the acceleration of gravity, which explains why the dense liquid plumes grow radially outward rather than in the vertical direction.

As discussed above, the thickness of the dyed layer initially decreases, up to $t/(R_i/U_i) \sim$ 10 in the experiment shown on figure 2.4c,d, before increasing until the crater reaches its maximum size. This can be qualitatively understood as resulting from a competition between the growth of the instability and the thinning of the layer associated with the expansion of the crater, which can damp the instability by stretching the layer.

The instability first goes through a stage where the perturbations of the interface are small in comparison with the radius of the crater and the wavelength of the instability (figure 2.4d, i-ii). This stage is expected to occur very early in the crater opening sequence, as suggested by our experiments where the perturbations reach the same size as the instability wavelength, at $t/(R_i/U_i) \sim 10$. This stage is not directly observed in our experiments because geometrical effects, that stretch and thin the dense layer, prevail over the RT instability. Fast vigorous crater expansion is indeed expected to dampen the RT instability. Since the two fluids involved are miscible, *i.e.* surface tension is zero, all wave numbers are expected to be unstable with respect to the RT instability (Chandrasekhar, 1955). However, owing to larger velocity gradients at large wave numbers, viscosity is responsible for the energy dissipation of short wavelengths. The growth rate of the instability then decreases as the inverse of the wave number (Chandrasekhar, 1961). Consequently, a mode of maximum instability depending on the acceleration history and impact parameters is expected to develop. This mode of maximum instability likely determines the typical number of plumes and the corresponding wavelength.

At some point, geometrical effects produced by crater expansion loose intensity and become comparable with the instability. This coincides with a stage where the instability is strongly influenced by three-dimensional effects, leading to the formation of plumes below the hemispherical surface of the crater (figure 2.4d, iii). As the instability grows toward a more turbulent layer, the mode of maximum instability is likely to be modified by non-linear interactions. Plumes then start interacting with each other, producing a mixing layer (figure



Figure 2.4 – (a, c) Liquid drop impact onto a deep liquid pool without density contrast ($\rho_1/\rho_2 = 1$ and Fr = 481). (b, d) Liquid drop impact onto a deep liquid pool with density contrast ($\rho_1/\rho_2 = 1.8$ and Fr = 542). In the backlight configuration (a, c), we use a LED panel to image the crater shape. In the LIF configuration (b, d), a laser sheet excites the fluorescent dye contained in the impacting drop.



Figure 2.5 – Position of the mixing layer cross-section at $\theta = 0$, as a function of time, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i , without (a) $(\rho_1/\rho_2 = 1.0)$ and with (b) $(\rho_1/\rho_2 = 1.8)$ density contrast between the drop and the pool. The surface of the pool prior to impact is at z = 0. The colour scale represents the intensity of the fluorescent tracer initially within the drop.

2.4d, iv). We expect these interactions to come from multi-mode perturbations interacting non-linearly with each other, and from small-scale Kelvin-Helmholtz instability produced at the side of the plumes (Cook et al., 2004).

This competition between instability growth and geometrical damping is also apparent in figure 2.6, which shows the mixing layers when the crater reaches its maximum size, as a function of the Froude number and density ratio. For density ratios smaller than unity (first column), the impacting drop is only stretched by crater expansion. Mixing related to the RT instability does not occur in this stable configuration. For density ratios about unity (second column), some mixing is observed, possibly resulting from a large-scale shear instability in the mixing layer. During crater opening, the air-water interface is not exactly hemispherical and the velocity field is not exactly radial (Bisighini <u>et al.</u>, 2010). This creates a velocity shear across the interface, which may lead to the development of a Kelvin-Helmholtz instability. This instability might be stabilised by the density difference for density ratios smaller than unity. For density ratios larger than unity (third and forth columns), mixing due to the RT instability occurs. For a given Froude number, the mixing layer thickness obtained when the crater reaches its maximum size increases with the density ratio. For a given density ratio, the mixing layer thickness does not change significantly with the Froude number.

A point of terminology may be in order here. The configuration of our experiments falls somewhat in between the canonical Rayleigh-Taylor configuration, in which the acceleration is constant, and incompressible Richtmyer-Meshkov instability, in which the acceleration changes impulsively (Richtmyer, 1960; Meshkov, 1969; Jacobs et Sheeley, 1996). Since in our experiments the acceleration varies continuously during the crater opening phase, we have chosen to refer to it as a Rayleigh-Taylor instability, as has been done before in the literature

 \sim



Figure 2.6 – Snapshots of the mixing layer when the crater reaches its maximum size, as a function of the Froude number and the density ratio.

(*e.g.* Mikaelian, 1990; Dimonte, 1999). However, the magnitude of the acceleration decreases fast compared to the crater opening timescale, by almost two orders of magnitude (figure 1.7c of chapter 1), giving it a somewhat impulsive nature. This suggests that the development of the instability may share some similarities with the Richtmyer-Meshkov instability.

2.4 Evolution of the Rayleigh-Taylor instability

Experiments in the LIF configuration provide the time evolution of the mixing layer. We first use a linear stability analysis model to predict the instability wavelength at early times. Using the energy conservation model (chapter 1), we also derive a model for the mixing layer thickness evolution, which we compare to experiments.

2.4.1 Early-time wavelength

We convert the experimental instability wavelengths at early times into an equivalent spherical harmonic degree, and we compare to a scaling law and to an approximate linear stability analysis model (Chandrasekhar, 1955). From the number of plumes n, counted on the hemispherical section of the density interface at $t/(R_i/U_i) = 10$, we estimate the instability wavelength as $\lambda = \pi \bar{R}/n$. We then obtain the corresponding spherical harmonic degree of maximum instability l_{max} using the Jeans relation (Jeans, 1923)

$$\sqrt{l_{max}(l_{max}+1)} = \frac{2\pi\bar{R}}{\lambda}.$$
(2.4)



Figure 2.7 – (a) Experimental harmonic degree of maximum instability l_{max} , as a function of the harmonic degree of maximum instability scaling l_{max}^* (equation 2.6). Colours scale as the Reynolds number Re. (b) Experimental harmonic degree of maximum instability l_{max} , as a function of the theoretical degree of maximum instability (equations 2.7-2.8). Colours scale as the Reynolds number Re.

We assume that the instability wavelength depends on a balance between inertia, buoyancy and viscous forces. On one hand, the balance between buoyancy and inertia is valid at small harmonic degrees l, with an instability growth rate scaling as $l^{1/2}$ (Rayleigh, 1899; Taylor, 1950). On the other hand, the balance between buoyancy and viscosity is valid at large harmonic degrees l, with an instability growth rate scaling as 1/l (Chandrasekhar, 1961). The instability growth rate thus reaches a maximum when inertia, buoyancy and viscous forces are of the same order of magnitude. The corresponding instability wavelength is then $\lambda \sim \{\nu_2^2/[(\Delta \rho_0/\rho_2)\ddot{R}]\}^{1/3}$, which after nondimensionalization gives

$$\lambda \sim \left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_2} \ddot{\vec{R}}\right)^{-1/3} \operatorname{Re}^{-2/3}.$$
(2.5)

Assuming that \ddot{R} and \bar{R} respectively scale as R_{max}/t_{max}^2 and R_{max} (see equations 1.15 and 1.18), and using the Jeans relation (equation 2.4), equation 2.5 gives a scaling for the degree of maximum instability

$$I_{max}^{*} = c \,\phi^{1/4} \xi^{-1/3} \mathrm{Fr}^{-1/12} \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^{1/4} \left(\frac{\Delta \rho_0}{\rho_2}\right)^{1/3} \mathrm{Re}^{2/3},\tag{2.6}$$

2
where $c = 0.177 \pm 0.005$ is a least-squares best-fit prefactor obtained from experimental data (figure 2.7a).

We show the harmonic degrees of maximum instability in figure 2.7a, for all experiments, as a function of their derived scaling l_{max}^* . Experimental data are approximately proportional to the scaling, except for Reynolds number smaller than 4000. In this case, the crater differs from the hemispherical shape and from the purely radial acceleration assumed in the scaling.



Figure 2.8 – (a) Theoretical growth rate of the instability (equation 2.7-2.8), as a function of the harmonic degree l, at several times $t/(R_i/U_i)$. The solid line corresponds to the theoretical degree of maximum instability. (b) Theoretical growth rate of the instability (equation 2.7-2.8), as a function of the harmonic degree l, at $t/(R_i/U_i) = 10$. Dashed line and dash-dotted line correspond respectively to $l^{1/2}$ and 1/l scaling laws. In this case, $\rho_1/\rho_2 = 1.8$, $\nu_1/\nu_2 = 1$, Fr = 10^3 , Bo = 0.75, Re = $10^4 \phi = 0.38$, $\xi = 0.34$.

We also compare our experimental results to a linear stability analysis model (Chandrasekhar, 1955). An incompressible fluid sphere having a density ρ_1 and a viscosity μ_1 is radially accelerated into an ambient fluid having a density ρ_2 and a viscosity μ_2 . We assume the mean radius \bar{R} of the sphere to be constant with time. Chandrasekhar (1955) derived an approximate dispersion relation for the growth rate γ of the instability (his equation 90), when made dimensionless becomes

$$\gamma^{2} + M \left(l, \rho_{1}/\rho_{2}, \mu_{1}/\mu_{2} \right) \frac{\gamma}{\bar{R}^{2}} \frac{1}{\mathrm{Re}} - N \left(l, \rho_{1}/\rho_{2} \right) \frac{\bar{R}}{\bar{R}} = 0,$$
(2.7)

with

$$\begin{cases} M = \frac{2l(l+1)[l+(l+1)(\mu_1/\mu_2)] + (2l+1)^2(1-\mu_1/\mu_2)}{l+(l+1)(\rho_1/\rho_2)} \\ N = \frac{l(l+1)(1-\rho_1/\rho_2)}{l+(l+1)(\rho_1/\rho_2)} \end{cases}.$$
(2.8)

This dispersion relation is in agreement with exact results derived by Chandrasekhar (1955).

We obtain the growth rate of the instability by solving simultaneously the dispersion relation (equation 2.7) and the mean crater radius evolution (equation 1.9 of chapter 1). The time evolution derives from the time dependent terms of equation 2.7, *i.e.* $\bar{R}(t)$ and $\bar{R}(t)$. Since the model of Chandrasekhar (1955) is a static model, *i.e.* the average position of the density interface is constant with time, results should be considered carefully. The dynamic problem, *i.e.* with a moving density interface, is much more challenging (*e.g.* Prosperetti, 1977) and will not be addressed here.

At each time, the instability growth rate has a maximum at degree l_{max} owing to viscosity effects, giving the theoretical degree of maximum instability l_{max} (figure 2.8a). For small degrees, the instability growth rate scales as $l^{1/2}$ (figure 2.8b), as expected from inviscid planar geometry cases (Rayleigh, 1899; Taylor, 1950). For large degrees, viscosity effects become significant due to the larger velocity gradients involved. Viscosity dissipates short wavelength energy, leading to a 1/l decay of the instability growth rate (figure 2.8b), as in viscous planar geometry without surface tension (Chandrasekhar, 1961).

In order to compare the model with experimental data, we calculate the theoretical degree of maximum instability at $t/(R_i/U_i) = 10$, *i.e.* the time at which the experimental degree of maximum instability is measured (section 2.2). Figure 2.7b shows that there is a close agreement between the experimental data and the model, except for Reynolds number smaller than 4000, as previously explained.

2.4.2 Mixing layer thickness

2.4.2.1 Mixing model

We now turn to building a model for the time evolution of the mixing layer thickness. We will need to specify the time evolution of the mean radius of the crater. This will be given by the energy model derived in chapter 1 (section 1.4). In addition to the energy conservation model assumptions, we assume the mixing layer to be uniform with a constant thickness around the crater boundary.

We first consider the situation where the drop liquid does not mix with its surroundings. As the crater radius increases, the drop liquid spreads over an increasingly large surface area. In the absence of mixing, the layer volume remains constant, and hence the mean layer thickness h decreases with time. Denoting by $\bar{u}(r, t)$ the laterally averaged velocity field associated with the opening of the crater, the time derivative of h is then given by

$$h = \bar{u}(\bar{R} + h) - \bar{u}(\bar{R}).$$
 (2.9)

Since $\bar{u} = \dot{\bar{R}}(\bar{R}/r)^2$ corresponds to the radial potential flow of equation 1.5, this gives

$$\dot{h} = \dot{\bar{R}} \left[\frac{\bar{R}^2}{(\bar{R} + h)^2} - 1 \right],$$
(2.10)

where the right-hand side will be referred to as a geometrical thinning term. This equation originates from the mass conservation of the layer in the absence of mixing.

We now consider the effect of mixing by the RT instability (figure 2.9). We assume that the instability entrains ambient liquid into the mixing layer at velocity u'(r,t). The scalar mixing term u' measures the amplitude of the velocity fluctuations in the layer, and hence the amplitude of mixing. We then assume \dot{h} to be the sum of the geometrical thinning and mixing terms (figure 2.9c), which gives

$$\dot{h} = \dot{\bar{R}} \left[\frac{\bar{R}^2}{(\bar{R} + h)^2} - 1 \right] + u'.$$
 (2.11)

The velocity u' and length scale h can be seen as the velocity and integral length-scale of a mixing-length turbulent model describing the mixing layer.



Figure 2.9 – Mixing layer evolution. After having spread quickly on the crater boundary to become a thick layer (a), the liquid layer of the drop gradually gets thinner as the crater grows (b). At some point, crater expansion becomes weak enough, allowing for the Rayleigh-Taylor instability to develop (c). We decompose the velocity field into a velocity component \bar{u} produced by crater opening, and velocity fluctuations u' produced by the Rayleigh-Taylor instability.

We obtain the evolution of u' using a buoyancy-drag model of the mixing layer (Dimonte, 2000; Oron et al., 2001; Zhou, 2017). We consider that the mixing layer with a density $\bar{\rho} = \rho_2 + \Delta \rho$ penetrates into the less dense surrounding liquid with a density ρ_2 . The equation of motion then reads

$$\bar{\rho}\frac{\mathrm{d}u'}{\mathrm{d}t} = -\beta\Delta\rho\ddot{\bar{R}} - C\rho_2 \frac{u'^2}{h},\tag{2.12}$$

where β and C are the RT buoyancy prefactor and the drag coefficient, respectively. This equation corresponds to a balance between the fluid inertia on the left-hand side, buoyancy in the first term of the right-hand side, and inertial drag in the second term of the right-hand side. The acceleration of the crater boundary \ddot{R} being significantly larger than g (figure 1.7), we neglect Earth's gravity in the buoyancy term.

Using mass conservation in the uniform, hemispherical and thin mixing layer, the dimensionless density difference is

$$\frac{\Delta\rho}{\bar{\rho}} = \frac{1}{1 + \frac{3}{2}\bar{R}^2 h \frac{\rho_2}{\Delta\rho_0}},$$
(2.13)

where $\Delta \rho_0$ is the initial density difference, *i.e.* between the impacting drop and the pool. Inserting the density excess (equation 2.13) into the equation of motion (equation 2.12), we obtain

$$\frac{\mathrm{d}u'}{\mathrm{d}t} = -\beta \frac{\bar{R}}{1 + \frac{3}{2}\bar{R}^2 h \frac{\rho_2}{\Delta\rho_0}} - C \frac{1}{1 + \frac{3}{2}\frac{1}{\bar{R}^2 h}\frac{\Delta\rho_0}{\rho_2}} \frac{u'^2}{h}.$$
(2.14)

Together with the crater radius evolution (equation 1.9 of chapter 1), equations 2.11 and 2.14 are coupled ordinary differential equations. We solve this initial value problem numerically using $\bar{R}(1) = 1$, h(1) = 2/3 and u'(1) = 0 as initial conditions. For each experiment, we use the experimentally measured crater radius $\bar{R}(t)$ and mixing layer thickness h(t) to determine the best value for the fitting parameters for equation 2.14 and 1.9 (chapter 1). This includes the energy partitioning coefficient ϕ and the kinetic energy correction coefficient ξ (section 1.4 of chapter 1), as well as the buoyancy prefactor β , and the drag coefficient C.

2.4.2.2 Time evolution

Figure 2.10 compares the fitted mixing layer evolution model with experimental data, in two reference cases, with or without a difference of density between the impacting drop and the pool. In figure 2.10c, we estimate u' from equation 2.11 based on experimental measurements of R and h, *i.e.* u' is the difference between the measured time derivative of h and the prediction of the model in the absence of mixing. The model underestimates u' for dimensionless times typically smaller than 10, for experiments with and without density difference. This underestimate may be explained by shear instabilities at the interface between the drop layer and its surroundings (e.g. figure 2.6, $\rho_1/\rho_2 = 1.0$). These instabilities increase the mixing rate and are neglected in the mixing model, explaining why the model underestimates the inward flux u'. Furthermore, the liquid of the drop initially accumulates at the crater floor. Since the weighted average of the mixing layer thickness h gives more weight to the bottom of the crater (equation 2.3), the initial mean thickness is then larger in the experiments than in the model, where the layer thickness is uniform. The liquid of the drop then flows on the crater sides. For a given volume of the drop layer, the measured layer velocity h is then larger than the early-time velocity predicted with a uniform mixing layer (equation 2.9). This also explains why the uniform model underestimates the inward flux u' in comparison with experimental data.

Figure 2.11 shows the mixing layer thickness h, growth rate h/h, and the estimated mixing term u' as a function of time, for all experiments, grouped by density ratio. As expected from figure 2.6, the mixing layer evolution, due to the RT instability, is mainly dictated by the density ratio between the drop and its surroundings. In the mixing stage (typically $t/(R_i/U_i) > 15$), a larger initial density difference promotes mixing by the RT instability through an increased mixing term u' (figure 2.11c), leading to an increased mixing layer growth rate (figure 2.11a,b). The local Reynolds number in the mixing layer depends on the density ratio and decreases with time, but is typically in the range 1 - 200.

2.4.2.3 Thinning stage, mixing stage, and transition timescale

We now focus on the numerical solution of the coupled ordinary differential equations 1.9 (chapter 1), 2.11 and 2.14. Figure 2.12 shows the geometrical thinning term and the mixing term in equation 2.11, as well as the buoyancy term and the drag term in equation 2.14, as a function of time. Based on this figure, we identify two stages in the evolution of the mixing layer.

The first stage, referred to as the thinning stage, is defined by a negative growth rate of the mixing layer, *i.e.* $\dot{h} < 0$ in figure 2.12a. Its dynamics is controlled by the geometrical evolution



Figure 2.10 – Time evolution, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i , of the mixing layer thickness h normalised by the drop radius R_i (a), the mixing layer growth rate \dot{h}/h normalised by the drop free-fall rate U_i/R_i (b), and the estimated inward flux due to mixing u' (from equation 2.11) normalised by the impact velocity U_i (c), for two impact parameters with and without initial density difference. Circles and solid lines correspond respectively to experimental data and fitted mixing model (equations 1.9, 2.11 and 2.14). Dashed lines and dotted lines correspond respectively to the complete early-time power-law analytical solution (equation 2.15) and the approximate early-time power-law analytical solution (equation 2.17), calculated for the $\rho_1/\rho_2 = 1.0$ and Fr = 481 experiment. Dash-dotted lines correspond to the late-time power-law analytical solution (equation 2.21 with $h_0 = 2/3$, $\dot{h}_0 = -1.25$, and C = 0.70), calculated for the $\rho_1/\rho_2 = 1.8$ and Fr = 732 experiment.



Figure 2.11 – (a) Experimental mixing layer thickness h, normalised by the drop radius R_i , as a function of time, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i . (b) Experimental mixing layer growth rate \dot{h}/h , normalised by the drop free-fall rate U_i/R_i , as a function of time, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i . (c) Estimated inward flux due to mixing u' (from equation 2.11), normalised by the impact velocity U_i , as a function of time, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i . Experiments are clustered by density ratio group, the extent of which is defined by the standard deviation of the experiments in that group. Colours scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 .



Figure 2.12 – (a) Geometrical thinning term (first term on the right-hand side), mixing term (second term on the right-hand side), and \dot{h} (left-hand side) in equation 2.11, as a function of time, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i . (b) Buoyancy term (first term on the right-hand side), drag term (second term on the right-hand side), and \dot{u}' (left-hand side) in equation 2.14, as a function of time, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i . In this numerical solution, $\rho_1/\rho_2 = 1.8$, Fr = 572, $\phi = 0.39$, $\xi = 0.47$, $\beta = 0.29$ and C = 1.27.

of the crater, with the geometrical thinning term much larger than the RT mixing term in equation 2.11 (figure 2.12a). Since the crater deceleration is large at early times, the buoyancy term prevails over the drag term in the buoyancy-drag equation 2.14 (figure 2.12b). However, this does not influence the evolution of the mixing layer since the geometrical thinning term dominates.

Neglecting the mixing term u', and assuming respectively $\bar{R}(1) = 1$ and h(1) = 2/3 as initial conditions for the mean crater radius and the thickness of the mixing layer, the solution of the differential equation 2.11 is

$$h = \left(\frac{98}{27} + \bar{R}^3\right)^{1/3} - \bar{R}.$$
(2.15)

Using the power-law solution of \overline{R} (equation 1.11), we obtain an analytical solution for h in the geometrical phase (figure 2.10, dashed lines). Assuming $h \ll \overline{R}$, which is reasonable after a few dimensionless time (*e.g.* figure 2.4), equation 2.11 simplifies as

$$\dot{h} = -2\dot{\bar{R}}\frac{h}{\bar{R}}.$$
(2.16)

The solution then takes the form

$$h = \frac{2}{3} \frac{1}{\bar{R}^2}.$$
 (2.17)

These solutions correspond to the conservation of the initial volume of the impactor, *i.e.* a sphere of unit dimensionless radius. Using the power-law solution of equation 1.11 (chapter 1), equation 2.17 also gives a power-law solution for the mixing layer thickness, velocity, and acceleration

$$\begin{cases} h(t) = \frac{2}{3} \left[Q(t-1) + 1 \right]^{-4/5} \\ \dot{h}(t) = -\frac{8}{15} Q \left[Q(t-1) + 1 \right]^{-9/5} \\ \ddot{h}(t) = \frac{24}{25} Q^2 \left[Q(t-1) + 1 \right]^{-14/5} \end{cases}$$
(2.18)

where $Q = \left(\frac{25}{6} \frac{\phi}{\xi} \frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^{1/2}$ (chapter 1). Consequently, a power-law solution for the mixing layer growth rate is

$$\frac{\dot{h}}{h}(t) = -\frac{4}{5}Q\left[Q(t-1)+1\right]^{-1}.$$
(2.19)

These solutions (figure 2.10, dotted lines) depend on the density ratio ρ_1/ρ_2 , and on the correction parameters ϕ and ξ , through Q. They explain the early-time evolution of the mixing layer thickness.

The second stage, referred to as the mixing stage, is defined by a positive growth rate of the mixing layer, *i.e.* $\dot{h} > 0$ in figure 2.12a. In this stage, the spreading and mixing are similar in magnitude. The dynamics is then governed by a balance between residual geometrical effects and mixing produced by the RT instability. Since the buoyancy term tends quickly toward zero because the magnitude of the crater deceleration decreases rapidly, the mixing is governed by the drag term in this stage (figure 2.12b). At late times, when the crater is close to reach its maximum, the geometrical thinning term vanishes and the mixing layer dynamics is only controlled by the mixing term (figure 2.12a).

In this stage, we use the approximation 2.16 for the geometrical term to simplify equation 2.11. We also neglect the buoyancy in equation 2.14 assuming $\frac{2}{3} \frac{\Delta \rho_0}{\rho_2} \frac{1}{R^2 h} \ll 1$. These assumptions respectively correspond to the vanishing crater deceleration and $\Delta \rho \ll \rho_2$ during the mixing stage. With these assumptions, equations 2.11 and 2.14 become

$$\begin{cases} \dot{h} = -2\frac{\dot{R}}{\bar{R}}h + u' \\ \dot{u'} = -C\frac{u'^2}{h} \end{cases}$$
(2.20)

Assuming a 2/5 power-law solution for \bar{R} (equation 1.11), and using $h(1) = h_0$ and $\dot{h}(1) = \dot{h}_0$ as initial conditions, the solution to equation 2.20 is

$$h(t) = h_0 \left[1 + Q(t-1) \right]^{-4/5} \left\{ 1 + K \left[\left[1 + Q(t-1) \right]^{9/5} - 1 \right] \right\}^{\frac{1}{1+C}},$$
(2.21)

where $K = \frac{1}{9}(C+1)(4+\frac{5}{Q}\frac{\dot{h}_0}{h_0})$ (figure 2.10, dash-dotted lines). The value C = 0.7 required to fit experimental data is smaller than the value obtained by fitting experimental data with the full numerical model (equations 1.11, 2.11 and 2.14). We explain this difference with the assumptions made to obtain the analytical solution, *i.e.* approximated geometrical term, neglected buoyancy term, $\Delta \rho \ll \rho_2$, and 2/5 power-law for \bar{R} . Using a larger value of C in the analytical solution results in an underestimate of the layer thickness in the mixing stage.

The transition time t_c between the thinning stage and the mixing stage is the time at which the growth rate changes sign and the mixing layer thickness reaches a local minimum (figure 2.13a). This corresponds to the time at which geometrical effects exactly balance the mixing produced by the RT instability.

We measure the transition time in experiments, and in figure 2.13b, we compare the experimental values with the transition time obtained from the numerical model. Although uncertainties on the transition time are significant due to the extrinsic variability of experiments, the numerical model is rather consistent with experimental data.

We now derive an approximate power-law for the transition time. We assume that $h \ll R$, and hence we use the approximation 2.16 for the geometrical term to solve equation 2.11. We also simplify equation 2.14 assuming $\frac{2}{3} \frac{\Delta \rho_0}{\rho_2} \frac{1}{R^2 h} \ll 1$. These assumptions correspond to $\Delta \rho \ll \rho_2$, which is a reasonable assumption at the transition time. With these assumptions,

equations 2.11 and 2.14 can be combined to give

$$\ddot{h} + 2(2C+1)\frac{\dot{R}}{\bar{R}}\dot{h} + 2(2C-1)\frac{\dot{R}^2}{\bar{R}^2}h + C\frac{\dot{h}^2}{h} + 2h\frac{\ddot{R}}{\bar{R}} + \beta\frac{2}{3}\frac{\Delta\rho_0}{\rho_2}\frac{\ddot{R}}{\bar{R}^2h} = 0.$$
 (2.22)

At the critical transition time t_c , $\dot{h}(t = t_c) = 0$. Using the power-law solutions for \bar{R} (equation 1.11) and h (equation 2.18) in the thinning stage, we obtain an expression for t_c from equation 2.22

$$t_{c}^{*} = c \left\{ 1 + \frac{1}{Q} \left[\left(\frac{16}{9} \frac{C+1}{\beta \frac{\Delta \rho_{0}}{\rho_{2}}} \right)^{5/6} - 1 \right] \right\},$$
(2.23)

where $c = 1.09 \pm 0.06$ is a least-squares best-fit prefactor obtained from experimental data (figure 2.13c). As observed experimentally in figure 2.11, the predicted transition time (equation 2.23) decreases with the density contrast between the fluid of the impacting drop and the pool. The larger the density contrast, the quicker mixing effects become comparable to geometrical effects.

2.4.2.4 Buoyancy prefactor and drag coefficient

Figure 2.14 shows the fitted buoyancy prefactor β and drag coefficient C for each experiment.

The mean value of the buoyancy prefactor is $\beta = 0.3 \pm 0.1$. This is smaller than the value $\beta = 1$ found by Dimonte (2000) for plane layer experiments. This difference may come from the hemispherical shape or the finite thickness of the dense layer in our experiments. Given error bars, we find that β shows no resolvable trend with the density ratio or the Froude number. However, variations may exist and require further investigations.

The mean value of the drag coefficient is $C = 2 \pm 1$. This value agrees with the value $C = 2.5 \pm 0.6$ obtained for constant, variable and impulsive accelerations of a plane mixing layer (Dimonte, 2000). We find that C decreases when the density ratio increases (figure 2.14b). The mean value of the drag coefficient at $\rho_1/\rho_2 = 1.2$ and $\rho_1/\rho_2 = 1.8$ is respectively $C = 3.0 \pm 0.5$ and $C = 0.9 \pm 0.3$. As for the buoyancy prefactor, C shows no resolvable trend with the Froude number, although variations may exist.

In order to further compare the values of β and C with the results of (Dimonte, 2000), we now consider two simplified end-member acceleration history: a constant acceleration and an impulsive acceleration.

In the case of a plane layer under constant acceleration \overline{R} , the solution to the buoyancydrag equation 2.12 is $h = \alpha (\Delta \rho / \overline{\rho}) \overline{R} t^2$ (e.g. Dimonte, 2000), where α is an empirical prefactor and $\overline{\rho} = (\rho_1 + \rho_2)/2$. The parameter α can be expressed as a function of the parameters β and C by looking for a solution of equation 2.12. Taking $u' = \dot{h}$, as appropriate for a plane layer, solving gives

$$\alpha = \frac{\beta}{2 + 8C\frac{\rho_2}{\rho_1 + \rho_2}}.$$
(2.24)

Figure 2.15a shows α , calculated for each experiment, and compares the results to the homogeneous buoyancy-drag model of Dimonte (2000) for C = 1, C = 2, and C = 3. The mean value $\alpha = 0.04 \pm 0.01$ in our experiments is smaller than the values $\alpha = 0.05 - 0.07$ that are obtained at the same density ratio with immiscible fluids, and under constant acceleration (Dimonte et Schneider, 2000). The observed values of α are also smaller than the predictions



Figure 2.13 – (a) Experimental mixing layer thickness h, normalised by the drop radius R_i , as a function of time, normalised by the drop free-fall time R_i/U_i , for a single experiment. The transition time t_c between the thinning stage and the mixing stage is defined as the time at which the mixing layer thickness reaches a local minimum. (b) Experimental transition timescale t_c , normalised by the drop free-fall time R_i/U_i , as a function of the transition time predicted by the mixing model (equations 1.9, 2.11 and 2.14), normalised by the drop free-fall time R_i/U_i . (c) Experimental transition timescale t_c , normalised by the drop free-fall time R_i/U_i , as a function of the transition time scaling t_c^* (equation 2.23), normalised by the drop free-fall time R_i/U_i . Colours scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 .



Figure 2.14 – Buoyancy prefactor β (a), and drag coefficient C (b), as a function of the Froude number Fr. Colours scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 .

from the homogeneous model of Dimonte (2000), in particular at large density ratios. For example, at $\rho_1/\rho_2 = 1.8$ the drag coefficient found in our experiments is approximately C = 1 (figure 2.14b), which leads to an overestimate of α by a factor 2 in figure 2.15a. This may be a consequence of the variable acceleration, but also of the spherical interface, miscibility, and the finite thickness of the dense layer.

In the case of an impulsive acceleration, the buoyancy term in equation 2.12 is negligible since $\ddot{R} = 0$. Neglecting geometrical effects, *i.e.* $u' = \dot{h}$, and assuming that $\bar{\rho} = (\rho_1 + \rho_2)/2$, the solution is then given by $h = h_0 \tau^{\theta}$, where $\tau = u'_0 t/\theta h_0 + 1$, and h_0 and u'_0 are initial values (*e.g.* Dimonte, 2000). The exponent is then

$$\theta = \frac{1}{1 + 2C\frac{\rho_2}{\rho_1 + \rho_2}}.$$
(2.25)

Figure 2.15b shows θ , calculated for each experiments, and compares the results to the buoyancy-drag model of Dimonte (2000). The mean value $\theta = 0.4 \pm 0.1$ is close to the values $\theta = 0.2 - 0.3$ that are obtained at the same density ratio between immiscible fluids, and under an impulsive acceleration (Dimonte et Schneider, 2000). θ increases with the density ratio, consistently with the homogeneous model of Dimonte (2000) estimated at consistent values of the drag coefficient C (figure 2.14b). Since the acceleration of the crater is approximately a $t^{-8/5}$ power-law, the acceleration is relatively close to be impulsive, explaining the good agreement between our experiments and the impulsive acceleration model.

2.4.2.5 Maximum mixing layer thickness

The maximum mixing layer thickness first depends on the growth rate of the RT instability in the mixing stage, an increased initial density difference leading to an increased mixing layer growth rate (figure 2.11). The maximum thickness also depends on the time window



Figure 2.15 – Constant acceleration prefactor α (a), and impulsive acceleration exponent θ (b), as a function of the density ratio ρ_1/ρ_2 . Colours scale as the experimental drag coefficient C. Solid lines, dashed lines, and dotted lines correspond to the homogeneous buoyancy-drag model of Dimonte (2000) for C = 1, C = 2, and C = 3, respectively.

available for the mixing layer to actually grow without being affected by geometrical effects. The transition time t_c and the maximum opening time t_{max} correspond respectively to the lower and upper limits of the available time window. Since t_c and t_{max} are respectively a decreasing function (equation 2.23) and an increasing function (equation 1.18) of the density ratio, we expect an increased density ratio to expand the time window available for mixing, leading to an increased maximum mixing layer thickness, consistently with figure 2.11a. Since t_{max} also increases with the Froude number, we also expect the available time window and the maximum layer thickness to increase with the Froude number.

We first compare the experimental maximum mixing layer thickness with the maximum thickness obtained from the model (figure 2.16a). We obtain a good agreement. Since the maximum layer thickness is expected to depend on both the initial density ratio and the Froude number, we fit the experimental data with a power-law scaling h_{max}^* (figure 2.16b). We obtain

$$h_{max}^* = c_1 \left(\frac{\rho_1}{\rho_2}\right)^{c_2} \operatorname{Fr}^{c_3},$$
 (2.26)

where $c_1 = 0.04 \pm 0.02$, $c_2 = 2.3 \pm 0.2$ and $c_3 = 0.21 \pm 0.06$. The choice of looking for a scaling law as a function of ρ_1/ρ_2 is motivated by the fact that t_{max}^* and t_c^* are strong functions of ρ_1/ρ_2 . This scaling is consistent with the predicted influence of the density ratio and the Froude number on the mixing layer growth rate and the time window available for mixing. We indeed obtain a maximum mixing layer thickness increasing with both the initial density ratio ($c_2 > 0$) and the Froude number ($c_3 > 0$). The fact that c_2 is significantly larger than c_3 is also consistent with the qualitative observations of figure 2.6, *i.e.* a maximum mixing layer thickness increasing mainly with the initial density ratio.



Figure 2.16 – (a) Experimental maximum mixing layer thickness h_{max} , normalised by the drop radius R_i , as a function of the maximum thickness predicted by the mixing model (equations 1.9, 2.11 and 2.14), normalised by the drop radius R_i . (b) Experimental maximum mixing layer thickness h_{max} , normalised by the drop radius R_i , as a function of the least-square best-fit power-law scaling h_{max}^* , using the density ratio ρ_1/ρ_2 and the Froude number Fr (equation 2.26). Colours scale as the density ratio ρ_1/ρ_2 .

2.5 Metal-silicate equilibration during the impact

We now apply our results to obtain a prediction of the amount of RT mixing following an impact on a magma ocean. After the impact, the metal core of the colliding body migrates toward the planetary core due to the density contrast with the surrounding silicates (Stevenson, 1990; Rubie <u>et al.</u>, 2015). Part of the migration occurs in a fully molten magma ocean where the metal is expected to descend as a turbulent thermal and equilibrate with silicates (Deguen <u>et al.</u>, 2011, 2014; Landeau <u>et al.</u>, 2014). The metal phase then undergoes a vigorous stirring (Lherm et Deguen, 2018), leading to its fragmentation (Landeau <u>et al.</u>, 2014; Wacheul <u>et al.</u>, 2014; Wacheul et Le Bars, 2018) into centimetric drops (Stevenson, 1990; Karato et Murthy, 1997; Rubie <u>et al.</u>, 2003; Ichikawa <u>et al.</u>, 2010; Deguen <u>et al.</u>, 2014). However, these turbulent thermal models assume that the metal cores are released as a compact volume in the magma ocean. In contrast, recent investigations show that the impactor core mixes with silicates during the impact stage, prior to the fall in the magma ocean (Kendall et Melosh, 2016; Landeau <u>et al.</u>, 2021). Our experiments confirm this result and demonstrate that a RT instability develops during the impact, mixing metal and silicates.

In order to quantify the mixing produced by the spherical RT instability during a planetary impact, we estimate the mass of ambient silicates that mixes with the impacting core during crater opening. When an impactor with a radius R_i , a volume fraction of metal f_m , a metal core density ρ_m , and a silicate mantle density ρ_s , impacts a planetary target, the dimensionless mass of equilibrated silicates is $\Delta = M_s/M_m$, where $M_m = f_m \rho_m (4/3)\pi R_i^3$ is the mass of the metal core and $M_s = \rho_s [2\pi R_{max}^2 h_{max} - (4/3)\pi R_i^3]$ is the mass of entrained silicates (Deguen et al., 2014). After nondimensionalization, the mass of silicates mixed with metal during crater

opening is

$$\Delta = \frac{\rho_s}{\rho_m} \left(\frac{3}{2} \frac{1}{f_m} R_{max}^2 h_{max} - 1 \right).$$
(2.27)

Using scaling laws for R_{max} (equation 1.16) and h_{max} (equation 2.26), we obtain the following scaling law for the mixing mass

$$\Delta^* = \frac{\rho_s}{\rho_m} \left(\frac{1}{f_m} c_1 \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho_s} \right)^{c_2} \operatorname{Fr}^{c_3} - 1 \right)$$
(2.28)

where $c_1 = 0.07 \pm 0.04$, $c_2 = 2.8 \pm 0.2$ and $c_3 = 0.67 \pm 0.06$. The density ratio is defined with $\bar{\rho}/\rho_s$, where $\bar{\rho} = \rho_m f_m + \rho_s (1 - f_m)$ is the mean density ratio of the impactor, because this scaling derives from the crater size and the maximum mixing layer thickness scaling laws (equations 1.16 and 2.26, respectively), which indeed use the mean density of the impactor.

We validate this scaling law on experimental data in figure 2.17a, using $f_m = 1$ since the drop is a one-phase fluid. The predicted values of the dimensionless mass of equilibrated silicates Δ^* are indeed close to the experimental values Δ . Relatively large error bars of Δ^* mainly result from the uncertainty on the prefactor coefficient of h_{max} (equation 2.26). This means that the following geophysical applications have to be considered carefully given the uncertainties on the scaling law coefficients.

Using equation 2.28 and the Froude number definition in the context of planetary impacts $Fr = 2(R_t/R_i)(U_i/U_e)^2$ (equation 1.26), we calculate the estimated mass of silicates mixed with the impacting core during crater opening Δ^* as a function of the target to impactor radius ratio R_t/R_i (figure 2.17b). We use $f_m = 0.16$ and $\rho_m/\rho_s = 2$ to match the internal structure of a realistic differentiated impactor (Canup, 2004). Since the Froude number increases with the target to impactor radius ratio, it means that a smaller colliding body will produce more mixing, relative to their size, than giant impactors. For example, impactors with a 10 km and 100 km radius (figure 2.17b, triangle and circle, respectively) will then mix with 37.5 and 7.6 times its own mass, respectively.

Several giant impact scenarios have been proposed to explain the formation of the Moon (*e.g.* Canup, 2004; Cuk et Stewart, 2012). We expect the canonical impact scenario with a Marssized impactor (Canup, 2004) to mix with 0.3 times its own mass during this crater opening stage (figure 2.17b, square). In contrast, we predict that the fast-spinning and smaller impactor proposed by Cuk et Stewart (2012) mixes with 2.0 times its own mass (figure 2.17b, diamond). These giant impacts scenarios involve small target to impactor radius, corresponding to an extrapolated range of Froude number, *i.e.* Fr < 200 (figure 2.17b, dashed lines), which is outside of the experimental Froude number range. In addition, this small target to impactor radius is very sensitive to the uncertainty on the scaling law coefficients. The mass of equilibrated silicates extrapolated for large impactor thus has to be considered carefully.

Recent experiments with large impactor fluid volumes estimate the mass of equilibrated silicates during the impact, considering both the crater formation, its collapse into an upward jet, and the collapse of the jet (Landeau et al., 2021). However, these experiments have been done with relatively small density contrasts ($\rho_1/\rho_2 < 1.1$), and the effect of the RT instability was not as important as in the present experiments. At a given Froude number, *e.g.* Fr = 300, the fluid of the impactor mixes with 4.8 and 13.3 times its own mass of ambient fluid, if $\rho_1/\rho_2 = 1.1$ and $\rho_1/\rho_2 = 1.8$, respectively (equation 2.28). This means that the mass of ambient fluid likely to equilibrate with the impactor is 2.8 times larger in our experiments close to the metal-silicate density ratio than in the experiments of Landeau et al. (2014). In the following comparison between experiments, we thus implicitly assume that mixing produced by the RT instability and the jet are independent, whereas the mixing produced by the jet



Figure 2.17 – (a) Experimental mass of equilibrated silicates Δ , as a function of the predicted mass of equilibrated silicates Δ^* (equation 2.28), using $f_m = 1$. Colours scale as the modified Froude number Fr^{*}. (b) Predicted mass of equilibrated silicates Δ^* as a function of the target to impactor radius R_t/R_i (equation 1.26). (c) Predicted mass of equilibrated silicates Δ^* , normalised by the mass of equilibrated silicates during the whole impact, including the jet formation and collapse $\Delta_{\rm jet}$ (equation 16 in Landeau et al., 2021). We use $f_m = 0.16$ and $\rho_m/\rho_s = 2$. Dashed lines correspond to an extrapolated range of Froude number, *i.e.* Fr < 200, which is outside of the experimental Froude number range. Triangle: impactor of 10 km in radius onto a Earth-sized target. Circle: impactor of 100 km in radius onto a Earth-sized target. Square: canonical Moon-forming impact with a Mars-sized impactor (Canup, 2004). Diamond: fast-spinning Earth Moon-forming impact with a fast ($U_i = 2U_e$) and small ($R_i/R_t = 2.7$) impactor (Cuk et Stewart, 2012).

is actually promoted by the RT instability and the dispersion of the impactor during crater opening. In other words, we assume that mixing produced by the RT instability and the jet is combined in an additive way, whereas it is likely a multiplicative process. This means that we probably underestimate the influence of the jet on the overall equilibration for the large density ratios.

Figure 2.17c shows the predicted mass of silicates equilibrated during crater opening Δ^* normalised by the mass of silicates equilibrated during the whole impact, including the formation and collapse of the jet Δ_{jet} . The fraction of silicates equilibrated during the opening phase of the cratering process is less than 27% and depends on the impact velocity and the target to impactor radius. In the same conditions, the 10 km radius impactor, the 100 km impactor radius, the canonical Moon-forming impactor and the fast-spinning Earth impactor respectively mix with 1155, 74, 1.5 and 12 times the impactor mass. This means that the fraction of silicates equilibrated during the opening stage of the crater, in comparison with the whole cratering process including the jet formation and collapse, is respectively 3%, 10%, 21% and 16% (figure 2.17c). This is in agreement with an impact-induced mixing mostly dominated by the collapse of the jet (Landeau et al., 2021).

We now turn to estimate the equilibration efficiency $\mathcal{E} = k/(1 + D/\Delta)$ (equation 2 of the general introduction). The limits $\mathcal{E} = 0$ and $\mathcal{E} = 1$ correspond respectively to no chemical transfer and full equilibration between metal and silicates. The equilibration efficiency is a generalisation of the degree of chemical equilibration k, which includes the partition coefficient D (Deguen et al., 2014; Landeau et al., 2021).



Figure 2.18 – (a) Equilibration efficiency during crater opening \mathcal{E} (solid and dashed lines) and during the whole impact, including the jet formation and collapse \mathcal{E}_{jet} (dotted lines). (b) Equilibration efficiency during crater opening \mathcal{E} , normalised by the equilibration efficiency during the whole impact \mathcal{E}_{jet} (Landeau et al., 2021). We use a degree of chemical equilibration k = 1, a partition coefficient D = 30, $f_m = 0.16$ and $\rho_m/\rho_s = 2$. Dashed lines correspond to an extrapolated range of Froude number, *i.e.* Fr < 200, which is outside of the experimental Froude number range. Triangle: impactor of 10 km in radius onto a Earth-sized target. Circle: impactor of 100 km in radius onto a Earth-sized target. Square: canonical Moon-forming impact with a Mars-sized impactor (Canup, 2004). Diamond: fast-spinning Earth Moon-forming impact with a fast ($U_i = 2U_e$) and small ($R_i/R_t = 2.7$) impactor (Cuk et Stewart, 2012).

Figure 2.18a shows the equilibration efficiency as a function of the target to impactor radius, during the crater opening stage (solid lines) and during the whole impact, including the formation and collapse of the jet (dotted lines). As an example, we consider the case of a partition coefficient D = 30 corresponding to a typical partition coefficient for siderophile elements such as tungsten (Siebert et al., 2011). We also assume a degree of chemical equilibration k = 1 (Landeau et al., 2021). In the following, we consider that no significant equilibration and full equilibrate between metal and silicates during the opening stage of the crater (solid lines). For example, when $U_i = U_e$, full equilibration is achieved for very small impactor, *i.e.* when $R_t/R_i \gtrsim 1.3 \times 10^4$, or 0.5 km. When we consider the whole impact, including the jet stage, full equilibration is achieved for significantly larger impactors (dotted lines), *i.e.* when $R_t/R_i \gtrsim 30$, or 200 km. Figure 2.18b shows the fraction of equilibration that occurs during the opening stage of the crater, with respect to the whole impact. This fraction only represents 20% of the whole equilibration induced by the impact when $R_t/R_i \lesssim 10$, but increases for small impactors up to 90% when $R_t/R_i \simeq 10^4$.

The canonical Moon-forming impactor and the fast-spinning Earth impactor are not significantly equilibrated during the opening stage of the cratering process with $\mathcal{E} \simeq 0.01$ and $\mathcal{E} \simeq 0.06$, respectively (figure 2.18a). When we consider the whole impact, including the jet, equilibration efficiency increases by a factor 5 (figure 2.18b), which gives $\mathcal{E}_{\text{jet}} \simeq 0.05$ and $\mathcal{E}_{\text{jet}} \simeq 0.3$.



Figure 2.19 – (a) Equilibration efficiency during crater opening \mathcal{E} , as a function of the target to impactor radius R_t/R_i and the partition coefficient D. (b) Equilibration efficiency during crater opening \mathcal{E} normalised by the equilibration efficiency during the whole impact, including the jet formation and collapse \mathcal{E}_{jet} , as a function of the target to impactor radius R_t/R_i and the partition coefficient D. We assume a degree of chemical equilibration k = 1, an impact velocity $U_i = U_e$, and we use $f_m = 0.16$ and $\rho_m/\rho_s = 2$.

The partition coefficients of both siderophile and lithophile elements significantly vary from one element to another, and depending on the (P,T,fO_2) conditions (*e.g.* Murthy, 1991;

Li et Agee, 1996; Chabot <u>et al.</u>, 2005; Wood <u>et al.</u>, 2006; Siebert <u>et al.</u>, 2013). Figure 2.19a shows the equilibration efficiency during the crater opening stage, as a function of the target to impactor radius and the partition coefficient. As expected, equilibration efficiency decreases significantly as the partition coefficient increases. Figure 2.19b shows the fraction of equilibration that occurs during the opening stage, with respect to the whole impact. In addition to the target to impactor radius dependency, this fraction decreases when the partition coefficient increases. Moderately siderophile elements such as Co, for which the partition coefficient is likely to be $D \simeq 25$ (Wood <u>et al.</u>, 2006), have an equilibration efficiency significantly controlled by the crater opening stage with $\mathcal{E}/\mathcal{E}_{jet} \gtrsim 0.6$ when we consider a 10 km impactor. On the contrary, highly siderophile elements such as Pt, Pd or Ir, for which the partition coefficient is likely to be $D \gtrsim 600$ (Wood <u>et al.</u>, 2006), have an equilibration efficiency controlled by the jet stage, with $\mathcal{E}/\mathcal{E}_{jet} \lesssim 0.1$ for a 10 km impactor.

The dispersion and mixing of the metal phase induced by the impact, including the crater opening stage with the RT instability and the late impact stage with the formation and collapse of the jet, determine the initial conditions of the turbulent thermal that migrates toward the core in the magma ocean. As shown by Landeau et al. (2021), considering the impact stage as an initial condition for the following turbulent thermal leads to an increased mixing, up to 100 times larger than previous estimates (Deguen et al., 2011, 2014). Predicted equilibration efficiency is consequently up to 20 times larger than previous estimates (Landeau et al., 2021). This crucially affects geochemical models of Earth's formation by modifying the distribution of lithophile and siderophile elements between the mantle and the core (Badro et al., 2018, *e.g.*). The timing of core formation is significantly reduced as the equilibration efficiency increases (Rudge et al., 2010). The equilibration pressure deduced from siderophile elements is also reduced with an increased equilibration efficiency (Fischer et al., 2017).

2.6 Conclusion and perspectives

In this chapter, we used Laser-Induced Fluorescence to visualize the mixing layer produced around the crater after the impact of a drop on a deep liquid pool. After a phenomenological description of a radial instability growing around the cavity, we show that crater deceleration after impact is responsible for a density-driven perturbation at the drop-pool interface we interpret as a spherical Rayleigh-Taylor instability. Using the energy conservation model for the crater radius evolution (chapter 1), we investigate the instability wavelength using an approximate linear stability analysis model, and we obtain a scaling law. We also derive a mixing layer evolution model involving two stages, a thinning and a mixing stage. The mixing layer dynamics is first controlled by the geometrical evolution of the crater, then by the balance between residual geometrical effects and mixing produced by the Rayleigh-Taylor instability. We obtain scaling laws for the transition timescale between stages and the maximum mixing layer thickness. These results have geophysical implications concerning the differentiation of terrestrial planets, in particular through the estimation of the mass of silicates that equilibrates with the core of the impactors during the impact of planetesimals on a magma ocean. We then calculate the equilibration efficiency resulting from the crater opening phase through the spherical RT instability.

In order to validate the extrapolation of our experimental scaling laws to giant impacts (Canup, 2004; Cuk et Stewart, 2012), experiments at low Froude number involving large volume impactors (*e.g.* Landeau <u>et al.</u>, 2021) are required. This would allow to investigate the possible effect of the Reynolds number on the mixing layer. Furthermore, several physical aspects neglected in our experiments have to be investigated experimentally or numerically,

in order to examine their effect on the mixing dynamics and the related metal-silicate equilibration.

Immiscibility effects may change the mixing dynamics, in particular with the fragmentation of the metal phase. Furthermore, the viscosity and diffusivity contrasts may influence thermal and chemical transfers between phases.

Compressibility effects are significant during the opening stage of the crater, with a Mach number larger than unity (Kendall et Melosh, 2016). They include the propagation of an impact shock-wave and melting processes. Experiments neglect these effects with a Mach number much smaller than unity. Compressibility may influence the crater evolution and mixing dynamics following the impact, in particular the evolution of the mixing layer during crater opening. Nonetheless, the flow velocity becomes very rapidly subsonic because the kinetic energy of the impactor is quickly distributed over an increasingly large volume, and because this kinetic energy is converted into gravitational potential energy.

Oblique impact effects are also expected since the probability of a vertical impact is less than the likelihood of an oblique impact, with a maximum probability for a 45° angle (Shoemaker, 1961). Current experiments are designed with a vertical impact, but ongoing oblique impact experiments with large volume impactors are conducted by Jean-Baptiste Wacheul¹. These experiments could be compared with numerical simulation (*e.g.* Kendall et Melosh, 2016). Figure 2.20 shows an oblique impact experiment where the crater opens asymmetrically (figure 2.20, i-iii) before it becomes approximately hemispherical (figure 2.20, iv). This asymmetry modifies the dynamics of the mixing layer with the growth of a shear instability around the cavity (figure 2.20, iii-iv). The crater then collapses (figure 2.20, v-vi), producing an oblique jet with an angle similar to the impact angle, but in the opposite direction (figure 2.20, vii-viii). These features modifying the dynamics of the mixing layer during crater opening and the properties of the jet following the collapse of the crater crucially affect the overall dispersion of the metal phase (Kendall et Melosh, 2016).



Figure 2.20 – Oblique impact ($\alpha = 47^{\circ}$) using a large volume impactor ($R_i = 2.3$ cm) and a density ratio $\rho_1/\rho_2 = 1.001$. Experiment by Jean-Baptiste Wacheul.

Differentiated impactors effects are also expected since most of the Earth mass was accreted from differentiated bodies (Kleine et al., 2002; Scherstén et al., 2006). Experiments currently fail to reproduce an impactor with a differentiated fluid core. The existence of a mantle around the impactor's core may influence the mixing layer dynamics during crater opening by changing the distribution of the metal phase around the crater. Depending on whether the impactor core directly descends in the magma ocean or is entrained into the upward jet, dispersion and mixing of the metal phase may be modified.

^{1.} Univ Lyon, Univ Lyon 1, ENSL, UJM, CNRS, LGL-TPE, F-69007 Lyon, France.

Finally, pressure and temperature (P-T) effects are expected during the impact, in particular regarding large energetic impacts such as the Moon-forming giant impact. These effects neglected in experiments may result in an increased miscibility of metal and silicate phases (Morard et Katsura, 2010), with potential consequences on the fragmentation of the metal phase. This may affect chemical equilibration and increase the iron content in a magma ocean. Temperature contrasts may also slightly influence the buoyancy of the metal phase. This may affect the impact dynamics in a minor way.

3 Étude du champ de vitesse induit par l'impact

3.1 Introduction

L'étude de la dynamique du champ de vitesse autour du cratère produit par l'impact est une étape nécessaire au développement de modèles permettant de prédire l'évolution de la taille et de la forme des cratères (Engel, 1967; Bisighini <u>et al.</u>, 2010), la formation de la corolle fluide (Okawa <u>et al.</u>, 2006; Krechetnikov et Homsy, 2009), et la production du pic central (Fedorchenko et Wang, 2004; Ray <u>et al.</u>, 2015; van Rijn <u>et al.</u>, 2021). En plus des différentes applications industrielles (*e.g.* Hines, 1966), ces phénomènes jouent un rôle important sur la dynamique des sols et des océans (Zhou <u>et al.</u>, 2020), ainsi que sur les propriétés des impacts planétaires (Melosh, 1989), et en particulier la dynamique des éjectas (Maxwell, 1977; Barnhart et Nimmo, 2011; Kurosawa et Takada, 2019).

Au cours d'un impact planétaire, la formation du cratère est un processus continu pouvant néanmoins être divisé en trois phase, une phase de contact et compression, suivi d'une phase d'excavation et enfin une phase de modification (Melosh, 1989).

La phase de contact et compression est extrêmement rapide, puisqu'elle ne dure que quelques fois le temps nécessaire à l'impacteur pour parcourir son propre diamètre. Pendant cette phase, une surpression de plusieurs centaines de gigapascals affecte l'impacteur et la cible dans un rayon correspondant à la taille de l'impacteur, produisant ainsi un métamorphisme d'impact sur les roches environnantes. Une onde de choc se propage dans le milieu, affectant la dynamique des premiers instants de l'ouverture du cratère. La surpression est également à l'origine de la formation d'un jet à haute vitesse au niveau des bords du projectile. Dans nos expériences en laboratoire, les premiers instants suivant l'impact de la goutte correspondraient à cette phase initiale de contact. Cependant, les effets de compressibilité ne sont pas pris en compte, ce qui constitue une limitation importante à la modélisation expérimentale de cette phase.

La phase d'excavation se déroule sur des temps beaucoup plus longs, correspondant, pour les impacteurs plus grands que quelques kilomètres, au temps caractéristique d'ouverture du cratère donné dans le chapitre 1 (équation 1.18). Dans ce cas, l'onde de choc de la phase de compression s'atténue et l'excavation se fait dans un régime gravitaire, où l'inertie de l'impacteur et la gravité contrôlent la dynamique de l'ouverture de la cavité. La matière qui emplissait le cratère est excavée par l'impact sous la forme d'une couche d'éjectas. Cette phase correspond à la phase d'ouverture du cratère observée dans nos expériences, également soumis à un régime gravitaire. La corolle fluide observée expérimentalement correspond aux éjectas des impacts planétaires.

La phase de modification se déroule sur un temps du même ordre de grandeur que la phase d'excavation. Cette phase correspond à l'effondrement du cratère transitoire produit par l'ex-

cavation, sous l'influence de la gravité et en moindre mesure d'un rebond élastique. Les modalités de l'effondrement dépendent de la taille du cratère transitoire. Les petits impacteurs, vont généralement produire des cratères simples, c'est-à-dire sans pic central, pour lesquels les processus de modification se résument à un glissement modéré de la partie supérieure du cratère le long de ses flancs. Les grands impacteurs, vont généralement produire des cratères complexes, avec un pic central plus ou moins développé et éventuellement la formation d'anneaux d'effondrement, en relation avec une élévation du centre du cratère et la formation de terrasses circulaires suite à la mise en place de failles sur les bords de la cavité. Dans nos expériences, ce processus de modification correspond à la phase d'effondrement du cratère, avec en particulier la mise en place d'un écoulement convergent à l'origine du pic central.

Dans le cas de projectiles plus grands que quelques kilomètres, les processus impliqués dans les phases d'excavation et de modification sont principalement contrôlés par la gravité et l'inertie de l'impacteur. Les expériences d'impact en laboratoire, appartenant à un régime gravitaire similaire aux impacts planétaires, permettent donc de reproduire en partie certaines caractéristiques des cratères d'impact (forme simples et complexes, éjectas). La prédiction des processus associés à la cratérisation requiert alors la modélisation de la dynamique du champ de vitesse. Certains modèles adoptent une approche cinématique, en choisissant une forme arbitraire pour la vitesse, sans intégrer de contraintes dynamiques (Maxwell, 1977). D'autres modèles adoptent une approche dynamique sur un écoulement potentiel, avec par exemple l'utilisation d'un bilan d'énergie (e.g Engel, 1967; Leng, 2001), ou alors d'une équation de Bernoulli instationnaire (Bisighini et al., 2010). L'utilisation d'un bilan d'énergie trouve ses limites dans la modélisation des termes liés à la propagation d'une onde de surface et à la formation de la corolle, ainsi qu'à sa fragmentation secondaire. Par ailleurs, l'usage d'un écoulement potentiel est motivée par l'idée d'un écoulement irrotationnel dans la majorité du fluide. En effet, la vorticité est générée au niveau de l'interface air-eau, puis diffuse en un temps t sur une épaisseur de l'ordre de $\sqrt{\nu t}$, où ν est la viscosité du fluide. Sachant que le temps caractéristique d'apparition de la cavité est de l'ordre de 100 ms dans les expériences, cela signifie que la vorticité diffuse sur une épaisseur d'environ 0.3 mm, ce qui est négligeable devant la taille du cratère. Comme dans le chapitre 1, ces modèles s'intéressent principalement à la phase d'excavation et à la taille maximale du cratère, laissant de coté la phase de modification de la cavité. Ils supposent en général un cratère hémisphérique (e.g Engel, 1967; Leng, 2001), ou alors une sphère dont la position verticale du centre de masse peut varier au cours du temps (Bisighini et al., 2010). Ces hypothèses sont discutables car le cratère possède une géométrie complexe dépendant du temps, sauf éventuellement proche de sa taille maximale où il est quasiment hémisphérique.

Ces modèles utilisent tous des hypothèses afin de contraindre la cinématique de l'écoulement. Ils imposent arbitrairement la forme du champ de vitesse (Maxwell, 1977), ou alors la forme du cratère, hémisphérique (Engel, 1967; Leng, 2001) ou sphérique (Bisighini <u>et al.</u>, 2010), et le potentiel de vitesse en relation avec la géométrie de la cavité. Ils utilisent ensuite un bilan d'énergie (Engel, 1967; Leng, 2001) ou une équation de Bernoulli instationnaire (Bisighini <u>et al.</u>, 2010) pour prédire l'évolution temporelle de la cavité et du champ de vitesse associé. Des modèles dynamiques avec des contraintes plus souples sur la forme du cratère et sur le champ de vitesse sont donc nécessaires pour pouvoir expliquer la forme complexe des cavités obtenues expérimentalement. De tels modèles permettraient également de mieux comprendre la dynamique de formation de la corolle. Dans le contexte des impacts planétaires, ce genre de modèles dynamiques permettrait de mieux expliquer la forme des cratères d'impact sur les surfaces planétaires, ainsi que la distribution des éjectas.

Dans ce chapitre, la caractérisation du champ de vitesse autour du cratère est réalisée à

partir de mesures expérimentales utilisant la vélocimétrie par image de particules. Après une description qualitative de l'écoulement, le champ de vitesse est analysé en utilisant une décomposition sur une base de polynômes de Legendre shiftés, comme pour la forme du cratère. Les modèles publiés, ainsi que deux nouveaux modèles, sont ensuite présentés et comparés aux données expérimentales. Le premier modèle est un modèle cinématique constituant une extension des modèles utilisant un cratère hémisphérique (*e.g.* Engel, 1967; Leng, 2001). Il se focalise sur la phase d'ouverture du cratère. Le second modèle est un modèle dynamique utilisant la conservation de l'énergie sous la forme d'une équation de Bernoulli instationnaire et une cavité dont la forme varie au cours du temps, ce qui permet d'étudier les phases d'ouverture et de fermeture du cratère.

3.2 Vélocimétrie par image des particules

Le champ de vitesse est obtenu en utilisant une méthode de vélocimétrie par image de particules (PIV). Dans cette configuration, une nappe laser (532 nm) illumine des particules de polyamides, dont la densité est $\rho_p = 1030 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ et le diamètre moyen $d_p = 20 \,\mu\text{m}$, en suspension dans la cuve (figure I.2). La nappe laser est générée avec un laser continu Nd :YAG de 10 W en combinaison avec une lentille cylindrique divergente et un télescope, permettant de générer une nappe d'environ 1 mm d'épaisseur. La nappe laser est verticalisée en utilisant un miroir incliné à 45°, situé sous la cuve. La longueur d'onde du laser est isolée avec un filtre passe-bande (532 ± 10 nm).

Afin d'obtenir le champ de vitesse, une caméra acquiert deux images brutes rapprochées dans le temps ($\Delta t = 200 \ \mu s$) entre lesquelles le déplacement des particules entraînées par l'écoulement est visible (figure 3.1). Les deux images sont découpées en fenêtres d'interrogations et une corrélation croisée est réalisée dans chacune d'entre elles, afin d'obtenir le déplacement moyen des particules au sein de chaque fenêtre. Un vecteur vitesse peut alors être calculé dans chaque fenêtre, ce qui permet de reconstituer l'ensemble du champ de vitesse. Les images sont finalement calibrées spatialement à l'aide d'une mire.



FIGURE 3.1 – Schéma illustrant le fonctionnement de la PIV par corrélation croisée, permettant d'obtenir le champ de vitesse dans l'écoulement.

La limite du cratère est directement obtenue à partir des images brutes utilisées pour la PIV (figure 3.2). Sur ces images, la région du cratère correspond à une zone sans particules, associée

en bordure de la cavité à une forte intensité lumineuse liée à des réflexions à l'interface air-eau, en particulier à la base du cratère. La délimitation de la limite du cratère est définie à partir de ces caractéristiques, qui permettent d'enclore la cavité en utilisant une méthode de seuil d'intensité.



FIGURE 3.2 – Image brute utilisée dans le processus de PIV. Les vecteurs représentent le champ de vitesse calculé à partir du couple d'images dont elle fait partie. Les lignes continues correspondent à la forme du cratère, ajustée à partir de l'image brute en utilisant une décomposition sur une base de polynômes de Legendre shiftés (équation 3.1), jusqu'au degré l = 2. Les données de vitesses situées à l'intérieur de la ligne continue délimitant le cratère correspondent à des régions sans particules. Les vecteurs qui y sont calculés utilisent des corrélations croisées entre des réflexions à l'interface air-eau et ne sont donc pas fiables.

Comme dans les chapitres 1 et 2, le rayon du cratère $R(\theta, t)$, qui dépend de l'angle polaire θ et du temps t, est ajusté à partir d'une décomposition sur une base de polynômes de Legendre shiftés \tilde{P}_l jusqu'au degré $l_{max} = 2$

$$R(\theta, t) = \sum_{l=0}^{l_{max}} a_l \tilde{P}_l(\cos \theta),$$
(3.1)

où les $a_l(t)$ sont les coefficients ajustés avec une méthode des moindres carrés. Les polynômes de Legendre shiftés sont définis à partir d'une transformation affine des polynômes de Legendre standards $\tilde{P}_l(x) = P_l(2x - 1)$, et sont orthogonaux sur [0, 1]. En particulier, le rayon moyen du cratère \bar{R} est obtenu à partir du degré l = 0, avec $\bar{R} = a_0$. Le résultat de la décomposition sur les données de PIV est présenté sur la figure 3.2. La méthode de seuil utilisée permet de retrouver avec succès la forme du cratère.

La figure 3.3 compare les coefficients obtenues sur les données de PIV avec ceux issus d'une expérience dans des conditions similaires, mais illuminée par l'arrière (chapitre 1). Dans l'ensemble, les deux méthodes donnent des résultats similaires, en particulier sur les deux premiers degrés, cruciaux en ce qui concerne la forme générale de la cavité. Malgré une sensible surestimation du degré l = 1, qui pourrait être liée à l'écart entre les nombres de Froude, ou la variabilité inhérente à ces expériences, cela valide la méthode utilisant directement les données de PIV.



FIGURE 3.3 – Coefficients a_0/R_i (a), a_1/a_0 (b) et a_2/a_0 (c) en fonction du temps $t/(R_i/U_i)$. Les lignes bleues correspondent à des coefficients obtenus sur les données de PIV (Fr = 444 et $\rho_1/\rho_2 = 1$), tandis que les lignes oranges correspondent à des coefficients obtenus sur une expérience dans des conditions similaires (Fr = 488 et $\rho_1/\rho_2 = 1$), mais illuminée par l'arrière (chapitre 1).

3.3 Phénoménologie de la cinématique de cratérisation

3.3.1 Description de l'écoulement

Les figures 3.4 et 3.5 montrent l'évolution respective de la norme du champ de vitesse et de la vorticité au cours du temps, dans un écoulement suivant un impact où Fr = 444, We = 432 et $\rho_1/\rho_2 = 1$. Les données de vitesses situées à l'intérieur de la ligne continue délimitant le cratère correspondent à des régions sans particules (partie 3.2). Les vecteurs qui y sont calculés utilisent des corrélations croisées entre des réflexions à l'interface air-eau et ne sont donc pas fiables.

Pendant la phase d'ouverture du cratère, les vitesses autour du cratère diminuent progressivement en relation avec la décélération du cratère (figure 3.4, i-iv). Initialement, la vitesse maximale mesurée dans l'écoulement est de l'ordre de $1.1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$, ce qui correspond à environ 32% de la vitesse de l'impacteur. Dans l'ensemble, la norme de la vitesse diminue radialement en s'éloignant du cratère (figure 3.4, i-iv). Le champ de vitesse possède une composante radiale dominante, ainsi qu'une composante polaire responsable d'un écoulement orienté vers le haut proche de la surface. En particulier, la composante polaire non-nulle est liée au caractère non hémisphérique de la cavité au début de l'ouverture du cratère. Elle est à l'origine de la formation de la corolle. Ces caractéristiques sont cohérentes avec des observations antérieures du champ de vitesse (Engel, 1966).

L'impact génère peu de vorticité autour du cratère, cette dernière restant confinée dans une région proche de l'interface air-eau, ce qui suggère que l'écoulement est dans l'ensemble irrotationnel (figure 3.5, i-iv). La vorticité observée autour de l'interface air-eau est probablement un artefact lié au champ de vitesse mesuré sur des réflexions et non sur des particules de PIV. Cette hypothèse est cohérente avec une longueur de diffusion de la vorticité petite (0.3 mm en 100 ms) devant la taille de la bande de vorticité observée (quelques mm).

Lorsque le cratère atteint sa taille maximale (figure 3.4, v), le cratère, quasiment hémisphérique, est associé à des vitesses très faibles dans le fluide ambiant. Contrairement aux observations de Engel (1966), utilisées par la suite dans différents modèles d'évolution du cratère (*e.g.* Engel, 1967; Prosperetti et Oguz, 1993), les vitesses ne s'annulent pas simultanément dans tout l'écoulement. La vitesse à la base du cratère, dirigée vers le bas en raison de l'expansion de la cavité, diminue progressivement et finit par s'annuler, avant d'augmenter à nouveau, dirigée cette fois vers le haut en raison de l'effondrement de la cavité. Sur les cotés du cratère, la vitesse de la cavité ne s'annule pas lorsque le cratère atteint sa taille maximale. L'effondrement du cratère prend le relais de l'expansion de la cavité, permettant ainsi de maintenir des vitesses dirigées vers l'extérieur sur les flancs du cratère, proche de la surface.

Lorsque le cratère s'effondre, un écoulement convergent vers le centre de la cavité se met en place (figure 3.4, vi-viii). Ce dernier est à l'origine de la formation du jet central au dessus de la surface.

3.3.2 Diagnostique expérimental

Afin d'analyser quantitativement le champ de vitesse et de tester des modèles décrivant son évolution, il est possible de décomposer les composantes du champ de vitesse sur une base de polynômes de Legendre shiftés, moyennant un certain nombre d'hypothèses. Le champ de vitesse $u = (u_r, u_\theta, u_\varphi)$ est exprimé dans un système de coordonnées sphériques (r, θ, φ) dont l'origine est située au niveau du point d'impact entre la goutte et la surface du liquide ambiant, et défini tel que u_r et u_θ soient dans le plan de la nappe laser (figure 3.6).



FIGURE 3.4 – Évolution de la norme de la vitesse $|\boldsymbol{u}| = \sqrt{u_x^2 + u_z^2}$ pour un impact où Fr = 444, We = 432 et $\rho_1/\rho_2 = 1$. Les vecteurs correspondent au champ de vitesse expérimental. Les lignes continues correspondent à la limite du cratère définies par le degré l = 2 de la décomposition en polynômes de Legendre (équation 3.1).

 \mathfrak{C}



FIGURE 3.5 – Évolution de la vorticité ω_y , perpendiculaire au plan de la nappe laser, pour un impact où Fr = 444, We = 432 et $\rho_1/\rho_2 = 1$. Les vecteurs correspondent au champ de vitesse expérimental. Les lignes continues correspondent à la limite du cratère définies par le degré l = 2 de la décomposition en polynômes de Legendre (équation 3.1).



FIGURE 3.6 – Schéma de la géométrie du cratère définissant les systèmes de coordonnées cartésiennes (x, y, y) et sphériques (r, θ, φ) .

Ce champ de vitesse, associé à la formation du cratère, correspond au mouvement d'un fluide supposé incompressible,

$$\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0. \tag{3.2}$$

Par ailleurs, l'écoulement est supposé irrotationnel à tout instant ($\nabla \times u = 0$), ce qui signifie que l'écoulement est potentiel et que le champ de vitesse s'écrit en fonction du potentiel des vitesses ϕ , défini tel que

$$\boldsymbol{u} = \nabla \phi. \tag{3.3}$$

En supposant que l'écoulement est axisymétrique, le potentiel peut être décomposé sur une base de polynômes de Legendre shiftés selon

$$\phi(r,\theta,t) = \sum_{l=0}^{+\infty} \tilde{\phi}_l(r,t) \tilde{P}_l(\cos\theta), \qquad (3.4)$$

où les $\phi_l(r,t)$ sont les coefficients de cette décomposition. Les composantes u_r et u_{θ} du champ de vitesse sont alors obtenues en dérivant le potentiel

$$\begin{cases} u_r = \frac{\partial \phi}{\partial r} = \sum_{l=0}^{+\infty} u_{r,l} \tilde{P}_l(\cos \theta) \\ u_\theta = \frac{1}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta} = \sum_{l=0}^{+\infty} u_{\theta,l} \frac{\partial \tilde{P}_l(\cos \theta)}{\partial \theta} \end{cases},$$
(3.5)

avec $u_{r,l}(r,t)$ et $u_{\theta,l}(r,t)$ les coefficients respectifs de u_r et u_{θ} . Ces coefficients sont obtenus à partir des données expérimentales du champ de vitesse, avec une inversion utilisant la méthode des moindres carrés. À noter que contrairement aux $u_{r,l}$ sur la composante radiale, les $u_{\theta,l}$ ne sont pas les coefficients de la décomposition de la composante polaire sur la base des polynômes de Legendre shiftés.

La figure 3.7 montre les coefficients $u_{r,l}$ et $u_{\theta,l}$ en fonction de la coordonnée radiale, à un temps donné pendant la phase d'ouverture du cratère ($t/(R_i/U_i) = 15$). Pendant cette phase, le champ de vitesse est globalement dominé par les degrés l = 0 et l = 1, les degrés d'ordre supérieur étant négligeables devant ces dernier. Dans le détail, le degré l = 2 pourrait jouer un rôle sur la dynamique du champ de vitesse, ce dernier étant sensiblement supérieur aux degrés d'ordre l > 2, en particulier pour la composante u_{θ} . Sur la composante u_r (figure 3.7a), les degrés dominants l = 0 et l = 1 sont relativement proches et pourraient même inverser leur influence relative lorsque $r/\bar{R} \gtrsim 2$. Sur la composante u_{θ} (figure 3.7b), le degré l = 0 n'intervient pas dans la décomposition car $\partial \tilde{P}_0(\cos \theta)/\partial \theta = 0$ (équation 3.5), ce qui implique que le degré l = 1 est le seul degré significatif de cette composante.



FIGURE 3.7 – Coefficients $u_{r,l}$ (a) et $u_{\theta,l}$ (b) issus de la décomposition des vitesses sur une base de polynômes de Legendre shiftés, normalisés par la vitesse moyenne du cratère \dot{R} , en fonction de la coordonnée radiale r, normalisée par le rayon moyen du cratère \bar{R} . Les coefficients sont calculés à $t/(R_i/U_i) = 15$ pour un impact où Fr = 444, We = 432 et $\rho_1/\rho_2 = 1$.

Les figures 3.8 et 3.9 montrent l'évolution temporelle respective des coefficients $u_{r,l}$ et $u_{\theta,l}$ en fonction de la coordonnée radiale. Les courbes de la figure 3.7 correspondent donc à des coupes radiales de ces figures pendant l'ouverture du cratère, à $t/(R_i/U_i) = 15$. Les degrés l = 0 et l = 1 de la composante radiale et le degré l = 1 de la composante polaire dominent le champ de vitesse pendant toute l'ouverture du cratère ($t/(R_i/U_i) \leq 35$), en accord avec les observations de la figure 3.7, mais aussi pendant l'effondrement de la cavité ($t/(R_i/U_i) \gtrsim 35$). Le degré l = 2 pourrait jouer un rôle secondaire, en particulier sur la composante u_{θ} (figure 3.9).

Pendant l'ouverture du cratère $(t/(R_i/U_i) \leq 35)$, les degrés dominants de la composante radiale du champ de vitesse, c'est-à-dire $u_{r,0}$ et $u_{r,1}$, sont positifs, ce qui traduit le champ de vitesse radial lié à l'expansion de la cavité. Le degré dominant de la composante polaire, c'està-dire $u_{\theta,1}$, est lui négatif avec une magnitude inférieur d'un ordre de grandeur, ce qui traduit une perturbation du champ de vitesse radial, à l'origine d'un flux de matière à travers la surface en z = 0, autrement dit la formation de la corolle. La dérivée \tilde{P}_1 par rapport à θ est en effet égale à $-2\sin\theta$, ce qui signifie bien qu'un coefficient $u_{\theta,1}$ négatif correspond à un écoulement vers la surface.

Au moment où le cratère atteint sa taille maximale, les degrés dominants des deux composantes du champ de vitesse deviennent globalement nuls avant de changer de signe, en relation avec l'effondrement du cratère. Dans le détail, $u_{r,0}$ pourrait s'annuler plus tardivement que $u_{r,1}$ $(t/(R_i/U_i) \simeq 40$ pour le degré l = 0 et $t/(R_i/U_i) \simeq 30$ pour le degré l = 1). Cela signifie qu'au moment où le rayon moyen du cratère est maximal $(t/(R_i/U_i) \simeq 35)$, $u_{r,0} > 0$ et $u_{r,1} < 0$, ce



FIGURE 3.8 – Coefficients $u_{r,l}$ ($l \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$) issus de la décomposition des vitesses sur une base de polynômes de Legendre shiftés, normalisés par la vitesse d'impact U_i , en fonction de la coordonnée radiale r, normalisée par le rayon de la goutte R_i , et du temps. Les coefficients sont calculés pour un impact où Fr = 444, We = 432 et $\rho_1/\rho_2 = 1$.



FIGURE 3.9 – Coefficients $u_{\theta,l}$ ($l \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$) issus de la décomposition des vitesses sur une base de polynômes de Legendre shiftés, normalisés par la vitesse d'impact U_i , en fonction de la coordonnée radiale r, normalisée par le rayon de la goutte R_i , et du temps. Les coefficients sont calculés pour un impact où Fr = 444, We = 432 et $\rho_1/\rho_2 = 1$.

qui pourrait expliquer les observations de la figure 3.4v, avec où vitesse s'annule à la base du cratère tandis qu'elle se maintient, dirigée vers l'extérieur, sur les flancs.

Pendant la phase de fermeture du cratère $(t/(R_i/U_i) \gtrsim 35)$, $u_{\theta,1}$ devient positif, ce qui traduit la formation de l'écoulement convergent en relation avec l'effondrement de la cavité. Par ailleurs, $u_{r,0}$ et $u_{r,1}$ sont tous deux négatifs, ce qui traduit également l'effondrement du cratère et la formation du pic central, avec une composante radiale plus marquée au niveau de la base de la cavité, et donc globalement dirigée vers le haut.

3.4 Modélisations du champ de vitesse

L'étude expérimentale du champ de vitesse a montré que les coefficients $u_{r,0}$, $u_{r,1}$ et $u_{\theta,1}$ dominaient la dynamique de l'écoulement pendant la majorité des phases d'ouverture et d'effondrement de la cavité. Les mesures expérimentales de ces coefficients sont d'abord utilisées pour étudier la pertinence des modèles développés au cours des décennies passées. Un modèle cinématique est ensuite présenté et comparé aux données expérimentales. Enfin, un modèle dynamique est développé afin de prédire conjointement l'évolution de la forme du cratère et du champ de vitesse associé.

3.4.1 Modèles publiés

La figure 3.10 montre les trois coefficients dominants $u_{r,0}$, $u_{r,1}$ et $u_{\theta,1}$ en fonction de la coordonnée radiale pendant la phase d'ouverture du cratère $(t/(R_i/U_i) = 7)$. Les prédictions des modèles de Engel (1967), Maxwell (1977), Leng (2001), et Bisighini <u>et al.</u> (2010) sont également représentés. Le cratère n'étant pas hémisphérique, les coefficients de la décomposition du champ de vitesse échantillonnent des endroits de l'écoulement situés à des distances variables de la limite réelle du cratère, ce qui proche de l'interface air-eau, en $r = \overline{R}$, est susceptible d'influencer la dépendance radiale de ces coefficients. Cela pourrait par exemple expliquer l'aplatissement de $u_{r,0}$ lorsque $r \leq 1.2\overline{R}$, ainsi que les changements observés sur $u_{r,1}$ et $u_{\theta,0}$ dans cette région proche du cratère.

Parmi les modèles choisissant arbitrairement la forme du champ de vitesse se trouve le modèle Z de Maxwell (1977). La composante u_r est supposée invariante selon θ , et sa dépendance radiale est définie comme une puissance Z de r. u_{θ} est alors obtenue en utilisant l'incompressibilité du fluide. Le champ de vitesse s'exprime comme

$$\begin{cases} u_r = \frac{\alpha(t)}{r^Z} \\ u_\theta = (Z-2) \frac{\sin\theta}{1+\cos\theta} \frac{\alpha(t)}{r^Z} \end{cases},$$
(3.6)

où $\alpha(t)$ est un coefficient arbitraire dépendant du temps décrivant l'intensité de l'écoulement.

Le modèle de Maxwell (1977), suggéré par les données de cratérisation planétaire, permet d'expliquer ces données avec $Z \simeq 3$. Maxwell (1977) note cependant que l'exposant Z pourrait être dépendant de θ , ce qui n'est pas pris en compte dans le modèle. À noter par ailleurs que ce modèle n'est pas potentiel. Avec le choix arbitraire de Z et α , ce modèle constitue une approche purement cinématique et non dynamique de la cratérisation. Le modèle Z de Maxwell (1977) possède donc une composante radiale de degré l = 0 et une composante polaire de degré l = 1. Le modèle, calculé avec Z = 3 et $\alpha = 1$, est proche des résultats de nos expériences pour $u_{r,0}$ et $u_{\theta,1}$ (figure 3.3). La valeur de Z ayant été obtenue sur des données de cratérisation planétaire, cela constitue un argument pour justifier que la dynamique des impacts planétaires dans le régime gravitaire est similaire à celle de nos expériences.



FIGURE 3.10 – Coefficients $u_{r,0}$ (a), $u_{r,1}$ (b) et $u_{\theta,1}$ (c) issus de la décomposition des vitesses sur une base de polynômes de Legendre shiftés, normalisés par la vitesse moyenne du cratère \dot{R} , en fonction de la coordonnée radiale r, normalisée par le rayon moyen du cratère \bar{R} . Les coefficients sont calculés à $t/(R_i/U_i) = 7$ pour un impact où Fr = 444, We = 432 et $\rho_1/\rho_2 = 1$. Les lignes continues correspondent aux modèles de Engel (1967), Leng (2001), Maxwell (1977) et Bisighini <u>et al.</u> (2010).

L'utilisation d'un bilan d'énergie dans lequel le terme d'énergie cinétique est calculé à partir d'un écoulement potentiel permet d'ajouter des contraintes dynamiques, mais le choix du potentiel est souvent arbitraire et correspond à l'expression d'hypothèses sur la forme du champ de vitesse. Engel (1967) utilise un modèle de cratère hémisphérique de rayon \bar{R} , ce qui permet de définir arbitrairement un potentiel ϕ de la forme

$$\phi = -\frac{\bar{R}\bar{R}^2\cos\theta}{r}.$$
(3.7)

Les composantes radiale u_r et polaire u_{θ} du champ de vitesse, obtenues par dérivation du potentiel, sont donc de la forme

$$\begin{cases} u_r = \frac{\bar{R}\bar{R}^2\cos\theta}{r^2} \\ u_\theta = \frac{\bar{R}\bar{R}^2\sin\theta}{r^2} \end{cases}.$$
(3.8)

A partir d'un bilan d'énergie, utilisant un facteur arbitraire sur l'énergie cinétique de l'impacteur, ce modèle permet de prédire un rayon moyen du cratère cohérent avec les observations expérimentales. À noter cependant que Engel (1967) fait une erreur dans le choix de ce potentiel, car bien qu'il permette de satisfaire les conditions limites $|\boldsymbol{u}|(r = +\infty) = 0$ et $|\boldsymbol{u}|(r = \bar{R}) = \bar{R}$ sur la vitesse, il est solution de l'équation de Laplace ($\nabla^2 \phi = 0$) en coordonnée cylindrique et non sphérique. Cela signifie implicitement que la géométrie du cratère est un demi-cylindre et non un hémisphère.

Le modèle d'Engel (1967) possède à la fois une composante radiale de degré l = 0 et l = 1, et une composante polaire de degré l = 1 (figure 3.3). Cela permet d'obtenir un champ de vitesse qualitativement similaire aux expériences, incluant l'expansion radiale de la cavité, ainsi que la formation de la corolle, liée à sa composante polaire. La pente en $1/r^2$ des coefficients $u_{r,0}$ et $u_{\theta,0}$ est cependant trop faible pour pouvoir expliquer quantitativement les données expérimentales. Le coefficient $u_{r,1}$ prédit par le modèle est par contre cohérent avec la dépendance radiale expérimentale, en particulier lorsque $r \gtrsim 2\overline{R}$.

Le potentiel le plus simple, permettant à la fois de satisfaire les conditions limites en $r = \overline{R}$ et $r = +\infty$, et solution de l'équation de Laplace en coordonnées sphériques, est celui utilisé par exemple par Leng (2001), ainsi que dans le chapitre 1. Il s'écrit

$$\phi = -\frac{\bar{R}\bar{R}^2}{r},\tag{3.9}$$

ce qui permet d'exprimer les composante du champ de vitesse sous la forme

$$\begin{cases}
 u_r = \frac{\bar{R}\bar{R}^2}{r^2} \\
 u_\theta = 0
\end{cases}$$
(3.10)

Le modèle de Leng (2001), associé à un cratère hémisphérique, suppose donc que l'écoulement est purement radial, avec uniquement un coefficient $u_{r,0}$ non nul (figure 3.3). Cela permet d'estimer la croissance de la taille moyenne du cratère à partir d'un bilan d'énergie, mais ne permet par exemple pas d'expliquer la formation de la corolle ou la forme complexe du cratère, qui requièrent une composante polaire du champ de vitesse. Comme pour le modèle d'Engel (1967), la pente de $u_{r,0}$ en $1/r^2$ est trop faible pour expliquer les données expérimentales pendant l'ouverture du cratère.

Afin d'obtenir un cratère non hémisphérique et d'intégrer une composante polaire au champ de vitesse, Bisighini et al. (2010) suppose l'existence d'une cavité sphérique de rayon
\bar{R} dont la position du centre de masse $z_c(t)$ varie verticalement au cours du temps. Cette hypothèse sur la géométrie du cratère est associée à la définition d'un potentiel de vitesse correspondant à la superposition entre une expansion radiale et un écoulement autour d'une sphère en translation. Le potentiel permettant de satisfaire les conditions limites en $r = \bar{R}$ et $r = +\infty$ et l'équation de Laplace en coordonnées sphériques s'écrit donc

$$\phi = -\frac{\bar{R}\bar{R}^2}{r} - \dot{z}_c r \left(1 - \frac{\bar{R}^3}{2r^3}\right) \cos\theta, \qquad (3.11)$$

avec des composantes du champ de vitesse de la forme

$$\begin{cases} u_r = \frac{\dot{\bar{R}}\bar{R}^2}{r^2} - \left(1 - \frac{\bar{R}^3}{r^3}\right) \dot{z}_c \cos\theta \\ u_\theta = \left(1 + \frac{\bar{R}^3}{2r^3}\right) \dot{z}_c \sin\theta \end{cases}$$
(3.12)

La conservation de l'énergie, sous la forme d'une équation de Bernoulli instationnaire permet alors de prédire l'évolution du rayon moyen de la sphère ainsi que la position de son centre de masse, permettant ainsi d'expliquer l'évolution générale de la forme du cratère pendant sa phase d'ouverture et de fermeture.

Le modèle de Bisighini <u>et al.</u> (2010) possède une composante radiale de degré l = 0 et l = 1, et une composante polaire de degré l = 1 (figure 3.3). Les coefficients sont calculés en utilisant $\dot{z}_c = 0.05U_i$, ce qui correspond à la vitesse verticale caractéristique de la sphère pendant l'ouverture du cratère dans le modèle de Bisighini <u>et al.</u> (2010). Bien que le modèle puisse expliquer la forme générale du cratère en utilisant des conditions initiales appropriées (figure 1.21), les coefficients du champ de vitesse ne sont pas cohérents avec les données expérimentales.

Les modèles publiés permettent d'obtenir l'évolution temporelle de la taille moyenne du cratère mais échouent dans l'ensemble à prédire le forme de la cavité ainsi que le champ de vitesse associé à la cratérisation. C'est le cas pendant l'ouverture du cratère, mais aussi pendant l'effondrement de la cavité, qui ne peut être étudiée simplement avec un bilan d'énergie. Le développement de nouveaux modèles est donc nécessaire afin de prédire l'évolution de la forme de la cavité et du champ de vitesse. Le premier modèle est cinématique et conserve l'hypothèse d'un cratère hémisphérique pendant l'ouverture du cratère, tandis que le second est dynamique et permet de prédire l'évolution conjointe du champ de vitesse et de la forme du cratère pendant l'ouverture et la fermeture de la cavité.

3.4.2 Modèle cinématique

Ce modèle constitue une approche cinématique dans le sens où il ne s'intéresse pas aux processus responsable de la formation et de l'évolution du champ de vitesse. Le fluide est supposé parfait ($\nu = 0$) et incompressible ($\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$), tandis que l'écoulement est supposé irrotationnel ($\nabla \times \boldsymbol{u} = 0$), ce qui signifie que l'écoulement est potentiel ($\boldsymbol{u} = \nabla \phi$). Par conséquent, le potentiel ϕ satisfait l'équation de Laplace

$$\nabla^2 \phi = 0, \tag{3.13}$$

qui en coordonnée sphérique (r, θ, φ), et en supposant que l'écoulement est axisymétrique, possède une solution de la forme

$$\phi(r,\theta,t) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\phi_n(t)}{r^{n+1}} P_n(\cos\theta), \qquad (3.14)$$

où les $\phi_n(t)$ sont des coefficients dépendant du temps et les $P_n(x)$ sont les polynômes de Legendre standards, orthogonaux sur [-1, 1]. Les composantes u_r et u_{θ} du champ de vitesse sont alors obtenues en dérivant le potentiel

$$\begin{cases} u_r = \frac{\partial \phi}{\partial r} = \sum_{n=0}^{+\infty} -(n+1)\frac{\phi_n}{r^{n+2}}P_n(\cos\theta) \\ u_\theta = \frac{1}{r}\frac{\partial \phi}{\partial \theta} = \sum_{n=0}^{+\infty}\frac{\phi_n}{r^{n+2}}\frac{\partial P_n(\cos\theta)}{\partial \theta} \end{cases} .$$
(3.15)

Par ailleurs, le potentiel des vitesses peut être décomposé sur une base de polynômes de Legendre shiftés (équation 3.4). Les coefficient $\tilde{\phi}_l(r, t)$ de cette décomposition peuvent s'exprimer en fonction des coefficients $\phi_n(t)$ en projetant l'équation 3.14 sur la base des polynômes de Legendre shiftés en utilisant la relation d'orthogonalité

$$\langle X, \tilde{P}_m \rangle = (2m+1) \int_0^1 X \tilde{P}_m(x) \mathrm{d}x,$$
(3.16)

où $\langle X, \tilde{P}_m \rangle$ désigne la projection d'une fonction X sur le polynôme shifté \tilde{P}_m . Cela permet d'obtenir la relation

$$\tilde{\phi}_{l}(r,t) = \sum_{n=l}^{+\infty} \frac{\phi_{n}(t)}{r^{n+1}} p_{ln},$$
(3.17)

où

$$p_{ln} = (2l+1) \int_0^1 P_n(x) \tilde{P}_l(x) \mathrm{d}x.$$
(3.18)

Les composantes u_r et u_{θ} du champ de vitesse sont alors obtenues en dérivant le potentiel (équation 3.5). Les coefficients $u_{r,l}$ et $u_{\theta,l}$ issus de cette dérivation peuvent alors s'exprimer en fonction des coefficients ϕ_n

$$\begin{cases} u_{r,l} = \sum_{n=l}^{+\infty} -(n+1) \frac{\phi_n}{r^{n+2}} p_{ln} \\ u_{\theta,l} = \sum_{n=l}^{+\infty} \frac{\phi_n}{r^{n+2}} p_{ln} \end{cases}$$
(3.19)

Le modèle utilise trois hypothèses principales permettant une simplification des équations précédentes. La première hypothèse correspond à la conservation de la masse et suppose que le flux de matière à travers la surface en z = 0 est égale au taux de croissance du volume du cratère. Cela implique en particulier que

$$\phi_0 = 0, \tag{3.20}$$

ce qui est cohérent avec le fait qu'on observe une dépendance en $1/r^3$ du champ de vitesse. Une forte contribution de ϕ_0 impliquerait en effet un dépendance en $1/r^2$. La deuxième hypothèse suppose d'abord que le cratère est hémisphérique, de rayon \bar{R} . Cette hypothèse repose sur les observations du chapitre 1 montrant que la cavité est quasiment hémisphérique pendant une partie significative de la phase d'ouverture. Par ailleurs, cette hypothèse implique que la composante radiale du champ de vitesse est indépendante de θ au niveau de l'interface, ce qui signifie que $u_r(r = \bar{R}) = \dot{\bar{R}}$. La troisième hypothèse correspond aux conditions limites des coefficients $u_{r,l}$ au niveau de la limite du cratère en $r = \bar{R}$. La composante radiale de degré l = 0 est égale à $\dot{\bar{R}}$, le degré l = 1 est fixé à une fraction α de $\dot{\bar{R}}$, et les degrés supérieurs sont supposés nuls. Cela se traduit par un système d'équations de la forme

$$\begin{cases} \dot{\bar{R}} = u_{r,0}(r = \bar{R}) & \text{si} \quad l = 0 \\ \alpha \dot{\bar{R}} = u_{r,1}(r = \bar{R}) & \text{si} \quad l = 1 \\ 0 = u_{r,l}(r = \bar{R}) & \text{si} \quad l \ge 2 \end{cases}$$
(3.21)

Afin d'obtenir une solution à ce système d'équations, la somme de l'équation 3.19 est tronquée jusqu'au degré l_{max} . En adimensionnant les équations par le rayon du cratère, pour que r = 1 au niveau de l'interface air-eau, l'équation 3.21 s'écrit

$$\begin{cases} \bar{R} = -\sum_{n=0}^{l_{max}} (n+1)\phi_n p_{0n} & \text{si} \quad l=0\\ \alpha \dot{\bar{R}} = -\sum_{n=1}^{l_{max}} (n+1)\phi_n p_{1n} & \text{si} \quad l=1\\ 0 = -\sum_{n=l}^{l_{max}} (n+1)\phi_n p_{ln} & \text{si} \quad 2 \le l \le l_{max} \end{cases}$$
(3.22)

L'équation 3.22 constitue un système de $l_{max} + 1$ équations à l_{max} inconnues car ϕ_0 est supposé nul (équation 3.20). Cependant, l'équation en $l = l_{max}$ n'est pas exploitable car elle donne $\phi_{l_{max}} = 0$, ce qui impliquerait par substitution que tous les coefficients ϕ_l soient nuls. Le système se réduit donc à l_{max} équations, ce qui permet d'obtenir une solution analytique pour tous les coefficients ϕ_l . Pour obtenir les deux premiers degrés du champ de vitesse, on choisit $l_{max} = 2$,

$$\begin{cases} \phi_0 = 0 \\ \phi_1 = -\dot{\bar{R}} \\ \phi_2 = -\frac{4}{9}(\alpha - 1)\dot{\bar{R}} \end{cases}$$
(3.23)

L'équation 3.17 permet alors de calculer les coefficients $\tilde{\phi}_l$ à partir des coefficients ϕ_l , ce qui donne

$$\begin{cases} \tilde{\phi}_0 = -\frac{1}{2r^2} \dot{\bar{R}} \\ \tilde{\phi}_1 = \left(-\frac{1}{2r^2} - \frac{\alpha - 1}{3r^3} \right) \dot{\bar{R}} \end{cases}$$
(3.24)

L'équation 3.19 permet finalement d'obtenir les coefficients $u_{r,l}$ et $u_{\theta,l}$, tels que

$$\begin{cases} u_{r,0} = \frac{1}{r^3} \dot{R} \\ u_{r,1} = \left(\frac{1}{r^3} + \frac{\alpha - 1}{r^4}\right) \dot{R} \\ u_{\theta,0} = 0 \\ u_{\theta,1} = \left(-\frac{1}{2r^3} - \frac{\alpha - 1}{3r^4}\right) \dot{R} \end{cases}$$
(3.25)

À la différence du modèle de Maxwell (1977) qui utilisait une dépendance radiale arbitraire en $1/r^Z$, ou des modèles d'Engel (1967) et Leng (2001) qui utilisaient une loi en $1/r^2$, le champ de vitesse s'exprime donc comme une combinaison de termes en $1/r^3$ et $1/r^4$. À noter qu'en utilisant des données de cratérisation planétaire, le modèle de Maxwell (1977) prédisait un exposant $Z \simeq 3$, ce qui est cohérent avec la dépendance prédite par le modèle. La dépendance radiale est également différente du modèle de Bisighini <u>et al.</u> (2010) qui utilisait une combinaison entre des termes en $1/r^2$ et $1/r^3$. Le modèle, uniquement cinématique, est paramétré par le facteur α , dépendant du temps.

La figure 3.11a montre le coefficient $u_{r,0}$ au cours du temps, pendant la phase d'ouverture du cratère. Comme sur la figure 3.10, la dépendance radiale de $u_{r,0}$ suit une loi de puissance. L'équation 3.25 prédit une dépendance radiale de $u_{r,0}$ en $1/r^3$, ce qui correspond à une pente proche des données expérimentales. La loi prédite par le modèle cinématique est indépendante de α . Proche du cratère ($r \leq 1.2\bar{R}$), $u_{r,0}$ s'écarte de la loi de puissance observée dans le reste de l'écoulement, en particulier aux temps courts. Cela pourrait être lié au fait que la cavité n'est pas hémisphérique, ou à la présence d'une couche limite dans laquelle l'écoulement n'est pas potentiel. Loin du cratère ($r \gtrsim 2.6\bar{R}$), le bruit expérimental augmente et la loi de puissance s'effondre, en particulier aux temps longs, c'est-à-dire quand le cratère atteint sa taille



FIGURE 3.11 – (a) Coefficients $u_{r,0}$, normalisés par la vitesse moyenne du cratère \bar{R} , en fonction de la coordonnée radiale r/\bar{R} . (b) Coefficients $u_{r,1}$, normalisés par la vitesse moyenne du cratère $\dot{\bar{R}}$, en fonction de la coordonnée radiale r/\bar{R} . (c) Coefficients $u_{\theta,1}$, normalisés par la vitesse moyenne du cratère $\dot{\bar{R}}$, en fonction de la coordonnée radiale r/\bar{R} . (c) Coefficients $u_{\theta,1}$, normalisés par la vitesse moyenne du cratère $\dot{\bar{R}}$, en fonction de la coordonnée radiale r/\bar{R} . Les coefficients sont estimés à différents temps pendant l'ouverture du cratère, pour un impact où Fr = 444, We = 432 et $\rho_1/\rho_2 = 1$. Les lignes rouges correspondent au modèle cinématique (équation 3.25), calculé pour différentes valeur de α . (c) Facteur α , ajusté conjointement sur les coefficients $u_{r,1}$ et $u_{\theta,1}$ expérimentaux, en fonction du temps.

maximale. Cela pourrait s'expliquer par l'existence de vitesses très faibles dont l'estimation par PIV est assortie d'un bruit significatif associé à une erreur importante. Sur les données expérimentales, l'exposant de la loi de puissance est relativement stable au cours du temps, mais le préfacteur semble cependant dépendre du temps, en particulier aux temps courts, avant de converger vers 1 aux temps longs. Ce phénomène pourrait être expliqué par le fait que le cratère n'est pas hémisphérique, en particulier au début de l'ouverture de la cavité, alors que la vitesse moyenne \dot{R} , qui est utilisée pour normaliser $u_{r,0}$, est calculée en supposant un cratère hémisphérique.

La figure 3.11b montre le coefficient $u_{r,1}$ au cours du temps, pendant la phase d'ouverture du cratère. La dépendance radiale de $u_{r,1}$ suit une combinaison de lois de puissance, dont l'importance relative dépend du temps. L'équation 3.25 prédit une dépendance radiale de $u_{r,1}$ en $1/r^3$ et $1/r^4$, pondérée par α . Les données expérimentales sont expliquées par le modèle cinématique en choisissant une valeur appropriée pour α , correspondant à la valeur de $u_{r,1}/\dot{R}$ en $r = \bar{R}$.

La figure 3.11c montre le coefficient $u_{\theta,1}$ au cours du temps, pendant la phase d'ouverture du cratère. La dépendance radiale de $u_{\theta,1}$ suit également une combinaison de lois de puissance. L'équation 3.25 prédit une dépendance radiale de $u_{\theta,1}$ en $1/r^3$ et $1/r^4$, pondérée par α . Les données expérimentales sont expliquées par le modèle cinématique en choisissant une valeur appropriée pour α , proche de celle obtenue sur $u_{r,1}$.

La figure 3.11d montre l'évolution temporelle de α , obtenue en ajustant conjointement le modèle cinématique (équation 3.25) aux données expérimentales des coefficients $u_{r,1}$ et $u_{\theta,1}$. α est positif et relativement indépendant du temps au début de l'ouverture du cratère. Lorsque la taille de la cavité approche de valeur maximale, α devient négatif et semble diverger lorsque $\bar{R} \rightarrow \bar{R}_{max}$.

Dans l'ensemble, le modèle cinématique permet d'expliquer les données expérimentales du champ de vitesse pendant l'ouverture du cratère en utilisant un paramètre α dépendant du temps. L'évolution temporelle de α est probablement liée à la dynamique de l'écoulement, en particulier à la forme réelle du cratère, et ne peut être prédite dans le cadre de ce modèle cinématique. L'évolution de α pourrait néanmoins être mise en relation avec un bilan d'énergie (équation 1.9) où le potentiel interviendrait dans l'expression du terme d'énergie cinétique. Dans ce cas, α serait lié au paramètre de correction du terme d'énergie cinétique ξ (figure 1.8b), permettant de prendre en compte la différence entre le potentiel utilisé dans le modèle et l'écoulement réel. Cet aspect du problème ne sera pas traité ici et pourra faire l'objet de travaux ultérieurs.

3.4.3 Modèle dynamique

Ce modèle constitue une approche dynamique dans le sens où il intègre les forces responsables de la mise en mouvement de l'écoulement. Comme dans le modèle cinématique, l'évolution du champ de vitesse associé à la formation du cratère utilise un modèle où le fluide est supposé parfait et incompressible. Par ailleurs, l'écoulement est supposé irrotationnel, ce qui signifie que l'écoulement est potentiel, et que le potentiel satisfait l'équation de Laplace. L'écoulement étant supposé axisymétrique, le potentiel ϕ est donné sous la forme d'un développement en polynômes de Legendre standards (équation 3.14). Les composantes du champ de vitesse peuvent ensuite être calculées en dérivant le potentiel (équation 3.15). Dans ce modèle, le cratère n'est pas hémisphérique, la forme de la cavité étant décomposée sur une base de polynômes de Legendre shiftés (équation 3.1).

Le fluide étant supposé parfait et incompressible, cela implique que le champ de vitesse $m{u}$

est contrôlé par l'équation d'Euler,

$$\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial t} + (\boldsymbol{u} \cdot \nabla) \boldsymbol{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \boldsymbol{g}, \qquad (3.26)$$

où ρ est la masse volumique du fluide, p est la pression et g est la pesanteur. L'intégration de cette équation permet d'obtenir l'équation de Bernoulli instationnaire

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2}u^2 - gz + \frac{p}{\rho} = \text{constante}, \qquad (3.27)$$

où u est la norme de la vitesse, g est l'accélération de la pesanteur et z est la coordonnée verticale sous la surface du fluide. Cette équation est constante dans tout le volume de l'écoulement, mais loin du cratère, la vitesse et le potentiel tendent vers zéro tandis que la pression suit un profil hydrostatique $p(z) = p_0 + \rho g z$, où p_0 est la pression atmosphérique, ce qui implique que la constante vaut en réalité p_0/ρ . Par ailleurs, au niveau de la surface du cratère, en $r = R(\theta)$, l'équation de Young-Laplace indique que la différence de pression entre l'air et le liquide dépend de la tension de surface σ à l'interface et de sa courbure moyenne locale $C(\theta)$ selon

$$p[R(\theta)] - p_0 = \sigma C(\theta). \tag{3.28}$$

En coordonnées polaires, la courbure s'exprime comme

$$C(\theta) = \frac{R^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial \theta}\right)^2 - R \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2}}{\left[R^2 + \left(\frac{\partial R}{\partial \theta}\right)^2\right]^{3/2}}.$$
(3.29)

L'équation de Bernoulli, exprimée au niveau de la surface du cratère, devient donc

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)_{r=R(\theta)} + \frac{1}{2}u[R(\theta)]^2 - gR(\theta)\cos\theta + \frac{\sigma}{\rho}C(\theta) = 0.$$
(3.30)

Par ailleurs, afin de déterminer la forme du cratère, une condition limite cinématique est appliquée au niveau de la surface du cratère

$$\frac{\mathrm{D}R}{\mathrm{D}t} = \frac{\partial R}{\partial t} + u_{\theta}(R)\frac{1}{R}\frac{\partial R}{\partial \theta} = u_{r}(R), \qquad (3.31)$$

avec D • /D $t = \partial \bullet / \partial t + u \cdot \nabla \bullet$ la dérivée lagrangienne.

Les équations 3.30 et 3.31 peuvent être adimensionnées en utilisant respectivement le rayon de la goutte R_i , la vitesse d'impact U_i et R_i/U_i comme longueur, vitesse et temps d'adimensionnement, ce qui donne un système d'équations différentielles de la forme

$$\begin{cases} \left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)_{r=R} = -\frac{1}{2}u(R)^2 + \frac{1}{\mathrm{Fr}}R\cos\theta - \frac{1}{\mathrm{We}}C\\ \frac{\partial R}{\partial t} = u_r(R) - u_\theta(R)\frac{1}{R}\frac{\partial R}{\partial \theta} \end{cases}, \tag{3.32}$$

où Fr = $U_i^2/(gR_i)$ est le nombre de Froude et We = $\rho U_i^2 R_i/\sigma$ est le nombre de Weber (équation I.1).

Afin d'obtenir une solution au système d'équations différentielles ci-dessus, le potentiel de vitesse (équation 3.14) est tronqué au degré $n_{max} = 2$

$$\phi(r,\theta,t) = \frac{\phi_0}{r} + \frac{\phi_1 \cos \theta}{r^2} + \frac{\phi_2 \left(3\cos^2 \theta - 1\right)}{2r^3},$$
(3.33)

ce qui donne des composantes du champ de vitesse (équation 3.15) de la forme

$$\begin{cases} u_r = -\frac{\phi_0}{r^2} - \frac{2\phi_1 \cos \theta}{r^3} - \frac{3\phi_2(3\cos^2 \theta - 1)}{2r^4} \\ u_\theta = -\frac{\phi_1 \sin \theta}{r^3} - \frac{3\phi_2 \sin \theta \cos \theta}{r^4} \end{cases}$$
(3.34)

Par ailleurs, le rayon du cratère (équation 3.1) est tronqué au degré $l_{max} = 1$

$$R(\theta, t) = a_0 + a_1(2\cos\theta - 1).$$
(3.35)

Le système d'équations différentielles de l'équation 3.32 est alors projeté sur une base de polynômes de Legendre shiftés selon

$$\langle X, \tilde{P}_m \rangle = (2m+1) \int_0^{\pi/2} X \tilde{P}_m(\cos\theta) \sin\theta d\theta,$$
 (3.36)

où $\langle X, \hat{P}_m \rangle$ désigne la projection d'une fonction X sur le polynôme \hat{P}_m , et cela jusqu'au degré $n_{max} = 2$ pour l'équation de Bernoulli et jusqu'au degré $l_{max} = 1$ pour la condition limite cinématique.

Afin de simplifier les calculs, le terme de tension de surface, proportionnel à 1/We, est négligé pour $n \ge 1$ et les équations sont développées au premier ordre en a_1 . Cette dernière approximation est motivée par le fait que le cratère est quasiment hémisphérique pendant une bonne partie du processus de cratérisation, avec par conséquent $a_1 \ll a_0$. Cela permet d'obtenir un système de cinq équations avec cinq inconnues ϕ_0 , ϕ_1 , ϕ_2 , a_0 et a_1 (annexe 3.A, équations 3.37-3.41), qu'il est possible de résoudre numériquement. Cette version du modèle est appelée « modèle complet ».

Une alternative permettant de simplifier le modèle complet consiste à supposer par ailleurs que $\phi_0 = 0$, ce qui correspond à l'égalité entre le débit à travers la surface en z = 0 et le taux de croissance du volume du cratère. En utilisant uniquement des degrés n = 1 et n = 2 de l'équation de Bernoulli, cela permet d'obtenir un système de quatre équations avec quatre inconnues ϕ_1 , ϕ_2 , a_0 et a_1 (annexe 3.A, équations 3.42-3.45), qu'il est également possible de résoudre numériquement. À noter qu'une des conséquences de ce modèle est que le terme de tension de surface n'intervient plus dans les équations. Cette version du modèle est appelée « modèle simplifié ».

La figure 3.12 montre les coefficients ϕ_0 , ϕ_1 et ϕ_2 du potentiel de vitesse et les coefficients a_0 et a_1 de la forme du cratère obtenus expérimentalement. Les coefficients du potentiel sont déterminés à partir des données expérimentales avec une méthode des moindres carrés, en inversant conjointement la composante radiale et la composante polaire du champ de vitesse. Les coefficients de la forme de la cavité sont déterminés en utilisant la méthode de la partie 3.2. Les coefficients expérimentaux sont alors comparés à ceux obtenus à partir du modèle dynamique complet et simplifié, utilisant des conditions initiales appropriées.

Le modèle dynamique complet (lignes continues) permet de prédire dans l'ensemble l'évolution du champ de vitesse et de la forme du cratère. Le modèle simplifié (lignes discontinues) présente une évolution similaire à celle du modèle complet, mais il prédit néanmoins légèrement moins bien les données expérimentales. Dans le détail, le coefficient ϕ_0 prédit par le modèle est du bon ordre de grandeur mais s'écarte des données expérimentales au cours du temps, tandis que les degrés supérieurs restent cohérent avec les données expérimentales. Cela pourrait être lié à la faible magnitude de ϕ_0 devant les coefficients d'ordre supérieur, ce qui signifierait que l'écoulement est principalement contrôlé par les degrés n = 1 et n = 2. Cette observation est une des justifications de l'hypothèse $\phi_0 = 0$ utilisée dans le modèle simplifié.



FIGURE 3.12 – Coefficients ϕ_0 (a), ϕ_1 (b), ϕ_2 (c), a_0 (d) et a_1 (e) en fonction du temps. La forme du cratère obtenue sur les données de PIV (cercles) est comparée à celle obtenue dans des conditions similaires avec une illumination par l'arrière (croix). Les lignes continues et discontinues correspondent à la solution numérique de l'équation 3.32, dans l'hypothèse du modèle complet et du modèle simplifié, respectivement.

Par ailleurs, le coefficient a_0 prédit par le modèle, correspondant au rayon moyen du cratère, surestime les données expérimentales au début $(t/(R_i/U_i) \leq 10)$ et à la fin $(t/(R_i/U_i) \geq 55)$ de la cratérisation. Ces périodes sont associées à un cratère très aplati suite à l'étalement initial de la goutte et à l'effondrement terminal de la cavité. Par conséquent, le développement au premier ordre en a_1 , ainsi que l'absence de degré d'ordre supérieur, pourraient expliquer l'écart entre le modèle et les expériences. En outre, le coefficient a_1 prédit sous-estime les données, ce qui pourrait s'expliquer par une compensation de la surestimation de a_0 .

La figure 3.13 montre la composante radiale du champ de vitesse expérimental (a) et reconstruit à partir du modèle dynamique complet (b) ou simplifié (c). La comparaison est menée à des temps différents correspondant au début (i) et à la fin (ii) de l'ouverture de la cavité, ainsi qu'à sa fermeture (iii). La figure 3.14 présente une comparaison similaire, mais pour la composante polaire du champ de vitesse. Le modèle dynamique permet de prédire le champ de vitesse expérimental de manière satisfaisante, y compris pendant la phase de fermeture du cratère. Les différences existant entre les deux versions du modèle concernent peu la structure générale du champ de vitesse, mais plutôt l'intensité de ses composantes, en particulier proche de la surface ($\theta = \pm \pi/2$).

La figure 3.15 montre la forme du cratère obtenue à partir d'une expérience illuminée par l'arrière (Fr = 488 et $\rho_1/\rho_2 = 1$). Cette forme expérimentale est comparée à la reconstruction de la forme de la cavité obtenue dans des conditions similaires (Fr = 444 et $\rho_1/\rho_2 = 1$), avec les modèles dynamiques complet (a) et simplifié (b). La forme du cratère prédite par le modèle est dans l'ensemble proche des données expérimentales, en particulier autour de sa taille maximale. Aux temps courts, le modèle surestime néanmoins la profondeur et la largeur du cratère, ce qui est cohérent avec la surestimation de a_0 et la sous-estimation a_1 (figure 3.12), et serait lié au développement au premier ordre en a_1 . Ces différences sont d'autant plus marquées dans le cas du modèle simplifié. Aux temps longs, le modèle dynamique complet prédit correctement la profondeur du cratère mais surestime sa largeur. Le modèle simplifié a par ailleurs tendance à sous-estimer la profondeur du cratère. Ces différences pourraient également être liées au développement au premier ordre en a_1 et à l'absence de degrés d'ordre supérieur dans le modèle.

Dans les deux versions du modèle, l'évolution des coefficients du potentiel de vitesse et de la forme du cratère est assez sensible aux conditions initiales. Une modification, même modérée, de la valeur de ces conditions est susceptible de conduire à une évolution radicalement différente des coefficients, qui s'écartent ainsi des données expérimentales. Cette sensibilité constitue une limitation inhérente à ce modèle dynamique, dans le sens où la prédiction de la dynamique de la cratérisation ne dépend pas que des paramètres de l'impact, mais aussi des conditions initiales. Une étude des conditions initiales en fonction des paramètres de l'impact, en particulier du nombre de Froude, est donc nécessaire mais ne sera pas traitée ici et pourra faire l'objet de travaux ultérieurs.

Dans l'ensemble, le modèle dynamique permet de prédire correctement les données expérimentales de vitesse et de forme du cratère. Une résolution utilisant un développement à des ordres supérieurs en a_1 serait néanmoins utile pour pouvoir prédire correctement la cratérisation lorsque le cratère est très aplati, en particulier au début de l'ouverture et à la fin de la fermeture de la cavité.

3.5 Conclusion et perspectives

Le champ de vitesse associé à la cratérisation est obtenu expérimentalement en utilisant une méthode de PIV autour du cratère. Ses composantes peuvent alors être analysées à l'aide



FIGURE 3.13 – Composante radiale u_r du champ de vitesse expérimental (a), reconstruit à partir du modèle dynamique complet (b), et du modèle dynamique simplifié (c), à différents moment de l'ouverture (i et ii) et de la fermeture (iii) du cratère. La vitesse et les longueurs sont normalisées respectivement par la vitesse d'impact U_i et le rayon de la goutte R_i .

 \mathfrak{S}



FIGURE 3.14 – Composante polaire u_{θ} du champ de vitesse expérimental (a), reconstruit à partir du modèle dynamique complet (b), et du modèle dynamique simplifié (c), à différents moment de l'ouverture et de la fermeture du cratère. La vitesse et les longueurs sont normalisées respectivement par la vitesse d'impact U_i et le rayon de la goutte R_i .



FIGURE 3.15 – Forme du cratère à différents temps de la phase d'ouverture de la cavité. Les lignes fines correspondent à une reconstruction à partir du modèle dynamique complet (a) et simplifié (b). Les lignes épaisses correspondent à la forme de la cavité déterminée à partir d'une expérience illuminée par l'arrière (Fr = 488 et $\rho_1/\rho_2 = 1$), dans des conditions similaires aux données de PIV (Fr = 444 et $\rho_1/\rho_2 = 1$).

d'une décomposition sur une base de polynômes de Legendre shiftés. L'écoulement, essentiellement potentiel, est dominé par les deux premiers degrés de la décomposition, à la fois pendant les phases d'ouverture et de fermeture du cratère. Bien qu'ils permettent d'obtenir l'évolution temporelle de la taille moyenne du cratère, les modèles publiés ne permettent pas d'expliquer correctement le champ de vitesse expérimental. Un modèle cinématique, utilisant un cratère hémisphérique, est donc présenté. Ce modèle permet d'expliquer les composantes radiale et polaire du champ de vitesse pendant la phase d'ouverture du cratère. Un modèle dynamique est ensuite utilisée pour prédire conjointement la forme du cratère et du champ de vitesse pendant les phases d'ouverture et de fermeture du cratère. Ce modèle, utilisant une équation de Bernoulli instationnaire, permet d'expliquer dans l'ensemble les observation expérimentales. Les perspectives de cette étude du champ de vitesse associé à la cratérisation incluent l'étude de l'évolution temporelle du modèle cinématique, avec en particulier l'évolution du facteur α . Les simplifications du modèle dynamique pourraient être assouplies, avec par exemple un développement à l'ordre supérieur de la forme du cratère, afin de prendre en compte sa forme aplatie au début de son ouverture et lors de son effondrement. Le modèle dynamique pourrait alors être utilisé pour modéliser la formation du pic central et de la corolle fluide au dessus du cratère.

L'influence du rapport de densité entre l'impacteur et la cible pourrait également être considérée afin d'expliquer l'influence de ce rapport sur la forme du cratère (chapitre 1). Une extension du modèle dynamique utilisant une couche mince autour de la cavité, correspondant au liquide dense de l'impacteur, est envisageable. Cela impliquerait une hypothèse sur la distribution de la couche dense autour de la cavité, l'écriture de deux conditions limites cinématiques aux interfaces air-impacteur et impacteur-cible et la résolution de l'équation de Bernoulli instationnaire dans les deux couches.

D'un point de vue géophysique, le modèle dynamique pourrait être utilisé pour modéliser la formation des éjectas lors de la phase d'excavation d'un impact planétaire. La composante polaire en z = 0 constitue en effet une condition initiale satisfaisante pour la trajectoire balistique des éjectas. Ce modèle dynamique pourrait remplacer le modèle cinématique empirique de Maxwell (1977), qui ne prédit par ailleurs pas le degré 1 de la composante radiale, mais qui est utilisé dans différents contextes relatifs aux éjectas (Barnhart et Nimmo, 2011; Kurosawa et Takada, 2019).

Enfin, la décomposition de la forme du cratère sur une base de polynômes de Legendre shiftés pourrait constituer une méthode plus générale pour décrire la forme des cratères sur les surfaces planétaires, actuellement modélisée empiriquement en terme de lois de puissance de la profondeur de la cavité (*e.g.* Melosh, 1989, 2011). Par ailleurs, une telle description pourrait être associée au modèle dynamique, permettant ainsi d'apporter des contraintes physiques sur la forme des cratères planétaires (*e.g.* Melosh, 1989, 2011). Cela pourrait lier dynamiquement la forme simple ou complexe des cratères, avec en particulier la présence d'un pic central, au paramètres de l'impacteur (taille, vitesse et éventuellement densité). Une telle relation nécessiterait cependant une modélisation de la rhéologie afin notamment de déterminer les conditions d'arrêt de la phase de modification du cratère.

3.A Équations du modèle dynamique

3.A.1 Modèle complet

Les équations du modèle dynamique complet (équation 3.32 projetées jusqu'à $l_{max} = 1$ et $n_{max} = 2$, au premier ordre en a_1 et en négligeant le terme de tension de surface si $n \ge 1$) s'écrivent sous la forme

$$a_0' = -\frac{\phi_0}{a_0^2} - \frac{\phi_1 a_1}{3a_0^4} + \frac{\phi_1}{a_0^3} + \frac{3\phi_2 a_1}{2a_0^5} + \mathcal{O}(a_1^2),$$
(3.37)

$$a_1' = \frac{2\phi_0 a_1}{a_0^3} + \frac{4\phi_1 a_1}{a_0^4} - \frac{\phi_1}{a_0^3} + \frac{9\phi_2 a_1}{10a_0^5} + \frac{9\phi_2}{4a_0^4} + \mathcal{O}(a_1^2), \tag{3.38}$$

pour la condition limite cinématique et

$$\begin{split} 0 &= \frac{\phi_0'}{a_0} - \frac{5\phi_0\phi_1a_1}{3a_0^6} + \frac{\phi_0\phi_1}{a_0^5} - \frac{9\phi_0\phi_2a_1}{2a_0^7} + \frac{\phi_0^2}{2a_0^6} - \frac{a_1\phi_1'}{3a_0^3} + \frac{\phi_1'}{2a_0^2} - \frac{63\phi_1\phi_2a_1}{10a_0^8} \\ &+ \frac{3\phi_1\phi_2}{2a_0^7} - \frac{3\phi_1^2a_1}{2a_0^7} + \frac{\phi_1^2}{a_0^6} - \frac{3a_1\phi_2'}{4a_0^4} - \frac{3\phi_2^2a_1}{a_0^9} + \frac{3\phi_2^2}{2a_0^8} - \frac{a_0}{2Fr} - \frac{a_1}{6Fr} \\ &+ \frac{a_0a_1}{Wea_0^3} + \frac{1}{Wea_0} + \mathcal{O}(a_1^2), \end{split}$$
(3.39)
$$0 &= -\frac{a_1\phi_0'}{a_0^2} - \frac{5\phi_0\phi_1a_1}{a_0^6} + \frac{\phi_0\phi_1}{a_0^5} - \frac{9\phi_0\phi_2a_1}{5a_0^7} + \frac{9\phi_0\phi_2}{4a_0^6} - \frac{2\phi_0^2a_1}{a_0^5} - \frac{a_1\phi_1'}{a_0^3} + \frac{\phi_1'}{2a_0^2} \\ &- \frac{147\phi_1\phi_2a_1}{10a_0^8} + \frac{27\phi_1\phi_2}{10a_0^7} - \frac{33\phi_1^2a_1}{5a_0^7} + \frac{3\phi_1^2}{4a_0^6} - \frac{3a_1\phi_2'}{10a_0^4} + \frac{3\phi_2'}{4a_0^3} - \frac{558\phi_2^2a_1}{35a_0^9} + \frac{9\phi_2^2}{8a_0^8} \\ &- \frac{a_0}{2Fr} - \frac{a_1}{2Fr} + \mathcal{O}(a_1^2), \end{aligned}$$
(3.40)
$$0 &= -\frac{10\phi_0\phi_1a_1}{3a_0^6} - \frac{9\phi_0\phi_2a_1}{a_0^7} + \frac{3\phi_0\phi_2}{4a_0^6} - \frac{2a_1\phi_1'}{3a_0^3} - \frac{27\phi_1\phi_2a_1}{2a_0^8} + \frac{3\phi_1\phi_2}{2a_0^7} - \frac{3\phi_1^2a_1}{a_0^7} \\ &+ \frac{\phi_1^2}{4a_0^6} - \frac{3a_1\phi_2'}{2a_0^4} + \frac{\phi_2'}{4a_0^3} - \frac{111\phi_2^2a_1}{14a_0^9} + \frac{69\phi_2^2}{56a_0^8} - \frac{a_1}{3Fr} + \mathcal{O}(a_1^2), \end{aligned}$$
(3.41)

pour l'équation de Bernoulli.

3.A.2 Modèle simplifié

Les équations du modèle dynamique simplifié (équation 3.32 projetées jusqu'à $l_{max} = 1$ et $n_{max} = 2$, au premier ordre en a_1 , en négligeant le terme de tension de surface et en supposant que $\phi_0 = 0$) s'écrivent sous la forme

$$a_0' = -\frac{\phi_1 a_1}{3a_0^4} + \frac{\phi_1}{a_0^3} + \frac{3\phi_2 a_1}{2a_0^5} + \mathcal{O}(a_1^2), \tag{3.42}$$

$$a_1' = \frac{4\phi_1 a_1}{a_0^4} - \frac{\phi_1}{a_0^3} + \frac{9\phi_2 a_1}{10a_0^5} + \frac{9\phi_2}{4a_0^4} + \mathcal{O}(a_1^2),$$
(3.43)

pour la condition limite cinématique et

$$0 = -\frac{a_1\phi_1'}{a_0^3} + \frac{\phi_1'}{2a_0^2} - \frac{147\phi_1\phi_2a_1}{10a_0^8} + \frac{27\phi_1\phi_2}{10a_0^7} - \frac{33\phi_1^2a_1}{5a_0^7} + \frac{3\phi_1^2}{4a_0^6} - \frac{3a_1\phi_2'}{10a_0^4} + \frac{3\phi_2'}{4a_0^3} - \frac{558\phi_2^2a_1}{35a_0^9} + \frac{9\phi_2^2}{8a_0^8} - \frac{a_0}{2Fr} - \frac{a_1}{2Fr} + \mathcal{O}(a_1^2),$$
(3.44)
$$0 = -\frac{2a_1\phi_1'}{3a_0^3} - \frac{27\phi_1\phi_2a_1}{2a_0^8} + \frac{3\phi_1\phi_2}{2a_0^7} - \frac{3\phi_1^2a_1}{a_0^7} + \frac{\phi_1^2}{4a_0^6} - \frac{3a_1\phi_2'}{2a_0^4} + \frac{\phi_2'}{4a_0^3} - \frac{111\phi_2^2a_1}{14a_0^9} + \frac{69\phi_2^2}{56a_0^8} - \frac{a_1}{3Fr} + \mathcal{O}(a_1^2),$$
(3.45)

pour l'équation de Bernoulli.

Conclusion et perspectives

Dans cette première partie, la phase d'impact entre un impacteur et une surface planétaire est étudiée à l'aide d'expériences analogues, du point de vue de la géométrie des cratères (chapitre 1), du mélange associé à l'impact (chapitre 2) et du champ de vitesse produit autour de la cavité pendant le processus de cratérisation (chapitre 3).

Le chapitre 1 s'intéresse expérimentalement à la géométrie des cratères pour obtenir des lois d'échelle reliant la taille maximale de la cavité, ainsi que son temps caractéristique de formation, aux paramètres de l'impact, en particulier sa densité, sa taille et sa vitesse. Ces lois d'échelle sont cohérentes avec les résultats de la littérature sur les impacts planétaires (*e.g.* Melosh, 1989), ce qui permet de justifier leur application au contexte de la différenciation des planètes telluriques. Ces lois d'échelle permettent d'obtenir une estimation de la taille de la région de l'océan de magma dans laquelle la phase métallique de l'impacteur est dispersée pendant l'impact. Cette dispersion est cruciale car elle participe, avec la formation et l'effondrement du jet central post-impact, à définir la taille initiale du thermique turbulent qui migrera ensuite vers le noyau (partie II). La taille initiale du thermique est nécessaire pour déterminer l'efficacité d'équilibrage thermique et chimique entre le métal des impacteurs et les silicates de l'embryon planétaire.

L'équilibrage post-impact dans le thermique turbulent (partie II) est précédé d'une phase de mélange pendant l'ouverture du cratère, puis pendant la formation et l'effondrement du jet central. Le chapitre 2 se focalise sur le mélange produit par une instabilité de Rayleigh-Taylor sphérique autour du cratère. Suite à l'impact, la décélération de la cavité est en effet susceptible de produire des panaches métalliques pénétrant dans l'océan de magma environnant. Les lois d'échelle obtenues expérimentalement sont extrapolées à l'équilibrage métal-silicate pendant un impact planétaire. Cela permet d'obtenir une estimation de l'efficacité d'équilibrage liée à l'instabilité de Rayleigh-Taylor pendant la phase d'impact.

La formation d'un cratère d'impact planétaire est par ailleurs toujours associée à l'excavation d'un volume de matière, principalement constitué par la cible, sous la forme d'éjectas. Ces éjectas peuvent être à l'état liquide ou vapeur dans le cas de grands impacteurs, en particulier lors de la différenciation de la planète, ou alors à l'état solide dans le cas de petits impacteurs. Quelque soit l'état physique des éjectas, la modélisation du champ de vitesse associé à la formation du cratère est nécessaire pour pouvoir estimer les trajectoires balistiques des éjectas. Le chapitre 3 s'intéresse donc au champ de vitesse expérimental, produit dans des expériences analogues d'impact. Ces champs de vitesse peuvent en particulier être prédit par un modèle dynamique, incluant une composante polaire, à partir de laquelle il sera possible, à terme, d'obtenir un modèle balistique de formation des éjectas.

Au delà de ces expériences, une perspective est d'utiliser des simulations numériques afin de modéliser certains effets inhérents aux impacts planétaires, mais qu'il est difficile d'obtenir expérimentalement. Pour cela, une comparaison¹ entre les expériences en laboratoire et les

^{1.} Des travaux de comparaisons sont actuellement dirigés par Maylis Landeau [IPGP] entre des expériences



Experimental

FIGURE I.3 – Illustration de la comparaison entre les expériences d'impact de gouttes (Lherm <u>et al.</u>, 2020) et de volumes liquides centimétriques (Landeau <u>et al.</u>, 2021), ainsi que de simulations numériques lagrangiennes (Nakajima <u>et al.</u>, 2020) et eulériennes (Kendall et Melosh, 2016).

simulations numériques est d'abord nécessaire afin de caractériser les avantages et les limites des différentes méthodes. L'objectif de cette comparaison est de mettre en relation les expériences d'impacts de gouttes millimétriques et de volumes liquides centimétriques, avec des

de gouttes (Victor Lherm [ENSL] et Renaud Deguen [UGA]), des expériences de volumes liquides centimétriques (Maylis Landeau [IPGP]), des simulations numériques eulériennes (Kai Wüennemann [MFN]) et des simulations numériques lagrangiennes (Miki Nakajima [University of Rochester]).

simulations numériques utilisant des hydrocodes eulériens, ainsi que des codes lagrangiens, comme l'hydrodynamique des particules lissées, ou *smoothed-particle hydrodynamics* (SPH) en anglais (figure I.3). Cette comparaison porte en particulier sur différentes quantités en relation avec la dispersion et le mélange de la phase métallique dans l'océan de magma. À terme, les propriétés géométriques (évolution de la taille et de la forme des cratères), cinématiques (champ de vitesse associé à la cratérisation) et d'homogénéisation (formation de la zone de mélange autour du cratère et mélange produit par la formation et l'effondrement du jet central) doivent être comparées entre les différentes méthodes. Après validation des simulations numériques, différents effets peuvent être étudiés, comme par exemple l'effet de la compressibilité sur la phase d'ouverture du cratère, avec la propagation d'une onde de choc et des processus de fusion partielle, l'effet de l'angle d'impact, avec une asymétrie de la géométrie du cratère, l'effet d'un impacteur différencié, avec un noyau métallique séparé du manteau silicaté, ou encore l'effet de la pression et de la température, pouvant affecter la flottabilité et la miscibilité de la phase métallique.

Annexes

I.A Propriétés physiques des sels en solution aqueuse

La figure I.4 présente la viscosité dynamique et l'indice de réfraction en fonction de la masse volumique de solutions aqueuses de NaCl, NaI et CsCl. L'utilisation du CsCl est privilégiée dans les chapitres 1 à 3 car il permet de minimiser les contrastes de viscosité et d'indice de réfraction entre le liquide de la goutte et le liquide ambiant.



FIGURE I.4 – Viscosité dynamique (a) et indice de réfraction (b) de solutions aqueuses de NaCl (Haynes, 2016), CsCl (Haynes, 2016) et NaI (Bai et Katz, 2014), en fonction de leur masse volumique.

Dans le chapitre 5, l'utilisation du NaI et du CsCl est impossible avec les colorants fluorescents comme la Rhodamine 6G, car la présence de ces sels favorise la formation d'agrégats réduisant l'intensité de la fluorescence (*e.g.* Fischer et Georges, 1998). Dans les gammes de concentration en sels utilisés dans les expériences, l'intensité de la fluorescence devient indépendante de la concentration en colorant, ce qui ne permet plus de relier l'intensité à la concentration. Les expériences sont donc réalisées avec du NaCl qui n'atténue pas la fluorescence.

I.B Mesure des tensions de surface

La tension de surface σ des solutions aqueuses de CsCl est déterminée en utilisant la méthode de la goutte pendante (*e.g.* Daerr et Mogne, 2016). Cette dernière utilise l'équilibre de pression local contrôlé par l'équation de Laplace-Young $\Delta p(z) = \sigma \bar{\kappa}(z)$ à une certaine distance z de l'extrémité inférieure de la goutte, où Δp est la différence de pression de part et d'autre de l'interface et $\bar{\kappa}$ est son rayon de courbure moyen. En exprimant le rayon de courbure en fonction de la position de la surface de la goutte en coordonnées cylindriques (R(s), Z(s)), où s est l'abscisse curviligne des ces coordonnées le long de l'interface, l'équation de Laplace-Young permet d'obtenir l'équation de la forme de la goutte

$$-\sin\psi = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}s} + \frac{\sin\psi}{R}\right) \tag{I.4}$$

où ψ est l'angle entre le plan tangent à l'interface et le l'horizontal. Les conditions limites, définies à l'extrémité inférieure de la goutte, sont $\psi(0) = 0$ et $\psi'(0) = l_c/r_0$, où l_c est la longueur capillaire de la goutte et r_0 est le rayon de courbure à l'extrémité inférieure.

L'intégration numérique de cette équation donne la forme de la goutte qui peut ensuite être comparée aux données expérimentales (figure I.5a). Un ajustement par la méthode des moindres carrés permet ainsi d'obtenir la longueur capillaire et d'en déduire la tension de surface avec

$$\sigma = \Delta \rho g l_c^2, \tag{I.5}$$

où g est l'accélération de la gravité et $\Delta\rho$ est la différence de densité entre l'intérieur et l'extérieur de la goutte.



FIGURE I.5 – (a) Image de goutte pendante. La ligne rouge correspond à la forme utilisée pour calculer la tension de surface (équation I.4). (b) Tension de surface σ en fonction de la densité ρ_1 du fluide de la goutte. La tension de surface de la solution aqueuse de CsCl est mesurée avec la méthode de la goutte pendante, tandis que celle de la solution eau-éthanol est calculée avec les données de Khattab et al. (2012). La ligne continue et les lignes pointillées correspondent respectivement à une régression linéaire sur les données de solution aqueuse de CsCl et à l'intervalle de confiance correspondant, estimé pour $\pm 1\sigma$.

La méthode de la goutte pendante est appliquée aux solutions aqueuses de CsCl pour des densités dans l'intervalle $\rho_1 = 998 - 1770 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. Pour chaque solution, la formation de gouttes formées à l'orifice d'un tube de 1.85 mm de diamètre est enregistrée. L'algorithme de Daerr et Mogne (2016) est ensuite appliqué à cette série d'images, ce qui permet d'obtenir une valeur moyenne de la tension de surface assortie d'une erreur caractéristique.

La figure I.5b montre les résultats obtenus pour les solutions aqueuses de CsCl avec la méthode de la goutte pendante. La tension de surface augmente avec la concentration en CsCl, mais la différence entre les solutions les plus concentrées et l'eau pure n'excède pas 20%. La tension de surface semble évoluer linéairement avec la densité, avec une droite de la forme

$$\sigma = a\rho_1 + b,\tag{I.6}$$

où $a = (1.8 \pm 0.2) \times 10^{-5}$ et $b = 0.052 \pm 0.003$. Les tensions de surface des solutions aqueuses de CsCl utilisées dans cette partie, et entrant par exemple dans la définition du nombre de Bond, correspondent à cette loi expérimentale.

Pour le mélange eau-éthanol, les tensions de surface mesurées par Khattab et al. (2012) sont également représentées sur la figure I.5b. La valeur $\sigma = 22.9 \pm 0.8 \text{ mJ} \cdot \text{m}^{-2}$, correspondant à l'éthanol pur, est retenue pour les expériences utilisant de l'éthanol comme liquide de la goutte.

I.C Mesure du rayon des gouttes

Dans les expériences utilisant la nappe laser (chapitres 2 et 3), la mesure directe du rayon des gouttes est impossible. Il est donc nécessaire de calibrer la taille des gouttes, en fonction des propriétés du fluide utilisé. Pour chaque catégorie d'expérience (éthanol, eau, solutions aqueuse de CsCl), la taille des gouttes est calculée à partir de mesures de masse. Cela permet de prédire une valeur pour le rayon des gouttes dans toutes les configurations expérimentales.

La figure I.6a montre un exemple de mesure de masse sur des gouttes utilisant une solution aqueuse de CsCl de densité $1202 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. Les mesure de masse sont effectuées avec une balance de précision sur environ 25 gouttes, ce qui permet d'obtenir une valeur moyenne assortie d'une erreur correspondant à un écart-type. Le rayon correspondant est ensuite calculé en supposant que la goutte est sphérique.

La figure I.6b montre les résultats de ces mesures de masse (en bleu) en fonction de la masse volumique du fluide utilisé (éthanol, eau, solutions aqueuse de CsCl). Ces mesures sont comparées à des mesures directes du rayon sur des images de gouttes (en orange). Dans le cas de l'éthanol ($\rho_1 = 790 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$), les mesures de masse donnent un valeur du rayon très proche des mesures directes (0.4%). Dans le cas de l'eau et des solutions aqueuses de CsCl ($\rho_1 \ge 998 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$), les mesures directes du rayon sont systématiquement supérieures à celles issues des mesures de masse (2%). Cela s'explique par une surestimation du rayon moyen dans le cas des mesures directes en raison du léger aplatissement vertical des gouttes.

Le rayon moyen dépend de la tension de surface de la goutte, qui est associée à une force s'opposant à son détachement de l'embout, ainsi que de la densité de la goutte, qui augmente son poids et favorise donc son détachement. La tension de surface de l'éthanol étant plus faible que celle de l'eau et des solutions aqueuses de CsCl (figure I.5b), cela explique un rayon moyen plus petit pour les expériences utilisant de l'éthanol. Pour les expériences utilisant de l'eau et des solution aqueuses de CsCl, c'est principalement l'augmentation de la masse volumique qui est responsable de la diminution du rayon moyen. La tension de surface augmentant avec la densité des solutions, elle contribue à réduire la taille des gouttes, mais ce facteur est secondaire car la tension de surface varie peu (environ 20%).

Dans les expériences, le rayon moyen R_i de la goutte est calculé en utilisant les mesures de masse. Pour l'éthanol, le rayon moyen utilisé est $R_i = 2.01 \pm 0.01$ mm Pour celles utilisant de l'eau et des solution aqueuses de CsCl, le rayon est calculé à partir de la densité mesurée,



FIGURE I.6 – (a) Mesure de masse sur des gouttes produites avec l'embout en plastique de 4.7 mm, en utilisant une solution aqueuse de CsCl ($\rho_1 = 1202 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$). La masse mesurée est $m_i = 83.1 \pm 0.2 \text{ mg}$, ce qui correspond à un rayon égal à $R_i = 2.546 \pm 0.002 \text{ mm}$. (b) Rayon des gouttes produites avec l'embout en plastique de 4.7 mm, en utilisant de l'éthanol ($\rho_1 = 790 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$), de l'eau ($\rho_1 = 998 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$) et une solution aqueuse de CsCl ($\rho_1 = 1200 - 1800 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$). Les données issues des mesures indirectes de masse (en bleu) sont comparées avec des mesures directes (en orange) du rayon. La ligne continue et les lignes pointillées correspondent respectivement à une loi de puissance ajustée aux données de solution aqueuse de CsCl et à l'intervalle de confiance correspondant, estimé pour $\pm 1\sigma$.

en utilisant une loi de puissance empirique de la forme

$$R_i = a\rho_1^b,\tag{I.7}$$

où $a = 0.021 \pm 0.001$ et $b = -0.29 \pm 0.01$.

I.D Mesure des vitesses d'impact

Les expériences pour lesquelles l'illumination est basée sur l'utilisation d'une nappe laser (chapitres 2 et 3) ne permettent pas une mesure directe de la vitesse d'impact des gouttes. Un modèle de chute libre avec frottement quadratique est donc utilisé pour calculer la vitesse d'impact. Le modèle est validé sur des mesures de vitesse d'impact utilisant une illumination par l'arrière (chapitre 1).

Le principe fondamental de la dynamique appliqué à une goutte sphérique de masse m_i , de rayon R_i et de masse volumique ρ_1 , chutant à une vitesse u dans l'air s'écrit

$$m\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = mg' - \frac{1}{2}c_d\rho_a Su^2,\tag{I.8}$$

où $S = \pi R_i^2$ est la section droite de la goutte, $c_d \simeq 0.5$ (e.g. Clift et al., 1978) est le coefficient de traînée, et $g' = g(1 - \frac{\rho_a}{\rho_1})$ dépend de l'accélération de la gravité g et de la masse volumique de l'air $\rho_a = 1.204 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$. Les frottements fluides sont modélisés par un terme quadratique. Il est possible d'écrire cette équation en fonction de la distance z parcourue par la goutte au

cours de sa chute

$$\frac{\mathrm{d}u^2}{\mathrm{d}z} = 2g' \left[1 - \left(\frac{u}{u_\infty}\right)^2 \right],\tag{I.9}$$

avec $u_{\infty} = \sqrt{\frac{8}{3} \frac{\rho_1}{\rho_a} \frac{g'}{c_d}} R_i$. En prenant u(0) = 0 comme condition limite, la solution de cette équation différentielle est

$$u(z) = u_{\infty}\sqrt{1 - e^{-z/l}},$$
 (I.10)

avec $l = \frac{1}{2}u_{\infty}^2/g'$. Les vitesses d'impact sont obtenues à partir de ce modèle en mesurant la hauteur de chute de chaque goutte et en calculant la vitesse correspondante avec l'équation I.10.

La figure I.7a montre les vitesses d'impact expérimentales U_i obtenues avec une illumination par l'arrière (chapitre 1) en fonction des vitesses calculées avec le modèle (équation I.10). Le modèle donne des valeurs très proches des mesures expérimentales pour toutes les densités utilisées pour le fluide de la goutte, ce qui valide les hypothèses de frottements quadratiques et de goutte sphérique. La figure I.7b montre les vitesses d'impact prédites par le modèle en fonction de la hauteur de chute de la goutte pour les différentes densités. Ce modèle prédictif est utilisé dans les chapitres 2 et 3 pour calculer la vitesse d'impact.



FIGURE I.7 – (a) Vitesse d'impact U_i mesurée expérimentalement en fonction de la vitesse calculée avec le modèle de chute libre. (b) Vitesse d'impact calculée avec le modèle de chute libre en fonction de la hauteur de chute. Le modèle de chute libre utilise l'équation I.10.

Deuxième partie Phase post-impact

Introduction

La seconde partie s'intéresse à la séparation métal-silicate pendant la phase post-impact, c'est à dire pendant la migration de la phase métallique dans l'océan de magma sous la forme d'un thermique turbulent. Cette partie considère en particulier l'influence de l'étirement et de la déformation de la phase métallique sur l'homogénéisation entre métal et silicates. A l'aide de simulations numériques, le chapitre 4 s'intéresse d'abord à la cinématique de l'équilibrage en considérant indépendamment les briques élémentaires de la séquence d'homogénéisation entre métal et silicates (lamelle, ligament, goutte). La dynamique de l'étirement et de l'équilibrage est ensuite étudiée directement avec des simulations numériques 2D de thermiques turbulents. La dynamique de l'écoulement d'un thermique turbulent, l'étirement associé, ainsi que le mélange qui en résulte, sont enfin étudiés dans le chapitre 5 en utilisant des expériences analogues en laboratoire.

Ce chapitre introductif présente d'abord les processus de séparation de la phase métallique dans un thermique turbulent. Il s'intéresse ensuite à l'équivalence entre problèmes de transport chimique et thermique. Puis, il présente les nombres sans dimension qui interviennent lors de la séparation métal-silicate. Enfin, il définit les notions de brassage (*stirring*) et de mélange (*mixing*) cruciales pour comprendre les processus d'homogénéisation entre métal et silicates.

Séparation métal-silicate dans un thermique turbulent

Au cours de la différenciation des planètes telluriques, il est maintenant clair que les planétésimaux ont migré vers le noyau dans un océan de magma, local ou global, en raison de l'énergie colossale libérée lors des impacts (Tonks et Melosh, 1993). Les mécanismes de séparation entre la phase métallique apportée par les impacteurs et la phase silicatée de l'océan de magma déterminent l'efficacité du fractionnement chimique et du partitionnement thermique entre métal et silicates, avec des conséquences décisives sur l'évolution de la planète (*e.g.* Rubie et al., 2015). La phase métallique évolue dans un océan de magma de faible viscosité, de l'ordre de $10^{-2} - 1$ Pa · s, associé à une convection extrêmement vigoureuse avec un nombre de Rayleigh de l'ordre de Ra = $10^{27} - 10^{32}$ (Solomatov, 2015).

Si les impacteurs sont indifférenciés, ce qui est probablement le cas au début de l'accrétion (Chambers, 2010), la phase métallique est constituée d'une constellation de particules submillimétriques, similaire à un matériau chondritique, qui tendent à s'agglomérer sous l'effet de leur tension de surface. A la fin de l'accrétion, les impacteurs se différencient (Kleine <u>et al.</u>, 2002; Scherstén <u>et al.</u>, 2006) et la phase métallique prend la forme d'un noyau compact pouvant mesurer plusieurs centaines de kilomètre dans le cas des impacts géants. Ces volumes de métal se dispersent sous l'effet d'instabilités hydrodynamiques (Kelvin-Helmholtz et Rayleigh-Taylor en particulier), formant ainsi des structures de plus petite taille. Dans les deux cas, la phase métallique converge vers la formation de gouttes de métal dont la taille est prédite par l'équilibre entre la tension de surface et l'inertie de la phase métallique (Stevenson, 1990; Karato et Murthy, 1997; Rubie et al., 2003), c'est-à-dire par le nombre de Weber

We =
$$\frac{\Delta \rho dv}{\gamma}$$
, (II.1)

où $\Delta \rho$ est la différence de densité entre métal et silicates, d est le diamètre des particules métalliques, v est la vitesse de sédimentation des particules et γ est la tension de surface. Lorsque We est plus petit que 10, les gouttes métalliques peuvent s'agglomérer, mais lorsque We est plus grand que 10, elles se fragmentent. Par conséquent, les gouttes de métal sont stables lorsque We $\simeq 10$. En prenant une tension de surface $\gamma = 1 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2}$, Rubie et al. (2003) estiment que les gouttes sont stables pour un diamètre $d \simeq 1 \text{ cm}$ et une vitesse $v \simeq 0.5 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$.

Les mécanismes physiques impliqués dans la transition entre des volumes kilométriques et des gouttes centimétriques, où l'homogénéisation métal-silicate est efficace, sont étudiés depuis plusieurs décennies (Rubie et al., 2015). Le mécanisme proposé classiquement est celui d'une « pluie de fer » ("iron rain" en anglais) correspondant aux gouttes métalliques issues de la fragmentation, c'est-à-dire un écoulement composé de gouttes dispersées dans l'océan de magma (e.g. Stevenson, 1990). Karato et Murthy (1997) s'intéressent à la distribution en taille de ces gouttes et démontrent son rôle crucial concernant l'équilibrage métal-silicate. A l'aide d'un modèle analytique, Rubie et al. (2003) avancent un équilibrage chimique très efficace, après une distance seulement égale à quelques fois le diamètre initial du volume métallique. Tous les planétésimaux, à l'exception des impacts géants, auraient subit une homogénéisation efficace. Cet équilibrage très efficace est en accord avec l'étude de Ichikawa et al. (2010), où la pluie de fer est modélisée par des simulations numériques directes. Ils obtiennent un équilibrage thermique majoritairement contrôlé par l'advection et une homogénéisation très efficace, après seulement 100 m dans parcouru dans l'océan de magma. Les simulations numériques de Samuel (2012) confirment cet équilibrage efficace. Le volume initial de métal, si il est plus petit que la taille typique de l'océan de magma, se fragmente progressivement en diapirs de plus en plus petits, jusqu'à atteindre une taille inférieur à 20 cm, pour laquelle l'équilibre chimique et thermique est rapidement réalisé.

Une fois fragmentée en gouttes centimétriques, la phase métallique s'équilibre rapidement avec l'océan de magma. La possibilité de cette fragmentation, qui dépend des processus physiques régissant l'évolution de la phase métallique, reste néanmoins une question ouverte. En particulier, l'absence de fragmentation de la phase métallique diminuerait considérablement l'efficacité de l'équilibrage. Le scénario de la « pluie de fer » est généralement associé à une vision laminaire de la séparation métal-silicate dans l'océan de magma. La fin de l'accrétion, qui représente une part significative de la masse de la Terre, voit la libération des noyaux des planétésimaux dans des conditions extrêmement turbulentes. La phase métallique subit des fluctuations de vitesses significatives à l'origine de son érosion et de sa déformation. Les simulations d'Ichikawa <u>et al.</u> (2010) montrent que les gouttes les plus petites sont entraînés vers le haut par le reflux, ce qui affecte la dynamique de sédimentation. En utilisant des modèles analytiques basés sur l'érosion de particules de fer sphériques par des instabilités hydrodynamiques, Dahl et Stevenson (2010) suggèrent que seulement 1 à 20% du noyau terrestre s'est équilibré avec le manteau en raison de la fragmentation et de l'homogénéisation incomplète des noyaux dont la taille est supérieure à 10 km.

Dans leur étude expérimentale, Deguen <u>et al.</u> (2011) proposent l'idée d'une migration de la phase métallique sous la forme d'un thermique turbulent immiscible. Cet écoulement diphasique a pour origine la différence de densité entre les phases, avec des silicates moins denses que le métal. Le thermique déforme et étire vigoureusement la phase métallique qui finit par se fragmenter en gouttes. Le fluide ambiant est progressivement incorporé au thermique par entraînement turbulent, ce qui provoque la dilution progressive du thermique par un flux entrant de fluide ambiant (Morton et al., 1956; Turner, 1986). La dynamique du thermique immiscible est équivalente à celle d'un thermique miscible dans les mêmes conditions, le concept d'entraînement turbulent développé initialement pour des thermiques miscibles est donc applicable (Deguen et al., 2014; Landeau et al., 2014). Il n'y a pas de différence de vitesse entre les deux phases, la croissance du rayon moyen du thermique est bien liée à l'entraînement du fluide ambiant qui se déplace ensuite avec la phase métallique. Le mélange entre les phases se fait alors en deux étapes, avec d'abord une phase d'entraînement turbulent dans l'océan de magma, puis un impact secondaire à la surface de la partie solide du manteau qui disperse un peu plus la phase métallique. Ces expériences montrent qu'un impacteur de petite taille s'équilibrera dans l'océan de magma, tandis que le noyau d'un impacteur de grande taille restera en déséquilibre chimique et thermique avec la phase silicatée. La grande diversité en taille, vitesse et forme des gouttes de la phase métallique provoque la mise en place d'une dynamique interne au thermique turbulent, avec la surimposition d'événements de fragmentation et de coalescence (Wacheul et al., 2014). Les expériences de Wacheul et Le Bars (2018) confirment la pertinence de ce modèle de thermique turbulent par rapport au modèle classique de la « pluie de fer ». L'efficacité d'équilibrage dépend de la taille initiale du thermique et de la viscosité du fluide ambiant. La taille initiale du thermique est donc directement contrôlée par la dispersion de la phase métallique au moment de l'impact à la surface de l'océan de magma (partie I). Cette dispersion augmente significativement l'homogénéisation métal-silicate (Kendall et Melosh, 2016), en particulier à cause de la formation et de l'effondrement du jet central suivant la fermeture du cratère (Landeau et al., 2021), et du mélange provoqué par une instabilité de Rayleigh-Taylor sphérique lors de l'ouverture de la cavité (Lherm et al., 2020).

Un équilibrage métal-silicate efficace ne requiert cependant pas nécessairement une fragmentation de la phase métallique en des structures centimétriques. Les expériences de Deguen <u>et al.</u> (2014) montrent en effet que l'élongation de la phase métallique dans le thermique turbulent permet d'augmenter la surface d'échange entre les phases. Avec ce mécanisme, un impacteur de petite taille pourrait s'équilibrer efficacement, mais pas un impacteur dont la taille approche celle de l'océan de magma. C'est en particulier cette influence de la déformation et de l'élongation de la phase métallique sur l'équilibrage qui sera étudiée numériquement et expérimentalement dans les chapitres 4 et 5.

Équivalence entre échanges chimiques et thermiques

Dans cette partie, les propriétés physico-chimiques et les paramètres associés à la phase métallique migrant vers le noyau en formation sont notées avec un indice i = 1, tandis que ceux associés à l'océan de magma silicaté sont notés avec l'indice i = 2. La table II.1 présente les propriétés physico-chimiques typiques de ces deux phases (*e.g.* Solomatov, 2015).

Dans le cadre de l'approximation de Boussinesq et en absence de sources de chaleur internes (chauffage radioactif ou chaleur latente), l'évolution de la température T_i et de la concentration C_i dans chacune des phases est contrôlée par deux équations de transport dont les formes sont identiques. En terme de mathématiques, la seule différence entre les problèmes de transferts thermiques et chimiques est liée à la condition limite à l'interface métal-silicate. Pour la température, cette condition limite dépend de la conductivité thermique λ_i ,

$$T_1 = T_2, \tag{II.2}$$

$$\lambda_1 \nabla T_1 \cdot \mathbf{n} = \lambda_2 \nabla T_2 \cdot \mathbf{n}. \tag{II.3}$$

	Phase silicatée	Phase métallique	Unité
Densité, ρ_i	4×10^3	7.8×10^3	${ m kg} \cdot { m m}^{-3}$
Viscosité cinématique, ν_i	2.5×10^{-5}	1.3×10^{-6}	$\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$
Viscosité dynamique, η_i	10^{-1}	10^{-2}	$Pa \cdot s$
Dilatation thermique, α_i	5×10^{-5}	10^{-5}	K^{-1}
Capacité thermique massique, c_{p_i}	10^{3}	5×10^2	$\mathbf{J}\cdot\mathbf{kg}^{-1}\cdot\mathbf{K}^{-1}$
Conductivité thermique, λ_i	4	100	$\mathbf{W}\cdot\mathbf{m}^{-1}\cdot\mathbf{K}^{-1}$
Diffusivité thermique, κ_i	10^{-6}	10^{-5}	$\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$
Coefficient de diffusion, κ^c_i	10^{-9}	10^{-9}	$\mathrm{m}^2\cdot\mathrm{s}^{-1}$
Tension de surface, γ	0.5	0.5	${ m J}\cdot{ m m}^{-2}$

TABLE II.1 – Propriétés physico-chimiques typiques de la phase métallique et de la phase silicatée lors de la séparation métal-silicate dans un océan de magma. Adapté d'après Solomatov (2015).

Pour la concentration, elle dépend du coefficient de diffusion κ_i^c et du coefficient de partage $D_{1/2}$ entre les deux phases,

$$D_{1/2} = \frac{C_1}{C_2},$$
(II.4)

$$\kappa_1^c \nabla C_1 \cdot \mathbf{n} = \kappa_2^c \nabla C_2 \cdot \mathbf{n}, \qquad (\text{II.5})$$

Dans les deux cas, n est le vecteur unitaire normal à l'interface dirigé vers la phase 2.

Les équations II.3 et II.5 traduisent respectivement la continuité du flux de masse et du flux thermique à l'interface. La température est continue à travers l'interface, mais la concentration ne l'est pas. Les deux problèmes peuvent cependant être rendus mathématiquement équivalents en introduisant une nouvelle variable χ_i définie comme

$$\chi_i = T_i \quad \text{ou} \quad \chi_i = \frac{C_i}{D_{1/2}^{\delta_{i1}}},\tag{II.6}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Général	χ_i	K_i	k_i	q_i
Thermique	T_i	κ_i	λ_i	$\rho_i c_{p_i}$
Chimique	$C_i/D_{1/2}^{\delta_{i1}}$	κ_i^c	$\kappa_i^c D_{1/2}^{\delta_{i1}}$	$D_{1/2}^{\delta_{i1}}$

TABLE II.2 – Correspondance entre cas thermique et chimique. Le champs scalaire χ_i est associé à une diffusivité modifié K_i et à une conductivité modifié k_i dans chaque phase $i. q_i$ est également défini comme le rapport k_i/K_i . δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

Plutôt que de considérer séparément les problèmes de transferts thermiques et chimiques, nous utilisons le champs scalaire χ_i dont l'évolution est contrôlée par l'équation d'advectiondiffusion

$$\frac{\mathrm{D}\chi_i}{\mathrm{D}t} = K_i \nabla^2 \chi_i,\tag{II.7}$$

où $\frac{D\bullet}{Dt} = \frac{\partial\bullet}{\partial t} + u \cdot \nabla \bullet$ est la dérivée lagrangienne et u est le vecteur vitesse. Les conditions limites sont alors

$$\chi_1 = \chi_2, \tag{II.8}$$

$$k_1 \nabla \chi_1 \cdot \mathbf{n} = k_2 \nabla \chi_2 \cdot \mathbf{n}, \tag{II.9}$$

à l'interface métal-silicates. χ_i est alors associé à un coefficient de diffusion K_i , qui correspond à la diffusion thermique κ_i ou à la diffusion chimique κ_i^c , et à une conductivité k_i , égale à λ_i dans le cas thermique et à $D_{1/2}^{\delta_{i1}}\kappa_i^c$ dans le cas chimique. Le rapport $q_i = k_i/K_i$ est égal à $\rho_i c_{p_i}$ dans le cas thermique, dépendant ainsi de la densité ρ_i et de la capacité thermique massique c_{p_i} , et à $D_{1/2}^{\delta_{i1}}$ dans le cas chimique. La correspondance entre les propriétés de χ_i et leur équivalent thermique et chimique est donnée dans la table II.2.

Nombres sans dimension

La dynamique de l'écoulement d'un volume de métal migrant vers le noyau dans l'océan de magma dépend de l'échelle spatiale considérée. Considérons d'abord les grandes échelles avec un volume de métal initialement sphérique (figure II.1a). Le diamètre et la vitesse de ce volume sont respectivement notées s_0 et U. La densité, la viscosité cinématique et le coefficient de diffusion (chimique ou thermique) sont respectivement notés ρ_i , ν_i et K_i , dans la phase métallique (i = 1) et la phase silicatée (i = 2). $\Delta \rho = \rho_1 - \rho_2$ est définie comme la différence entre la densité de la phase métallique et de la phase silicatée. La tension de surface entre les deux phases est notée γ et l'accélération de la gravité g.

Les dix grandeurs physiques qui caractérisent le problème comportent trois unités fondamentales. Le théorème de Vaschy-Buckingham prédit donc que la dynamique de l'écoulement est contrôlée par un ensemble de sept nombres sans dimension indépendants, un des choix possibles étant

$$\operatorname{Re}_{1} = \frac{Us_{0}}{\nu_{1}}, \quad \operatorname{Pe}_{1} = \frac{Us_{0}}{K_{1}}, \quad \operatorname{We}_{1} = \frac{\rho_{1}U^{2}s_{0}}{\gamma}, \quad \operatorname{Bo} = \frac{\Delta\rho g s_{0}^{2}}{\gamma}, \quad \frac{\rho_{1}}{\rho_{2}}, \quad \frac{\nu_{1}}{\nu_{2}}, \quad \frac{K_{1}}{K_{2}}, \quad \text{(II.10)}$$

où le nombre de Reynolds $\rm Re_1$ compare l'inertie aux forces visqueuses, le nombre de Péclet $\rm Pe_1$ compare le transport par advection par rapport au transport par diffusion, le nombre de Weber $\rm We_1$ compare l'inertie à la tension de surface, et le nombre de Bond Bo compare la flottabilité à la tension de surface. Un nombre d'Ohnesorge diffusif, égal à $\sqrt{\rm We_1}/\rm Pe_1$, est également utilisé

$$Oh_{\kappa_1} = \frac{K_1 \sqrt{\rho_1}}{\sqrt{\gamma s_0}}.$$
(II.11)

Ce dernier a la même forme que le nombre d'Ohnesorge classique, $Oh = \nu_1 \sqrt{\rho_1} / \sqrt{\gamma s_0}$, sauf qu'il compare la tension de surface à la diffusion chimique ou thermique K_1 et non à la diffusion de quantité de mouvement ν_1 .

Pendant l'écoulement post-impact, l'écoulement est initialement influencé par la phase d'impact avec une vitesse initiale dépendant des conditions d'impact (Kendall et Melosh, 2016; Landeau et al., 2021). Après un certain temps, l'effet de l'impact sur la dynamique de l'écoulement se dissipe et la migration du volume de métal apporté par l'impacteur se retrouve progressivement contrôlée par la flottabilité de la phase métallique. Dans ce cas, une échelle caractéristique pour la vitesse globale du volume de métal est donnée par $U \sim \sqrt{\frac{\Delta \rho}{\rho_1} g s_0}$, ce



FIGURE II.1 – Schéma des géométries impliquées dans la séparation métal-silicate dans un océan de magma en fonction de l'échelle spatiale considérée. (a) A grande échelle, un volume de métal liquide initialement sphérique, de diamètre s_0 , de masse volumique ρ_1 , de viscosité ν_1 et de diffusivité (chimique ou thermique) K_1 , migre vers le noyau à une vitesse U, dans un liquide silicaté de masse volumique $\rho_2 < \rho_1$, de viscosité ν_2 et de diffusivité K_2 . La tension de surface entre les deux phases est notée γ et l'accélération de la gravité g. (b) Le volume de métal, si il est suffisamment grand, est susceptible de se déformer et d'être étiré (Deguen et al., 2014) en des structures à petites échelles d'épaisseur s_0 , dont le taux d'étirement est noté $\dot{\epsilon}$.

qui donne

$$\operatorname{Re}_{1} = \sqrt{\frac{\Delta\rho}{\rho_{1}} \frac{gs_{0}^{3}}{\nu_{1}^{2}}}, \quad \operatorname{Pe}_{1} = \sqrt{\frac{\Delta\rho}{\rho_{1}} \frac{gs_{0}^{3}}{K_{1}^{2}}}, \quad \operatorname{We}_{1} = \operatorname{Bo} = \frac{\Delta\rho gs_{0}^{2}}{\gamma}, \quad \frac{\rho_{1}}{\rho_{2}}, \quad \frac{\nu_{1}}{\nu_{2}}, \quad \frac{K_{1}}{K_{2}}. \quad \text{(II.12)}$$

Suite à un impact planétaire, le volume de métal est suffisamment grand pour que son inertie dépasse les forces de tension de surface qui tendent à le maintenir sphérique (We₁ \gg 1), ce qui conduit à la déformation de la phase métallique et à son étirement local (Deguen <u>et al.</u>, 2014), à petites échelles (figure II.1b). En considérant une portion de phase métallique étirée, de taille caractéristique s_0 , avec un taux d'étirement $\dot{\epsilon}$, la vitesse caractéristique d'étirement de la phase métallique est de l'ordre de $U \sim \dot{\epsilon}s_0$, ce qui permet de définir un second jeu de nombres sans dimension,

$$\operatorname{Re}_{1} = \frac{s_{0}^{2}\dot{\epsilon}}{\nu_{1}}, \quad \operatorname{Pe}_{1} = \frac{s_{0}^{2}\dot{\epsilon}}{K_{1}}, \quad \operatorname{We}_{1} = \frac{\rho_{1}s_{0}^{3}\dot{\epsilon}^{2}}{\gamma}, \quad \operatorname{Bo} = \frac{\Delta\rho g s_{0}^{2}}{\gamma}, \quad \frac{\rho_{1}}{\rho_{2}}, \quad \frac{\nu_{1}}{\nu_{2}}, \quad \frac{K_{1}}{K_{2}}.$$
(II.13)

Les nombres sans dimension correspondant à l'écoulement d'un volume métallique de 100 km sont présentés dans la table II.3. La diversité des nombres sans dimension mis en jeu dans ce problème donne un aperçu de la variété des régimes d'écoulement susceptibles d'intervenir lors de la migration post-impact. Lors de l'écoulement, les nombres de Reynolds, Péclet, Bond et Weber sont extrêmement élevés, ce qui traduit un processus fortement turbulent pour lequel la viscosité, la diffusion chimique et thermique, ainsi que la tension de surface sont négligeables sur une grande gamme d'échelles spatiales. La viscosité, la diffusion et la tension de surface

	Phase silicatée	Phase métallique
Nombre de Reynolds, Re	10^{12}	10^{14}
Nombre de Péclet thermique, Pe_T	10^{14}	10^{12}
Nombre de Péclet chimique, Pe_C	10^{17}	10^{17}
Nombre de Bond, Bo	10^{15}	10^{15}
Nombre de Weber, We	10^{15}	10^{15}
Nombre d'Ohnesorge thermique, Oh_{κ_T}	10^{-12}	10^{-10}
Nombre d'Ohnesorge chimique, Oh_{κ_C}	10^{-15}	10^{-15}

restent néanmoins cruciales à petites échelles, étant donné qu'elles sont directement associées à l'homogénéisation chimique et thermique entre les deux phases, ainsi qu'à la fragmentation de la phase métallique.

TABLE II.3 – Nombres sans dimension typiques de la phase métallique et de la phase silicatée lors de la séparation métal-silicate dans un océan de magma. Les nombres sans dimension sont calculés pour un impacteur de 100 km en utilisant l'équation II.12.

Des temps caractéristiques dont les rapports définissent les nombres sans dimension peuvent également être définis. C'est par exemple le cas du temps diffusif $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$, du temps advectif lié à l'étirement $t_{\dot{\epsilon}} = 1/\dot{\epsilon}$, du temps de chute libre lié à la gravité $t_g = \sqrt{(\rho_1/\Delta\rho)s_0/g}$, du temps visqueux $t_{\nu} = s_0^2/\nu_1$ et du temps capillaire $t_{\gamma} = \sqrt{\rho_1 s_0^3/\gamma}$, qui définissent le nombre de Reynolds Re $\sim t_{\nu}/t_{\dot{\epsilon}}$ ou Re $\sim t_{\nu}/t_g$, de Péclet Pe $\sim t_{\kappa}/t_{\dot{\epsilon}}$ ou Pe $\sim t_{\kappa}/t_g$, de Weber We $\sim (t_{\gamma}/t_{\dot{\epsilon}})^2$, et de Bond Bo $\sim (t_{\gamma}/t_g)^2$.

Brassage (stirring) et mélange (mixing)

Pour terminer cette introduction, un point de vocabulaire s'impose pour différencier brassage et mélange (figure II.2).

Le brassage (*stirring* en anglais) correspond à la déformation ou à l'agitation d'un champ, généralement scalaire, comme par exemple la température ou la composition. C'est un processus réversible dans lequel chaque particule fluide conserve sa température et sa composition initiale. Si les structures issues de ce brassage sont suffisamment petites, ce processus conduit à une homogénéisation apparente du système, mais il est toujours possible de revenir mécaniquement à l'état initial. Le mélange (*mixing* en anglais) correspond aux différentes étapes menant à l'homogénéisation à l'échelle moléculaire de ce champ scalaire. C'est un processus irréversible impliquant nécessairement un phénomène de diffusion. Une fois mélangé, le système présente une température et un potentiel chimique uniforme.

Dans un thermique turbulent immiscible s'écoulant dans un océan de magma, l'homogénéisation thermique et chimique est le résultat du brassage de la phase métallique par l'écoulement turbulent, conduisant à un mélange par diffusion à l'échelle moléculaire. Autrement dit, c'est l'interface métal-silicate qui est brassée, tandis que les champs de température et de potentiel chimique (et donc de concentration), définis dans les deux phases, sont mélangés.



FIGURE II.2 – Schéma représentant le brassage (*stirring*) et le mélange (*mixing*) d'un traceur. La figure de brassage provient de Villermaux (2019).

4

Étude numérique du mélange post-impact

4.1 Introduction

The "iron rain" scenario is based on the assumption of rapid fragmentation of the impactor cores into centimetric drops. Whether this is realistic remains an open question. Differentiation of terrestrial planets started early and most of the Earth was accreted from large differentiated planetesimals and embryos (100 to 1000 km) (Rubie et al., 2015). Whether the huge volumes of metal delivered by these impacts were indeed able to fragment into cm-scale drops is unclear (Dahl et Stevenson, 2010; Deguen et al., 2014; Landeau et al., 2014; Wacheul et al., 2014; Kendall et Melosh, 2016). Liquid fragmentation is a well studied problem of fluid mechanics and the key mechanisms are reasonably well understood: though the details depends on the configuration of the flow, the route to fragmentation necessarily involves the formation of elongated liquid ligaments (e.g. Marmottant et Villermaux, 2004a; Villermaux, 2004, 2007), which is the only geometry unstable against the Rayleigh-Plateau capillary instability leading to fragmentation into drops. Fragmentation must therefore be preceded by a change of topology of the metal phase, from a compact volume (the core of the impactor) toward metal ligaments. Ligaments can be produced either directly by hydrodynamic instabilities or turbulence, or indirectly by the bursting of metal sheets, the liquid from the sheets then collecting into ligaments (e.g. Villermaux, 2007). In the context of metal fragmentation in a magma ocean, laboratory experiments and numerical simulations suggest that the production of both metal ligaments and sheets can result from a combination of Rayleigh-Taylor and shear instabilities, turbulent fluctuations, and interactions with the shear related to the crater opening and the following flow (Deguen et al., 2011, 2014; Landeau et al., 2014; Wacheul et al., 2014; Kendall et Melosh, 2016; Wacheul et Le Bars, 2018). Once formed, ligaments can fragment into drops as a result of the Rayleigh-Plateau capillary instability (Marmottant et Villermaux, 2004a,b; Eggers et Villermaux, 2008). Figure 4.1 illustrates the fragmentation sequence just described, which is to be considered as generic: if fragmentation of planetesimal's core indeed happens, it corresponds to the typical and necessary sequence of events required for the fragmentation of an initially spherical metallic impactor into stable droplets.

In our conceptual fragmentation model (figure 4.1) and in laboratory experiments on which it is based (Deguen et al., 2014; Landeau et al., 2014), the liquid metal phase is vigorously stirred and stretched by the turbulent flow following the impact, before fragmentation actually happens. This suggests that mass and heat transfer between metal and silicates may be aided, or even controlled, by "stretching enhanced diffusion", a mechanism identified as crucial in the context of the mixing of a stirred diffusive heterogeneity (*e.g.* Ranz, 1979; Olson <u>et al.</u>, 1984; Kellogg et Turcotte, 1987; Ottino, 1989; Villermaux, 2004; Coltice et Schmalzl, 2006; Duplat et Villermaux, 2008; Venaille et Sommeria, 2008; Ricard, 2015). Stretching enhanced diffusion


Figure 4.1 – A conceptual view of the fragmentation and equilibration of a metal volume falling into a magma ocean. Typical temperature/concentration profiles are represented for the sheet and the ligament.

works as follows: take an initially compact patch of a diffusing tracer (temperature or concentration of solute) advected by a flow. Unless the flow is uniform, the patch will be deformed according to the local strain tensor. In 2D, it will be stretched in one of the principal strain directions, and compressed in the other one (thus leading to the formation of 2D sheets). In 3D, it will be either stretched into one of the principal strain direction and compressed in the two others (thus leading to the formation of a filament), or compressed into one direction and elongated in the two others (leading to the formation of sheets). This stretching can drastically accelerate the homogenization of the tracer because the flow has the effect of increasing the exchange surface and maintaining strong concentration gradients in the compression direction(s), thus enabling efficient diffusive transport of the tracer. The effect is important if the stretching time (the inverse of the stretching rate) is smaller than the diffusion timescale based on the initial blob size. For example, if an heterogeneity is stretched into a sheet of thickness s(t) at a constant rate $\dot{\epsilon} = \frac{d(\ln s)}{dt}$, the homogenization timescale t_h is given by

$$t_h \sim \frac{1}{2\dot{\epsilon}} \ln\left[2\frac{\dot{\epsilon}s_0^2}{K} + 1\right],\tag{4.1}$$

where s_0 is the initial thickness of the heterogeneity, and K is the tracer diffusivity (e.g. Ranz, 1979; Kellogg et Turcotte, 1987). If the stretching time $1/\dot{\epsilon}$ is large compared to the diffusion time s_0^2/K (*i.e.* if $\dot{\epsilon}s_0^2/K \ll 1$), a Taylor expansion of equation 4.1 shows that $t_h \rightarrow s_0^2/K$, which shows that in this limit the homogenization is controlled solely by diffusion. However, if $\dot{\epsilon}s_0^2/K \gg 1$, equation 4.1 shows that t_h depends predominantly on the stretching rate $\dot{\epsilon}$, and only weakly (logarithmically) on the tracer diffusivity K. Stretching enhanced diffusion is a kinematic theory, and makes no assumption on the nature of the flow responsible for the stretching. Though in deep Earth geodynamics this formalism has been used in the context of low-Reynolds, laminar flows (mixing of compositional heterogeneities in the mantle) (*e.g.* Olson <u>et al.</u>, 1984; Kellogg et Turcotte, 1987; Coltice et Schmalzl, 2006), it has been developed with turbulent flows in mind (Ranz, 1979), and has been used for example to characterize mixing in turbulent jets (*e.g.* Villermaux, 2004; Duplat et Villermaux, 2008).

Our goal is to test whether stretching enhanced diffusion can be an efficient mean of equilibrating (thermally and chemically) the metal phase of the impactors' cores with the immiscible molten silicates of the magma ocean, and to generalize its formalism (and equation 4.1 in particular) to heat and mass transfer between two stirred immiscible liquid phases. After presenting the geometries used in the numerical simulations and the governing equations (section 4.2), we build a regime diagram for the deformation of an initially round drop falling under its own weight and obtain the corresponding equilibration time (section 4.3). Our numerical simulations and laboratory experiments (Deguen et al., 2014; Landeau et al., 2014; Wacheul et al., 2014; Wacheul et Le Bars, 2018) show that a mass of metal falling into a magma ocean is most probably in a regime which we call "stirring regime", in which the metal is stretched into convoluted sheets and ligaments, before fragmenting into drops. We then study the equilibration of what we consider to be the "building blocks" of the fragmentation and equilibration sequence, *i.e.* sheets, ligaments and droplets (section 4.4). We then come back to the stirring regime which we characterize in light of our results on the equilibration of stretched sheets (section 4.5). We finally estimate the equilibration distance of impactor's cores in an early magma ocean (section 4.6).

4.2 Numerical model

4.2.1 Geometries

In sections 4.3, 4.4, and 4.5, we will carry out analytical and numerical calculations (*cf.* table 4.1 for numerical parameters) on the temperature and concentration evolution of sheets, ligaments and drops.

In each geometry (figure 4.2), we consider a two-phase flow involving a liquid silicate-like outer phase (phase 2) and a liquid metallic-like inner phase (phase 1). Sheets and ligaments are stretched by a constant pure shear flow at a strain rate $\dot{\epsilon}$. We don't consider the effect of gravity. The two phases have different densities, viscosities, and diffusivities, both for analytical and numerical calculations (section 4.4, sheet and ligaments). In numerical simulations, ligaments are free to fragment. We also consider the case of a free-falling, initially round metal mass. Numerical calculations on deformed drops assume identical viscosities and diffusivities between the two phases (sections 4.4, drops, and 4.5). Analytical calculations on non-deformed drops do take into account the conductivity and diffusivity contrasts (section 4.4, drops).

4.2.2 Equations

We study here the evolution of either temperature T_i or concentration C_i in a two-phase flow, where $i \in \{1, 2\}$ refers to the metallic (i = 1) or the silicate phase (i = 2). The only difference between heat and mass transfer problems lies in the boundary conditions at the metal-silicates interface. The evolution of temperature and composition can be made mathematically equivalent by introducing a new variable χ_i (table II.2), governed by a unique transport equation (equation II.7), and related to shared boundary conditions (equations II.8 and



Figure 4.2 – Setup for the 2D sheet (a), ligament (b) and drop (c) calculations. Dashed arrows represent the imposed velocity field and the red lines indicate the numerical box boundary. (a): L_0 is the box size and s_0 the initial thickness of the sheet. (b): $L_0/2$ is the box size and s_0 the initial diameter of the ligament. The metal phase corresponding to the inner cylinder (black lines) is surrounded by the silicate phase, the shaded radial plan corresponds to the 2D numerical simulation area. (c): L_0 is the box size and s_0 the initial diameter of the drop. The imposed velocity field compensates the mean falling velocity $\langle u_y \rangle$.

	Sheet		Ligament		Drop	
N	256		256 - 1024		256 - 8192	
s_0/L_0	0.2		0.1		0.1	
Re_1	$1.0 \times 10^{-4} - 1.0 \times 10^{4}$		$1.0 \times 10^{-2} - 1.0 \times 10^{5}$		$1.0 \times 10^{0} - 1.0 \times 10^{6}$	
Pe_1	$5.5 \times 10^{-6} - 5.5 \times 10^{2}$		$5.5 \times 10^{-4} - 5.5 \times 10^{3}$		$1.0 \times 10^{-3} - 1.0 \times 10^{5}$	
Oh_{κ_1}	-		$1.0 \times 10^{-7} - 1.0 \times 10^{2}$		-	
We_1	-		$1.0 \times 10^{-18} - 1.0 \times 10^{12}$		-	
Во	-		-		$5.0 \times 10^{-2} - 1.0 \times 10^{5}$	
	Phase 1	Phase 2	Phase 1	Phase 2	Phase 1	Phase 2
ρ_i/ρ_1	1	0.51	1	0.51	1	0.51
η_i/η_1	1	10	1	10	1	1
K_i/K_1	1	4.3×10^{-2}	1	$4.3 imes 10^{-2}$	1	1
k_i/k_1	1	5.0×10^{-2}	1	5.0×10^{-2}	1	1

Table 4.1 – Parameters used in the 2D numerical simulations of sheets, ligaments and drops. N is the resolution of the box side in pixels. s_0/L_0 is the initial aspect ratio of the two phases. Re₁, Pe₁, Oh_{κ_1} and We₁ are respectively the Reynolds number, the Péclet number, the thermal/compositional Ohnesorge number and the Weber number in the phase 1. Bo is the Bond number. ρ_i/ρ_1 , η_i/η_1 , K_i/K_1 , and k_i/k_1 are respectively the normalized density, dynamic viscosity, diffusivity and conductivity of the phases (see table II.2 for details).

II.9).

In the following calculations, the velocity field will either be imposed, or obtained by solving the Navier-Stokes equation under the assumption of incompressibility,

$$\rho_i \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) = -\nabla P + \eta_i \nabla^2 \mathbf{u} + \rho_i \mathbf{g}, \qquad (4.2)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{4.3}$$

where **u** is the flow velocity, P is pressure, η_i is viscosity, and g is the acceleration of gravity. The non-linear term on the left-hand side of equation 4.2 is the source of turbulence. It is included in our numerical simulations, but since our simulations are 2D, we will not be able to reach fully developed turbulent regimes. At the metal/silicates interface, the velocity field and tangential stress are continuous, while the normal stress is discontinuous due to interfacial tension,

$$[\sigma_1 - \sigma_2] \cdot \mathbf{n} = \gamma \left(\nabla \cdot \mathbf{n} \right) \mathbf{n}, \tag{4.4}$$

where σ_i is the stress tensor, $\nabla \cdot \mathbf{n}$ is the local curvature, and γ is interfacial tension.

4.2.3 Numerical solver: Basilisk

The equations are solved in 2D with direct numerical simulations using the free software Basilisk (see basilisk.fr and Popinet (2003, 2009)). This partial differential equations solver uses an adaptive Cartesian mesh, making simulations possible up to Reynolds number of 10^4 . Mesh refinement is performed when the discretization error of a selected field (*e.g.* temperature, concentration, velocity) is larger than an arbitrary value. It allows a good spatial resolution when and where it is needed, particularly in the vicinity of the stretched metal phase. On the contrary, spatial resolution is reduced far from the metal-silicate interface, where velocity variations are spatially smoother.

The incompressible Navier-Stokes equations (eq. 4.2 and 4.3) are solved with a Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) condition limited time step, using a Bell-Collela-Glaz (BCG) advection scheme and a multigrid Poisson-Helmholtz solver for the viscous term. The BCG solver uses a second order upwind scheme. The diffusion term of the advection-diffusion equation (eq. II.7) is solved using a time implicit backward Euler discretization. The non-linear advection term of the equation is solved with the BCG scheme.

The two-phase flow is implemented using a level-set method. Each phase is characterized by its physical properties (*e.g.* diffusivity, viscosity, etc) and the initial value of the scalar and vector fields (*e.g.* temperature, concentration, velocity). The interface between the two phases is described by a level set function ϕ determining its shape. The time evolution of the interface between the phases is computed with a Volume-Of-Fluid (VOF) advection scheme. First, the interface is reconstructed defining lines (2D) in each cell corresponding to the interface. Then, these lines and planes are moved with a geometrical flux computation. Surface tension (eq. 4.4) is finally implemented by computing the curvature of the interface.

4.3 The path toward equilibration in a magma ocean

4.3.1 Regime diagram

We start here by building a regime diagram (figure 4.3) for the deformation of an initially round metal volume falling from rest into molten silicates, from 2D numerical simulations. We choose to construct a regime diagram as a function of the Reynolds number in the inner phase Re₁ (eq. II.12, build with the inertial terminal velocity scaling) and of the Bond number Bo (eq. II.12), which measures the relative importance of buoyancy and surface tension. Since we use $\nu_1 = \nu_2$ in these simulations, Re₂ = $\sqrt{\rho_1/\rho_2}$ Re₁ and the regime diagram is thus a function of Re₂ divided by 1.4. Besides, viscosities in the metal and the magma ocean also vary, with a potential influence on the regime diagram (Wacheul et Le Bars, 2018). Since in the case of a free-falling drop buoyancy is balanced by the largest of inertia and viscous forces, a small value of Bo implies that surface tension always dominates over the other forces, irrespectively of Re₁. Conversely, a large value of Bo implies that surface tension is small compared to either viscous forces (low Re₁) or inertia (high Re₁).

Though based on 2D simulations, our results are broadly consistent with published results from experiments and numerical simulations (in axisymmetric configurations) (*e.g.* Clift <u>et al.</u>, 1978; Han et Tryggvason, 1999; Landeau <u>et al.</u>, 2014). At low Re₁, the drop remains undeformed, irrespectively of the value of Bo. The flow around the drop is laminar and stationary, and the drop develops an internal circulation (figure 4.22). Keeping Bo small and increasing Re₁, the velocity field eventually becomes time-dependent, with the magnitude of the velocity fluctuations increasing with Re₁. The velocity fluctuations do deform the drop surface and modify its trajectory, leading to a wobbling regime (figure 4.23), but surface tension still remains large compared to the time-dependent inertial stresses, which prevents any significant stretching of the metal and limits the amount of deformation. At moderate values of Bo (~ 10) and Re₁ (~ $10-10^2$), we identify an ellipsoidal-cap regime (figure 4.24) similar to the spherical regime except for the flattened shape of the droplet.

Deformation of the drop is significant only at large values of Bo and moderate-to-large



Figure 4.3 – Regime diagram of an initially round metal drop falling in a magma ocean, as a function of Re_1 and Bo. Markers correspond to numerical simulations. The dashed blue lines correspond to the relationship between Re_1 and Bo (eq. 4.5), for viscosities of the metal η_1 between 10^{-3} and 10^{-1} Pa.s. In the regime snapshots, the red lines correspond to the interface between metal and silicates and black vectors to the velocity field in a frame moving with the center of mass of the metal phase.

values of Re_1 . At $\text{Bo} \gtrsim 10^2$, we find that the initially round drop deforms into a backwardfacing bag (figure 4.25) shape for Re_1 on the order of 10 (Thomson et Newall, 1886; Clift et al., 1978; Baumann et al., 1992; Han et Tryggvason, 1999; Samuel, 2012), and into a forward-facing bag (figure 4.26) shape (similar to the skirted mode of Clift et al. (1978) and to the jellyfish mode of Landeau et al. (2014)) for Re_1 on the order of 10^2 . At even larger values of Re_1 , we identify a regime which we will refer to as stirring regime (figure 4.27) where the velocity field consists in two counter-rotating vortices, with smaller scale velocity fluctuations superimposed. The metal phase is vigorously stretched and deformed into sheets. This regime is qualitatively similar to the immiscible turbulent thermal regime observed experimentally by Deguen et al. (2014) and Landeau et al. (2014), even though the 2D geometry of our simulations does not allow as much turbulence to develop.

From the dimensionless numbers definition in the introduction to part II, we write Re_1 as a function of Bo as

$$\operatorname{Re}_{1} = \left(\frac{\gamma^{3}\rho_{1}^{2}}{\Delta\rho g\eta_{1}^{4}}\right)^{1/4} \operatorname{Bo}^{3/4}.$$
(4.5)

The factor in between parenthesis is the inverse of a Morton number (*e.g.* Clift <u>et al.</u>, 1978). It only involves material properties in addition to g, and typically varies by a factor of 10 mainly due to uncertainties on the viscosity η_1 , which is relatively small compared to Re₁ and Bo varying by orders of magnitude depending on the size of the metal. Equation 4.5 (with uncertainties) thus define the part of the regime diagram which is the most relevant for metal segregation in a magma ocean. This is shown in figure 4.3 (dashed blue lines) for parameters

values given in table II.3 and a viscosity of the metal phase in the range $10^{-3} - 10^{-1}$ Pa.s (Rubie et al., 2003, 2015). If starting from a volume of metal on the large Re and Bo side of the regime diagram (i.e. $\text{Re}_1 \gtrsim 10^3$ and $\text{Bo} \gtrsim 10^2$, which corresponds to a diameter of $\gtrsim 5$ cm), the falling metal would be expected to be in the stirring regime (turbulent thermal). If fragmentation produces droplets at moderate Re_1 and Bo, these droplets will most likely be in either the wobbling or spherical regimes, or possibly in the ellipsoidal-cap regime.

4.3.2 Equilibration times

We now focus on the thermochemical equilibration efficiency, which we characterize with an equilibration time $t_{1/2}$ corresponding to the time at which the mean scalar field in the metal phase $\langle \chi_1 \rangle$ is half its initial value. Figure 4.4a shows the equilibration time $t_{1/2}$ normalized by the free-fall time t_g obtained from numerical simulations as a function of the Péclet number in the inner phase Pe₁, for various values of Re₁ and Bo.

At $Pe_1 \leq 10^2$, we find that $t_{1/2}/t_g \sim Pe_1$, irrespectively of Re_1 and Bo. This implies $t_{1/2} \sim t_{\kappa}$, which means that equilibration is controlled by diffusion. Increasing Pe₁ above \sim 10^2 results in faster equilibration than in the diffusion regime. At $Pe_1 \gtrsim 10^2$ the equilibration time depends on the deformation regime of the drop, and hence on Re_1 and Bo, with the stirring regime being the most efficient at improving equilibration: we find $t_{1/2}/t_g \sim Pe_1^{0.77}$ in the high Pe spherical regime (circles), while in the stirring regime, $t_{1/2}/t_q$ shows a weak dependency on Pe_1 (diamonds) with $t_{1/2}/t_g = 0.53 \ln(Pe_1)$ (the logarithmic Pe_1 dependency will be explained in section 4.5). The effect of the deformation regime can also be seen from figure 4.4b which shows the effect on $t_{1/2}/t_q$ of increasing Re₁ while keeping Bo and Pe₁ constants at 10^4 . At Bo = 10^4 the deformation regime changes from spherical to backwardfacing bag shape, forward-facing bag shape, and finally stirring regime as Re_1 is increased. The equilibration time decreases significantly with Re_1 (as $t_{1/2}/t_g \sim \text{Re}_1^{-0.59}$) while $\text{Re}_1 \lesssim 10^3$, but $t_{1/2}/t_q$ seems to reach a plateau at $\text{Re}_1 \gtrsim 10^3$ when entering the stirring regime. While higher Re_1 simulations would be needed to confirm this point, this suggests that the equilibration time may become independent of Re_1 (and hence on viscosity) in the stirring regime at high Re₁. Figure 4.4c shows $t_{1/2}/t_g$ as a function of the Bond number, for Pe₁ fixed at 10⁴ and Re_1 fixed at either 10 or 10⁴. We find that $t_{1/2}/t_g$ decreases as Bo increases, irrespectively of Re_1 , before reaching a plateau. This is consistent with the fact that increasing Bo allows the metal phase to be more deformed, which helps equilibration. This is particularly drastic in the stirring regime, in which the vigorous stretching and folding of the metal phase leads to very fast equilibration.

4.4 Equilibration in the building blocks of the fragmentation sequence

The regime diagram obtained in section 4.3, and experiments (Deguen <u>et al.</u>, 2014; Landeau <u>et al.</u>, 2014; Wacheul <u>et al.</u>, 2014; Wacheul et Le Bars, 2018), suggest that the most relevant dynamical regime at the beginning of the fragmentation sequence is the stirring regime, in which the metal phase is stretched into thin sheets (in our 2D simulations), and sheets and ligaments in 3D. The metal phase will then eventually fragment into drops. We therefore study here heat and mass transfer in what we consider to be the three "building blocks" of the fragmentation and equilibration sequence: stretched sheets, ligaments, and drops.



Figure 4.4 – Equilibration time $t_{1/2}$ normalized by $t_g = \sqrt{(\rho_1/\Delta\rho)s_0/g}$ as a function of the Péclet number in the inner phase Pe₁ (a), the Reynolds number in the inner phase Re₁ (b), and the Bond number Bo (c). $t_{1/2}$ is the time at which $\langle \chi_1 \rangle$ is half its initial value. The lines correspond to calculated scaling law.

4.4.1 Stretched isolated sheets

We consider here the homogenization of a scalar field $\chi(x, y, t)$ in and around a stretched isolated 2D sheet. Following Ranz (1979), the evolution of χ is described in a local Lagrangian frame (x, y) which moves and rotates with the fluid such that the y-direction is always parallel to the stretching direction, and the x-direction perpendicular to it. In this frame of reference, the flow is a pure shear flow (or stagnation flow), and the velocity field is of the form $(u_x = -\dot{\epsilon}x, u_y = \dot{\epsilon}y)$, where $\dot{\epsilon}$ is the stretching rate. The thickness of the sheet s(t) is given by $s(t) = s_0 \exp\left(-\int_0^t \dot{\epsilon}(t') dt'\right)$, and is assumed to be much smaller than the radius of curvature of the sheet. Stretching will tend to align the direction of the gradient of χ with the compression direction, and we can therefore consider the sheet and the scalar field to be locally invariant in the stretching direction. With this assumption and the velocity field given above, the scalar transport equation II.7 becomes

$$\frac{\partial \chi_i(x,t)}{\partial t} + \dot{\epsilon} x \frac{\partial \chi_i(x,t)}{\partial x} = K_i \frac{\partial^2 \chi_i(x,t)}{\partial x^2}.$$
(4.6)

We transform these equations into diffusion equations with the following change of variable (Ranz, 1979):

$$\xi = \frac{x}{s(t)},\tag{4.7}$$

$$\tau = K_1 \int_0^t \frac{\mathrm{d}t'}{s(t')^2}.$$
(4.8)

This amounts to normalize lengths by s(t), which sets the thickness of the sheet to $\xi = 1$, and time by a diffusion time scale based on the diffusivity inside the sheet (phase 1). With this change of variable, equation 4.6 reduces to

$$\frac{\partial \chi_i(\xi,\tau)}{\partial \tau} = \frac{K_i}{K_1} \frac{\partial^2 \chi_i(\xi,\tau)}{\partial \xi^2}.$$
(4.9)

The scalar field is initialized with a difference $\Delta \chi$ between the phases such as

$$\chi_1(|\xi| \le 1, \tau = 0) = \Delta \chi,$$
 (4.10)

$$\chi_2(|\xi| > 1, \tau = 0) = 0.$$
 (4.11)

The boundary conditions are the continuity of the scalar field and its flux at the phase interface (equations II.8 and II.9), and $\chi \rightarrow 0$ at infinity.

Based on Lovering (1936), the full solution of this set of equations in each phase is

$$\chi_{1}(\xi \leq 1/2, \tau) = \frac{\Delta \chi}{2} \Biggl\{ -(1+p) \operatorname{erf}\left(\frac{\xi - 1/2}{2\sqrt{\tau}}\right) + (1+p) \\ \cdot \sum_{n=1}^{\infty} (-p)^{n-1} \Biggl[\operatorname{erf}\left(\frac{n+\xi - 1/2}{2\sqrt{\tau}}\right) - p \operatorname{erf}\left(\frac{n-\xi + 1/2}{2\sqrt{\tau}}\right) \Biggr] \Biggr\}, (4.12) \\ \chi_{2}(\xi \geq 1/2, \tau) = \frac{\Delta \chi}{2} \Biggl\{ -(1-p) \operatorname{erf}\left(\frac{\xi - 1/2}{2\sqrt{K_{2}/K_{1}\tau}}\right) + (1-p^{2}) \\ \cdot \sum_{n=1}^{\infty} (-p)^{n-1} \operatorname{erf}\left(\frac{\sqrt{K_{2}/K_{1}n} + \xi - 1/2}{2\sqrt{K_{2}/K_{1}\tau}}\right) \Biggr\}.$$
(4.13)

In particular, the scalar in the middle of the sheet $\chi(\xi = 0)$ evolves in time according to

$$\chi(\xi = 0, \tau) = \Delta \chi(1+p) \sum_{n=0}^{\infty} (-p)^n \operatorname{erf}\left(\frac{2n+1}{4\sqrt{\tau}}\right).$$
(4.14)

The parameter $p \in [-1, 1]$ accounts for the diffusivity contrast in the two-phase flow and depends on the diffusivity ratio k_1/k_2 and on the ratio q_1/q_2 (see table II.2) as

$$p = \frac{1 - \sqrt{\frac{k_1 q_1}{k_2 q_2}}}{1 + \sqrt{\frac{k_1 q_1}{k_2 q_2}}}.$$
(4.15)

Its value dramatically affects the scalar profiles (figure 4.5b). If p < 0 (figure 4.5a), the diffusivity in the inner phase is larger than in the outer phase, leading to a flatter profile in the inner phase. On the contrary, if p > 0 (figure 4.5c), the diffusivity in the outer phase is larger than in the inner phase, leading to a flatter profile in the outer phase.



Figure 4.5 – Scalar profile in and around the sheet for p = -0.61 (a), p = 0 (Jaupart et Mareschal, 2010) (b) and p = +0.61 (c) as a function of τ . τ and ξ are respectively the normalized time and length (*i.e.* equations 4.7 and 4.8). (d): Evolution of $\tau_{1/2}$ as a function of p (eq. 4.14). The dashed line corresponds to the approximation of $\tau_{1/2}$ when $p \to -1$ (eq. 4.16). (e): Evolution of the parameter p as a function of the partition coefficient $D_{1/2}$ for several values of the mass diffusivity ratio κ_1^c/κ_2^c (from equation 4.15).

We compute from equation 4.14 the normalized equilibration time $\tau_{1/2}$ at which $\chi(\xi = 0, \tau_{1/2}) = \Delta \chi/2$. Equation 4.14 shows that $\tau_{1/2}$ is a function of p only, and figure 4.5d shows that $\tau_{1/2}$ decreases when p increases. An approximate expression for $\tau_{1/2}$ can be found in the limit of p close to -1, corresponding to $k_1q_1 \gg k_2q_2$, as follows. In this limit, we expect equilibration to be limited by diffusion in the outer phase 2. The equilibration time $t_{1/2}$, corresponding to the normalized equilibration time $\tau_{1/2}$, should therefore be independent of k_1 . According to equation 4.8, $t_{1/2}$ is a function of $\tau_{1/2}/K_1 = \tau_{1/2}q_1/k_1$, the form of which depends on the evolution of the thickness of the sheet. $\tau_{1/2}(p)$ must therefore be proportional to k_1 . If $p \to -1$, p simplifies as $p \sim -1 + 2\sqrt{\frac{k_2}{k_1}\frac{q_2}{q_1}}$ from equation 4.15. It thus satisfies the proportionality with k_1 only if

$$au_{1/2}(p) \sim \frac{1}{(p+1)^2}, (4.16)$$

which in the limit $p \to -1$ tends toward $\sim \frac{1}{4} \frac{k_1}{k_2} \frac{q_1}{q_2}$. Figure 4.5d shows that the prediction of equation 4.16 with a proportionality factor equal to 0.6 is indeed very close to the full solution of equation 4.14 when p approaches -1. It is still reasonably accurate at higher values of p: it overestimates $\tau_{1/2}$ by a factor 2 at most over the all range of p.

In the heat transfer case, the value of p in a magma ocean (table II.3) is $p \sim -0.6$. In the composition case, $p = (1 - \sqrt{\kappa_1^c / \kappa_2^c D_{1/2}})/(1 + \sqrt{\kappa_1^c / \kappa_2^c D_{1/2}})$ depends on the partition coefficient and the mass diffusivity contrast between metal and silicates (figure 4.5e). In particular, it can be seen that p approaches -1 for siderophile elements (e.g. W, Co, Cr, V, Ni), since $D_{1/2} \gg 1$ and κ_1^c / κ_2^c is larger than unity (O'Neill et Palme, 1998).

We now go back to the stretching of the metal sheet and calculate the equilibration time $t_{1/2}$ from equation 4.8 taken at $\tau = \tau_{1/2}$. For that purpose, we assume that $\dot{\epsilon}$ is constant, as predicted in the case of homogeneous turbulence (Batchelor, 1952), which implies an exponential decrease of the layer thickness

$$s(t) = s_0 \exp\left(-\dot{\epsilon}t\right). \tag{4.17}$$

Using equation 4.8, we obtain

$$t_{1/2} = \frac{1}{2\dot{\epsilon}} \ln\left[2\operatorname{Pe}_1\tau_{1/2}(p) + 1\right] = \frac{1}{2\dot{\epsilon}} \ln\left[\frac{2s_0^2\dot{\epsilon}}{K_1}\tau_{1/2}(p) + 1\right],$$
(4.18)

which is a generalization of equation 4.1 to the homogenization of a scalar field between two liquid phases with different transport properties. In the small Péclet limit, a Taylor expansion of equation 4.18 shows that $t_{1/2} \simeq \tau_{1/2}(p) s_0^2/K_1$, as expected. In the large Péclet limit when advection dominates over diffusion, *i.e.* in the stretching enhanced diffusion regime, equation 4.18 simplifies to

$$t_{1/2} \sim \frac{1}{2\dot{\epsilon}} \ln \left[\operatorname{Pe}_1 \tau_{1/2}(p) \right].$$
 (4.19)

In the limit $p \rightarrow -1$ relevant to siderophile elements (figure 4.5e), using equation 4.16 gives

$$t_{1/2} \sim \frac{1}{2\dot{\epsilon}} \ln\left[\operatorname{Pe}_1 \frac{1}{(p+1)^2}\right] \sim \frac{1}{2\dot{\epsilon}} \ln\left[\operatorname{Pe}_2 \left(\frac{q_1}{q_2}\right)^2\right],\tag{4.20}$$

with Pe_2 the Péclet number of the phase 2 defined in the same way as Pe_1 (eq. II.12).

Figure 4.6a shows the evolution of χ in the middle of the sheet as a function of the time normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$, as given by equation 4.14. If $\text{Pe}_1 \leq 1$, the equilibration time is nearly independent of Pe_1 , whereas if $\text{Pe}_1 \gtrsim 1$, $\chi(\xi = 0)$ decreases over a timescale significantly reduced as Pe_1 increases. Figure 4.6b shows the equilibration time $t_{1/2}$ as a function of Pe₁ according to equation 4.18. If Pe₁ $\ll 1$, $t_{1/2}/t_{\kappa}$ is independent of Pe₁ and $t_{1/2}$ scales as the diffusion time t_{κ} , consistently with the low Péclet number approximation of equation 4.18. We thus obtain the diffusive regime expected in that range of Péclet number (figure 4.17). On the contrary, if Pe₁ $\gg 1$, $t_{1/2}/t_{\kappa}$ is well approximated by equation 4.19 with a weaker dependence on p than in the diffusive regime (figure 4.6b, dash-dotted line). If in addition $p \to -1$, $t_{1/2}/t_{\kappa}$ scales as equation 4.20 at large Pe₁ (figure 4.6b, dashed line). $t_{1/2}$ depends predominantly on the stretching rate with a comparatively weak (logarithmic) dependency on the diffusivity. If the stretching rate $\dot{\epsilon}$ increases, the equilibration time $t_{1/2}$ decreases dramatically (eq. 4.18 and figure 4.6b). In other words, if stretching intensifies, the equilibration efficiency between metal and silicates increases. In that case, we obtain a stretching enhanced diffusion regime (figure 4.18). The critical Pe₁ separating the two regimes depends on p. In particular, when $p \to -1$, *i.e.* for large partition coefficient and diffusivity ratio κ_1^c/κ_2^c , the critical Pe₁ is significantly decreased below 1.



Figure 4.6 – (a): Value of χ_1 in the middle of the sheet (calculated from equation 4.14 at p = -0.61) as a function of the time normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$, for several values of the Péclet number in the inner phase Pe₁. (b): Equilibration timescale $t_{1/2}$ normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$ as a function of the Péclet number in the inner phase Pe₁, for several values of p (from equation 4.18). The dash-dotted line corresponds to the large Pe approximation of equation 4.19, calculated for p = 0. The dashed line corresponds to the large Pe and $p \rightarrow -1$ approximation of equation 4.20, calculated for p = -0.99.

Using equations 4.17 and 4.19, we can also calculate the width of the sheet $s_{1/2}$ at $t = t_{1/2}$. In the $\text{Pe}_1 \gg 1$ limit, this gives

$$s_{1/2} \sim \frac{1}{\sqrt{\tau_{1/2}(p)}} \left(\frac{K_1}{\dot{\epsilon}}\right)^{1/2},$$
(4.21)

where $(K_1/\dot{\epsilon})^{1/2}$ is a characteristic diffusion length, known as the Batchelor length scale (Kellogg et Turcotte, 1987). $s_{1/2}$ corresponds to the length at which diffusion is no longer negligible, the sheet being sufficiently thin for diffusion to complete equilibration. A 100 km metallic core falling at 100 m \cdot s⁻¹ (Deguen et al., 2011) produces a large scale stretching rate of 100 m \cdot s⁻¹/100 km = 10⁻³ s⁻¹. Using a thermal diffusivity of 10⁻⁵ m² \cdot s⁻¹ (table II.3),

we obtain a thermal equilibration scale around 6 cm. Concerning chemical equilibration, the $p \to -1$ limit of $\tau_{1/2}(p)$ (eq. 4.16) gives

$$s_{1/2} \sim \frac{2}{D_{1/2}} \left(\frac{\kappa_2^c}{\dot{\epsilon}}\right)^{1/2}.$$
 (4.22)

Using a mass diffusivity of $10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ and $D_{1/2}$ equal to 1, 10 and 100, the width of chemical equilibration is around 2, 0.2 and 0.02 mm, respectively. Thermal equilibration may happen prior to fragmentation because the typical fragmentation scale corresponding to a capillary length is around 3 mm. However, the chemical equilibration length is of the same order as the fragmentation scale, or even smaller regarding siderophile elements. It means that chemical equilibration may happen at the same time, or after, fragmentation of the metallic core occurs.

4.4.2 Stretched isolated ligaments

4.4.2.1 Analytical solution

Using the same change of variable as for the sheet (equations 4.7 and 4.8) allows to obtain an analytical solution of the axisymmetric advection-diffusion equation of the stretched ligament (figure 4.2b). The scalar field and its flux are continuous across the phase interface. From Carslaw et Jaeger (1959), p. 346, we obtain the solutions in each phase

$$\chi_1(\xi \le 1, \tau) = \frac{4\Delta \chi k^2}{\pi^2 K^2} \int_0^\infty e^{-u^2 \tau} \frac{J_0(u\xi) J_1(u) du}{u^2 [\phi^2(u) + \psi^2(u)]},$$
(4.23)

$$\chi_2(\xi \ge 1, \tau) = \frac{2\Delta\chi k^2}{\pi K} \int_0^\infty e^{-u^2\tau} J_1(u) \frac{J_0(Ku\xi)\phi(u) - Y_0(Ku\xi)\psi(u)}{u[\phi^2(u) + \psi^2(u)]} du, \quad (4.24)$$

where $K = \sqrt{K_1/K_2}$, $k = \sqrt{k_1/k_2}$ and

$$\psi(u) = \frac{k^2}{K} J_1(u) J_0(Ku) - J_0(u) J_1(Ku), \qquad (4.25)$$

$$\phi(u) = \frac{k^2}{K} J_1(u) Y_0(Ku) - J_0(u) Y_1(Ku).$$
(4.26)

 J_{ν} and Y_{ν} are respectively the Bessel function of the first and the second kind, with ν their order.

Using the same method as for the sheet (eq. 4.8 and 4.17), we obtain a law for the equilibration time similar to equation 4.18, except for $\tau_{1/2}$ which now depends independently on K and k (figure 4.7), leading to

$$t_{1/2} = \frac{1}{2\epsilon} \ln \left[2 \operatorname{Pe}_1 \tau_{1/2}(K, k) + 1 \right].$$
(4.27)

We obtain a good agreement between the analytical solution from equation 4.27 (figure 4.8a, red circles) and numerical simulations (figure 4.8a, black circles).

As in the sheet case, we obtain the equilibration length, which can be written

$$s_{1/2} \sim \frac{1}{\sqrt{\tau_{1/2}(K,k)}} \left(\frac{K_1}{\dot{\epsilon}}\right)^{1/2}$$
 (4.28)

in the large Péclet limit. For a 100 km metallic core falling at 100 m.s⁻¹ (Deguen et al., 2011) and using typical parameters of table II.3, we obtain $\tau_{1/2}(K, k) \sim 5.5$ and a thermal equilibration length around 4 cm. The chemical equilibration length is around 1.6, 0.5 and 0.1 mm for $D_{1/2}$ equal to 1, 10 and 100, respectively. As for the sheets, thermal equilibration may happen prior to fragmentation whereas chemical equilibration may happen during or after fragmentation.



Figure 4.7 – Evolution of $\tau_{1/2}$ as a function of $K = \sqrt{K_1/K_2}$ and $k = \sqrt{k_1/k_2}$, in the ligament geometry.

4.4.2.2 Effect of surface tension

Ligaments are unstable against the Rayleigh-Plateau capillary instability, and will eventually fragment into drops, possibly affecting equilibration. Fragmentation (figure 4.21) results from the development of the capillary instability, which grows on a timescale on the order of t_{γ} (capillary time based on the ligament initial diameter) in the absence of significant stretching, if $t_{\gamma} \ll t_{\epsilon}$. It is known that the capillary instability can be damped if the ligament is stretched (e.g. Taylor, 1934; Tomotika, 1936; Mikami et al., 1975; Eggers et Villermaux, 2008), stretching can thus delay fragmentation if $t_{\epsilon} \ll t_{\gamma}$, *i.e.* if We₁ \gg 1.

Figure 4.8 shows the equilibration time $t_{1/2}$, defined here as the time at which the mean value of χ of the inner phase $\langle \chi_1 \rangle$ is half its initial value, obtained from numerical calculations as a function of Pe₁, We₁, and Oh_{κ_1}. Fragmentation happens after equilibration if t_{γ} is large compared to the (no surface tension) equilibration time given by equation 4.27. This would be the case if t_{γ} is large compared to either $t_{\kappa}\tau_{1/2}$ (at small Péclet) or $t_{\epsilon} \ln(\text{Pe}_{1}\tau_{1/2})$ (at large Péclet), *i.e.* if $\text{Oh}_{\kappa_1}/\tau_{1/2} \gg 1$ or We₁ $\gg \left[\ln(\text{Pe}_{1}\tau_{1/2})\right]^2$. Fragmentation has no effect on equilibration in this limit, and the equilibration time obtained from the numerical calculations is consistent with the prediction of equation 4.27. The flat slopes at large We₁ (figure 4.8b) and Oh_{κ_1} (figure 4.8c) show that equilibration is indeed independent of surface tension. The diffusive (figure 4.19) and the stretching enhanced diffusion (figure 4.20) regimes are thus retrieved at small and large Péclet, respectively (figure 4.8a, circles).

If now fragmentation happens before the equilibration time predicted by equation 4.27, we find that equilibration is controlled by the time required to develop the Rayleigh-Plateau capillary instability and break the ligament. At low We₁ and Oh_{κ_1}, we indeed find that $t_{1/2}/t_{\epsilon} \sim \text{We}_1^{1/2}$ (figure 4.8b) and $t_{1/2}/t_{\kappa} \sim \text{Oh}_{\kappa_1}$ (figure 4.8c), which correspond to $t_{1/2} \sim t_{\gamma}$. This suggests that the flow associated with the fragmentation of the ligament into drops is strong enough to allow for fast equilibration of the drops.



Figure 4.8 – Equilibration time $t_{1/2}$ normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$ (a and c) or $t_{\dot{\epsilon}} = \dot{\epsilon}^{-1}$ (b) as a function of the Péclet number Pe_1 (a), the Weber number We_1 (b) and the thermal/compositional Ohnesorge number Oh_{κ_1} (c), in the inner phase. Red circles corresponds to the analytical solution presented in equation 4.27. The dashed line corresponds to the calculated power-law trend.

4.4.3 Free-falling drops

At the end of the fragmentation sequence of the impactors' cores (figure 4.1), the fate of the remaining heat and chemical elements in the droplets depends on the Péclet number, *i.e.* if they equilibrate in the high Pe spherical or in the diffusive regime. In the diffusive regime (figure 4.28), the equilibration time scales as the typical diffusion time of the drop $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$, irrespectively of viscosity and surface tension (figure 4.4).

In the high Pe spherical regime (figure 4.22), equilibration is accelerated by the formation of thin thermal or compositional boundary layers on the leading side of the drop, on both sides of the interface, where advection maintains a strong radial gradient of χ . At a viscosity ratio η_1/η_2 on the order of 1 or smaller, equilibration is aided by the circulation forced within the drop by the viscous stress at the interface (Ulvrová et al., 2011). The outer boundary layer is connected to a wake tail on the rear side of the drop. A prediction for the equilibration time is obtained from mass conservation on the spherical drop and estimates of the convective flux.

We consider the equilibration of a drop of diameter s_0 and falling velocity u, with internal circulation, at high Pe₁ and Pe₂. In this limit, we expect the formation of two thin thermal/compositional boundary layers, on both sides of the droplet interface, with respective thicknesses δ_1 and δ_2 . Depending on the properties of the two phases, the flux can be limited by one or the other of the boundaries. Denoting by $\langle \chi_1 \rangle$ the mean of χ_1 in the drop, by χ_i the value of χ at the interface, and by χ_2^{∞} the value of χ_2 far from the drop, the heat/mass flux Φ across the interface is

$$\Phi \sim k_1 \frac{\langle \chi_1 \rangle - \chi_i}{\delta_1} \sim k_2 \frac{\chi_i - \chi_2^{\infty}}{\delta_2}.$$
(4.29)

The boundary layers thickness on both sides of the interface can be shown to be $\delta_i \sim \sqrt{K_i s_0/u} \sim s_0 \operatorname{Pe}_i^{-1/2}$ by balancing advection and diffusion in the vicinity of the interface (see for example Ribe (2015) for the outer boundary layer scaling; a similar reasoning leads to the scaling of the inner boundary layer, which has the same form). Writing χ_i as a function of $\langle \chi_1 \rangle$ and χ_2^{∞} from equation 4.29, and noting that $\delta_1/\delta_2 \sim \sqrt{K_1/K_2}$, the flux becomes

$$\Phi \sim \frac{k_2}{s_0} \operatorname{Pe}_2^{1/2} \frac{\langle \chi_1 \rangle - \chi_2^{\infty}}{1 + \left(\frac{q_2 k_2}{q_1 k_1}\right)^{1/2}},\tag{4.30}$$

which is consistent with the heat flux given by Ribe (2015) in the limit $q_1k_1 \gg q_2k_2$. Using conservation of χ gives

$$\frac{\pi}{6}s_0^3 q_1 \frac{\mathrm{d}\langle \chi_1 \rangle}{\mathrm{d}t} = -\pi s_0^2 \Phi, \qquad (4.31)$$

from which we obtain the equilibration time

$$t_{1/2} \sim \frac{s_0^2 q_1}{6k_2} \operatorname{Pe}_2^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{q_2 k_2}{q_1 k_1}\right)^{1/2} \right]$$
, regarding χ . (4.32)

We thus find that

$$t_{1/2} \sim \frac{s_0^2 \rho_1 c_{p_1}}{6\lambda_2} \operatorname{Pe}_2^{-1/2} \left[1 + \left(\frac{\rho_2 c_{p_2} \lambda_2}{\rho_1 c_{p_1} \lambda_1} \right)^{1/2} \right], \text{ regarding } T,$$
(4.33)

$$t_{1/2} \sim \frac{s_0^2 D_{1/2}}{6\kappa_2^c} \operatorname{Pe}_2^{-1/2} \left[1 + \frac{1}{D_{1/2}} \left(\frac{\kappa_2^c}{\kappa_1^c} \right)^{1/2} \right], \text{ regarding } C.$$
(4.34)

Equation 4.34 simplifies as $t_{1/2} \sim (s_0^2 D_{1/2})/(6\kappa_2^c) \operatorname{Pe}_2^{-1/2}$ and $t_{1/2} \sim (s_0^2/6)(\kappa_1^c \kappa_2^c)^{-1/2} \operatorname{Pe}_2^{-1/2}$ in the limits of siderophile $(D_{1/2} \gg 1)$ and lithophile $(D_{1/2} \ll 1)$ elements, respectively. The equilibration time we predict for siderophile elements depends linearly on the partition coefficient, which is consistent with the numerical results of Ulvrová <u>et al.</u> (2011). On the contrary, the equilibration time obtained for lithophile elements is independent of the partition coefficient, consistently with the analysis of Samuel (2012).

4.5 Equilibration in a turbulent thermal

4.5.1 Deformation and stretching dynamic

We now focus on the stirring regime identified in section 4.3, which we think is the most relevant for metal segregation in a magma ocean (Dahl et Stevenson, 2010; Deguen <u>et al.</u>, 2011, 2014; Landeau et al., 2014).

Figure 4.27 shows snapshots of a simulation in this regime, at $Re_1 = 10^4$, $Bo = 10^3$, and $Pe_1 = 10^4$. The initially round drop quickly deforms, both because of an instability which we interpret as a combination of Kelvin-Helmholtz (shear-driven) and Rayleigh-Taylor (buoyancy-driven) instabilities, and because of the action of the mean flow, which takes the form of a pair of expanding counter-rotating vortices (the 2D analogue of a vortex ring). The interaction between the vortices and the interface instability leads to strong deformation and stretching of the metal phase, which topology evolves toward a collection of convoluted sheets (see for example figure 4.27 at $t/t_q = 4.2$ and figure 4.10b). In our 2D numerical calculations, the metal phase eventually becomes discontinuous, but this "fragmentation" is an artifact due to the resolution limits of the computation grid. 2D sheets are stable against Rayleigh-Plateau capillary instabilities and are not expected to break. In the simulations, the metal phase becomes discontinuous when the stretched structures become locally too thin to be resolved, but this is not a physical effect. A finer mesh indeed delays this apparent fragmentation. We therefore use the maximum resolution possible, but 2D simulations are fundamentally not designed to address fragmentation. Nonetheless, these calculations are relevant for understanding the interplay between stretching and thermochemical equilibration, considering scales larger than the resolution limit. The Batchelor scale (e.g. equation 4.21), estimated using a large scale stretching rate related to the pair of counter-rotating vortices, is indeed two orders of magnitude larger than the resolution of the grid.

4.5.2 Equilibration time

The development of sheets from the initial volume of metal can be considered as the superposition of isolated stretched sheets with uniform stretching similar to that of section 4.4. We thus expect the equilibration time to be of the form $t_{1/2} \sim t_{\dot{\epsilon}} \ln(\text{Pe}_1 \tau_{1/2})$ (eq. 4.19), where $\dot{\epsilon}$ is the stretching rate of the sheets, which needs to be estimated as a function of the flow geometry and strength. $\tau_{1/2}$ is a function of p in 2D (sheets in section 4.4 and figure 4.5d), or a function of K_1/K_2 and k_1/k_2 in 3D (ligaments in section 4.4), owing to the presence of both sheets and ligaments. The flow has a vortex ring structure (figure 4.27), with a falling velocity $\langle u_y \rangle \sim \sqrt{(\Delta \rho / \rho_1)gs_0}$ varying on a scale s_0 . If stretching is governed by the vortices, then $\dot{\epsilon}$ should be on the order of $\langle u_y \rangle / s_0$, which is equivalent to a stretching timescale equal to the free-fall timescale of the drop t_g . This leads to

$$t_{1/2} \sim t_g \ln(\text{Pe}_1 \tau_{1/2}).$$
 (4.35)

There is a good agreement between this prediction and the results from the numerical calculations of section 4.3, which shows that in the stirring regime $t_{1/2}/t_g$ is independent of Re₁ (figure 4.4b, diamonds) and Bo (figure 4.4c, diamonds), and has a Pe₁ dependency (figure 4.4a, dash-dotted line) well fitted by $t_{1/2} = 0.53t_g \ln(\text{Pe}_1)$. This suggests that equilibration is controlled by stretching enhanced diffusion, with a stretching rate controlled by the large scale component of the flow.

4.5.3 The role of stretching on equilibration

To address the role of stretching enhanced diffusion, we focus on the rate of gradient production (Ricard, 2015), obtained by applying the operator $2\nabla\chi\cdot\nabla$ to the advection-diffusion equation (eq. II.7) and integrating over the 2D numerical domain Ω

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{\Omega} |\nabla \chi|^2 \mathrm{d}S = -2 \int_{\Omega} \nabla \chi \cdot \underline{\dot{\epsilon}} \cdot \nabla \chi \mathrm{d}S - 2K \int_{\Omega} (\nabla^2 \chi)^2 \mathrm{d}S, \qquad (4.36)$$

where $\underline{\dot{e}}$ is the strain rate tensor. The rate of gradient production (term on the left-hand side) is equal to the sum of an advection term (first term on the right-hand side) and a diffusion term (second term on the right-hand side). The advection term is related to the properties of the flow through the strain rate tensor $\underline{\dot{e}}$ and corresponds to the source of gradient production. It can be either positive or negative depending on the geometry of the flow and scalar field. In contrast, the diffusion term is always negative and damps scalar gradients.

These integrals are calculated in three examples corresponding to small Pe diffusive, high Pe spherical and stirring regime:

(i) In the small Pe diffusive regime (figure 4.9a), the advection term is equal to zero and the rate of gradient production is equal to the diffusion term because scalar gradients are only dissipated and never generated. The diffusion term converges toward zero over time owing to the progressive equilibration of the drop, on a timescale $\sim t_{\kappa}$.

(ii) In the high Pe spherical regime (figure 4.9b), the advection term is positive because scalar gradients are produced by advection in the boundary layer in front of the drop during its fall. Starting from 0, the advection term first increases during a short transient during which the thermal boundary layer grows by diffusion up to a thickness at which advection balances diffusion. The advection term then slowly decreases due to the decrease of difference of χ between the drop and the surrounding, while the thickness of the thermal boundary layer remains constant. The magnitude of the diffusion term follows closely the evolution of the advection term, but is slightly smaller, which shows that equilibration is controlled by the advection and gradients production. The advection term and the diffusion term converge toward zero as the drop equilibrates with the surrounding fluid, with an equilibration time about 100 times smaller than the diffusion time. In the simulation, the shape of the drop slightly varies in time, explaining the fluctuations around the mean exponential decrease obtained on the integrals.

(iii) In the stirring regime (figure 4.9c), the advection term becomes positive owing to the production of scalar gradients by the stretching. The advection term is larger than the diffusion term as soon as deformation and stretching of the drop develop, leading to a positive rate of gradient production. Equilibration is then controlled by the production of scalar gradients (whose stirring is the source). At first, the rate of gradient production increases, in connection with the development of stretched structures through hydrodynamics instabilities and stirring. Then, the rate of gradient production decreases owing to the diffusive equilibration of the metal phase with the surrounding fluid when the thickness of the sheets become small enough.



Figure 4.9 – Upper: Time evolution of the terms in equation 4.36, *i.e.* the rate of gradient production, the advection term and the diffusion term (Ricard, 2015), in the small Pe diffusive (a), the high Pe spherical (b) and the stirring (c) regime. Lower: Snapshots showing maps of χ_i in these regimes. The dashed gray lines correspond to the interface position between phases 1 and 2. The gray lines correspond to the streamlines of the velocity field on a frame moving with the center of mass of the metal.

Figure 4.10 shows the negative eigenvalue of the strain rate tensor $\underline{\dot{e}}$, which we interpret as a stretching magnitude (Ricard, 2015). In the high Pe spherical regime (a), stretching develops on a scale comparable with the size of the drop, which is significantly larger than the thin boundary layer where thermal and compositional exchanges occur. On the contrary, in the stirring regime (b), stretching occurs in the vicinity of the interface, over a very localized deformation area. The source of gradient production responsible for the large advection term (figure 4.9c, upper) is then located at the same place as the interface deformation. Small-scale stretching processes related to the stirring are responsible for gradient production, arguing in turn for an equilibration controlled by stretching enhanced diffusion.

4.5.4 Probability distribution functions of the scalar field

The qualitative difference between the three regimes is also highlighted by the probability distribution functions (PDF) of the scalar field. In the small Pe diffusive regime (figure 4.11a), the distribution of χ tends toward a probability density $\propto 1/\chi$. This is consistent with the radial dependency of χ , which, after the initially discontinuous radial profile of χ has smoothed out, tends toward a self-similar profile of the form $\chi(r,t) \propto \exp(-r^2/(K_2t))$. It can be verified that the PDF of a field with this spatial distribution is indeed $\propto 1/\chi$. In the high Pe spherical regime (figure 4.11b), the PDF slowly shifts toward smaller scalar values over time, conserving its shape consistently with the stable evolution of the scalar field inside the drop during its fall.



Figure 4.10 – Map of the local negative eigenvalue of the strain rate tensor $\underline{\dot{e}}$ in the high Pe spherical (a) and the stirring regime (b). The gray lines corresponds to the interface between the metallic and the silicate phase.

In the stirring regime (figure 4.11c), χ has a peaked distribution, which over time becomes narrower and shifts toward lower scalar levels as a result of the progressive homogenization.

It has been argued (Meunier et Villermaux, 2003; Villermaux, 2004; Duplat <u>et al.</u>, 2010b) that the interaction between stretched sheets and ligaments lead to the addition of their scalar fields and to the stable self-convolution of their scalar distributions. It is predicted that in this regime the scalar field distribution follows a one parameter gamma distribution,

$$P(X = \chi/\langle \chi \rangle) = \frac{n^n}{\Gamma(n)} X^{n-1} e^{-nX}, \qquad (4.37)$$

where $n = 1/\sigma^2$ is related to the standard deviation σ of the distribution. After a time corresponding to the development of stretched structures, the PDFs from our calculations are indeed well approximated by these one parameter gamma distributions (figure 4.11c), except in the tail where the probability density is higher. This again is consistent with an equilibration controlled by stretching enhanced diffusion. Self-convolution as a result of scalar fields addition also supports the assumption on the superposition of isolated sheets we made to predict the equilibration time of the drop (eq. 4.35).

4.5.5 Influence of the viscosity contrast

The viscosity ratio between metal and silicates is known to influence the dynamics of the flow, in particular the deformation and fragmentation of the metal phase, and the associated metal-silicate equilibration (*e.g.* Samuel, 2012; Wacheul <u>et al.</u>, 2014; Wacheul <u>et Le Bars</u>, 2018; Qaddah <u>et al.</u>, 2019, 2020; Clesi <u>et al.</u>, 2020). Figure 4.12 shows snapshots of the scalar field χ at $t = t_{1/2}$ for several viscosity ratio μ_1/μ_2 . The viscosity of the metal phase is kept constant while we change the viscosity, and consequently the Reynolds number of the ambient silicates as a change in the viscosity ratio, but we cannot separate this effect from the change in the Reynolds number.

When $\mu_1/\mu_2 \gtrsim 10^{-1}$, the metal phase is rapidly deformed by the two counter-rotating vortices typically occurring in the stirring regime (figure 4.12, i-iii). The dynamics of the flow



Figure 4.11 – Time evolution of the probability distribution function (PDF) of the scalar field in the small Pe diffusive (a), the high Pe spherical (b) and the stirring regime (c). Insets correspond to the time evolution of the cumulative distribution function (CDF) of the scalar field. The solid lines correspond to the fitted one parameter gamma distributions (eq. 4.37).

is then relatively independent of the viscosity ratio. When the viscosity ratio decreases, the deformation of the metal phase significantly decreases. KH and RT instabilities responsible for the deformation of the metal phase are damped by the ambient viscosity, the entrainment of silicates in the turbulent thermal is thus reduced. The metal phase is stretched backwards, which corresponds to the forward-facing bag regime (figure 4.12, iv). As the viscosity of the ambient fluid further increases, the drop becomes more stable to deformation, which leads to an intermediate regime, with an ellipsoidal drop associated to the backward development of a short and thin cylindrical fluid sheet gradually enclosing a bubble of silicates (figure 4.12, v). When $\mu_1/\mu_2 \lesssim 10^{-4}$, the drop is no longer deformed and remains spherical during its fall in the silicate phase (figure 4.12, vi).



Figure 4.12 – Snapshots of χ at $t = t_{1/2}$ for several viscosity ratios μ_1/μ_2 , at $\text{Pe}_1 = 10^4$, $\text{Re}_1 = 10^4$ and $\text{Bo} = 10^3$. Green lines correspond to the interface position between phase 1 and 2.

Figure 4.13a shows the average value of χ_1 in the metal phase as a function of time, for several viscosity ratios. Figure 4.13b shows the corresponding equilibration time, defined as the time where the average value of χ_1 is half its initial value, as a function of the viscosity ratio.

When $\mu_1/\mu_2 \gtrsim 1$, the evolution of $\langle \chi_1 \rangle$ is independent of the viscosity ratio, with a short equilibration time $t_{1/2}/t_g \simeq 6$. This corresponds to a developed stirring regime where the drop is strongly deformed and viscosity is negligible regarding the equilibration dynamics. Stretching enhanced diffusion is responsible for an efficient equilibration between metal and silicates. When $\mu_1/\mu_2 \lesssim 1$, the ambient viscosity increases and starts to affect equilibration by increasing the equilibration time. This corresponds to the transition toward spherical drops through the forward-facing bag and ellipsoidal regimes. Metal-silicate equilibration is reduced since stretching enhanced diffusion in the metal phase gradually vanishes. In the spherical (and ellipsoidal) regime, the equilibration time decreases as $t_{1/2}/t_g \sim (\mu_1/\mu_2)^{-0.51}$.

This sequence is consistent with experimental observations under similar conditions (Wacheul et Le Bars, 2018). The metal phase is indeed strongly deformed in a turbulent thermal at $\mu_1/\mu_2 \gtrsim 1.4 \times 10^{-2}$, whereas ambient fluid entrainment is reduced when the density ratio decreases ($\mu_1/\mu_2 \simeq 1.4 \times 10^{-3}$). This indeed leads to decreased equilibration distances and equilibration times when the viscosity ratio increases. At large viscosity ratios, equilibration distances obtained in Wacheul et Le Bars (2018, figure 12) tend to reach a plateau which may correspond to the plateau observed in our equilibration times (figure 4.13b). The gradual enclosing of a silicate bubble (figure 4.12, v) has already been observed experimentally (Wacheul et al., 2014) and numerically (Qaddah et al., 2019) under similar conditions. In the same way, the forward-facing bag regime (figure 4.12, iv) corresponds to the jellyfish mode obtained in



Figure 4.13 – (a) Average value of χ_1 in the metal phase as a function of time, normalized by t_g , for several viscosity ratio μ_1/μ_2 . (b) Equilibration time $t_{1/2}$, normalized by t_g , as a function of the viscosity ratio μ_1/μ_2 . The line corresponds to the calculated scaling law at low viscosity ratio.

experiments (Landeau <u>et al.</u>, 2014) and numerical simulations (Qaddah <u>et al.</u>, 2019, 2020). The increase in the stability of the drop with the viscosity of the ambient silicates is also consistent with previous numerical simulations in laminar or moderately turbulent conditions (Qaddah et al., 2019, 2020; Clesi et al., 2020).

4.5.6 Comparison with 3D simulations

In this section, we compare a 2D numerical simulations with preliminary results obtained with a 3D simulation in the same conditions ($Pe_1 = 1.4 \times 10^6$, $Re_1 = 2.5 \times 10^6$, $Bo = 7.6 \times 10^4$). Figure 4.14 shows snapshots of this 3D simulation at different times. The mean flow approximately behaves as a turbulent thermal in which ambient silicates are gradually entrained.

As in 2D simulations (figure 4.27), the spherical drop is first deformed by a combination of Rayleigh-Taylor and Kelvin-Helmholtz instabilities, which leads to the formation of metal sheets and ligaments. The ligaments then fragment into drops with a Rayleigh-Plateau instability. The metal phase fragments everywhere at the same time, which is consistent with experimental observations (Deguen et al., 2011, 2014; Wacheul et Le Bars, 2018). Although this 3D simulation captures the different building blocks of the generic fragmentation sequence (figure 4.1), the resolution is relatively low ($256 \times 256 \times 256$ cells) and numerical fragmentation may be superimposed on the physical fragmentation of the metal phase.

Figure 4.15 compares 2D and 3D simulations regarding the average value of the scalar field in the metal phase $\langle \chi_1 \rangle$ and the vertical velocity of the metal phase barycenter $\langle u_z \rangle$. $\langle \chi_1 \rangle$ decreases faster in 3D than in 2D, although the time evolution has the same shape in both cases (figure 4.15a). An explanation may be provided by geometrical effects, with a surface to volume ratio smaller in the 2D case than in the 3D case. This may produce an enhanced entrainment in the 3D case, resulting from the observed vertical velocity of the thermal 50% larger than the 2D case (figure 4.15b). This may also be explained by an increased stretching



Figure 4.14 – 3D simulation of falling drop in the stirring regime with a resolution of $256 \times 256 \times 256$ cells, at $Pe_1 = 1.4 \times 10^6$, $Re_1 = 2.5 \times 10^6$, $Bo = 7.6 \times 10^4$. The surface corresponds to the interface between the phases and the color scales as the vertical component of the vorticity. The time is normalised by t_q .

enhanced diffusion in the 3D case, due to the formation of both stretched sheets and ligaments, which is not the case in 2D. Stretching enhanced diffusion is indeed a key ingredient of the equilibration process since $\langle \chi_1 \rangle$ decreases by more than half of its initial value before the metal phase fragments into drops at $t/t_g \simeq 5$. Finally, an increased fragmentation of the metal phase in 3D may promote metal-silicate equilibration.

In addition to numerical fragmentation, the interpretations based on this 3D simulation have to be considered carefully since the low resolution does not allow to reach the scale at which viscous dissipation eventually occurs. More simulations, involving larger resolutions are thus required to validate the convergence of the turbulent thermal time evolution in 3D.

4.6 Equilibration in a magma ocean

In our numerical calculations, we find that the equilibration time is well approximated by $t_{1/2} = 0.53t_g \ln \text{Pe}_1$ (figure 4.4a), where the Péclet number is built on a stretching rate equal to $\langle u_y \rangle / s_0 = \sqrt{(\Delta \rho / \rho_1)gs_0} / s_0$. Using a falling velocity $\langle u_y \rangle = \sqrt{(\Delta \rho / \rho_1)gs_0}$, the equilibration distance (50% of the initial temperature/composition difference) of a metal core in the magma ocean is

$$d_{1/2} = 0.53s_0 \ln\left(\sqrt{\frac{\Delta\rho g}{\rho_1} \frac{s_0^{3/2}}{K_1}}\right).$$
(4.38)



Figure 4.15 – Comparison between 3D ($256 \times 256 \times 256$ cells) and 2D (4096×4096 cells) simulations in the same conditions ($Pe_1 = 1.4 \times 10^6$, $Re_1 = 2.5 \times 10^6$, $Bo = 7.6 \times 10^4$), regarding the average value of χ_1 in the metal phase (a) and the vertical velocity of the thermal barycenter $\langle u_z \rangle$, as a function of time, normalised by t_g .

As discussed in section 4.5, this equation has to be considered carefully since in our 2D simulations, numerical fragmentation of the metal phase may increase the equilibration efficiency, leading to an underestimate of the equilibration distance. On the other hand, geometrical effects, stretching enhanced diffusion and fragmentation of the metal phase in 3D may be related to an overestimate of the equilibration distance in 2D simulations.

Figure 4.16 shows the equilibration distance $d_{1/2}$ as a function of the initial core size, in the thermal $(K_1 = \kappa_1)$ and the compositional $(K_1 = \kappa_1^c)$ cases. As an example, the composition and temperature equilibration distances of a 10 km impactor's core sinking in a magma ocean would be 187 km and 134 km, respectively. We can also predict that only impactors with a core smaller than 185 km and 139 km will significantly equilibrate thermally or chemically in a 2900 km deep magma ocean. These estimates are significantly larger than in models based on the iron rain scenario, in which fragmentation produces small drops with a very efficient equilibration in less than a 100 m (Rubie et al., 2003) or 2 km (Samuel, 2012). This may be explained by an incomplete fragmentation into drops and an equilibration controlled by stretching enhanced diffusion in the metal phase. This could indeed lead to a thermal and concentration disequilibrium for large impactors (Deguen et al., 2011, 2014; Wacheul et Le Bars, 2018).

4.7 Conclusion and perspectives

Deformation and fragmentation of differentiated impactors' cores are key mechanisms for heat and chemical elements transfer during the differentiation of planetary bodies. We argue that fragmentation of the metallic core of an impactor must involves a change of topology leading to a collection of sheets and ligaments, which can then fragment into drops (figure 4.1). This picture is consistent with previous experimental results (Deguen <u>et al.</u>, 2011, 2014; Landeau <u>et al.</u>, 2014; Wacheul <u>et al.</u>, 2014; Kendall et Melosh, 2016; Wacheul et Le Bars, 2018)



Figure 4.16 – Equilibration distance $d_{1/2}$ of a metal core in a magma ocean as a function of the initial core size s_0 , in the thermal and the compositional cases. The dashed line corresponds to a 2900 km deep magma ocean.

and our numerical simulations (section 4.5), which suggest that a large volume of metal falling into a magma ocean would be vigorously stirred and stretched. We focus here on the physical concepts associated with the fragmentation and equilibration sequence. The "building blocks" of the fragmentation sequence involve stretched structures (sheets and ligaments) in which stretching enhanced diffusion, generalized here to immiscible fluids, improves significantly chemical and thermal equilibration efficiency between metal and silicates. The equilibration time depends mainly on the stretching rate with, if the stretching rate is constant, a logarithmic dependency on diffusivity and partition coefficient. We find that thermal equilibration may occur before fragmentation whereas chemical equilibration may still be incomplete at this moment. Fragmentation eventually produces droplets whose chemical equilibration depends critically on the partition coefficient (equation 4.34). In the stirring regime identified for large volume of metals (in the sense of having large Reynolds and Bond numbers), the metal phase is vigorously stretched and deformed. We find from numerical simulations in that regime that the equilibration time depends mainly on the stretching rate of the metal phase and weakly on diffusivity, irrespectively of viscosity and surface tension. Our results suggest that thermochemical equilibration is controlled by the stretching enhanced diffusion process, which in our numerical simulations develops from the mean flow, as the fall of the drop entrains surrounding silicates.

However, our results are based on the assumption that the stretching rate is governed by the mean flow (equation 4.35). This seems to be correct in our 2D calculations, but is unlikely to hold in 3D at higher Re and Bo due to the development of turbulent fluctuations. Turbulent velocity fluctuations would increase the stretching of the metal phase, and thus decrease the equilibration time. The prediction of equation 4.35 therefore most probably overestimates

significantly the equilibration time. We may anticipate that in the limit of high Re_1 , Bo and Pe_1 , equilibration of the metal with the surrounding silicates would even be fast enough for the evolution of the mean value of χ in the metal phase to be limited by the rate of entrainment of fresh silicates rather than by equilibration at the local scale. Our analysis suggests that the key for testing this hypothesis and estimating the equilibration times is to obtain models predicting the stretching rate of the metal phase during the cratering phase and post-cratering flow. In the chapter 5, we thus use laboratory experiments to investigate simultaneously the stretching and the mixing dynamics of the turbulent thermal.





Figure 4.17 – Stretched sheet in the diffusion regime, $Pe_1 = 5.5 \times 10^{-5}$ and $Re_1 = 10^{-3}$. Upper: χ in the middle of the sheet as a function of time normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$. Lower: Snapshots of χ at different times. Time is normalized by t_{κ} . Dotted grey lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



Figure 4.18 – Stretched sheet in the stretching enhanced diffusion regime, $Pe_1 = 5.5$ and $Re_1 = 1.0 \times 10^2$. Upper: χ in the middle of the sheet as a function of time normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$. Lower: Snapshots of χ at different times. Time is normalized by t_{κ} . Dotted grey lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.





Figure 4.19 – Stretched ligament in the diffusion regime, $Pe_1 = 5.5 \times 10^{-3}$, $Oh_{\kappa_1} = +\infty$ and $We_1 = +\infty$. Upper: Average value of χ_1 in phase 1 of the ligament as a function of time normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$. Lower: Snapshots showing maps of χ at different times. Numbers correspond to time normalized by t_{κ} . Dotted grey lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



Figure 4.20 – Stretched ligament in the stretching enhanced diffusion regime, $Pe_1 = 5.5 \times 10^1$, Oh_{κ_1} = + ∞ and We₁ = + ∞ . Upper: Average value of χ_1 in phase 1 of the ligament as a function of time normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$. Lower: Snapshots showing maps of χ at different times. Numbers correspond to time normalized by t_{κ} . Dotted grey lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



Figure 4.21 – Stretched ligament in the fragmentation regime, $Pe_1 = 5.5$, $Oh_{\kappa_1} = 10^{-6}$ and $We_1 = 3.0 \times 10^{-11}$. Upper: Average value of χ_1 in phase 1 of the ligament as a function of time normalized by $t_{\kappa} = s_0^2/K_1$. Lower: Snapshots of χ at different times. Numbers correspond to time normalized by t_{κ} . Dotted grey lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



4.C Snapshots of the free-falling drop

Figure 4.22 – Falling drop in the spherical regime, $Pe_1 = 10^4$, $Re_1 = 10^1$ and $Bo = 10^3$. Upper: average χ_1 in the metal phase as a function of time normalized by t_g . Lower: Snapshots of χ at different times. Time is normalized by t_g . Green lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.


Figure 4.23 – Falling drop in the wobbling regime, $Pe_1 = 10^4$, $Re_1 = 10^4$ and Bo = 1. Upper: average χ_1 in the metal phase as a function of time normalized by t_g . Lower: Snapshots of χ at different times. Time is normalized by t_g . Green lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



Figure 4.24 – Falling drop in the ellipsoidal-cap regime, $Pe_1 = 10^4$, $Re_1 = 10^1$ and $Bo = 10^1$. Upper: average χ_1 in the metal phase as a function of time normalized by t_g . Lower: Snapshots of χ at different times. Time is normalized by t_g . Green lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



Figure 4.25 – Falling drop in the backward-facing bag regime, $Pe_1 = 10^4$, $Re_1 = 10^1$ and $Bo = 10^4$. Upper: average χ_1 in the metal phase as a function of time normalized by t_g . Lower: Snapshots of χ at different times. Time is normalized by t_g . Green lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



Figure 4.26 – Falling drop in the forward-facing bag regime, $Pe_1 = 10^4$, $Re_1 = 10^2$ and $Bo = 10^4$. Upper: average χ_1 in the metal phase as a function of time normalized by t_g . Lower: Snapshots of χ at different times. Time is normalized by t_g . Green lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



Figure 4.27 – Falling drop in the stirring regime, $Pe_1 = 10^4$, $Re_1 = 10^4$ and $Bo = 10^4$. Upper: average χ_1 in the metal phase as a function of time normalized by t_g . Lower: Snapshots of χ at different times. Time is normalized by t_g . Green lines and solid grey lines respectively correspond to the interface position between phases 1 and 2 and streamlines of the velocity field.



Figure 4.28 – Drop in the diffusion regime, $Pe_1 = 1.0 \times 10^{-2}$, $Re_1 = 1.0 \times 10^4$ and $Bo = 7.6 \times 10^4$. Upper: Average value of χ_1 in phase 1 of the drop as a function of time normalized by $t_g = \sqrt{(\rho_1/\Delta\rho)s_0/g}$. Lower: Snapshots showing maps of χ at different times. Numbers correspond to time normalized by t_g . Dotted grey lines correspond to the interface position between phases 1 and 2.

5

Étude expérimentale du mélange post-impact

5.1 Introduction

Au cours de la différenciation des planètes telluriques, la phase métallique liquide issue du noyau des impacteurs migre dans la phase silicatée de l'océan de magma sous la forme d'un thermique turbulent immiscible (Deguen et al., 2011). L'étude expérimentale des thermiques immiscibles a montré que la dynamique générale de ces écoulements était équivalente à la dynamique d'un thermique miscible dans le mêmes conditions (Deguen et al., 2014; Landeau et al., 2014). L'immiscibilité entre les deux phases est néanmoins responsable de la fragmentation de phase métallique, ce qui est susceptible d'affecter la dynamique de l'équilibrage thermique et chimique entre métal et silicates (Deguen et al., 2014; Wacheul et Le Bars, 2018). Avant son éventuelle fragmentation, la phase métallique subit une élongation vigoureuse, ce qui augmente la surface d'échange entre les phases et maintient les gradients de concentration, influençant ainsi significativement la dynamique de l'homogénéisation entre métal et silicates (Deguen et al., 2014; Lherm et Deguen, 2018). L'influence des mécanismes de brassage sur le mélange a été étudiée numériquement sur les briques élémentaires de la séquence de fragmentation et sur un écoulement 2D dans un régime de brassage (chapitre 4). Les interactions entre l'écoulement à l'intérieur d'un thermique turbulent réel et le champ de température ou de concentration restent à caractériser. Pour cela, des expériences sur les thermiques turbulents immiscibles seraient nécessaires. Cependant, afin de s'affranchir des effets de la tension de surface et de simplifier les contraintes expérimentales, l'étude de thermiques miscibles constitue une première étape particulièrement adaptée.

Les thermiques turbulents miscibles sont des écoulements dont la mise en mouvement provient de la différence de densité entre deux fluides. La flottabilité de l'écoulement peut provenir d'une différence de densité d'origine thermique ou compositionnelle. Dans le cas d'un champ de pesanteur dirigé vers le bas, une flottabilité positive (négative), associée à un thermique plus (moins) dense que le fluide ambiant, fera migrer le thermique vers le bas (haut). Le terme « thermique », *thermal* en anglais, est hérité des « thermiques atmosphériques », dont l'origine est liée à des différences de température dans la colonne d'air, décrites pour la première fois par des pilotes de planeur (*e.g.* Woodward, 1956). Ces observations atmosphériques furent la base du développement de modèles et d'expériences, en particulier par des météorologistes intéressés par la dynamique des nuages (Scorer, 1957; Woodward, 1958, 1959).

Les thermiques turbulents s'inscrivent dans une famille d'écoulements où la flottabilité est cruciale pour leur dynamique (Turner, 1973). A la différence des panaches (*plumes*) où la source de flottabilité est maintenue dans le temps, dans un thermique (*thermal*) la source de flottabilité est ponctuelle (Turner, 1969). À ces deux grandes catégories s'ajoute une variété d'écoulements contrôlés au moins en partie par leur flottabilité, comme par exemple les pa-

naches forcés (*forced plumes*) (Morton, 1959), avec une quantité de mouvement imposée en plus de la flottabilité, et les panaches précoces (*starting plumes*) (Turner, 1962), intermédiaires entre un thermique et un panache. Par ailleurs, lorsqu'une quantité de mouvement initiale est fournie à une masse compact de fluide, un écoulement appelé anneau de vorticité (*vortex ring*) peut se former (Akhmetov, 2009). Ces anneaux possèdent une forme toroïdale s'enroulant autour d'un axe virtuel où les lignes de vorticité se referment en une boucle fermée. Ils peuvent avoir une densité différente du fluide ambiant, ce qui joue un rôle dans la propagation de l'anneau, on parle d'anneaux de vorticité flottant (*buoyant vortex ring*) (Turner et Taylor, 1957; Turner, 1964). En raison de leur forme en anneau, les thermiques turbulents peuvent donc être considérés comme des cas particuliers d'anneaux de vorticité flottants, sans quantité de mouvement initiale. Dans ce cas, la flottabilité initiale du thermique et sa circulation sont directement liées (Turner et Taylor, 1957).

Les thermiques turbulents ont été étudiés dans de nombreuses configurations, avec de petites (Morton <u>et al.</u>, 1956) et de grandes (Escudier et Maxworthy, 1973) différences de densité, au passage d'une interface de densité (Richards, 1961; Thompson <u>et al.</u>, 2000), ou encore dans un environnement stratifié en densité (Turner, 1973). Ces études ont montré que la dynamique de l'écoulement est contrôlée par l'entraînement turbulent du fluide ambiant à l'intérieur du thermique (Batchelor, 1954; Morton <u>et al.</u>, 1956; Turner, 1986). Ce concept est lié à l'hypothèse d'entraînement turbulent, qui prédit un taux d'entraînement du fluide ambiant proportionnel à la vitesse moyenne du thermique. L'incorporation du fluide ambiant est responsable de l'augmentation de la taille du thermique, de la dilution progressive de son contenu, et donc de son ralentissement croissant. L'entraînement turbulent correspond à la superposition entre un écoulement moyen, correspondant à l'incorporation du fluide ambiant à grande échelle, et la mise en place d'un processus visqueux de diffusion de la vorticité à petite échelle (Turner, 1986; Mathew et Basu, 2002).

La plupart des études sur les thermiques turbulents s'intéressent à l'évolution intégrale du thermique sans considérer sa structure interne, en particulier en terme de vorticité et de densité. Bond et Johari (2005) ont étudié l'effet de la géométrie initiale du thermique sur son développement proche de la source, en mesurant la vorticité et la densité (concentration d'un traceur fluorescent dans l'écoulement) à l'intérieur du thermique. Bond et Johari (2010) ont également étudié l'influence de la flottabilité sur la dynamique du thermique proche de la source, à partir de mesures expérimentales de profils de vorticité dans le thermique. Enfin, Zhao <u>et al.</u> (2013) ont caractérisé la structure interne du thermique loin de la source, en terme de vorticité et de concentration. A l'exception d'une unique expérience ayant permis de montrer que les régions du thermique contenant la vorticité et la concentration sont superposées (Zhao <u>et al.</u>, 2013), ces expériences ne permettent pas d'obtenir simultanément le champ de vitesse et le champ de concentration.

Dans ce chapitre, le champ de vitesse et le champ de concentration sont obtenus simultanément, ce qui permet d'étudier à la fois la cinématique de l'écoulement et la dynamique du mélange à l'intérieur du thermique. Après une présentation des expériences, l'écoulement est d'abord décrit qualitativement, ce qui permet de montrer une certaine hétérogénéité spatiale dans le thermique. L'évolution de la taille et de la concentration moyenne des thermiques est ensuite étudiée à la lumière de l'hypothèse d'entraînement turbulent. Puis, la cinématique de l'écoulement est caractérisée, en terme de circulation, de taux de déformation, d'élongation des structures et de spectre d'énergie cinétique. La dynamique du mélange est ensuite étudiée, en utilisant en particulier les densités de probabilité de la concentration, qui apportent des pistes pour expliquer l'hétérogénéité de l'homogénéisation dans le thermique. Enfin, cette hétérogénéité est discutée du point de vue de l'équilibrage métal-silicate.

5.2 Expériences

5.2.1 Dispositif expérimental

Dans ces expériences, un volume de liquide dense est libéré dans un liquide plus léger contenu dans une cuve de $30 \times 30 \times 100$ cm (figure 5.1a). Les deux fluides sont miscibles. Le fluide dense est contenu dans des tubes en aluminium de tailles variables (15, 30, 45, et 60 mm de diamètre et de hauteur, ce qui correspond respectivement à des volumes libérés de 2.7, 21.2, 71.6 et 169.6 mL). Le tube est scellé à ses deux extrémités par une membrane en latex tendue autour des ouvertures et maintenue en place par des colliers de serrage, puis rempli par le fluide dense. Le tube est ensuite immergé dans la cuve à une profondeur d'environ 15 cm sous la surface. Dans le cas des tubes de 30 à 60 mm, une aiguille vient alors percer délicatement la membrane supérieure afin d'enlever une éventuelle bulle bloquée contre la membrane. Une quantité négligeable de fluide est entraînée hors du tube pendant l'opération sous l'effet de la rétractation de la membrane. Après une minute de repos, une aiguille jusque-là retenue par un électroaimant est libérée et vient percer brutalement la membrane inférieure qui se rétracte très rapidement, libérant ainsi rapidement le fluide contenu dans le tube sous l'effet de la différence de densité avec le fluide ambiant. Pour le tube de 15 mm, les deux membranes sont percées simultanément car dans ce cas la rétractation de la membrane supérieure entraîne hors du tube une quantité non négligeable de fluide devant le volume contenu dans le tube. Une partie du fluide est donc libérée par le haut du tube, ce qui modifie sensiblement les conditions initiales de la libération du fluide.

Le liquide dense est une solution aqueuse de chlorure de sodium NaCl ($\rho_1 = 1011 - 1154 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ et $\mu_1 = 1.03 - 1.60 \text{ mPa} \cdot \text{s}$), tandis que la cuve est remplie d'eau ($\rho_2 = 998 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ et $\mu_2 = 1.005 \text{ mPa} \cdot \text{s}$). La densité est mesurée pour chaque expérience en utilisant un densitomètre Anton Paar 35 Basic, dont la précision est de l'ordre de 0.1%. Les viscosités correspondantes sont calculées à partir des données compilées par Haynes (2016). L'indice de réfraction des solutions aqueuses est de l'ordre de $n_1 = 1.336 - 1.370$, tandis que celui de l'eau est $n_2 = 1.333$ (Haynes, 2016).

Dans ces expériences, la fluorescence induite par laser (LIF) et la vélocimétrie laser par image de particules (PIV) sont utilisées simultanément pour obtenir le champ de concentration d'un traceur fluorescent initialement contenu dans le fluide dense et le champ de vitesse de l'écoulement (figure 5.2). L'écoulement est illuminé par une nappe laser verticale (532 nm) émise par un laser Nd :YAG continu de 400 mW combiné à une lentille cylindrique. La nappe laser est réfléchie verticalement en utilisant un miroir à 45° placé sous la cuve.

Dans le cas de la LIF (figure 5.1b), la nappe laser excite un colorant fluorescent (Rhodamine 6G) contenu dans le fluide dense. Le colorant fluorescent ré-émet ensuite dans une longueur d'onde comprise entre 500 et 700 nm. Un filtre passe-haut (> 540 nm) permet d'enlever la longueur d'onde du laser et d'isoler le signal d'émission. Les images sont ensuite calibrées spatialement à l'aide d'une mire, le fond enlevé et les inhomogénéités de la nappe laser sont corrigées. La concentration en colorant est finalement obtenue dans l'écoulement en utilisant une calibration préalablement déterminée entre l'intensité lumineuse et la concentration (annexe 5.A). L'évolution spatiale et temporelle du champ de concentration est alors utilisée pour analyser la dynamique du mélange dans le thermique turbulent.

Dans le cas de la PIV (figure 5.1c), la nappe las er illumine des particules de polyamides en suspension dans la cuve, dont la densité est $\rho_p = 1030 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ et le diamètre moyen $d_p = 60 \text{ }\mu\text{m}$. La longueur d'onde du las er est alors isolée avec un filtre passe-bande (532 \pm 10 nm). A fin d'obtenir le champ de vitesse, une caméra acquiert deux images rapprochées dans le temps



FIGURE 5.1 – (a) Schéma du dispositif expérimental utilisant simultanément la LIF et la PIV sur un thermique turbulent. (b) Image obtenue en utilisant la LIF. (c) Images obtenues en utilisant la PIV.

 $(\Delta t=12~{\rm ms})$ entre les quelles le déplacement des particules entraînées par l'écoulement est visible. Les deux images sont découpées en fenêtres d'interrogations et une corrélation croisée est réalisée dans chacune d'entre elles, afin d'obtenir le déplacement moyen des particules au sein de chaque fenêtre. Un vecteur vites se peut alors être calculé dans chaque fenêtre, ce qui permet de reconstituer l'ensemble du champ de vites se. Comme pour la LIF, les images sont calibrées spatialement à l'ai de d'une mire.

Les deux caméras utilisées sont positionnées légèrement en biais afin d'imager le même champ de vue, le chemin optique vers les caméras n'est donc pas normal à la nappe laser. La distorsion liée à cet angle est corrigée avec le processus de calibration spatiale réalisé pour les deux caméras sur une mire commune. Cela permet également de superposer précisément le champ de concentration obtenu avec une caméra et le champ de vitesse obtenu avec l'autre. Le champ de vue s'étend sur 32.8×38.5 cm (horizontal × vertical). Adimensionné par le rayon du tube, cela correspond à des champs de vue de 44×51 , 22×26 , 15×17 et 11×13 , pour les tubes de 15, 30, 45 et 60 mm, respectivement. Pour ces mêmes tubes, le champ de vue commence 5.3, 9.1, 8.3 et 7.6 cm sous la limite inférieure du tube, ce qui adimensionné donne 7.1, 6.0, 3.7 et 2.5 fois le rayon du tube. Les caméras utilisées sont des PCO Edge 5.5 avec des objectifs Nikon Nikkor 50 mm f/1.2. La résolution de chaque caméra est de 2560×2160 pixels, la dynamique de 16 bits, et la fréquence fixée à 20 Hz. La synchronisation temporelle des caméras est assurée



FIGURE 5.2 – Spectre d'absorption et d'émission du colorant fluorescent utilisé dans les expériences (Rhodamine 6G). Un filtre passe-haut (> 540 nm) est utilisé pour enlever la longueur d'onde du laser (532 nm) sur les images de LIF. Un filtre passe-bande (532 \pm 10 nm) est utilisé pour isoler la longueur d'onde du laser sur les images de PIV.

par un générateur de basses fréquences.

5.2.2 Paramètres expérimentaux

Les expériences présentées dans ce chapitre sont réparties dans quatre catégories en fonction du tube utilisé pour libérer le fluide dense (table 5.1). Pour chaque catégorie, trois expériences sont réalisées afin d'estimer la variabilité de l'écoulement. En effet, la caractère instationnaire de l'écoulement, ainsi que le couplage entre la flottabilité et l'écoulement moyen, rendent le thermique sensible aux conditions initiales de perçage de la membrane fermant le tube. La membrane inférieure ne se rétracte pas toujours de la même manière, ce qui modifie les conditions exactes dans lesquelles le fluide dense est libéré.

Sur les six nombres sans dimension de l'équation II.12, seuls quatre restent pertinent dans nos expériences miscibles. Le nombre de Bond Bo est en effet infini, car la tension de surface est nulle, tandis que le rapport de diffusivité vaut $K_1/K_2 = 1$, car le coefficient de diffusion de la Rhodamine 6G est le même dans toute la cuve. En plus des rapports de densité ρ_1/ρ_2 et de viscosité dynamique μ_1/μ_2 entre le fluide dense (i = 1) et le fluide léger (i = 2), les nombres de Reynolds Pe₁ et de Péclet Pe₁ sont définis comme

$$\operatorname{Re}_{1} = \sqrt{\frac{\Delta\rho}{\rho_{1}} \frac{gs_{0}^{3}}{\nu_{1}^{2}}}, \quad \operatorname{Pe}_{1} = \sqrt{\frac{\Delta\rho}{\rho_{1}} \frac{gs_{0}^{3}}{\kappa^{c2}}}, \quad (5.1)$$

où s_0 est le diamètre du tube, $\Delta \rho = \rho_1 - \rho_2$ est la différence de densité entre la densité du fluide dense ρ_1 et celle du fluide léger ρ_2 , ν_1 est la viscosité cinématique du fluide dense, $\kappa^c = 4.0 \times 10^{-10} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ (Gendron et al., 2008) est le coefficient de diffusion de la Rhodamine 6G dans l'eau et g est l'accélération de la gravité. Par ailleurs, la flottabilité initiale de chaque expérience est définie comme

$$B_0 = \frac{\Delta \rho}{\rho_2} V_0 g, \tag{5.2}$$

#	Tube (mm)	$B_0~(\mathrm{m}^4/\mathrm{s}^2)$	$ ho_1/ ho_2$	μ_1/μ_2	Re_1	Pe_1
А	15	4.1×10^{-6}	1.156	1.62	1510	$5.29 imes 10^6$
В	30	$1.8 imes 10^{-5}$	1.084	1.25	3940	$1.13 imes 10^7$
С	45	1.2×10^{-5}	1.017	1.05	3750	$9.67 imes 10^6$
D	60	2.2×10^{-5}	1.013	1.04	5080	1.31×10^7

TABLE 5.1 – Paramètres utilisés dans les quatre types expériences (A, B, C et D).

où V_0 est le volume de liquide contenu dans le tube.

Plusieurs échelles caractéristiques peuvent être définies dans ces thermiques turbulents. Le moteur de l'écoulement étant la gravité, une première approche consiste à utiliser la taille du tube, ainsi qu'une vitesse et un temps de chute liés à la gravité (*e.g.* Bond et Johari, 2005) comme longueur, vitesse et temps caractéristiques

$$l_g = s_0, \quad u_g = \sqrt{\frac{\Delta\rho}{\rho_1}} s_0 g, \quad t_g = \sqrt{\frac{\rho_1}{\Delta\rho}} \frac{s_0}{g}.$$
(5.3)

Une seconde méthode consiste à utiliser l'excès de flottabilité B_0 du thermique (*e.g.* Zhao <u>et al.</u>, 2013), qui contrôle la dynamique de l'écoulement, ce qui produit des échelles caractéristiques différentes

$$l_B = B_0^{1/3} g^{-1/3}, \quad u_B = B_0^{1/6} g^{1/3}, \quad t_B = B_0^{1/6} g^{-2/3}.$$
 (5.4)

L'objectif de ces expériences est de déterminer les interactions entre le mélange produit par un thermique turbulent et la dynamique de l'écoulement. Afin d'extrapoler les résultats obtenus en laboratoire à un écoulement post-impact dans un océan de magma, pour lequel le nombre de Reynolds est supérieur de plusieurs ordres de grandeur (table II.3), le nombre de Reynolds de nos expériences est à maximiser. Un certain nombre de contraintes s'appliquent cependant dans le choix des paramètres expérimentaux.

D'abord, le fluide dense et le fluide léger doivent être miscibles, en particulier afin de simplifier la mise en place de la LIF et de la PIV. L'utilisation de fluides immiscibles comme une solution aqueuse et une huile de silicone (*e.g.* Deguen <u>et al.</u>, 2011, 2014) nécessiterait d'utiliser un traceur chimique soluble dans les deux phases, ce qui n'est pas le cas de la Rhodamine 6G par exemple, ou alors de chauffer la phase dense puis de mesurer le champ de température en utilisant des méthodes telles que la LIF à deux couleurs ou des cristaux thermochromiques (*e.g.* Smith <u>et al.</u>, 2001). Par ailleurs, l'indice optique des deux phases doit être le même afin de réduire les phénomènes de réfraction rendant difficile les mesures de LIF et de PIV, ce qui est rendu possible en ajustant la concentration en sel de la solution dense.

Le choix du sel utilisé dans la solution dense s'oriente en premier lieu vers le iodure de sodium NaI ou le chlorure de césium CsCl en raison de leur faible influence sur la viscosité et l'indice optique de la solution aqueuse (annexe I.A). Cependant, ces derniers sont inutilisables avec les colorants fluorescents comme la Rhodamine 6G, car la présence de ces sels favorise la formation d'agrégats réduisant l'intensité de la fluorescence (*e.g.* Fischer et Georges, 1998). Dans les gammes de concentration en sels utilisées dans les expériences, l'intensité de la fluorescence devient indépendante de la concentration en colorant, ce qui ne permet plus de relier l'intensité à la concentration (annexe 5.A). Les expériences sont donc réalisées avec du chlorure de sodium NaCl qui n'atténue pas la fluorescence.

Même avec des fluides miscibles, les indices optiques des fluides doivent être proches pour pouvoir effectuer les mesures de LIF et de PIV, la concentration maximale de NaCl est donc limitée. Cette concentration maximale dépend de la taille du tube utilisé car plus le tube est grand et plus le chemin optique menant à la caméra est perturbé par les réfractions issues du contraste d'indice optique entre les deux fluides. Concrètement, la concentration en sel est ajustée pour chaque tube afin d'obtenir des images de PIV exploitables. Cela explique la diminution du rapport de densité lorsque la taille du tube augmente.

La maximisation du nombre de Reynolds dans nos expériences, en prenant en compte les contraintes discutées ci-dessus, donne des nombres de Reynolds et de Péclet dans l'intervalle $\text{Re}_1 = 1510 - 5080$ et $\text{Pe}_1 = 5.29 \times 10^6 - 1.31 \times 10^7$. Par ailleurs, ce choix de rapport de densité donne des nombres de Reynolds et de Péclet proches dans le cas des expériences B et C. L'influence de ces nombres sur la dynamique du mélange n'est donc sensible qu'à trois catégories d'expériences. Néanmoins, les expériences B et C permettent d'étudier l'influence de la taille initiale du thermique et du rapport de densité pour un nombre de Reynolds et de Péclet donné.

5.2.3 Diagnostique expérimental

Chaque image issue des méthodes de LIF et de PIV est traitée à posteriori afin d'obtenir l'évolution temporelle des grandeurs cibles liées à la taille et la position du thermique, au champ de concentration, et au champ de vitesse (figure 5.3).



FIGURE 5.3 – (a) Diagnostique expérimental basé sur le champ de concentration c/c_0 . Le centre de masse et le diamètre de la tête du thermique sont désignés respectivement par la croix et par la barre horizontale passant par le centre de masse. Le contour correspond au masque utilisé pour calculer les moments et les distributions de la concentration, ainsi que les intégrales de production des gradients de concentration. (b) Diagnostique expérimental basé sur la valeur propre négative du tenseur du taux de déformation $\dot{\epsilon}_3$. Le contour correspond au masque utilisé pour calculer la moyenne et la distribution des taux de déformation, ainsi que la circulation.

La position du centre de masse et le rayon de la tête du thermique sont déterminés à partir du champ de concentration (figure 5.3a). Le traitement comporte plusieurs étapes successives.

Le barycentre de l'ensemble du thermique, incluant donc la tête et la queue, est d'abord déterminé à partir de la dispersion du traceur fluorescent. Pour cela, le champ de concentration est binarisé à partir d'un seuil arbitraire correspondant à 10% de la concentration maximale, ce qui permet de déterminer le forme globale du thermique. Le centre de masse de coordonnées (x, z) est ensuite obtenu en calculant le barycentre de l'image binarisée selon

$$\begin{cases} x = \frac{1}{N} \sum_{i} \sum_{j} x_{i,j} I_{i,j} \\ z = \frac{1}{N} \sum_{i} \sum_{j} z_{i,j} I_{i,j} \end{cases},$$
(5.5)

où $x_{i,j}$, $z_{i,j}$ et $I_{i,j}$ sont respectivement les positions horizontales et verticales, ainsi que la valeur binarisée, des pixels de coordonnées (i, j), et N est le nombre de pixels non nuls dans l'image binarisée. Cela signifie que $I_{i,j} = 1$ si la concentration du pixel excède 10% de la concentration maximale, et $I_{i,j} = 0$ sinon. Le barycentre de la tête du thermique est ensuite obtenu avec une méthode itérative. Pour cela, le calcul de l'équation 5.5 est effectué plusieurs fois en combinant le masque initial basé sur la concentration maximale à un masque de binarisation correspondant à la tête du thermique. Le résultat de cette itération est présenté sur la figure 5.3 (croix). Le rayon du thermique est ensuite déterminé à partir de la dispersion horizontale σ_x du champ de concentration autour du barycentre dans la tête du thermique avec

$$\sigma_x = \sqrt{\sum_{i} \sum_{j} (x_{i,j} - x)^2 c_{i,j} I_{i,j}},$$
(5.6)

où $c_{i,j}$ est la concentration normalisée du pixel (i, j) et $I_{i,j}$ est la valeur du masque de binarisation correspondant à la tête du thermique (0 ou 1). La concentration est normalisée pour que

$$\sum_{i} \sum_{j} c_{i,j} I_{i,j} = 1.$$
(5.7)

Le rayon du thermique est alors défini comme $r = \sqrt{2} \text{erf}^{-1}(0.9)\sigma_x \simeq 1.64\sigma_x$, ce qui, en supposant que la concentration est distribuée selon une loi normale, permet d'inclure une fraction constante, égale à 90%, du champ de concentration à l'intérieur du thermique. Cela permet de faire correspondre le rayon du thermique avec la limite horizontale du champ de concentration dans la tête du thermique (figure 5.3a, trait horizontal).

Les moments de la concentration, en particulier sa moyenne, la distribution de la concentration, la distribution des incréments de concentration, les fonctions de structure et les intégrales de production des gradients de concentration sont calculés dans une région correspondant à l'intérieur du thermique turbulent sur la base du champ de concentration (figure 5.3a). Cette région est délimitée en utilisant un seuil de concentration correspondant à la moyenne de la concentration plus un écart-type, calculé dans l'ensemble du champ de vue. Le masque ainsi défini est ensuite dilaté spatialement afin de couvrir l'intégralité de la région du thermique, y compris les faibles concentrations périphériques. Le résultat est présenté sur la figure 5.3a (contour continu).

La moyenne et la distribution des taux de déformation, ainsi que la circulation, sont calculés dans une région définie sur la base de la valeur propre négative du tenseur du taux de déformation. Cette région est définie à partir d'un seuil déterminée avec la méthode d'Otsu (1979) permettant d'inclure les régions déformées à l'intérieur du thermique. Le résultat est présenté sur la figure 5.3b (contour continu).

5.3 Description de l'écoulement

Les expériences se focalisent sur la dynamique d'un thermique turbulent miscible après la phase initiale d'accélération, ce qui correspond typiquement à $z \gtrsim 3r_0$ (Scorer, 1957), où r_0 est le rayon initial du thermique, c'est-à-dire le rayon du tube. La figure 5.4 présente l'évolution temporelle du champ de concentration d'un thermique dans le cas B (Re₁ = 3940). L'échelle de couleur du champ de concentration est la même sur chaque image, ce qui signifie que cette séquence temporelle montre l'évolution de la concentration moyenne du thermique. Le champ de vitesse est superposé au champ de concentration. La figure 5.5 présente l'évolution de la vorticité pour la même expérience. L'échelle de couleur correspond à la composante ω_y de la vorticité, c'est-à-dire la composante normale à la nappe laser, normalisée sur chaque image afin de visualiser la structure de l'écoulement.

Dans la suite de ce chapitre, il est fait référence à différentes régions du thermique turbulent, définies dans la figure 5.6. De manière générale, le thermique est composé d'une tête et d'une queue cylindrique située à l'arrière de l'écoulement. La tête est composée d'un cœur en forme d'anneau, autour duquel se trouve une région périphérique en forme d'ellipsoïde, généralement aplatie verticalement.

Le volume libéré au moment du perçage de la membrane est immédiatement déformé avec la formation de protubérances liées à la mise en place d'une instabilité de Rayleigh-Taylor en raison de la différence de densité entre les deux fluides. Ces protubérances se développent et sont visibles pendant le début de l'écoulement (figure 5.4, i). Le thermique turbulent, contenu dans une région sphéroïde où se mélange le fluide dense et le fluide ambiant, migre progressivement vers le bas en raison de sa flottabilité. Au cours de sa chute, le rayon du thermique augmente en raison de l'incorporation progressive du fluide ambiant par un tourbillon contenu dans le thermique (figure 5.5), on parle alors d'entraînement turbulent. En conséquence, la concentration en colorant fluorescent diminue en raison de la dilution du fluide dense par le fluide ambiant (figure 5.4).

L'entraînement turbulent résulte de l'effet cumulé de l'incorporation du fluide ambiant par l'écoulement de grande échelle (*engulfment* en anglais), essentiellement un flux de matière à l'arrière du thermique, et de la mise en place d'un processus visqueux de diffusion de la vorticité, correspondant à des fluctuations turbulentes à petite échelle (*nibling* en anglais). C'est ce qui est observé sur la figure 5.7, avec d'une part un tourbillon à grande échelle entraînant le fluide ambiant dans le thermique et contrôlant son taux de croissance, et d'autre part des fluctuations de vitesse à petite échelle qui transmettent la vorticité au thermique et permettent à terme l'assimilation du fluide ambiant. L'entraînement turbulent dilue donc progressivement le fluide contenu dans le thermique, avec une combinaison de phénomène de brassage et de mélange.

Certaines régions du thermique semblent moins bien mélangées que d'autres, en particulier au niveau du cœur autour duquel s'enroule le thermique. Au contraire, le mélange semble être plus efficace au centre et sur les bords du thermique. Ces observations sont cohérentes avec l'idée d'un entraînement turbulent incorporant du fluide depuis la zone de mélange située à la périphérie du thermique, vers le centre du thermique, où l'écoulement converge. Le cœur autour duquel s'enroule le thermique resterait ainsi peu diluée par le fluide ambiant.

La libération du fluide dense se fait quasiment instantanément, néanmoins une queue de fluide dense traîne en arrière de la tête du thermique (*e.g.* figure 5.4, iv). Cette queue est probablement le résultat d'un perçage incomplet de la membrane, ou de frottements visqueux le long des parois du tube, ce qui étale dans le temps la libération du fluide dense. Néanmoins, la queue étant fortement dilué, le volume de fluide dense qu'elle contient est supposé négli-



FIGURE 5.4 – Évolution d'un thermique turbulent dans le cas B (Re₁ = 3940). L'échelle de couleur correspond au champ de concentration (LIF). Les flèches représentent la direction du champ de vitesse (PIV). Le temps après le perçage de la membrane est donné en seconde, ainsi que normalisé par $t_g = \sqrt{(\rho_1/\Delta\rho)s_0/g}$.



FIGURE 5.5 – Évolution d'un thermique turbulent dans le cas B (Re₁ = 3940). L'échelle de couleur correspond à la composante ω_y de la vorticité, c'est-à-dire la composante normale à la nappe laser, normalisée sur chaque image. Les flèches représentent la direction du champ de vitesse. Le temps après le perçage de la membrane est donné en seconde, ainsi que normalisé par $t_g = \sqrt{(\rho_1/\Delta\rho)s_0/g}$.



FIGURE 5.6 – Définition des régions du thermique turbulent. La tête est composée d'un cœur prenant la forme d'un anneau, situé à l'intérieur d'une région périphérique en forme d'ellipsoïde, généralement aplatie verticalement. La queue est composée d'une traînée cylindrique en arrière de la tête.

geable devant le volume dans la tête du thermique (Scorer, 1957; Richards, 1961; Thompson et al., 2000).

La structure et la dynamique du thermique turbulent semble varier en fonction du tube considéré. La figure 5.8 présente la vorticité et le champ de concentration dans les différentes, ca (A, B, C et D). A noter que les images sont choisies à des distances parcourues différentes, ce qui implique qu'il n'est pas possible de comparer la taille ou la concentration moyenne des thermiques, car ces dernières dépendent directement de la distance parcourue. Il s'agit ici de comparer la structure du thermique en considérant le nombre de Reynolds et la taille du tube dans un régime de thermique turbulent bien développé, c'est-à-dire loin de la source. Pour rappel, les expériences ont des rapports de densité différence). Dans le cas A ($\rho_1/\rho_2 \simeq 1.16$ et Re₁ $\simeq 1500$), le thermique présente un cœur bien défini dans lequel le fluide ambiant est entraîné. Les fluctuations turbulentes, qualitativement observables à partir des petites échelles du champ de vorticité et du degré de brassage du champ de concentration, sont relativement faibles en comparaison avec l'écoulement moyen dominé par l'incorporation du fluide ambiant. Dans le cas B ($\rho_1/\rho_2 \simeq 1.08$ et Re₁ $\simeq 3900$), les fluctuations turbulentes semblent augmenter par rapport à l'écoulement moyen, en relation avec une augmentation du nombre



FIGURE 5.7 – Image d'un thermique turbulent dans le cas D (Re₁ = 5080). L'échelle de couleur correspond à la composante ω_y de la vorticité, c'est-à-dire la composante normale à la nappe laser. Les flèches représentent la direction du champ de vitesse.

de Reynolds, associé à une intensification de la turbulence. Dans le cas C ($\rho_1/\rho_2 \simeq 1.02$ et Re₁ $\simeq 3800$), les fluctuations turbulentes sont comparables à celles du cas B, ce qui est attendu étant donné que les nombres de Reynolds sont relativement proches. La taille du tube ne semble donc pas influencer significativement sur la dynamique thermique pour un nombre de Reynolds donné. Dans le cas D, ($\rho_1/\rho_2 \simeq 1.01$ et Re₁ $\simeq 5100$), le nombre de Reynolds augmente encore, ce qui explique l'augmentation de l'intensité des fluctuations turbulentes. L'écoulement moyen associé à l'incorporation de fluide ambiant dans le thermique turbulent est moins bien formé que dans les autres cas. Cela pourrait s'expliquer par une distance à la source plus petite, avec un thermique n'ayant pas eu le temps de se développer pleinement, et par l'émergence d'interactions avec le bord de la cuve en raison de la taille du tube utilisé.

D'une expérience à l'autre, les thermiques miscibles présentent systématiquement une variabilité dans leur développement en raison de leur caractère instationnaire et du couplage entre la flottabilité et l'écoulement. Au moment de la libération du fluide dense, une petite perturbation lié à un perçage imparfait de la membrane est susceptible d'entraîner une modification conséquente de l'écoulement moyen. De la même manière, au cours de l'écoulement, les fluctuations turbulentes à l'intérieur du thermique peuvent interagir avec la flottabilité du thermique et modifier sa dynamique à grande échelle. Cette variabilité est susceptible de provoquer des modifications au niveau de l'angle, de la vitesse, de la taille et de la structure du thermique, et par conséquent des variations de l'évolution du champ de concentration et de la dynamique du mélange. Par ailleurs, la variabilité est amplifiée par l'utilisation de la LIF et de la PIV qui ne permettent d'obtenir qu'une section de l'écoulement. En particulier, une



FIGURE 5.8 – Image d'un thermique turbulent dans les cas A, B, C et D. Les échelles de couleur correspondent à la composante ω_y de la vorticité, c'est-à-dire la composante normale à la nappe laser (gauche), et au champ de concentration normalisé sur chaque image (droite). Les flèches représentent la direction du champ de vitesse.

déviation du thermique hors de la nappe laser peut mener à une observation de l'écoulement sans passer par son axe de symétrie, ce qui modifie significativement la structure apparente du thermique. La figure 5.9 présente trois expériences dans la même configuration (cas B), à des temps identiques. La structure du thermique, en particulier l'écoulement moyen, varie effectivement d'une expérience à l'autre.



FIGURE 5.9 – Image d'un thermique turbulent pour trois expériences différentes dans les mêmes conditions (cas B, $\text{Re}_1 = 3940$). Le temps (t = 10 s et $t/t_g = 71$) est identique pour les trois images. L'échelle de couleur correspond au champ de concentration (LIF). Les flèches représentent la direction du champ de vitesse (PIV).

5.4 Entraînement turbulent dans un thermique

Cette partie s'intéresse à l'évolution intégrale du thermique turbulent, en particulier en terme de taille et de position moyenne. L'homogénéisation apparente globale du thermique, basée sur l'évolution de la concentration moyenne est également obtenue. Les expériences sont interprétées à la lumière de l'hypothèse d'entraînement turbulent.

5.4.1 Taille et position

L'étude expérimentale de la taille et de la position des thermiques turbulents a donné naissance à plusieurs classes de modèles. Ces derniers peuvent par exemple utiliser uniquement des petites différences de densité (Morton <u>et al.</u>, 1956), considérer la contribution du fluide ambiant au bilan de quantité de mouvement et de grandes différences de densité (Escudier et Maxworthy, 1973), ou encore utiliser une quantité de mouvement initiale non nulle (Deguen et al., 2011).

Néanmoins, l'approche la plus simple pour comprendre la dynamique des thermiques turbulents reste l'utilisation de solutions auto-similaires basées sur des observations expérimentales et des arguments dimensionnels (*e.g.* Turner, 1973). Dans le cas d'un thermique axisymétrique, il est possible de supposer que les profils de vitesse et la densité à l'intérieur du thermique ne varient pas dans le référentiel du centre de masse du thermique, et que le seul paramètre contrôlant le mouvement du thermique est sa flottabilité totale B_0 , constant dans le cas d'un fluide ambiant homogène. Une analyse dimensionnelle permet de montrer que le rayon du thermique r, sa vitesse verticale w et la gravité réduite $g' = \frac{\bar{\rho} - \rho_2}{\rho_2} g$, où $\bar{\rho}$ est la densité thermique du thermique, peuvent alors s'exprimer comme

$$\begin{cases} r = r_i + \alpha z, \\ w = B_0^{1/2} z^{-1} f_w \left(\frac{r'}{r}\right), \\ g' = B_0 z^{-3} f_g \left(\frac{r'}{r}\right), \end{cases}$$
(5.8)

où α est le coefficient d'entraînement, r_i est
est le rayon initial du thermique, et les profils f_w et
 f_g sont des fonctions du vecteur position r'. La dérivée de la première équation illustre bien
 l'hypothèse d'entraînement turbulent

$$u = \alpha w, \tag{5.9}$$

qui affirme que la vitesse moyenne d'entraînement du fluide ambiant u est proportionnelle à la vitesse moyenne verticale du thermique w. Exprimée en fonction du temps, l'équation 5.8 est équivalente à

$$\begin{cases} r \propto z \propto (t - t_i)^{1/2}, \\ w \propto (t - t_i)^{-1/2}, \\ g' \propto (t - t_i)^{-3/2}, \end{cases}$$
(5.10)

où t_i correspond à l'origine temporelle du thermique.

La figure 5.10a montre l'évolution du rayon du thermique r en fonction de la distance parcourue par le centre de masse z, pour les trois expériences respectives des cas A, B, C et D. Le centre de masse et le rayon du thermique sont déterminé à partir de la méthode détaillée dans la partie 5.2.3. Lorsque que le thermique est bien développé, le rayon du thermique est supposé augmenter linéairement avec la distance parcourue (équation 5.8). Cette hypothèse est effectivement vérifiée dans le cas A, mais pas dans les cas B, C et D où il est difficile de s'assurer de la croissance linéaire du rayon. La croissance non linéaire et non monotone du rayon du thermique, observée dans nos expériences, est imputée à la méthode de détermination du rayon qui utilise la LIF. A la différence de la majorité des études sur les thermiques turbulents qui utilisent un illumination par l'arrière (*e.g.* Scorer, 1957; Richards, 1961; Deguen et al., 2011; Landeau et al., 2014), les limites du thermique sont obtenues avec une nappe laser, ce qui peut affecter la détermination de la taille du thermique si son centre de masse s'écarte du plan laser.

Pour un thermique turbulent, des expériences ont montré que le coefficient d'entraînement est $\alpha \simeq 0.25$ (e.g. Morton et al., 1956; Scorer, 1957; Deguen et al., 2011), indépendamment du nombre de Reynolds (Turner, 1969). Dans le cas A, le coefficient d'entraînement est plus grand que la valeur attendue avec $\alpha = 0.4 - 0.5$. Cela pourrait être expliqué avec un écoulement plus proche d'un anneau de vorticité peu turbulent que d'un thermique turbulent, associé à un nombre de Reynolds relativement petit ($Re_1 \simeq 1500$). Dans les cas B, C et D, malgré les variations importantes du rayon du thermique, il est possible d'identifier une croissance relativement linéaire sur certaines expériences après un certain temps (par exemple, la courbe verte du cas B si $z/r_0 \gtrsim 10$). Les coefficients d'entraînement sont alors un peu plus faibles que la valeur attendue avec $\alpha = 0.15 - 0.20$.

La figure 5.10b montre l'évolution du carré de la distance parcourue en fonction du temps, pour les trois expériences respectives des cas A, B, C et D. Lorsque que le thermique est bien développé, le carré de la distance parcourue par le thermique est supposé augmenter linéairement avec le temps (équation 5.10). Cette hypothèse est vérifiée dans les quatre cas sur la plupart



FIGURE 5.10 – (a) Rayon moyen du thermique normalisé par le rayon du tube r/r_0 , en fonction de la distance parcourue par le centre de masse du thermique z/r_0 . (b) Carré de la distance parcourue par le centre de masse du thermique normalisée par le rayon du tube $(z/r_0)^2$, en fonction du temps t normalisé par $t_g = \sqrt{(\rho_1/\Delta\rho)s_0/g}$. Les trois couleurs correspondent à trois expériences dans une même configuration.

des expériences, à l'exception des temps courts ($t/t_g \lesssim 10$) où le thermique n'a peut-être pas tout à fait terminé sa phase d'accélération et n'a donc pas atteint le régime asymptotique, en particulier dans le cas D.

La variabilité entre les expériences d'un même cas se retrouve évidemment sur les mesures du rayon et de distance parcourues par le thermique. Pour une distance donnée, un rayon plus important traduit un entraînement accru, associé à une dilution plus rapide du fluide dense et à une diminution de la vitesse verticale du thermique, menant donc à un temps de parcours augmenté depuis le perçage de la membrane.

Malgré les fluctuations inhérentes à chaque expérience et la variabilité entre les expériences d'un même cas, ces mesures sont globalement cohérentes avec la description qualitative de la partie 5.3, dans le sens où ces écoulements correspondent bien à des thermiques turbulents et sont compatibles avec l'hypothèse d'entraînement turbulent.

5.4.2 Homogénéisation apparente

La mesure du champ de concentration avec la LIF permet d'obtenir l'évolution de la concentration moyenne au cours du temps. Sur chaque image, la concentration moyenne est calculée dans une région correspondant à l'intérieur du thermique turbulent. Cette région est délimitée en utilisant la méthode de la partie 5.2.3.

La figure 5.11a montre l'évolution de cette concentration moyenne pour les expériences des cas A, B, C et D. Les expériences suivent globalement une loi de puissance en $t^{-3/2}$, comme attendu dans le cas d'un thermique turbulent, étant donné que la concentration en colorant fluorescent est proportionnelle à l'évolution de la différence de densité et donc à la gravité réduite g' (équation 5.10). Aux temps longs, la loi de puissance sous-estime la valeur expérimentale de la concentration moyenne, en particulier pour le cas A. Dans ce cas, cette sous-estimation pourrait s'expliquer par une dynamique différente d'un thermique turbulent en raison du nombre de Reynolds modéré de ces expériences. Par ailleurs, aux temps longs, le thermique atteint une dimension similaire à celle de la nappe laser, ce qui mène à une surestimation de la concentration moyenne car les bords moins concentrés du thermique ne sont alors pas pris en compte.

En supposant une évolution de la concentration moyenne $\langle c \rangle$ en $t^{-3/2}$ (équation 5.10), il est possible d'ajuster au données expérimentales une équation de la forme

$$\langle c/c_0 \rangle = \left(\frac{t}{t^*}\right)^{-3/2},\tag{5.11}$$

où c_0 est la concentration initiale et t^* est un paramètre ajusté. Ce dernier est relié au temps d'équilibrage apparent du thermique t_a par

$$t_a = t^* \left(\frac{c_a}{c_0}\right)^{-2/3},$$
(5.12)

où t_a est défini comme le temps auquel la concentration moyenne atteint une valeur c_a/c_0 donnée. t_a est bien un temps d'équilibrage apparent car il est déterminé à partir de la concentration moyenne à l'intérieur du thermique. En effet, cela ne permet pas de discriminer les deux processus d'homogénéisation, avec d'une part le mélange entre fluide dense et fluide ambiant à l'échelle moléculaire, et d'autre part le brassage entre les deux fluides en relation avec l'entraînement turbulent du fluide ambiant. L'homogénéisation réelle dans le thermique est probablement une combinaison de ces deux processus avec le brassage du fluide dense



FIGURE 5.11 – (a) Concentration moyenne dans à l'intérieur du thermique normalisée par la concentration initiale $\langle c/c_0 \rangle$ en fonction du temps t, normalisé par $t_g = \sqrt{(\rho_1/\Delta\rho)s_0/g}$. Les lignes pointillées correspondent à une loi de puissance en $t^{-3/2}$ (équation 5.11) ajustée, pour chaque cas, sur la moyenne des trois expériences. (b) Temps d'équilibrage apparent t_a avec $c_a/c_0 = 0.01$ (équation 5.12) normalisé par t_g en fonction du nombre de Péclet Pe₁.

conduisant à la formation de structures dont la taille permet le mélange à l'échelle moléculaire par diffusion.

La figure 5.11b montre le temps d'équilibrage apparent t_a pour une homogénéisation moyenne correspondant à 1% de la concentration initiale, en fonction du nombre de Péclet Pe₁. Bien qu'il soit supérieur à celui du cas A, le temps d'équilibrage des cas B, C et D ne varie pas significativement au sein de ce groupe d'expériences. La différence avec le cas A pourrait s'expliquer par un faible nombre de Reynolds, qui place l'écoulement hors du régime des thermiques turbulents développés, et pourrait réduire l'homogénéisation entre les fluides en raison d'une diminution des fluctuations turbulentes. Au vu de la variabilité entre les expériences d'un même cas, les cas B, C et D ont des temps d'équilibrage similaires, relativement indépendants du nombre de Péclet. Cette observation doit cependant être considérée prudemment car le nombre de Péclet ne varie que d'un facteur 1.4 entre les cas B, C et D. Elle serait néanmoins en accord avec les résultats issus de simulations numériques (chapitre 4) où le temps d'équilibrage est de la forme $t_a \sim t_g \ln Pe_1$. L'équilibrage pourrait ainsi être contrôlé par un phénomène de *stretching enhanced diffusion*, dont le taux d'étirement est déterminé par l'écoulement moyen à grande échelle, avec un faible influence (logarithmique) du nombre de Péclet, et donc de la diffusivité.

La valeur moyenne du temps d'équilibrage pour les cas B, C et D est $t_a/t_g = 22 \pm 3$, ce qui est supérieur à la valeur obtenue dans les simulations numériques du chapitre 4 avec $t_a/t_g \simeq 12$ pour des nombres de Péclet similaires (Pe₁ = 1×10^4). Cet écart n'est pas étonnant vu que les nombres de Péclet est plus petit dans le cas numérique, et étant donné les différences existant entre les deux méthodes, des simulations numériques immiscibles 2D et des expériences miscibles 3D.

Le même raisonnement sur la concentration moyenne est applicable en fonction de la distance parcourue par le thermique afin d'obtenir une longueur d'équilibrage, pertinente en ce qui concerne l'homogénéisation métal-silicate dans un océan de magma de profondeur finie. La figure 5.12a montre la concentration moyenne à l'intérieur du thermique en fonction de la distance parcourue dans les cas A, B, C et D. Les expériences suivent cette fois une loi de puissance en z^{-3} , comme attendu dans le cas d'un thermique turbulent (équation 5.8). En supposant une évolution de la concentration moyenne en z^{-3} , il est possible d'ajuster les données expérimentales à une équation de la forme

$$\langle c/c_0 \rangle = \left(\frac{z}{z^*} + 1\right)^{-3},\tag{5.13}$$

où z^{\ast} est un paramètre ajusté relié à la longueur d'équilibrage apparente l_{a} par

$$l_a = z^* \left[\left(\frac{c_a}{c_0} \right)^{-1/3} - 1 \right],$$
(5.14)

où l_a est définie comme la distance à laquelle la concentration moyenne atteint une valeur c_a/c_0 donnée.



FIGURE 5.12 – (a) Concentration moyenne à l'intérieur du thermique normalisé par la concentration initiale $\langle c/c_0 \rangle$ en fonction de la distance z parcourue par le thermique, normalisée par le rayon du tube r_0 . Les lignes pointillées correspondent à une loi de puissance en z^{-3} (équation 5.13) ajustée, pour chaque cas, sur la moyenne des trois expériences. (b) Longueur d'équilibrage apparente l_a avec $c_a/c_0 = 0.01$ (équation 5.14) normalisé par r_0 en fonction du nombre de Péclet Pe₁.

La figure 5.12b montre la longueur d'équilibrage apparente l_a pour une homogénéisation moyenne correspondant à 1% de la concentration initiale, en fonction de Pe₁. Comme pour le temps d'équilibrage, la longueur d'équilibrage ne varie pas significativement entre les cas B, C et D, ce qui traduit une faible influence de la diffusivité et un équilibrage principalement contrôlé par l'étirement à grande échelle. La longueur d'équilibrage de ces trois cas reste également supérieur à celle de cas A. La longueur d'équilibrage apparente moyenne des cas B, C et D est $l_a/r_0 = 12\pm 2$. Dans le contexte de la différenciation planétaire, cela signifie par exemple qu'un impacteur de 100 km de diamètre migrant vers le noyau dans un océan de magma est en apparence équilibré après 600 km. Ceci est une limite inférieure à la distance d'équilibrage réelle car elle suppose que la diminution de la concentration moyenne dans le thermique est associée à un mélange diffusif des deux fluides à l'échelle moléculaire. En réalité, la diminution de la concentration moyenne est liée au brassage du fluide dense et à l'incorporation progressive du fluide ambiant dans le thermique sans forcement qu'il y ait homogénéisation à l'échelle moléculaire. Une fraction significative du fluide dense est alors susceptible de rester en déséquilibre avec le fluide ambiant bien après que la longueur d'équilibrage apparente ait été atteinte.

5.5 Cinématique de l'écoulement

Cette partie s'intéresse à la cinématique de l'écoulement, c'est-à-dire à la caractérisation de son champ de vitesse. Il est alors possible d'étudier l'évolution de la circulation à l'intérieur du thermique, de son taux de déformation, de l'élongation associée, ainsi que des spectres d'énergie cinétique. Ces éléments sont discutés et interprétés dans le cadre de l'entraînement turbulent caractérisant les thermiques.

5.5.1 Circulation

L'hypothèse d'une circulation constante $\Gamma(t) = \Gamma_0$ dans un thermique turbulent (Turner et Taylor, 1957) permet de prédire l'évolution de son rayon sous la forme

$$r^2 = \frac{B_0}{\pi \Gamma_0} t,$$
 (5.15)

ce qui est cohérent avec les arguments dimensionnels présentés dans l'équation 5.10. La validation de cette hypothèse, utilisée dans de nombreux modèles de thermiques (*e.g.* Lecoanet et Jeevanjee, 2019) n'a pour l'instant fait l'objet que d'une unique validation expérimentale dans un régime de thermique développé, en utilisant un tube allongé (longueur du tube deux fois plus grande que son diamètre) et un seul rapport de densité (Zhao <u>et al.</u>, 2013). La production de circulation pendant le développement du thermique a également été étudiée, en particulier l'influence du rapport d'aspect du tube (Bond et Johari, 2005).

La figure 5.13 montre l'évolution de la circulation dans nos expériences au cours du temps. La circulation est calculée à partir du champ de vorticité intégré dans tout le domaine (lignes continues) et seulement au niveau de la tête du thermique (lignes discontinues). La tête du thermique est définie à partir de la méthode détaillée dans la partie 5.2.3. De manière générale, quel que soit la région utilisée pour intégrer la vorticité, la circulation augmente pour atteindre un plateau, avant de diminuer à un rythme qui dépend du cas considéré. L'augmentation initiale correspond à un thermique en cours de développement, où la circulation du thermique correspond à la circulation barocline générée par la flottabilité du thermique, à laquelle s'ajoute la circulation provenant de la vorticité produite par la couche limite au niveau de la paroi intérieure du tube (Didden, 1979; Bond et Johari, 2005). Après un certain temps, la circulation atteint un plateau, ce qui correspond au moment ou le thermique est développé et où la circulation est majoritairement contrôlée par la vorticité produite par baroclinicité. La circulation calculée sur l'ensemble du domaine (lignes continues) atteint des valeurs supérieures à celles calculées uniquement sur la tête du thermique (lignes discontinues). Cela s'explique par une circulation incluant des parties du thermique partiellement détachées de sa tête, en particulier sa queue, qui continuent à générer de la circulation aux temps longs (e.g. figures 5.4 et 5.5, vii). La circulation finit par diminuer progressivement car la queue du thermique, ainsi que les tourbillons qui peuvent se détacher de la tête au cours de l'écoulement, sont rapidement détruis par dissipation visqueuse (Zhao et al., 2013). Cela explique la diminution plus rapide de la circulation lorsqu'elle est calculée sur l'ensemble du domaine, car la queue du thermique



est prise en compte, ce qui n'est pas le cas lorsque la circulation est calculée au niveau de la tête du thermique.

FIGURE 5.13 – Circulation moyenne Γ normalisée par $B_0^{1/2}$ en fonction du temps normalisé par t_g . Les lignes continues et discontinues correspondent respectivement à la circulation calculée sur tout le domaine, et uniquement sur la tête du thermique. Les circulations positives (sens rétrograde) et négatives (sens trigonométrique) sont représentées. Les trois expériences de chaque cas sont représentées.

Dans le cas A, la circulation de la tête du thermique est quasiment constante, tandis que la circulation sur l'ensemble du domaine diminue faiblement. Cela s'explique par une queue de thermique relativement peu développée, ainsi qu'une turbulence modérée ($\text{Re}_1 \simeq 1500$), ce qui conduit à un thermique relativement compact duquel les tourbillons se détachent peu. Dans les cas B, C et en particulier D, la diminution de la circulation concerne à la fois l'ensemble du domaine et la tête du thermique. Ces thermiques ont en effet des queues plus importantes et libèrent ponctuellement des volumes significatifs de fluide dense, dont la dissipation visqueuse est plus rapide que la tête du thermique.

Après un certain temps, la circulation de la tête du thermique semble néanmoins converger vers une valeur constante Γ_0 qu'il est possible d'estimer à la fin des expériences, lorsque le thermique atteint le bas du champ de vue des caméras. Cette valeur est relativement proche

dans les quatre cas considérés, avec

$$|\Gamma_0| = (3.6 \pm 0.6) \times B_0^{1/2} \tag{5.16}$$

sur l'ensemble des expériences et en considérant à la fois la circulation positive et négative. Cette valeur surestime probablement la circulation liée à la tête du thermique. Effectivement, Bond et Johari (2005) obtiennent $|\Gamma_0| \simeq 2.6B_0^{1/2}$, tandis que Zhao <u>et al.</u> (2013) obtiennent $|\Gamma_0| \simeq 1.8B_0^{1/2}$. Par ailleurs, l'étude théorique de Lundgren <u>et al.</u> (1992) montre que $|\Gamma_0| \simeq 2.44B_0^{1/2}$ pour une circulation produite par la baroclinicité de l'écoulement.

L'hypothèse d'une circulation constante dans les thermiques turbulents (Turner et Taylor, 1957) est donc validée dans le cas A. Dans les cas B, C et D, la diminution de la circulation au cours du temps est interprétée par la présence de la queue et de tourbillons se détachant progressivement du thermique. La circulation pourrait néanmoins converger vers une valeur constante aux temps longs.

5.5.2 Taux de déformation

La dynamique de l'étirement dans le thermique turbulent est étudiée à partir du tenseur du taux de déformation, qui correspond au taux de variation de la déformation dans le fluide en un point et à un temps donné. Ce tenseur est lié au gradient de vitesse, c'est-à-dire aux variation spatiales du champ de vitesse dans l'écoulement. Le gradient du champ de vitesse $\boldsymbol{u} = (u_r, u_{\theta}, u_z)$ donne un tenseur du deuxième ordre dont l'expression générale en coordonnée cylindrique est

$$\nabla \boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} \partial_r u_r & \frac{1}{r} \partial_\theta u_r - \frac{u_\theta}{r} & \partial_z u_r \\ \partial_r u_\theta & \frac{1}{r} \partial_\theta u_\theta + \frac{u_r}{r} & \partial_z u_\theta \\ \partial_r u_z & \frac{1}{r} \partial_\theta u_z & \partial_z u_z \end{bmatrix}.$$
(5.17)

Il est ensuite possible de décomposer ce tenseur en une partie symétrique $\dot{\underline{\epsilon}}$ et une partie antisymétrique $\bar{\xi}$ selon

$$\begin{cases} \underline{\dot{\epsilon}} = \frac{1}{2} \left(\nabla \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} + \nabla \boldsymbol{u} \right) \\ \underline{\dot{\xi}} = \frac{1}{2} \left(\nabla \boldsymbol{u}^{\mathrm{T}} - \nabla \boldsymbol{u} \right) \end{cases}, \tag{5.18}$$

où $\underline{\dot{\epsilon}}$ est le tenseur du taux de déformation, contribuant à la déformation et à la compression de l'écoulement, et $\underline{\dot{\xi}}$ est un tenseur contribuant uniquement à une rotation solide de l'écoulement. En supposant que l'écoulement est axisymétrique et sans composante azimutale, le tenseur du taux de déformation devient

$$\underline{\dot{\epsilon}} = \begin{bmatrix} \partial_r u_r & 0 & \frac{1}{2} (\partial_z u_r + \partial_r u_z) \\ 0 & \frac{u_r}{r} & 0 \\ \frac{1}{2} (\partial_r u_z + \partial_z u_r) & 0 & \partial_z u_z \end{bmatrix},$$
(5.19)

où $\frac{u_r}{r} = -\partial_r u_r - \partial_z u_z$ en raison de l'incompressibilité de l'écoulement ($\nabla \cdot \boldsymbol{u} = 0$). La diagonalisation de ce tenseur donne trois axes principaux auxquels correspondent trois valeurs propres, définies de la plus grande à la plus petite telles que $\dot{\epsilon}_1 > \dot{\epsilon}_2 > \dot{\epsilon}_3$, représentant les principaux taux de déformation. $\dot{\epsilon}_1$ est positive et correspond à la direction principale d'élongation des structures. $\dot{\epsilon}_3$ est négative et correspond à la direction principale de compression des structures, dans laquelle se réoriente les gradients de concentration sous l'action de la déformation de l'écoulement. 5

La figure 5.14 montre l'évolution temporelle de la valeur propre négative du tenseur du taux de déformation. La compression des structures diminue au cours du temps en relation avec le ralentissement et la dissipation de l'écoulement. Par ailleurs, les taux de déformation semblent être distribués de manière relativement homogène à l'intérieur du thermique.

La figure 5.15 montre l'évolution de la valeur moyenne des valeurs propres du tenseur du taux de déformation à l'intérieur du thermique. Le thermique est défini à partir d'un masque dont la définition est donnée dans la partie 5.2.3. Les valeurs moyennes de $\dot{\epsilon}_1$ et $\dot{\epsilon}_3$ semblent évoluer comme une fonction inverse du temps. Cette évolution est interprétée à partir de l'évolution moyenne de la taille et de la vitesse du thermique (équation 5.10). En supposant que la déformation moyenne du thermique est contrôlée par l'écoulement moyen à grande échelle, le taux de déformation est de la forme

$$\dot{\epsilon} \propto \frac{w}{r} \propto (t - t_i)^{-1}.$$
 (5.20)

Une telle évolution du taux de déformation moyen est donc en faveur d'un équilibrage contrôlé par l'étirement des structures et par l'incorporation de fluide ambiant à un rythme déterminé par l'écoulement moyen à grande échelle.

Par ailleurs, l'échelle de temps pertinente pour les processus de déformation semble être le temps caractéristique t_B , construit sur l'excès de flottabilité du fluide dense. En effet, les taux de déformation moyens des cas B, C et D tendent à s'aligner sur une unique courbe. C'est également le cas lorsque les taux de déformation sont normalisés par t_g . Le fait que t_B et t_g soient des temps caractéristiques correspondant à l'évolution du taux de déformation indique également que la dynamique de l'étirement et du mélange dans l'écoulement est un processus lié à l'écoulement moyen.

L'évolution du taux de déformation résulte probablement en réalité de la superposition des effets de l'écoulement moyen à grande échelle et des fluctuations turbulentes à petite échelle. L'intensité de ces fluctuations turbulentes serait contrôlée par l'écoulement moyen et le taux de déformation serait donc probablement une fonction du nombre de Reynolds, *i.e.* $\dot{\epsilon} \sim w/rf(\text{Re})$.

Bien qu'il ait une dépendance temporelle similaire, le cas A semble différer des cas à plus haut Reynolds, avec en particulier des valeurs de $\langle \dot{\epsilon}_1 \rangle$ et $\langle \dot{\epsilon}_3 \rangle$ inférieures à celle des autres cas (figure 5.15a et c). Cela pourrait s'expliquer par un faible nombre de Reynolds, plaçant l'écoulement hors du régime des thermiques turbulents développés, ce qui modifierait la dynamique de l'entraînement et de l'étirement dans l'écoulement.

La figure 5.16a montre la densité de probabilité de la valeur propre négative du tenseur du taux de déformation normalisé par le temps caractéristique t_B pour une expérience du cas B. La densité de probabilité semble auto-similaire et subit une translation correspondant à la diminution de sa valeur moyenne au cours du temps (figure 5.15c). La figure 5.16b montre la même densité de probabilité, mais cette fois normalisée par la valeur moyenne du taux de déformation. Les trois expériences de chaque cas sont ici présentées pour différentes distances parcourues dans le champ de vue de la caméra, c'est-à-dire pour différents temps. La superposition des distributions confirme l'auto-similarité au cours du temps, et montre qu'elle reste valide quel que soit le cas considéré. Aux temps courts, ce qui correspond à une petite distance parcourue dans le champ de vue de la caméra, le taux de déformation s'écarte légèrement de la distribution auto-similaire vers laquelle il converge aux temps longs. Ceci pourrait être le résultat d'un thermique en cours de développement où l'influence de la source (le tube) reste visible.

La distribution des taux de déformation converge vers une famille de distribution gamma



FIGURE 5.14 – Évolution de la troisième valeur propre (négative) du tenseur du taux de déformation $\dot{\epsilon}_3$, dans un thermique turbulent dans le cas B (Re₁ = 3940). Les flèches représentent le champ de vitesse. Le temps après le perçage de la membrane est donné en seconde, ainsi que normalisé par $t_g = \sqrt{(\rho_1/\Delta\rho)s_0/g}$.



FIGURE 5.15 – Valeurs propres moyennes du tenseur du taux de déformation $\langle \dot{\epsilon}_1 \rangle$ (a), $\langle \dot{\epsilon}_1 \rangle$ (b) et $\langle \dot{\epsilon}_3 \rangle$ (c), normalisées par $1/t_B$, en fonction du temps, normalisé par t_B . Les trois expériences de chaque cas sont représentées.



FIGURE 5.16 – (a) Évolution de la densité de probabilité de la troisième valeur propre (négative) du tenseur du taux de déformation $p(\dot{\epsilon}_3 \cdot t_B)$, normalisée par $1/t_B$, au cours du temps, pour une expérience dans le cas B. (b) Évolution de la densité de probabilité de la troisième valeur propre (négative) du tenseur du taux de déformation $p(\dot{\epsilon}_3/\langle\dot{\epsilon}_3\rangle)$, normalisée par sa valeur moyenne $\langle\dot{\epsilon}_3\rangle$, en fonction de la position du thermique sous la limite supérieure du champ de vue $z - z_{top}$. Les trois expériences de chaque cas sont représentées, et cela pour des temps couvrant l'intégralité du parcours du thermique dans le champ de vue. La ligne rouge correspond à une distribution gamma à un paramètre (équation 5.21), où n = 3.

à un paramètre n définie par

$$p(X = \dot{\epsilon}_3 / \langle \dot{\epsilon}_3 \rangle) = \frac{n^n}{\Gamma(n)} X^{n-1} e^{-nX}, \qquad (5.21)$$

où Γ est la fonction gamma. Les données expérimentales sont ajustées avec un paramètre n = 3 pour cette distribution. L'auto-similarité des distributions de taux de déformation, ainsi que la convergence vers une distribution gamma est difficilement explicable sans modéliser l'évolution de la déformation des structures dans le thermique turbulent. Une approche simple pourrait par exemple utiliser un modèle basé sur les vortex sphériques de Hill (Turner, 1964; Akhmetov, 2009). Ces distributions gamma pourraient néanmoins être liées à l'agrégation de parcelles de fluides à l'intérieur du thermique turbulent, en particulier au niveau de l'anneau de vorticité au coeur du thermique. En effet, les phénomènes d'agrégation cinétique (Smoluchowski, 1918) dans des systèmes évoluant par auto-convolution sont associés à la mise en place de ces distributions possédant des queues exponentielles. Ces familles de distributions interviennent dans les processus turbulents, en particulier pour décrire les grandeurs dérivées de la vitesse (Atta et Chen, 1970; Castaing et al., 1990), dont fait partie le taux de déformation, ainsi que des champs scalaires comme la température (Pumir et al., 1991). Elles interviennent aussi pour décrire la taille des gouttes dans les processus de fragmentation fluides (Marmottant et Villermaux, 2004b; Villermaux, 2004, 2007; Vledouts et al., 2015). Enfin, elles interviennent dans les processus de mélange par agrégation additive de lamelles en milieu confiné, dans des écoulements turbulents, pour décrire l'évolution de la concentration (Villermaux et Duplat, 2003; Duplat et al., 2010a; Villermaux, 2019).

5.5.3 Élongation des structures

Le processus de brassage est responsable de l'élongation des structures fluides dans l'écoulement. La dynamique de l'homogénéisation est donc intrinsèquement liée à l'évolution temporelle de l'élongation. Une mesure de l'élongation moyenne est obtenue à partir de mesures du contour du champ de concentration obtenues sur la coupe de l'écoulement produit par la nappe laser. À chaque instant, le contour est défini en utilisant un seuil de concentration $c_s(t)$.

Une première méthode consiste à garder ce seuil constant au cours du temps (*e.g.* Villermaux et Innocenti, 1999), tel que

$$c_s(t)/c_0 = \{5 \times 10^{-4}, 5 \times 10^{-3}, 1 \times 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}\},$$
(5.22)

pour les cas A, B, C et D, respectivement. La valeur du seuil est choisie arbitrairement pour obtenir une augmentation de la longueur du contour au début des séquences temporelles correspondant à l'étirement des lignes matérielles à l'intérieur du thermique. Un seuil trop petit conduit à une mesure de la longueur de l'enveloppe du thermique, tandis qu'un seuil trop grand conduit à une mesure de la longueur de l'enveloppe du cœur du thermique, où sont confinées majoritairement les hautes concentrations.

Une seconde méthode consiste à définir le seuil de concentration afin de garder une fraction constance du champ de concentration au cours du temps (*e.g.* Duplat <u>et al.</u>, 2010a). Dans les expériences, cela correspond à

$$\int_{0}^{c_{s}(t)} p(c,t) \mathrm{d}c = 0.95, \tag{5.23}$$

où p(c, t) est la densité de probabilité de la concentration. La valeur de la fraction constante est choisie arbitrairement sur les mêmes critères que pour la première méthode. Cette méthode est plus universelle que la première car la définition du seuil est la même pour toutes les expériences et s'affranchit de l'évolution de la concentration moyenne.

La figure 5.17 montre l'évolution temporelle du contour de concentration en utilisant les deux définitions. Avec un seuil de concentration constant au cours du temps (lignes bleues), la longueur des contours augmente en raison de l'étirement des structures dans l'écoulement, puis diminue progressivement avec les niveaux de concentration. Ce comportement est relativement indépendant du choix du seuil qui modifie surtout les durées sur lesquelles se déroulent ces deux phases. Avec une fraction constante de la concentration (lignes oranges), la longueur des contours augmente de manière relativement monotone en raison de l'étirement. Malgré les fluctuations inhérentes à chaque expérience, l'évolution du contour des deux méthodes se superpose, jusqu'à la diminution du contour dans le cas du seuil constant.

Les contours semblent d'abord augmenter linéairement avec le temps, avant d'évoluer vers une loi de puissance dont l'exposant serait plus petit que 1. Une piste pour expliquer le comportement aux temps cours est de considérer le taux de déformation moyen, qui suit une fonction inverse du temps $\dot{\epsilon} \propto t^{-1}$ (équation 5.20). Cela signifie que l'élongation moyenne des structures est de la forme

$$l(t) = l_0 \exp\left[\int_{t_0}^t \dot{\epsilon}(t') \mathrm{d}t'\right] = l_0 \exp\left[\int_{t_0}^t \frac{1}{t'} \mathrm{d}t'\right] \propto t.$$
(5.24)

Cette évolution linéaire est similaire à la dynamique observée sur des panaches turbulents dispersifs (Duplat <u>et al.</u>, 2010a). Elle n'est cependant pas compatible avec le comportement des contours aux temps longs. Néanmoins, cette évolution suppose que les contours de concentration sont des lignes matérielles, ce qui n'est le cas qu'au début de l'écoulement, quand la déformation du champ de concentration correspond à la dispersion de l'écoulement. Après un



FIGURE 5.17 – Longueur des contours du champ de concentration l, normalisé par le rayon du tube r_0 , en fonction du temps t/t_g , pour les expériences de chacun des cas. Les lignes bleues correspondent à un contour défini avec un seuil de concentration constant au cours du temps, c'est-à-dire $c_s(t)/c_0 = \{5 \times 10^{-4}, 5 \times 10^{-3}, 1 \times 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}\}$ pour les cas A, B, C et D, respectivement. Les lignes oranges correspondent à un contour défini avec un seuil de concentration permettant de garder une fraction constante du champ de concentration au cours du temps, c'est-à-dire $\int_0^{c_s(t)} p(c, t) dc = 0.95$, pour tous les cas.

certain temps, les niveaux de concentration commencent à diminuer, en relation avec le développement du mélange à petite échelle. Ainsi, l'évolution des contours de concentration devient progressivement le résultat d'une superposition entre l'advection des lignes matérielles et la diffusion du champ de concentration.

La figure 5.18 montre l'évolution des contours de concentration en fonction de la distance parcourue par le thermique, en utilisant les deux méthodes de détermination du seuil de concentration. Les contours semblent évoluer linéairement avec la distance parcourue. Dans le cadre d'un thermique turbulent, une telle évolution n'est à priori pas compatible avec une évolution linéaire en temps, mais plutôt avec une loi de puissance en $t^{1/2}$ (équation 5.10). Les fluctuations expérimentales rendent néanmoins le choix difficile entre une loi linéaire et une loi de puissance.

En plus d'être sensible au processus de diffusion, l'élongation des structures obtenue ici à partir du champ de concentration est basée sur une mesure eulérienne, et non sur une mesure


FIGURE 5.18 – Longueur des contours du champ de concentration l, normalisé par le rayon du tube r_0 , en fonction de la distance z/r_0 parcourue par le thermique, pour les expériences de tous les cas. (a) Le contour est défini avec un seuil de concentration permettant de garder une fraction constante du champ de concentration au cours du temps, c'est-à-dire $\int_0^{c_s(t)/c_0} p(c,t) dc = 0.95$, pour tous les cas. (b) Le contour est défini avec un seuil de concentration constant au cours du temps, c'est-à-dire $c_s(t)/c_0 = \{5 \times 10^{-4}, 5 \times 10^{-3}, 1 \times 10^{-2}, 5 \times 10^{-2}\}$ pour les cas A, B, C et D, respectivement.

lagrangienne, nécessaire pour suivre l'étirement d'une parcelle de fluide. C'est également le cas pour les taux de déformation, qui sont donc impossibles à intégrer localement pour obtenir la statistique de l'élongation. Une étude plus approfondie de la dynamique de l'élongation est donc nécessaire pour comprendre l'évolution des lignes matérielles et des contours de concentration, en particulier aux temps longs.

5.5.4 Spectre spatial d'énergie cinétique

Les spectres d'énergie cinétique en fonction du nombre d'onde permettent également d'étudier la cinématique de l'écoulement, en obtenant l'énergie contenue par chaque échelle de l'écoulement. Les spectres d'énergie cinétique sont calculés à partir des mesures PIV des composantes horizontale u et verticale w du champ vitesse.

Le champ de vitesse n'étant pas périodique, des opérations sont appliquées avant de calculer le spectre (Salvador <u>et al.</u>, 1999). L'énergie correspondant à un nombre d'onde égal à zéro est d'abord supprimée en enlevant aux vitesses une fonction linéaire (un plan) préalablement ajustée aux données. La contribution des effets de bord au spectre d'énergie cinétique, liée à l'étendu finie de la nappe laser, est ensuite atténuée en multipliant le champ de vitesse par une fonction valant 1 sur la majorité du domaine et ayant une forme de cosinus tendant vers 0 sur les bords. Enfin, le domaine est rempli avec des 0 pour obtenir un nombre de pixels égal à une puissance de 2 afin d'améliorer la qualité des résultats de la transformation de Fourier rapide (FFT).

Le spectre d'énergie cinétique est ensuite obtenu en utilisant le formalisme de Durran <u>et al.</u> (2017), modifié à partir des travaux d'Errico (1985). Les transformées de Fourier 2D discrètes de chacune des composantes du champ de vitesse sont définies comme

$$\begin{cases} \hat{u}_{l,m}(k_x,k_z) = \sum_{r=0}^{N_x-1} \sum_{s=0}^{N_z-1} \omega_{N_x}^{lr} \omega_{N_z}^{ms} u_{r,s}(x,z) \\ \hat{w}_{l,m}(k_x,k_z) = \sum_{r=0}^{N_x-1} \sum_{s=0}^{N_z-1} \omega_{N_x}^{lr} \omega_{N_z}^{ms} w_{r,s}(x,z) \end{cases},$$
(5.25)

avec $\omega_{N_x} = e^{-i2\pi/N_x}$ et $\omega_{N_z} = e^{-i2\pi/N_z}$. (r, s) et (l, m) sont les indices relatifs au champ de vitesse discret dans l'espace réel et dans l'espace de Fourier. k_x et k_z sont les nombres d'onde dans les directions horizontale et verticale. N_x et N_z correspondent au nombre d'éléments dans les directions horizontale et verticale. Après remplissage du domaine (Salvador et al., 1999), ces derniers sont en réalité égaux, avec $N = N_x = N_z$. L'égalité de Parseval discrète, correspondant à l'égalité entre l'énergie cinétique totale dans le domaine et la somme des contributions des différentes harmoniques, s'écrit alors en fonction des transformées de Fourier et de leur conjugué, noté avec une étoile,

$$\sum_{r=1}^{N} \sum_{s=1}^{N} u_{r,s}^{2} + w_{r,s}^{2} = \frac{1}{N^{2}} \sum_{l=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} \hat{u}_{l,m} \hat{u}_{l,m}^{*} + \hat{w}_{l,m} \hat{w}_{l,m}^{*}.$$
(5.26)

Cette égalité peut alors être exprimée en terme de conservation de l'énergie cinétique moyenne, en fonction de la distance $\Delta x = \Delta z$ entre deux éléments du champ de vitesse, de la longueur des cotés du domaine $L = L_x = L_z = \Delta xN$ et de l'incrément horizontal et vertical du nombre d'onde $\Delta k = 2\pi/L$

$$\frac{1}{L^2} \sum_{r=1}^{N} \sum_{s=1}^{N} \frac{u_{r,s}^2 + w_{r,s}^2}{2} \Delta x^2 = \frac{\Delta x^2}{8\pi^2 N^2} \sum_{l=1}^{N} \sum_{m=1}^{N} (\hat{u}_{l,m} \hat{u}_{l,m}^* + \hat{w}_{l,m} \hat{w}_{l,m}^*) \Delta k^2.$$
(5.27)

Les nombres d'onde 2D sont ensuite discrétisés en multiples de Δ_k , tels que $k = p\Delta k$, avec $p \in [1, N_{max}]$ et $N_{max} = \lfloor \frac{\sqrt{2}}{2}N \rfloor$. Il est alors possible de définir R(p) comme l'ensemble des nombres d'onde (k_x, k_z) d'indices (l, m) respectant la condition

$$k - \frac{\Delta k}{2} \le \sqrt{k_x^2 + k_z^2} < k + \frac{\Delta k}{2}.$$
 (5.28)

Cela permet de sommer azimutalement les nombres d'onde dans l'espace de Fourier $\left(k_x-k_z\right)$ et d'obtenir

$$\frac{1}{L^2} \sum_{r=1}^{N} \sum_{s=1}^{N} \frac{u_{r,s}^2 + w_{r,s}^2}{2} \Delta x^2 = \sum_{p=1}^{N_{max}} E(k) \Delta k,$$
(5.29)

où E(k) est le spectre d'énergie cinétique radial défini par

$$E(k) = \frac{L}{4\pi N^4} \sum_{l,m \in R(p)} (\hat{u}_{l,m} \hat{u}_{l,m}^* + \hat{w}_{l,m} \hat{w}_{l,m}^*).$$
(5.30)

En terme d'unité, le spectre d'énergie cinétique est bien exprimé en m³ · s⁻². Le spectre d'énergie cinétique adimensionné $\tilde{E}(k)$ est donc obtenu en normalisant E(k) par $u_q^2 r_0$.

La figure 5.19 montre l'évolution temporelle du spectre spatial d'énergie cinétique $\dot{E}(k)$, dans les différents cas. Dans tous les cas, le spectre peut être découpé en trois parties. À petit nombres d'onde, c'est-à-dire à grande longueur d'onde, par exemple lorsque $kr_0 \leq 5 \times 10^{-2}$ dans le cas A, l'énergie cinétique est relativement indépendant de la longueur d'onde. Cela correspond à l'échelle d'injection d'énergie, *i.e.* à la taille caractéristique du thermique turbulent.



FIGURE 5.19 – Évolution du spectre spatial normalisé d'énergie cinétique $\dot{E}(k)$, en fonction du nombre d'onde k, normalisé par $1/r_0$, au cours du temps, pour les quatre cas.

À des nombres d'onde intermédiaires, par exemple lorsque $5\times 10^{-2} \lesssim kr_0 \lesssim 1.5$ dans le cas A, l'énergie cinétique diminue selon des lois de puissance dont l'exposant dépend des modalités de turbulence. Enfin, à grand nombres d'onde, par exemple lorsque $kr_0\gtrsim 1.5$ dans le cas A, l'énergie s'effondre car les échelles impliquées atteignent la résolution limite des caméras.

Aux nombres d'onde intermédiaires, le comportement du spectre dépend du cas considéré. Dans le cas A, le spectre semble suivre une loi de puissance dont l'exposant pourrait être compatible avec $k^{-11/5}$ ou $k^{-7/3}$ lorsque $kr_0 \leq 0.7$. Le spectre d'énergie cinétique en $k^{-11/5}$ correspond à une turbulence stratifiée, par exemple dans le cas d'un écoulement turbulent due à la flottabilité (Kumar et al., 2014; Verma et al., 2017), ce qui pourrait être le cas dans les thermiques turbulents. Le spectre d'énergie cinétique en $k^{-7/3}$ est quant à lui expliqué par l'influence de l'anisotropie, produite par exemple par un cisaillement à grande échelle (Lumley, 1967; Lohse, 1994; Yakhot, 1994), ce qui pourrait également être pertinent étant donné la forme

de l'écoulement moyen dans un thermique turbulent. Lorsque $kr_0 \gtrsim 0.7$, l'énergie des petites longueurs d'onde s'effondre, ce qui pourrait traduire la dissipation visqueuse de l'énergie dans le cadre d'un nombre de Reynolds modéré (Re₁ $\simeq 1500$) sans turbulence développée. Par ailleurs, l'énergie cinétique diminue au cours du temps à mesure que l'écoulement ralentit.

Dans les cas B, C et D, le spectre semble continuer à suivre une loi de puissance en $k^{-7/3}$ ou $k^{-11/5}$ à petit nombres d'onde, par exemple lorsque $kr_0 \lesssim 1$ dans le cas B. Cependant, à grand nombre d'onde, par exemple lorsque $kr_0 \gtrsim 1$ dans le cas B, l'énergie contenue par les petites échelles ne s'effondre pas comme dans le cas A. En effet, une autre loi de puissance, dont l'exposant pourrait être compatible avec $k^{-5/3}$ semble se mettre en place aux temps courts, avant de s'atténuer progressivement avec le temps. Le nombre de Reynolds est plus élevé (Re₁ $\gtrsim 3700$) dans ces trois cas, ce qui pourrait expliquer l'installation d'un régime inertiel de turbulence homogène et isotrope associé à un exposant de -5/3 selon la théorie de la cascade turbulente (Kolmogorov, 1941). Le ralentissement du thermique lié à sa dilution progressive par le fluide ambiant pourrait ensuite modifier le nombre d'onde de transition entre le régime en $k^{-5/3}$ et le régime en $k^{-7/3}$ ou $k^{-11/5}$, ce qui pourrait éventuellement expliquer la disparition du régime inertiel aux temps longs.

5.6 Dynamique du mélange

Cette partie s'intéresse à la dynamique du mélange par le thermique turbulent. Les moments de la concentration, ainsi que la dynamique de production des gradients de concentration, sont utilisés pour discuter de l'évolution de la structure du champ de concentration, et du mélange associé. Par ailleurs, l'étude des densité de probabilité de concentration, des incréments de concentration et des fonctions de structure permettent de caractériser les mécanismes impliqués dans l'homogénéisation du thermique.

5.6.1 Moments de la concentration

L'étude des propriétés de la densité de probabilité de concentration permet d'obtenir des informations sur la dynamique du mélange produit par l'écoulement. La figure 5.20 montre l'évolution temporelle de la moyenne, de la variance, de l'asymétrie et du kurtosis de la concentration, ainsi que sa valeur maximale et son coefficient de variation, défini comme $c_V = Var(c)/\langle c \rangle$. Comme pour l'étude de l'homogénéisation apparente (partie 5.4), ces propriétés sont calculées dans le thermique, défini avec un masque dans la partie 5.2.3.

La concentration moyenne évolue globalement en suivant une loi de puissance dont l'exposant moyen ajusté sur l'ensemble des expériences est $t^{-1.75}$ (figure 5.20a). L'exposant de cette loi est légèrement inférieur à $t^{-3/2}$, c'est-à-dire celui prédit par l'évolution théorique d'un thermique turbulent incorporant du fluide ambiant (équation 5.10). Cela pourrait être expliqué par une dynamique sensiblement différente d'un thermique turbulent développé, au vu des nombres de Reynolds relativement modérés. Par ailleurs, aux temps longs, le thermique atteint les bords de la nappe laser, ce qui pourrait mener à une sur-estimation de la concentration moyenne car les bords moins concentrés du thermique ne sont alors pas pris en compte.

La variance de la concentration évolue également comme une loi de puissance dont l'exposant moyen est $t^{-3.08}$ (figure 5.20b). Cela signifie que l'écart-type et la moyenne de la concentration évoluent de manière similaire. L'évolution du coefficient de variation, représentant la dispersion de la concentration autour de sa moyenne, vient confirmer cette similarité avec une valeur proche de 1 (figure 5.20f). Cela signifie que dans les conditions des expériences, le fluide ambiant incorporé au thermique n'est pas efficacement mélangé à l'échelle moléculaire, et que



FIGURE 5.20 – Évolution de la moyenne $\langle c/c_0 \rangle$ (a), de la variance $\operatorname{Var}(c/c_0)$ (b), de l'asymétrie $\operatorname{Skew}(c/c_0)$ (c), du kurtosis $\operatorname{Kurt}(c/c_0)$ (d), du maximum $\max(c/c_0)$ (e) et du coefficient de variation $c_V(c/c_0)$ (f) de la concentration c, normalisée par sa valeur initiale c_0 , en fonction du temps t/t_g . Les lois de puissance (a, b et e) sont ajustées sur la moyenne de l'ensemble des expériences de tous les cas.

le champ de concentration reste très hétérogène, avec une forte dispersion autour de sa valeur moyenne. Cette évolution est sans doute liée à l'incorporation continue de liquide ambiant de concentration c = 0 dans le thermique.

Les moments d'ordre supérieurs, comme l'asymétrie et le kurtosis de la concentration semblent augmenter au cours du temps pour toutes les expériences (figure 5.20c, d). Ceci est cohérent avec les profils radiaux de concentration obtenus par Zhao <u>et al.</u> (2013), qui montrent que la structure interne de l'ensemble du thermique n'évolue pas de manière auto-similaire, en terme de concentration, mais aussi de vorticité.

La valeur maximale de la concentration diminue également comme une loi de puissance dont l'exposant moyen sur l'ensemble des expériences est $t^{-1.11}$. Cet exposant est plus petit que dans les expériences de Zhao et al. (2013), où $\max(c) \propto t^{-0.84}$, mais reste néanmoins plus grand que l'exposant correspondant à l'évolution de la concentration moyenne. Cela signifie que la concentration maximale, située dans le cœur de l'écoulement (*e.g.* figure 5.4), diminue à un rythme plus faible que la concentration moyenne. Ceci est également un argument montrant l'absence d'auto-similarité de la concentration sur l'ensemble du thermique.

Le cœur de l'écoulement semble donc relativement protégé de l'homogénéisation avec le fluide ambiant, en raison de sa position centrale dans l'écoulement. L'absence d'auto-similarité sur l'ensemble du thermique pourrait alors s'expliquer par l'existence de deux régions, le cœur et la périphérie, avec des dynamiques de mélange différentes. Cela signifie que des hétérogénéités de concentration pourraient subsister, en particulier entre le cœur du thermique et la périphérie, et que la concentration maximale pourrait rester élevée en dépit d'une dilution globale du thermique.

5.6.2 Production des gradients de concentration

L'étude des gradients de concentration, en particulier la production de ces gradients, apporte des informations sur la dynamique du mélange et sur les interactions entre l'advection et la diffusion dans le cadre d'un écoulement convectif. De la même manière que dans le chapitre 4, appliquer l'opérateur $2\nabla c \cdot \nabla$ à l'équation d'advection-diffusion (équation II.7) et intégrer sur un domaine Ω correspondant à la surface illuminée du thermique turbulent, permet d'obtenir l'évolution des gradients de concentration (*e.g.* Ricard, 2015),

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{\Omega} |\nabla c|^2 \mathrm{d}S = -2 \int_{\Omega} (\nabla c \cdot \underline{\dot{\epsilon}} \cdot \nabla c) \mathrm{d}S - 2\kappa^c \int_{\Omega} (\nabla^2 c)^2 \mathrm{d}S.$$
(5.31)

Le taux de production des gradients de concentration (terme de gauche de l'équation 5.31) correspond à la compétition entre un terme d'advection responsable de la formation des gradients (premier terme à droite de l'équation 5.31) et d'un terme de diffusion responsable de leur destruction (second terme à droite de l'équation 5.31).

Le terme d'advection est lié aux propriétés de l'écoulement à travers le tenseur du taux de déformation $\underline{\dot{e}}$. Ce terme peut théoriquement être positif ou négatif. Cependant, dans un écoulement convectif, il devient rapidement positif, ce qui correspond à la production de gradients associé au brassage du champ de concentration. Le tenseur du taux de déformation (*e.g.* équation 5.19) a trois axes principaux, les gradients de concentration se réorientant parallèlement à l'axe principal correspondant à la valeur propre négative $\dot{\epsilon}_3$ du tenseur. Le terme d'advection devient donc rapidement de l'ordre de $|\dot{\epsilon}_3||\nabla c|^2$. Le terme de diffusion est toujours négatif et correspond à une diminution diffusive des gradients de concentration.

Cette équation est donc à mettre en relation avec le rôle du brassage et du mélange dans le processus d'homogénéisation de la concentration, ou d'ailleurs de la température. Le terme d'advection produit des gradients scalaires en brassant l'écoulement par convection compositionnelle, ou par convection thermique. Ces gradients augmentent jusqu'à ce que le terme de diffusion, proportionnel au carré des gradients, soit suffisamment important pour permettre le mélange, c'est-à-dire l'homogénéisation à l'échelle moléculaire du champ scalaire, à l'origine d'une diminution rapide de sa variance.

La figure 5.21 montre l'évolution temporelle des termes d'advection et de diffusion, ainsi que le taux de production des gradients, défini comme la somme des deux autres termes. Ces termes sont intégrés dans le thermique, défini à partir d'un masque dont la définition est donnée dans la partie 5.2.3. Le taux de production des gradient est d'abord positif, avec un terme d'advection nettement supérieur au terme de diffusion. Le processus d'homogénéisation est donc contrôlé par le brassage de l'écoulement, associé à l'entraînement du fluide ambiant à l'intérieur du thermique. Dans un premier temps, le taux de production des gradients augmente, ce qui correspond à l'étirement et au brassage vigoureux du fluide par l'écoulement moyen, des instabilités hydrodynamiques et les fluctuations turbulentes. Dans un second temps, le taux de production diminue au fur et à mesure que l'écoulement se dissipe. Après un certain temps, le taux de production des gradients ont atteint des niveaux permettant le mélange efficace du champ de concentration.

L'évolution du taux de production des gradients, avec une augmentation puis une diminution au cours du temps, est comparable aux simulations numériques du chapitre 4. La figure 5.22a montre les résultats d'une simulation dans des conditions similaire aux expériences ($\text{Re}_1 = 10^4$ et $\text{Pe}_1 = 10^6$). Le terme d'advection domine la production des gradients de concentration par rapport au terme de diffusion, dans des proportions similaires aux expériences. L'écoulement se déroule sur des temps caractéristiques inférieurs à ceux des expériences. Cela pourrait s'expliquer en partie par un nombre de Reynolds plus élevé que dans les expériences. La figure 5.22b montre les résultats d'une simulation avec le même nombre de Reynolds mais un nombre de Péclet plus petit ($\text{Re}_1 = 10^4$ et $\text{Pe}_1 = 10^4$). Comme cela pouvait être attendu avec la diminution du nombre de Péclet, le terme de diffusion augmente par rapport au terme d'advection, ce qui traduit un brassage moins vigoureux en relation avec une dissipation plus efficace des gradients de concentration. Néanmoins, la décroissance du terme d'advection se fait sur un temps caractéristique similaire, comparable à celui des expériences du cas D ($\text{Re}_1 \simeq 5000$).

La figure 5.23 compare les termes de diffusion et d'advection dans les expériences des quatre cas. Cette fois, le temps et les termes de l'équation 5.31 sont normalisés respectivement par t_B et $1/t_B$. Ces termes présentent des évolutions similaires quel que soit le cas considéré (figure 5.23a, b).

La figure 5.23c montre l'évolution du rapport entre le terme de diffusion et d'advection. Ce rapport diminue au cours du temps au fur et à mesure que le taux de production des gradients de concentration décroît. Le rapport devient finalement plus petit que l'unité, ce qui correspond à la mise en place effective du mélange par dissipation des gradients de concentration. Cette phase est atteinte à la fin de la plupart des expériences, sauf dans le cas D, où l'acquisition des données est limitée par la taille de la cuve. Le moment de cette transition peut être interprété comme un temps caractéristique de mélange t_m , auquel les gradients de concentration commencent à disparaître. Malgré une variabilité résiduelle, en particulier dans le cas D, les expériences des quatre cas s'alignent relativement bien sur une unique courbe lorsque le temps est normalisé par t_B , temps caractéristique construit sur l'excès de flottabilité. Cela signifie que le temps de mélange est de l'ordre de $t_m/t_B = 1000 \pm 200$.

La domination du terme d'advection par rapport au terme de diffusion, associée à un taux élevé de production des gradients, pendant tout le début de l'écoulement signifie que l'ho-



FIGURE 5.21 – Termes de diffusion $-2\kappa^c \int_{\Omega} (\nabla^2 c)^2 dS$, d'advection $-2 \int_{\Omega} (\nabla c \cdot \underline{\dot{e}} \cdot \nabla c) dS$ et de production des gradients de concentration $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla c|^2 dS$ (équation 5.31) en fonction du temps, pour les quatre cas. Les termes de l'équation et le temps sont respectivement normalisés par $1/t_q$ et t_q .

mogénéisation par mélange à l'échelle moléculaire commence à se produire tardivement, *i.e.* lorsque $t_m/t_B \gtrsim 1000$. Cela correspond à $t_m/t_g \gtrsim 260-50$, la valeur du temps caractéristique de mélange dépendant de la différence de densité, et donc du cas considéré. Cela signifie que le temps d'équilibrage apparent $t_a/t_g = 22 \pm 3$, correspondant à 1% de la concentration initiale, est plus petit que le temps caractéristique de mélange. En d'autres termes, le brassage du fluide dense dans le thermique, et l'incorporation du fluide ambiant par l'écoulement moyen, sont responsables d'une homogénéisation apparente, sans pour autant que cette dernière soit associée à un mélange effectif des constituants à l'échelle moléculaire. Des hétérogénéités de composition pourraient donc perdurer sur des échelles de temps nettement supérieures au temps apparent d'homogénéisation.

5.6.3 Densité de probabilité de concentration

La dynamique du mélange est intrinsèquement liée à l'évolution de la densité de probabilité de la concentration. Cette dernière permet en particulier d'identifier les hétérogénéités de



FIGURE 5.22 – Termes de diffusion $-2\kappa^c \int_{\Omega} (\nabla^2 c)^2 dS$, d'advection $-2 \int_{\Omega} (\nabla c \cdot \dot{\epsilon} \cdot \nabla c) dS$ et de production des gradients de concentration $\frac{d}{dt} \int_{\Omega} |\nabla c|^2 dS$ (équation 5.31) en fonction du temps, issus de deux simulations numériques 2D avec $\operatorname{Re}_1 = 10^4$, $\operatorname{Pe}_1 = 10^4$ (a) et $\operatorname{Re}_1 = 10^4$, $\operatorname{Pe}_1 = 10^6$ (b). Les termes de l'équation et le temps sont respectivement normalisés par $1/t_g$ et t_g . Le détail des simulations est présenté dans le chapitre 4.

l'efficacité du mélange et de les relier à la dynamique de l'écoulement. La densité de probabilité de la concentration p(c) permet de définir la probabilité p(c)dc de trouver dans l'écoulement une concentration comprise entre c et c + dc, ce qui implique que $\int p(c)dc = 1$.

La figure 5.24 montre l'évolution temporelle de la densité de probabilité de la concentration normalisée par la concentration initiale $p(c/c_0)$, à l'intérieur du thermique turbulent. Le masque utilisé pour délimiter le thermique est défini dans la partie 5.2.3. La concentration diminue progressivement au cours du temps à mesure que le fluide ambiant est entraîné à l'intérieur du thermique, ce qui correspond à la diminution de la concentration moyenne (figure 5.20a). La dispersion de la concentration autour de la valeur moyenne est également relativement constante, ce qui est cohérent avec les valeurs de la variance (figure 5.20b) et du coefficient de variation (figure 5.20f).

La figure 5.25 montre l'évolution temporelle de la densité de probabilité de la concentration normalisée par la concentration moyenne $p(c/\langle c \rangle)$. Cela permet d'étudier la dynamique du mélange en s'affranchissant de l'évolution de la concentration moyenne liée à la dilution du thermique par le fluide ambiant. Au premier ordre, les densités de probabilités présentent une structure commune avec une forme en 1/c dans pour les faibles concentrations ($c/\langle c \rangle \lesssim 5$) et une queue exponentielle pour les grande concentrations ($c/\langle c \rangle \gtrsim 5$). Malgré la correction de la concentration moyenne, des différences de structures restent visibles entre chaque expérience, à mettre en relation avec la variabilité inhérente aux expériences. Dans une même expérience, la forme de la densité de probabilité dépend également du temps, en particulier au niveau de la transition entre le régime des faibles des fortes concentrations.

Les faibles concentrations ($c/\langle c \rangle \lesssim 5$) correspondent à un régime où l'homogénéisation serait dominée par le mélange diffusif de lamelles de concentration relativement isolées, n'interagissant que très peu entre elles. Cette dynamique est comparable avec des écoulements dispersifs, comme par exemple des panaches turbulents (Duplat et al., 2010a).

Dans un repère la grangien (x, y) en mouvement avec le fluide, la concentration d'une lamelle étirée d'épaisseur s(t), dont le champ de concentration est invariant dans la direction y



FIGURE 5.23 – Termes de diffusion $-2\kappa^c \int_{\Omega} (\nabla^2 c)^2 dS$ (a), d'advection $-2 \int_{\Omega} (\nabla c \cdot \underline{\dot{\epsilon}} \cdot \nabla c) dS$ (b) et rapport des termes d'advection et de diffusion (c) de l'équation 5.31, en fonction du temps, pour les trois expériences des quatre cas. Les termes de l'équation et le temps sont respectivement normalisés par $1/t_B$ et t_B .



FIGURE 5.24 – Densité de probabilité de concentration normalisée par la concentration initiale $p(c/c_0)$, pour toutes les expériences des cas A, B, C et D, au cours du temps.

parallèle à l'étirement, et étiré localement à un taux $\dot{\epsilon} = \frac{1}{s} \frac{ds}{dt}$, est contrôlée par une équation d'advection-diffusion de la forme

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \dot{\epsilon}x\frac{\partial c}{\partial x} = \kappa^c \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}.$$
(5.32)

En utilisant un changement de variable basé sur l'épaisseur de la lamelle et un temps caractéristique de diffusion (Ranz, 1979)

$$\xi = \frac{x}{s(t)}, \quad \tau = \kappa^c \int_0^t \frac{1}{s(t')^2} dt',$$
(5.33)

l'équation d'advection-diffusion est transformée en une équation de diffusion simple

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 c}{\partial \xi^2}.$$
(5.34)



FIGURE 5.25 – Densité de probabilité de concentration normalisée par la concentration moyenne $p(c/\langle c \rangle)$, pour une expérience des cas A, B, C et D, au cours du temps. Les lignes tiretées correspondent à une distribution de concentration en 1/c (équation 5.37). Les lignes continues correspondent à une distribution gamma avec n = 0.8 (équation 5.50).

Pour une condition initiale de la forme $c(\xi, t = 0) = c_0 \exp(-\xi^2)$, la solution est donnée par un profil gaussien (Le Borgne <u>et al.</u>, 2015)

$$c(\xi, t) = \frac{c_0}{\sqrt{1 + 4\tau(t)}} \exp\left[-\frac{\xi^2}{s(t)^2(1 + 4\tau(t))}\right].$$
(5.35)

La concentration maximale dans la la melle, définie en $\xi=0,$ est donc égale à

$$c_{max}(t) = \frac{c_0}{\sqrt{1 + 4\tau(t)}}.$$
(5.36)

La densité de probabilité du profil spatial gaussien de la lamelle (équation 5.35), dépendant de

la concentration maximum $c_{max}(t)$, s'écrit alors

$$p(c|c_{max}) = \frac{1}{2c\sqrt{\ln(c_{max}/c_{min})\ln(c_{max}/c)}},$$
(5.37)

où la concentration est comprise entre sa valeur maximale c_{max} et sa valeur minimale c_{min} . La forme exacte de la densité de probabilité de la concentration est alors donnée par

$$p(c) = \int_{c}^{+\infty} p(c|c_{max}) p(c_{max}, t) \mathrm{d}c_{max}, \qquad (5.38)$$

où $p(c_{max}, t)$ est liée à l'histoire de l'étirement de la lamelle, correspondant à l'évolution de la statistique du champ de vitesse. Dans la limite des petites concentrations, la densité de probabilité de la concentration se comporte comme la distribution d'une lamelle isolée associée à un profil spatial gaussien (Le Borgne et al., 2015). Par conséquent, la distribution des concentrations est de la forme 1/c, car les variations associées au terme $\ln(c_{max}/c)$ sont petites dans le cas des petites concentrations. Cela correspond effectivement aux observations de la figure 5.25 lorsque $c/\langle c \rangle \lesssim 5$.

Les fortes concentrations ($c/\langle c \rangle \gtrsim 5$) correspondent à un régime où l'homogénéisation serait dominée par l'agrégation de lamelles pouvant posséder des histoires d'étirements et de mélange différentes. L'écoulement moyen pourrait être à l'origine du confinement de l'écoulement où s'agrègeraient les lamelles dans un processus d'auto-convolution des distributions de concentration. Cela signifie que la densité de probabilité de la concentration est le résultat d'une convolution avec elle-même l'instant précédent. Les niveaux de concentration sont donc susceptibles de s'additionner de manière aléatoire sous l'effet des fluctuations turbulentes. Ce mécanisme additif, permis par la linéarité de l'équation de diffusion, correspond à une convolution des densités de probabilité des lamelles qui s'interpénètrent. Cette dynamique est comparable avec le mélange dans un panache turbulent confiné (Villermaux et Duplat, 2003; Duplat et Villermaux, 2008).

Le profil de concentration résultant de l'interpénétration de deux la melles dont les profils sont $c_1(\xi, \tau)$ et $c_2(\xi, \tau)$ est obtenu par addition des niveaux de concentration

$$c(\xi,\tau) = c_1(\xi,\tau) + c_2(\xi,\tau).$$
(5.39)

Dans l'espace des probabilité, ce processus additif correspond à une convolution entre les distributions $p_1(c_1)$ et $p_2(c_2)$, tel que

$$p(c) = \int_0^c p_1(c_1) p_2(c_2) dc_2 = p_1 * p_2.$$
(5.40)

L'utilisation de la transformation de Laplace, définie comme

$$\tilde{p}(s,t) = \int_0^{+\infty} p(c,t)e^{-sc} \mathrm{d}c, \qquad (5.41)$$

permet alors d'exprimer le produit de convolution des densités de probabilités comme le produit des transformées de Laplace de ces distributions, c'est-à-dire $\tilde{p} = \tilde{p}_1 \tilde{p}_2$.

Le processus d'auto-convolution intervenant dans la partie confinée de l'écoulement peut être décrit de deux manières différentes, correspondant aux limites du même phénomène (Villermaux, 2019). La discussion qui suit résume le raisonnement exposé par Duplat et Villermaux (2008). D'une part, il est possible de considérer qu'une fraction $f = r\delta t$ de la melles dans l'écoulement s'additionnent complètement avec le ur voisines entre t et $t + \delta t$, tandis qu'une fraction 1 - f n'est pas affectée par le processus d'interpénétration. r correspond alors au taux de rapprochement entre les la melles. Cette limite correspond à une évolution discrète des convolutions, avec des additions complètes d'un pas de temps à l'autre. La distribution des concentrations évolue donc comme

$$p(c, t + \delta t) = fp(c, t) * p(c, t) + (1 - f)p(c, t),$$
(5.42)

ce qui lorsque $r\delta t \rightarrow 0$, se traduit en terme de transformées de Laplace par

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = r(-\tilde{p} + \tilde{p}^2).$$
(5.43)

Cette équation est caractéristique des processus d'agrégation cinétique des systèmes évoluant par auto-convolution (Smoluchowski, 1918), et intervient par exemple dans les processus turbulents (Atta et Chen, 1970; Castaing <u>et al.</u>, 1990; Pumir <u>et al.</u>, 1991) ou la fragmentation fluide (Marmottant et Villermaux, 2004b; Villermaux, 2004, 2007; Vledouts <u>et al.</u>, 2015). Une solution asymptotique de cette équation est une distribution exponentielle de la forme

$$p(c,t) \sim \exp\left(-\frac{c}{e^{\int_0^t r \mathrm{d}t'}}\right).$$
 (5.44)

D'autre part, il est possible de considérer que le processus d'auto-convolution se produit partout dans l'écoulement, avec une modification permanente de la distribution des concentrations même en un temps infinitésimal. Cette limite correspond alors à une évolution continue des convolutions (Venaille et Sommeria, 2007; Duplat et Villermaux, 2008). La distribution des concentrations évolue alors comme

$$\tilde{p}(s,t+\delta t) = \tilde{p}(s,t)^{1+f}.$$
(5.45)

Cette équation, correspondant à une fraction f d'auto-convolution, traduit bien le processus continu d'addition des niveaux de concentration, avec la possibilité d'une agrégation incomplète des lamelles de concentration (f < 1). Lorsque $r\delta t \rightarrow 0$, l'équation 5.45 donne

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = r\tilde{p}\ln\tilde{p}.$$
(5.46)

La solution de cette équation correspond à l'auto-convolution de la distribution initiale p(c, 0), telle que

$$p(c,t) = p(c,0)^{*\exp(\int_0^t r dt')}.$$
(5.47)

Ces deux processus limites permettent la définition d'une unique équation générale pour l'évolution des distributions par auto-convolution

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = rn \left(-\tilde{p} + \tilde{p}^{1+1/n} \right), \qquad (5.48)$$

dont *n* est l'unique paramètre. Les équations 5.43 et 5.46 sont respectivement obtenues dans la limite n = 1 et $n \to \infty$. A cette équation d'agrégation est ajoutée un terme lié à la diminution des niveaux de concentration à cause de l'étirement du fluide (Duplat et Villermaux, 2008). La conservation de la masse implique que $p(c+\delta c, t+\delta t) = p(c, t)$, avec une diminution moyenne

de la concentration de la forme $\langle \delta c / \delta t \rangle = -\gamma(t)c$, où $\gamma(t)$ correspond au taux d'étirement. L'équation 5.48 devient donc

$$\frac{\partial \tilde{p}}{\partial t} = -\gamma s \frac{\partial \tilde{p}}{\partial s} + rn \left(-\tilde{p} + \tilde{p}^{1+1/n}\right).$$
(5.49)

La solution asymptotique de cette équation appartient à la famille des distributions gamma

$$p(X = c/\langle c \rangle) = \frac{n^n}{\Gamma(n)} X^{n-1} e^{-nX},$$
(5.50)

où n correspond au nombre moyen de convolutions, ou d'agrégations, impliqués dans le système. Ce nombre d'agrégation contribue à conserver la concentration moyenne des agrégats de lamelles $\langle c(t) \rangle$, avec

$$\langle c(t) \rangle = n(t)\theta(t),$$
 (5.51)

où $\theta(t)$ est la concentration moyenne dans une la melle élémentaire, dont l'évolution temporelle dépend des conditions lo cales d'étirement. Cette distribution gamma comporte une que ue exponentielle (équation 5.44) qui pourrait expliquer les observations de la figure 5.25 dans le cas des fortes concentrations ($c/\langle c \rangle \gtrsim 5$).

Afin de réconcilier ces deux comportements limites, à faibles et fortes concentrations, il est nécessaire de développer un modèle de la structure du thermique turbulent. Ce dernier impliquerait deux régions du thermiques avec des dynamiques de mélange différentes, qui pourrait être liée à une distribution hétérogène de l'agrégation dans l'écoulement. Ce phénomène est similaire à ce qui est observé dans des milieux poreux où des écoulements hétérogènes produisent une agrégation partielle avec des régions denses en agrégats entourées de zones lacunaires (Le Borgne et al., 2015; Le Borgne et al., 2017). La périphérie du thermique serait associée au régime de mélange diffusif ou les lamelles de concentration sont isolées et n'interagissent pas entre elles. Les faibles concentrations, effectivement observées dans cette région (figure 5.4), seraient donc bien associées à une distribution en 1/c caractéristique des régimes diffusifs, comme dans un panache turbulent dispersif (Duplat et al., 2010a). La forme exacte de cette distribution dépend de la statistique de l'élongation des structures dans le thermique, qui influence la distribution de concentration maximale des lamelles. Le cœur du thermique serait quant à lui associé au régime de mélange par agrégation complète de lamelles dans un milieu confiné par l'écoulement moyen. Les fortes concentrations, effectivement observées dans cette région (figure 5.4), seraient bien associées à une distribution gamma, propre aux régimes de coalescence, comme dans un panache turbulent confiné (Duplat et Villermaux, 2008).

La prédiction de l'évolution de la distribution de la concentration nécessite de vérifier la validité de ce modèle et d'en déterminer les paramètres. Des hypothèses sur la distribution des régions dispersives et confinées dans le thermique sont nécessaires, afin d'y appliquer respectivement une dynamique d'agrégation totale et une dynamique de diffusion sans agrégation. Il est également nécessaire de prédire l'évolution du nombre d'agrégation dans l'écoulement, ainsi que son éventuelle distribution en fonction des régions du thermique. Enfin, des hypothèses sur la statistique de l'élongation lagrangienne dans le thermique turbulent sont nécessaires, pour obtenir l'évolution temporelle de la concentration d'une lamelle isolée, qui intervient dans la détermination des distributions de concentration (équations 5.32-5.38).

La forme de la densité de probabilité semble asymptotiquement stable dans la limite des faibles et des grandes concentrations (figure 5.25). Ceci est cohérent avec l'étude des profils de vorticité et de concentration, montrant une auto-similarité à l'intérieur du cœur du thermique, qui correspondrait aux fortes concentrations (Zhao et al., 2013). La transition entre les deux

régimes asymptotiques semble cependant dépendre du temps, ce qui expliquerait l'absence d'auto-similarité sur l'ensemble du thermique (Zhao et al., 2013).

Les densité de probabilité expérimentales de la figure 5.24 sont à comparer aux distributions issues de simulations numériques du chapitre 4 (figure 4.11). Ces distributions présentent des queues exponentielles qui se mettent en place aux temps longs et traduisent les processus d'agrégation entre lamelles dans la région confinée par l'écoulement moyen du thermique. Aux temps courts, les queues exponentielles à forte concentration sont perturbées le temps que le thermique se développe pleinement. Aux faibles concentrations, les distributions n'ont pas la même signature que dans les expériences, la distribution gamma reste prédominante, au détriment de la distribution en 1/c. Cette différence pourrait être liée au caractère 2D des simulations numériques, qui pourrait réduire la dispersion du thermique et favoriser l'agrégation des lamelles de concentration. La présence de fragmentation, physique et numérique, pourrait également jouer un rôle sur l'agrégation et sur la forme des distributions.

La densité de probabilité de la concentration traduit la présence de deux régions possédant des dynamiques de mélange différentes, ce qui explique l'évolution des moments de la distribution de concentration, ainsi que de son maximum (figure 5.20). En particulier, le processus d'agrégation dans le cœur du thermique pourrait expliquer la diminution plus lente du maximum de concentration, en comparaison avec la concentration moyenne. Cela expliquerait également que des hétérogénéités de concentration puissent subsister malgré la dilution globale du thermique.

5.6.4 Densité de probabilité des incréments de concentration

Pour aller plus loin dans l'analyse de la dynamique du mélange, il est possible d'utiliser la distribution des incréments de concentration, qui permet d'étudier la structure spatiale du champ scalaire (Le Borgne et al., 2017). Ces incréments de concentration Δc , calculés pour un incrément spatial $\Delta x = |\Delta x|$, sont définis comme

$$\Delta c(\boldsymbol{x}, t, \Delta x) = \langle c(\boldsymbol{x} + \Delta \boldsymbol{x}, t) - c(\boldsymbol{x}, t) \rangle, \qquad (5.52)$$

où x est le vecteur position et où l'opérateur $\langle \bullet \rangle$ désigne une moyenne des incréments de concentration partageant le même incrément spatial Δx . En pratique, les incréments de concentration sont calculés en chaque point de l'image, et correspondent à la moyenne des incréments obtenus sur un cercle de rayon Δx autour de ce point. La densité de probabilité des incréments de concentration $p(\Delta c)$ dépend donc de l'incrément Δx , ce qui reflète la structure du champ de concentration. À noter que lorsque $\Delta x \to 0$, la distribution des incréments de concentration tend vers la distribution du gradient de concentration.

Les incréments de concentration permettent de reconstruire la structure spatiale de l'écoulement en faisant varier l'incrément spatial (figure 5.26). Il est en effet possible de considérer le profil de concentration comme la superposition d'un ensemble de lamelles indépendantes. La différence entre deux points revient alors à annuler statistiquement la contribution des lamelles en commun aux deux emplacements, dans l'hypothèse où elles existent. Par conséquent, le nombre de lamelles indépendantes contribuant à l'incrément de concentration Δc augmente avec l'incrément spatial Δx et tend vers le nombre total de lamelles. Au contraire, le nombre de lamelles indépendantes tend vers 0 quand $\Delta x \rightarrow 0$. Faire varier l'incrément spatial permet donc de révéler la structure de l'agrégation dans l'écoulement.

La superposition des la melles de concentration dans l'écoulement donne naissance à une échelle de corrélation η à laquelle les la melles s'agrègent, et pour laquelle les niveaux de concentration sont relativement uniformes (Villermaux et Duplat, 2006). Pour des incréments Δx plus grands que l'échelle de corrélation η , les incréments de concentration correspondent à des différences entre des concentrations indépendantes, c'est-à-dire non corrélées entre elles. Au contraire, pour des incréments Δx plus petits que l'échelle de corrélation η , les incréments de concentration sont corrélés et dépendent de la manière dont l'agrégation est intervenue dans la construction du champ de concentration.



FIGURE 5.26 – Schéma du processus de superposition aléatoire impliqué dans la construction du champ de concentration. Le profil de concentration (en gris) est constitué par la somme de n lamelles (en couleurs). La concentration au niveau du point vert reçoit la contribution de lamelles vertes et rouges, tandis que la concentration au niveau du point bleu reçoit la contribution de lamelles bleues et rouges. La différence entre les points vert et bleu annule donc statistiquement la contribution des $n - (m_1 + m_2)$ lamelles rouges. L'incrément de concentration Δc , correspondant à un incrément spatial Δx , dépend donc de $m_1 + m_2$ lamelles indépendantes, en vert et bleu. Schéma modifié à partir de Le Borgne et al. (2017).

La figure 5.27 montre la densité de probabilité des incréments de concentration en fonction de l'incrément spatial, à l'intérieur du thermique. Le masque utilisé pour délimiter le thermique est défini dans la partie 5.2.3. Les distributions d'incréments peuvent être interprétées qualitativement à partir du modèle avec deux régions développé pour les distributions de concentration. La forme des distributions dépend de l'incrément spatial, ce qui est une propriété des processus turbulents intermittents (Warhaft, 2000; Le Borgne <u>et al.</u>, 2017). L'intermittence correspond ici à la coexistence entre des régions dispersives avec peu d'agrégation sur la périphérie du thermique et des régions confinées avec de l'agrégation au niveau du cœur du thermique.

La distribution des incréments de concentration présente un net pic autour de zéro, ce qui traduit la présence du régime dispersif sans agrégation (Le Borgne et al., 2017). En effet, c'est le comportement en 1/c de la distribution de concentration, propre au régime dispersif, qui produit le pic autour de zéro dans la distribution des incréments, et cela quel que soit la valeur de l'incrément spatial Δx . L'équivalence entre la distribution des incréments et la distribution des concentrations dans le régime dispersif est liée au fait que la plupart des incréments de concentration résulte de la différence entre la concentration en un point donné c_1 et une concentration très faible c_2 dans la région périphérique dispersive, telle que $c_2 \ll c_1$, ce qui donne $\Delta c = c_1 - c_2 \simeq c_1$.



FIGURE 5.27 – Densité de probabilité des incréments de concentration normalisés par la concentration moyenne $p(\Delta c/\langle c \rangle)$, pour une expérience à un temps donné ($t/t_g = \{208, 61, 25, 18\}$, dans les cas A, B, C et D, respectivement). Les courbes correspondent à des incréments Δx différents.

Pour de petits incréments Δx , la distribution des incréments de concentration présente une diminution exponentielle pour les grandes valeurs de Δc . Cette queue exponentielle est liée à de petits nombres d'agrégation pour lesquelles le nombre de lamelles indépendantes impliquées dans l'incrément de concentration est petit. Au contraire, pour de grands incréments Δx , la distribution des incréments de concentration à grand Δc ne présente plus une diminution exponentielle, mais plutôt une distribution gamma qui devient indépendante de Δx lorsque le nombre de lamelles indépendantes converge vers le nombre total de lamelles dans l'écoulement. Le comportement des incréments de concentration, dépendant de l'incrément spatial, est caractéristique des régions avec une agrégation significative (Le Borgne <u>et al.</u>, 2017), et donc ici du cœur du thermique.

La figure 5.28 montre la densité de probabilité des incréments de concentration en fonction du temps, pour un incrément spatial donné. La forme de la distribution semble relativement indépendante du temps, en particulier à petit Δc , ce qui correspond à la région périphérique dispersive. Une certaine variabilité temporelle semble néanmoins apparaître à grand Δc .

La forme de la distribution des incréments de concentration confirme donc les résultats obtenus sur la distribution des concentrations. La présence de deux régions à l'intérieur du



FIGURE 5.28 – Densité de probabilité des incréments de concentration normalisés par la concentration moyenne $p(\Delta c/\langle c \rangle)$, pour une expérience à un incrément donné ($\Delta x/s_0 = \{0.30, 0.15, 0.10, 0.07\}$, dans les cas A, B, C et D, respectivement). Les courbes correspondent à des temps différents.

thermique turbulent serait associée à une agrégation hétérogène et donc à des dynamiques de mélange différentes, responsable d'une hétérogénéité dans l'homogénéisation du thermique. Comme pour les distributions de concentration, la prédiction de la forme des distributions des incréments nécessiterait le développement d'un modèle lagrangien de la statistique de l'élongation dans le thermique.

5.6.5 Fonctions de structure

Une autre manière d'étudier la structure spatiale du mélange est de considérer les fonctions de structure de la distribution des incréments de concentration $p(\Delta c)$, c'est-à-dire les moments

d'ordre q de la distribution, définis comme

$$\langle |\Delta c|^q \rangle = \int |\Delta c|^q p(\Delta c) d\Delta c.$$
 (5.53)

En général, les fonctions de structure augmentent avec l'incrément spatial Δx , en relation avec une augmentation de l'incrément Δc et de $p(\Delta c)$, cette dernière traduisant une diminution de la corrélation entre les concentrations échantillonnées (Le Borgne et al., 2017). Lorsque Δx devient plus grand que l'échelle de corrélation des agrégats η , les fonctions de structure atteignent généralement un plateau car toutes les différences de concentration ont été échantillonnées.

La figure 5.29 montre les fonctions de structure de l'écoulement en fonction de l'incrément spatial Δx , normalisées par leur valeur en $\Delta x = s_0$, à l'intérieur du thermique. Le masque utilisé pour délimiter le thermique est défini dans la partie 5.2.3. Les fonctions de structure présentent une augmentation sur plusieurs ordres de grandeurs avant d'atteindre un plateau. La saturation des fonctions de structure à $\Delta x \simeq s_0$ indiquerait que l'échelle de corrélation dans le thermique est de l'ordre de $\eta \simeq s_0$, ce qui est cohérent avec une agrégation produite par l'écoulement moyen à l'intérieur du cœur du thermique. Par ailleurs, dans le cas d'un écoulement dispersif sans agrégation (Duplat <u>et al.</u>, 2010a; Le Borgne <u>et al.</u>, 2017) ou d'un écoulement confiné avec une agrégation complète (Duplat et Villermaux, 2008; Le Borgne <u>et al.</u>, 2017), les fonctions de structure sont censées évoluer comme des lois de puissance de Δx lorsque $\Delta x < \eta$. Dans le thermique, les fonctions de structure n'évoluent pas comme des lois de puissance, ce qui traduit la coexistence entre des régions possédant des niveaux d'agrégation hétérogènes. Ce comportement est similaire à la dynamique hétérogène du mélange dans des milieux poreux (Le Borgne et al., 2015; Le Borgne et al., 2017).

La figure 5.30 montre les fonctions de structure en fonction de l'incrément spatial au cours du temps, pour q = 1 et q = 5. De la même manière que pour la distribution des incréments de concentration (figure 5.28), la forme des fonctions semble dépendre assez peu du temps, malgré une certaine variabilité dépendant de l'expérience considérée.

Les fonctions de structure sont donc cohérentes avec les résultats sur la concentration et sur les incréments quant à l'existence d'une hétérogénéité de l'agrégation dans le thermique, en relation avec la coexistence de deux régions possédant des dynamiques de mélange différentes. Comme pour les distributions de concentration et des incréments, la prédiction de la forme des fonctions de structure nécessiterait le développement d'un modèle lagrangien de la statistique de l'élongation dans le thermique.

5.7 Hétérogénéité de l'homogénéisation métal-silicates

Les expériences et les simulations s'intéressant à l'équilibrage métal-silicates dans les océans de magma considèrent généralement l'homogénéisation thermique et chimique du point de vue de la valeur moyenne de la température et de la concentration (*e.g.* Samuel, 2012; Wacheul et Le Bars, 2018). C'est par exemple le cas dans l'étude numérique du chapitre 4, où les temps caractéristiques d'équilibrage sont définies lorsque la concentration moyenne du thermique atteint la moitié de la valeur initiale.

L'utilisation de la concentration moyenne dans le thermique permet de définir une homogénéisation apparente entre métal et silicates, comme dans la partie 5.4, où les distances d'équilibrage correspondent à une concentration moyenne égale à 1% de la concentration initiale. L'homogénéisation dans le thermique est le résultat de l'entraînement progressif des silicates environnants par l'écoulement moyen. Le mélange entre les silicates incorporés et le



FIGURE 5.29 – Fonctions de structure des incréments de concentration $\langle |\Delta c(\Delta x)|^q \rangle$, normalisées par leur valeur à $\Delta x = s_0$, pour une expérience dans chacun des cas. Les courbes correspondent à des degrés q différents.

métal contenu dans le thermique se fait alors de manière hétérogène dans l'écoulement, avec des régions mieux homogénéisées que d'autres. Le cœur du thermique est relativement protégé de l'homogénéisation avec les silicates ambiants en raison de sa position centrale dans l'écoulement, tandis que la périphérie du thermique est mélangée avec une plus grande efficacité. Lorsque le thermique atteint en moyenne un certain degré d'équilibrage, l'équilibrage effectif dans l'écoulement est en réalité distribué autour de cette valeur moyenne. Cela signifie que seule une fraction du thermique est réellement équilibrée pour un degré d'équilibrage moyen donné.

L'étude expérimentale des distributions de concentration a montré la coexistence entre deux régimes de mélange correspondant à des conditions de confinement variables et des niveaux d'agrégation différents à l'intérieur du thermique. La prédiction de la forme des distributions reste à développer et nécessiterait un modèle de la statistique de l'élongation dans le thermique. Il est néanmoins possible de définir empiriquement une approximation pour la distribution des concentrations

$$p^*(X = c/\langle c \rangle) = f(X) \frac{n^n}{\Gamma(n)} X^{n-1} e^{-nX} + (1 - f(X)) \frac{a}{X},$$
(5.54)

où $f(X) = 1/[1 + e^{-(X-X_0)}]$ est une fonction logistique permettant de représenter la tran-



FIGURE 5.30 – Fonctions de structure des incréments de concentration $\langle |\Delta c(\Delta x)|^q \rangle$, normalisées par leur valeur à $\Delta x = s_0$, pour une expérience dans chacun des cas. Les courbes correspondent à des temps différents, pour q = 1 et q = 5.

sition en X_0 , entre le régime dispersif en 1/c et le régime confiné qui suit une distribution gamma. Cette distribution est définie sur un intervalle tronqué $c/\langle c \rangle \in [0.1, 13]$ déterminé empiriquement à partir de la distribution expérimentale de la concentration dans le thermique (figure 5.31a). Les paramètres de cette distribution empirique (n = 1, a = 0.2 et $X_0 = 3$) sont relativement stable quels que soient l'expérience et le cas considérés (figure 5.25). La densité de probabilité de la concentration normalisée par la concentration initiale $p^*(c/c_0)$ est ensuite obtenue à partir de l'équation 5.54 en utilisant une évolution de la concentration moyenne en $\langle c \rangle / c_0 = (z/z^* + 1)^{-3}$ (équation 5.13). Cette évolution est paramétrée expérimentalement sur les cas B, C et D, c'est-à-dire des thermiques turbulents développés, ce qui donne $z^*/r_0 = 3.3 \pm 0.5$.

À partir de la distribution empirique de la concentration $p^*(c/c_0)$, paramétrée sur les ex-



FIGURE 5.31 – (a) Densité de probabilité de la concentration normalisée par la concentration moyenne $p(c/\langle c \rangle)$, en fonction du temps, pour une expérience du cas B. La courbe rouge correspond à une approximation empirique de la distribution (équation 5.54), avec n = 1, a = 0.2 et $X_0 = 3$. (b) Fonction de répartition de la concentration normalisée par la concentration initiale $P^*(c/c_0)$, en fonction de la distance z/r_0 parcourue par le thermique. Les lignes continue et discontinue correspondent respectivement à l'évolution de la concentration pour $P^*(c/c_0) = 0.99$ et pour $P^*(c = \langle c \rangle)$. (c) Degré d'équilibrage local k en fonction de la distance parcourue z/r_0 , avec $P^*(c/c_0) = 0.99$ (ligne continue) et $P^*(c = \langle c \rangle)$ (ligne discontinue).

périences, il est possible de calculer la fonction de répartition correspondante, notée $P^*(c/c_0)$. Cette fonction de répartition correspond à la probabilité que la concentration soit plus petite que c/c_0 . La figure 5.31b montre cette fonction de répartition en fonction de la distance z/r_0 parcourue par le thermique. La ligne continue représente l'évolution de la concentration c/c_0 en fonction de la distance, telle que $P^*(c/c_0) = 0.99$. En d'autre termes, ce profil de concentration, dépendant de la distance parcourue, correspond à une valeur de c/c_0 majorant 99% de l'ensemble du champ de concentration dans le thermique. De la même manière, la ligne discontinue représente l'évolution de la concentration c/c_0 , telle que $P^*(c = \langle c \rangle) \simeq 0.6$, c'està-dire l'évolution de la concentration moyenne en fonction de la distance parcourue par le thermique.

Un degré d'équilibrage local k entre métal et silicates peut alors être estimé à partir de l'évolution de la concentration, avec

$$k = 1 - \frac{c}{c_0}.$$
 (5.55)

La concentration étant distribuée autour de sa valeur moyenne (équation 5.54) en raison de l'hétérogénéité structurelle du thermique, le degré d'équilibrage local est également distribué.

La figure 5.31c montre l'évolution du degré d'équilibrage local k en fonction de la distance parcourue par le thermique. En considérant que l'équilibrage métal-silicate global est réalisé pour des valeurs du degré d'équilibrage local $\geq 99\%$, ce qui correspond à 1% de la concentration initiale, la distance apparente d'équilibrage basée sur la concentration moyenne, c'est-àdire $k = 1 - \langle c \rangle / c_0$, est estimée à $l_a/r_0 \simeq 12$ (figure 5.31b et c, lignes discontinues). Cependant, en raison de la distribution des concentrations, seulement 60% du métal contenu dans le thermique est effectivement équilibré avec les silicates. Des concentrations extrêmes, au niveau du cœur du thermique en particulier, sont donc susceptible de subsister bien plus loin que ce que la concentration moyenne laisse penser.

En considérant une valeur $c_{99\%}$ de la concentration, majorant 99% de l'ensemble du champ de concentration dans le thermique ($P^*(c_{99\%}/c_0) = 0.99$), le degré d'équilibrage local est défini par $k = 1 - c_{99\%}/c_0$ (figure 5.31b et c, lignes continues). Dans ce cas, l'équilibrage thermique et chimique global (correspondant toujours à des valeurs du degré d'équilibrage local $\geq 99\%$) serait atteint à une profondeur $z/r_0 \simeq 25$, ce qui correspond à deux fois la distance apparente d'équilibrage basée sur la concentration moyenne. Cela signifie par exemple qu'un impacteur libérant un noyau de 300 km de diamètre dans l'océan de magma serait en apparence équilibré à 1800 km de profondeur, alors qu'en réalité, un déséquilibre thermodynamique est susceptible de subsister jusqu'à 3800 km de profondeur, c'est-à-dire au delà de la limite manteau-noyau dans le cas d'un manteau entièrement fondu.

L'hétérogénéité de la dynamique du mélange et de l'homogénéisation des thermiques turbulents a donc des conséquences sur le degré d'équilibrage k en retardant l'équilibrage effectif du thermique d'un facteur 2 par rapport à un modèle de thermique homogène. Par conséquent, cela modifie également l'efficacité d'équilibrage \mathcal{E}_i utilisée dans les modèles géochimiques (équation 2 de l'introduction générale). Par ailleurs, la conservation de structures chimiques et thermiques hétérogènes jusqu'à des profondeurs importantes, en particulier au niveau de la limite manteau-noyau pourraient avoir des conséquences géodynamiques importantes, avec par exemple une hétérogénéité dans répartition spatiale des éléments sidérophiles.

L'extrapolation des résultats expérimentaux aux conditions de la différenciation planétaire a évidement plusieurs limitations qu'il est nécessaire de garder à l'esprit. Les nombres sans dimension expérimentaux, en particulier les nombres de Reynolds et de Péclet, sont inférieurs de plusieurs ordres de grandeur aux valeurs d'un écoulement à l'échelle planétaire. L'extrapolation suppose donc une certaine auto-similarité dans la dynamique du mélange dans le cas d'un thermique nettement plus turbulent. Par ailleurs, métal et silicates sont immiscibles, ce qui ajoute un nouvel ingrédient dans l'évolution des champs de vitesse et de concentration. En effet, la phase métallique est susceptible de se fragmenter, modifiant ainsi potentiellement la dynamique de l'équilibrage (Deguen <u>et al.</u>, 2011, 2014; Wacheul et Le Bars, 2018). Enfin, ces expériences supposent que le noyau de l'impacteur est libéré comme un volume compact de métal dans l'océan de magma, ce qui n'est pas le cas en raison de la dispersion et de l'équilibrage produit pendant l'impact lui-même (Kendall et Melosh, 2016; Lherm <u>et al.</u>, 2020; Landeau et al., 2021).

5.8 Conclusion et perspectives

La structure interne des écoulements est obtenue à partir de la mesure simultanée du champ de vitesse (PIV) et du champ de concentration (LIF). Les écoulements présentent effectivement les caractéristiques qualitatives de thermiques turbulents avec un écoulement moyen en forme d'anneau de vorticité incorporant progressivement le fluide ambiant. Par ailleurs, une certaine hétérogénéité de l'équilibrage du champ de concentration est visible avec un cœur moins bien mélangé que la périphérie du thermique. La mesure intégrale de la taille et de la position est globalement en accord avec l'hypothèse d'entraînement turbulent. La concentration moyenne donne une estimation des longueurs apparentes d'équilibrage. Néanmoins, les hétérogénéités observées sur les écoulements sont susceptibles de conserver des concentrations élevées sur des distances plus grandes que la longueur apparente d'équilibrage.

L'étude de la cinématique de l'écoulement permet d'obtenir la circulation dans le thermique. L'hypothèse de circulation constante de Turner et Taylor (1957) est globalement validée aux temps longs. Les taux de déformation mesurés expérimentalement permettent d'obtenir une loi d'échelle pour le taux de déformation moyen, compatible avec l'idée d'une élongation et d'un équilibrage contrôlé par l'écoulement moyen à grande échelle. L'élongation des structures basée sur des mesures eulériennes du contour du champ de concentration pourrait être linéaire avec la distance parcourue par le thermique. Les spectres d'énergie cinétique semblent montrer le développement d'une turbulence homogène et isotrope à petite échelle, qui pourrait être perturbée à grande échelle par une stratification de la turbulence liée aux gradients de densité dans le thermique, ou par un cisaillement de grande échelle produisant une anisotropie de la turbulence.

L'étude des moments de la concentration montre une homogénéisation hétérogène, cohérente avec les observations qualitatives. En particulier, des concentrations élevées sont susceptibles de perdurer dans l'écoulement. Le taux de production des gradients de concentration confirme ce comportement, qui serait lié à un brassage vigoureux du thermique par l'écoulement moyen, responsable d'une production intense de gradients de concentration. Par ailleurs, le temps caractéristique de mélange des hétérogénéités, basé sur la dynamique de production et de destruction des gradients, est plus grand que le temps d'homogénéisation apparente du thermique basé sur la concentration moyenne. Ceci indiquerait donc également que des hétérogénéités de concentration pourraient subsister dans l'écoulement. La densité de probabilité de la concentration donne un aperçu des mécanismes impliqués dans l'hétérogénéité du thermique et dans les processus de mélange. Le cœur du thermique serait protégé de l'homogénéisation en raison de son relatif confinement et des processus d'agrégation susceptibles de s'y dérouler et maintenir les niveaux de concentration. La périphérie du thermique serait équilibré plus facilement en raison de la dispersion de l'écoulement et de l'absence d'agrégation. La distribution des incréments de concentration et leur moments tendent à confirmer ces interprétations.

L'explication de ces distributions, ainsi que la relation entre la cinématique de l'écoulement et la dynamique du mélange, nécessitent l'estimation de la statistique lagrangienne de l'élongation des structures. Il est néanmoins possible d'utiliser une loi empirique pour l'évolution des distributions de concentration, ce qui permet d'obtenir une estimation du degré d'équilibrage thermique et chimique entre métal et silicates dans le thermique turbulent. La conservation de structures hétérogènes dans le cœur du thermique retarde l'équilibrage d'un facteur 2 par rapport à un modèle de thermique homogène.

Les perspectives de ces expériences incluent l'effet de l'immiscibilité. Pour cela des expériences sur des thermiques immiscibles sont envisageables (Deguen <u>et al.</u>, 2011, 2014; Landeau <u>et al.</u>, 2014, 2016). Elles utiliseraient par exemple une solution aqueuse de NaI dans une huile de silicone. La concentration en sel serait ajustée afin de faire correspondre l'indice optique des deux phases. Cette méthode nécessiterait d'utiliser un traceur chimique soluble dans les deux phases, ou alors de chauffer la phase dense puis de mesurer le champ de température en utilisant des méthodes telles que la LIF à deux couleurs ou des cristaux thermochromiques.

Par ailleurs, la présence d'une phase fragmentée dans l'environnement turbulent du thermique est susceptible de modifier l'entraînement et le mélange par rapport à des expériences miscibles, en fonction du nombre de Stokes des particules métalliques impliquées dans l'écoulement. Les particules métalliques de grandes tailles (St ≥ 0.1) peuvent augmenter l'intensité de la turbulence et favoriser l'entraînement et le mélange, tandis que les particules de petites taille (St $\ll 0.1$) ont l'effet inverse (*e.g.* Elghobashi et Truesdell, 1993; Elghobashi, 1994; Crowe <u>et al.</u>, 1997; Balachandar et Eaton, 2010). Ces effets, étudiés dans le cadre de panaches volcaniques (Jessop et Jellinek, 2014; Lherm et Jellinek, 2019), pourrait également s'appliquer à des thermiques turbulents.

Dans les thermiques impliqués pendant la différenciation des planètes, la différence de densité provient principalement de la différence de phase, mais la température est susceptible d'influencer la dynamique du thermique par des effets de double diffusion. Ces effets ont été étudiés dans des panaches turbulents (Dadonau et al., 2020), mais pas dans des thermiques. La double diffusion provoque par exemple la réduction du coefficient d'entraînement jusqu'à 20%, en entravant l'incorporation à grande échelle du fluide ambiant. Cet effet de la température sera probablement modéré étant donné la différence de densité entre métal et silicates. Des expériences pourraient néanmoins être menées sur des thermiques en chauffant le fluide dense.

Enfin, des effets de la température et de la pression sont également susceptibles d'intervenir sur la dynamique de la fragmentation en augmentant la miscibilité entre la phase métallique et la phase silicatée (Morard et Katsura, 2010). Cela pourrait affecter l'équilibrage chimique et le contenu en fer de l'océan de magma. Un tel effet pourrait être augmenté dans les super-Terres où des conditions P-T extrêmes peuvent exister.

5.A Calibration intensité-concentration

La détermination du champ de concentration utilise une relation entre l'intensité lumineuse de fluorescence de la Rhodamine 6G et sa concentration. Cette relation est calibrée indépendamment pour les cas A, B, C et D car les concentrations initiales varient d'un cas à l'autre et l'intensité de la fluorescence dépend légèrement de la concentration en NaCl. Pour chaque cas, l'intensité de fluorescence de solution contenue dans le tube est mesurée dans des conditions identiques aux expériences (cuve remplie avec les particules de PIV), afin de prendre en compte d'éventuels effets d'absorption le long du trajet de la nappe laser. La solution aqueuse initiale est progressivement diluée avec de l'eau pour prendre en compte la variation de concentration en sel concomitante à la variation de concentration en colorant fluorescent.



FIGURE 5.32 – Intensité lumineuse de fluorescence en fonction de la concentration en Rhodamine 6G, dans des solutions aqueuses de NaCl (a) et de NaI (b). La ligne continue correspond à une loi de puissance de la forme $I = ac^b$ ajustée aux données expérimentales, avec $a = (1.60 \pm 0.01) \times 10^4$ et $b = 0.93 \pm 0.01$. La ligne discontinue correspond à une loi de puissance de la forme I = ac ajustée aux données expérimentales pour $c \le 1 \text{ mg/L}$, avec $a = (1.63 \pm 0.02) \times 10^4$.

La figure 5.32 a présente une des calibrations de l'intensité lumineuse I en fonction de la concentration c en Rhodamine 6G. Lorsque $c \rightarrow 0$, l'intensité lumineuse doit augmenter linéairement avec la concentration en colorant et s'atténuer lorsque à forte concentration. C'est effectivement le cas lorsque $c \gtrsim 1 \text{ mg/L}$. Cette atténuation pour rait aussi être liée à des interactions avec NaCl, menant à la formation d'agrégats réduisant l'intensité de la fluores cence. Afin de prendre en compte cet effet à forte concentration, la calibration intensité-concentration utilise donc une loi de puissance de la forme $I = ac^b$, et non une loi linéaire.

L'utilisation du NaI et du CsCl, qui permettrait de minimiser les effets contrastes d'indice de réfraction et de viscosité est rendue impossible par la présence de ces sels qui favorisent la formation d'agrégats réduisant l'intensité de la fluorescence (*e.g.* Fischer et Georges, 1998). Dans les gammes de concentration en sels utilisés dans les expériences, l'intensité de la fluorescence devient indépendante de la concentration en colorant, ce qui ne permet plus de relier l'intensité à la concentration (figure 5.32b).

Conclusion et perspectives

Dans cette seconde partie, la phase post-impact de séparation métal-silicate dans un océan de magma, sous la forme d'un thermique turbulent, est étudiée numériquement (chapitre 4) et expérimentalement (chapitre 5).

Le chapitre 4 s'intéresse d'abord à l'influence de la déformation et de l'étirement de la phase métallique sur l'homogénéisation entre métal et silicates. La fragmentation de la phase métallique dans le thermique turbulent se produit en suivant une séquence générique, impliquant la production de lamelles compressées, ainsi que de ligaments étirés, à partir desquelles une population de gouttes peut se former par fragmentation. Les simulations numériques des briques élémentaires de la séquence de fragmentation montrent que l'homogénéisation thermique et chimique est accélérée par l'étirement de la phase métallique. Leur dynamique de mélange est donc contrôlée par l'historique de l'étirement de ces structures. Dans un thermique turbulent, les simulations numériques montrent que la phase métallique est vigoureusement étirée et déformée par l'écoulement. L'homogénéisation métal-silicate est alors contrôlée par le taux d'étirement de la phase métallique, avec une influence relativement faible de la diffusivité, de la viscosité et de la tension de surface. Le taux d'étirement semble être contrôlé par l'écoulement moyen, correspondant à l'entraînement progressif de silicates dans le thermique turbulent.

Le chapitre 5 s'intéresse ensuite expérimentalement à la dynamique du mélange dans le thermique turbulent miscible. Le brassage du fluide dense, correspondant à la phase métallique, produit une homogénéisation apparente entre métal et silicates, mesurée expérimentalement par la concentration moyenne d'un traceur passif. L'homogénéisation apparente du métal est contrôlée par l'incorporation progressive du fluide ambiant, correspondant à la phase silicatée, par entraînement turbulent. Les taux de déformations et l'élongation des structures du thermique suggèrent que l'écoulement moyen est bien responsable de cette homogénéisation, ce qui va dans le sens des résultat numériques du chapitre 4. L'étude du taux de production des gradients scalaires montre par ailleurs que le mélange effectif entre les phases, correspondant à un mélange diffusif à l'échelle moléculaire, se produit en réalité plus tardivement que l'homogénéisation apparente. De plus, le cœur de l'écoulement, correspondant à l'anneau autour duquel s'enroule le thermique semble protégé de l'équilibrage avec les silicates ambiants, et s'homogénéiser plus lentement que la région périphérique du thermique. L'étude des distributions de concentration et de ses incréments permet effectivement de mettre en évidence une hétérogénéité de l'équilibrage dans l'écoulement. Le cœur du thermique, relativement confiné par la forme de l'écoulement, serait soumis à des processus d'agrégation des niveaux de concentration, menant à la conservation de concentrations élevées. La périphérie du thermique serait homogénéisée plus rapidement en raison de la dispersion de l'écoulement. Cela implique qu'un déséquilibre thermodynamique entre métal et silicate est susceptible de perdurer sur de plus grandes distances dans l'océan de magma. Cette hétérogénéité est à prendre en compte dans l'estimation du degré d'équilibrage des modèles géochimiques. Par ailleurs, la migration de la phase métallique apportée par un planétésimal pourrait conduire à la formation de régions thermiquement et chimiquement hétérogènes dans le noyau et le manteau.

À partir des simulations numériques et des expériences en laboratoire, une perspective est de développer un modèle prédictif de l'évolution des distributions de concentration dans le thermique turbulent. Cela permettrait de prédire la dynamique de l'équilibrage métal-silicate dans un océan de magma, en prenant en compte les effets de l'étirement local (chapitre 4), dans une structure hétérogène de thermique turbulent (chapitre 5). Pour cela, il est nécessaire d'obtenir la statistique de l'élongation lagrangienne des structures de l'écoulement, afin de prédire l'évolution de la densité de probabilité de concentration. Une méthode consisterait à utiliser une approche lagrangienne de traçage de particules. Ces dernières seraient advectées numériquement par le champ de vitesse eulérien mesuré expérimentalement, ce qui permettrait de reconstruire la distribution de l'élongation, et de s'affranchir des processus de diffusion¹. Une autre approche consisterait à utiliser des algorithmes de vélocimétrie par traçage de particules (PTV), directement sur les particules visibles dans les images expérimentales. Le traçage serait néanmoins limité à quelques images car la nappe laser ne donne qu'une section 2D de l'écoulement 3D.

^{1.} Cette méthode numérique est actuellement implémentée par Ludovic Huguet, post-doctorant à l'Université Aix-Marseille et à l'Université Grenoble-Alpes.

Conclusion générale

Dans cette thèse, la dynamique physique des échanges thermiques et chimiques entre métal et silicates dans les océans de magma a été étudiée pendant la phase d'impact (partie I) et pendant la phase post-impact (partie II). Pendant l'impact, la décélération du cratère est responsable du développement d'une instabilité de Rayleigh-Taylor sphérique autour de la cavité, à l'origine de la formation d'une couche de mélange entre métal et silicates. La fermeture de la cavité, ainsi que la formation puis l'effondrement du pic central génèrent alors une source additionnelle de mélange métal-silicate. Après l'impact, la phase métallique s'équilibre progressivement avec les silicates de l'océan de magma sous la forme d'un thermique turbulent. La dynamique de l'équilibrage est contrôlée par l'écoulement moyen lié à l'entraînement turbulent et au brassage des silicates environnants. La structure de cet écoulement est alors responsable d'un équilibrage hétérogène, dont l'efficacité dépend de la dynamique locale de l'étirement de la phase métallique. L'étude des distributions de concentration permet de prédire une distance d'équilibrage métal-silicate effective augmentée d'un facteur 2 par rapport à un modèle de thermique homogène. Un impacteur libérant un noyau de 300 km dans l'océan de magma serait en apparence équilibré à 1800 km de profondeur alors qu'en réalité un déséquilibre thermodynamique est susceptible de subsister jusqu'à 3800 km.

Bien que la phase d'impact et la phase post-impact aient été étudiées séparément, elles s'inscrivent dans un processus de différenciation planétaire continu. L'état de l'impacteur à l'issue du processus d'impact constitue les conditions initiales du thermique turbulent dans lequel la phase métallique migre vers le noyau. En particulier, la dispersion de la phase métallique définit la taille initiale du thermique, tandis que l'équilibrage métal-silicate induit par l'impact contrôle sa flottabilité et son degré d'équilibrage initial. L'influence de l'impact sur la taille initiale du thermique produit suite à l'enchaînement successif de l'ouverture et de la fermeture de la cavité, de la formation et de l'effondrement du jet central, et de l'évolution en thermique turbulent reste à accomplir. Cela permettrait de comprendre l'intégralité des processus de mélange impliqués dans l'équilibrage métal-silicate suivant l'impact d'un planétésimal.

Des expériences préliminaires permettant d'étudier la dynamique du mélange dans le thermique formé après l'impact ont été réalisées. Le champ de concentration suivant l'impact d'une goutte à la surface d'un fluide moins dense est obtenu avec une méthode de LIF (figure 4). Le fluide dense, initialement dispersé sous le cratère, migre progressivement vers le bas sous l'effet de sa flottabilité. Ces expériences ont été répétées avec différents impacteurs, correspondant à différents nombres de Froude modifiés (équation I.2).

La figure 5a montre l'évolution du rayon du thermique en fonction de la distance parcourue par son centre de masse. Le coefficient d'entraînement semble relativement peu affecté par les conditions d'impact. La taille initiale du thermique semble cependant augmenter avec le nombre de Froude modifié, ce qui serait cohérent avec une plus grande dispersion par l'impact. La figure 5b montre l'évolution de la concentration moyenne en fonction de la distance



FIGURE 4 – Évolution d'un thermique produit par l'impact d'une goutte à la surface d'un liquide moins dense (Fr^{*} = 684 et $\rho_1/\rho_2 = 1.4$). L'échelle de couleur correspond au champ de concentration normalisée par la concentration initiale de la goutte.



FIGURE 5 – (a) Rayon moyen du thermique normalisé par le rayon de la goutte r/R_i , en fonction de la distance parcourue par son centre de masse z/R_i . (b) Concentration moyenne normalisée par la concentration initiale dans la goutte $\langle c \rangle / c_0$, en fonction de la distance parcourue par son centre de masse z/R_i . Les lignes continues et les zones transparentes correspondent respectivement à l'évolution de la moyenne et de l'écart-type de trois expériences dans les mêmes conditions d'impact (Fr^{*} = {379, 684, 1084} et $\rho_1/\rho_2 = 1.4$). La ligne noire correspond à coefficient d'entraînement $\alpha = 0.2$.

parcourue par le thermique. Les niveaux de concentration semblent diminuer avec l'augmentation du nombre de Froude modifié. Cela pourrait s'expliquer par un mélange plus important lors de la phase de cratérisation, en relation avec une dispersion accrue du liquide dense par l'impact.

Ces résultats préliminaires restent à confirmer et pourraient faire l'objet d'une étude plus approfondie en faisant par exemple varier le rapport de densité, ainsi que la hauteur de chute, ce qui permettrait d'explorer une plus grande gamme de nombres de Froude. Par ailleurs, le thermique généré après l'impact d'une goutte est peu turbulent, ce qui constitue une limitation à la comparaison avec un écoulement planétaire. L'utilisation d'impacteurs sous la forme de volumes fluides centimétriques (Landeau <u>et al.</u>, 2021) permettrait alors d'atteindre des conditions plus turbulentes, ainsi que des nombres de Froude plus petits, ce qui correspondrait mieux à la dynamique des impacts géants.

Références

- ABE, Y. : Thermal and chemical evolution of the terrestrial magma ocean. <u>Physics of the Earth</u> and Planetary Interiors, 100(1-4):27–39, 1997.
- AGBAGLAH, G., JOSSERAND, C. et ZALESKI, S. : Longitudinal instability of a liquid rim. <u>Physics</u> of Fluids, 25(2):022103, 2013.
- AGNOR, C. et ASPHAUG, E. : Accretion Efficiency during Planetary Collisions. <u>The</u> Astrophysical Journal, 613(2):L157–L160, 2004.
- AGNOR, C. B., CANUP, R. M. et LEVISON, H. F. : On the Character and Consequences of Large Impacts in the Late Stage of Terrestrial Planet Formation. Icarus, 142(1):219–237, 1999.
- Акнметоv, D. G. : <u>Vortex Rings</u>. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2009. ISBN 978-3-642-05015-2.
- ALBARÈDE, F. : Volatile accretion history of the terrestrial planets and dynamic implications. Nature, 461(7268):1227–1233, 2009.
- ARNETT, W. D., BAHCALL, J. N., KIRSHNER, R. P. et WOOSLEY, S. E. : Supernova 1987A. <u>Annual</u> Review of Astronomy and Astrophysics, 27(1):629–700, 1989.
- ATTA, C. W. V. et CHEN, W. Y. : Structure functions of turbulence in the atmospheric boundary layer over the ocean. Journal of Fluid Mechanics, 44(1):145–159, 1970.
- BADRO, J., AUBERT, J., HIROSE, K., NOMURA, R., BLANCHARD, I., BORENSZTAJN, S. et SIEBERT,
 J. : Magnesium Partitioning Between Earth's Mantle and Core and its Potential to Drive an Early Exsolution Geodynamo. Geophysical Research Letters, 45(24):13,240–13,248, 2018.
- BADRO, J., BRODHOLT, J. P., PIET, H., SIEBERT, J. et RYERSON, F. J. : Core formation and core composition from coupled geochemical and geophysical constraints. <u>Proceedings of the</u> National Academy of Sciences, 112(40):12310–12314, 2015.
- BADRO, J., SIEBERT, J. et NIMMO, F. : An early geodynamo driven by exsolution of mantle components from Earth's core. Nature, 536(7616):326–328, 2016.
- BAI, K. et KATZ, J. : On the refractive index of sodium iodide solutions for index matching in PIV. Experiments in Fluids, 55(4):1704, 2014.
- BALACHANDAR, S. et EATON, J. K. : Turbulent Dispersed Multiphase Flow. <u>Annual Review of</u> Fluid Mechanics, 42(1):111–133, 2010.
- BALAKRISHNAN, K. et MENON, S. : Characterization of the Mixing Layer Resulting from the Detonation of Heterogeneous Explosive Charges. Flow, Turbulence and Combustion, 87

(4):639-671, 2011.

- BARNHART, C. J. et NIMMO, F. : Role of impact excavation in distributing clays over Noachian surfaces. Journal of Geophysical Research : Planets, 116(E1), 2011.
- BATCHELOR, G. K. : The effect of homogeneous turbulence on material lines and surfaces. <u>Proc.</u> R. Soc. Lond. A, 213(1114):349–366, 1952.
- BATCHELOR, G. K. : Heat convection and buoyancy effects in fluids. <u>Quarterly Journal of the</u> Royal Meteorological Society, 80(345):339–358, 1954.
- BAUMANN, N., JOSEPH, D. D., MOHR, P. et RENARDY, Y. : Vortex rings of one fluid in another in free fall. Physics of Fluids A : Fluid Dynamics, 4(3):567–580, 1992.
- BELL, G. I. : Taylor instability on cylinders and spheres in the small amplitude approximation. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, NM, Technical Report No. LA-1321, 1951.
- BERBEROVIĆ, E., VAN HINSBERG, N. P., JAKIRLIĆ, S., ROISMAN, I. V. et TROPEA, C. : Drop impact onto a liquid layer of finite thickness : Dynamics of the cavity evolution. <u>Physical Review</u> E, 79(3):036306, 2009.
- BISIGHINI, A., COSSALI, G. E., TROPEA, C. et ROISMAN, I. V. : Crater evolution after the impact of a drop onto a semi-infinite liquid target. Physical Review E, 82(3):036319, 2010.
- BLANCHARD, I., SIEBERT, J., BORENSZTAJN, S. et BADRO, J. : The solubility of heat-producing elements in Earth's core. Geochemical Perspectives Letters, 5:1–5, 2017.
- BOND, D. et JOHARI, H. : Effects of initial geometry on the development of thermals. Experiments in Fluids, 39(3):591–601, 2005.
- BOND, D. et JOHARI, H. : Impact of buoyancy on vortex ring development in the near field. Experiments in Fluids, 48(5):737–745, 2010.
- BOTTKE, W. F., WALKER, R. J., DAY, J. M. D., NESVORNY, D. et Elkins-Tanton, L. : Stochastic Late Accretion to Earth, the Moon, and Mars. Science, 330(6010):1527–1530, 2010.
- BOUHIFD, M. A., GAUTRON, L., BOLFAN-CASANOVA, N., MALAVERGNE, V., HAMMOUDA, T., AN-DRAULT, D. et JEPHCOAT, A. P. : Potassium partitioning into molten iron alloys at highpressure : Implications for Earth's core. <u>Physics of the Earth and Planetary Interiors</u>, 160 (1):22–33, 2007.
- CANUP, R. M. : Simulations of a late lunar-forming impact. Icarus, 168(2):433-456, 2004.
- CANUP, R. M. : Forming a Moon with an Earth-like Composition via a Giant Impact. <u>Science</u>, 338(6110):1052–1055, 2012.
- CARSLAW, H. S. et JAEGER, J. C. : <u>Conduction of heat in solids</u>. Oxford : Clarendon Press, Oxford, 2nd édn, 1959. ISBN 0-19-853368-3.
- CASTAING, B., GAGNE, Y. et HOPFINGER, E. J. : Velocity probability density functions of high Reynolds number turbulence. Physica D : Nonlinear Phenomena, 46(2):177–200, 1990.
- CHABOT, N. L., DRAPER, D. S. et AGEE, C. B. : Conditions of core formation in the earth :

Constraints from Nickel and Cobalt partitioning. <u>Geochimica et Cosmochimica Acta</u>, 69 (8):2141–2151, 2005.

- Снамвекя, J. : Terrestrial Planet Formation. In Seager, S., éd. : Exoplanets, p. 297–317. University of Arizona Press, Tucson, Arizona, USA, 2010.
- CHANDRASEKHAR, S. : The character of the equilibrium of an incompressible fluid sphere of variable density and viscosity subject to radial acceleration. <u>The Quarterly Journal of</u> Mechanics and Applied Mathematics, 8(1):1–21, 1955.
- CHANDRASEKHAR, S. : <u>Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability</u>. Clarendon, Oxford, 1961. ISBN 978-0-486-31920-9.
- CHING, B., GOLAY, M. W. et JOHNSON, T. J. : Droplet Impacts Upon Liquid Surfaces. <u>Science</u>, 226(4674):535–537, 1984.
- CLANET, C., HERSEN, F. et BOCQUET, L. : Secrets of successful stone-skipping. <u>Nature</u>, 427 (6969):29–29, 2004.
- CLESI, V., MONTEUX, J., QADDAH, B., LE BARS, M., WACHEUL, J.-B. et BOUHIFD, M. : Dynamics of core-mantle separation : Influence of viscosity contrast and metal/silicate partition coefficients on the chemical equilibrium. <u>Physics of the Earth and Planetary Interiors</u>, p. 106547, 2020.
- CLIFT, R., GRACE, J. R. et WEBER, M. E. : <u>Bubbles, Drops, and Particles</u>. Academic Press, Inc., New York, 1978. ISBN 978-0-486-44580-9.
- COLTICE, N. et SCHMALZL, J. : Mixing times in the mantle of the early Earth derived from 2-D and 3-D numerical simulations of convection. <u>Geophysical Research Letters</u>, 33(23):L23304, 2006.
- Соок, A. W., CABOT, W. et MILLER, P. L. : The mixing transition in Rayleigh–Taylor instability. Journal of Fluid Mechanics, 511:333–362, 2004.
- CORGNE, A., KESHAV, S., FEI, Y. et McDonough, W. F. : How much potassium is in the Earth's core ? New insights from partitioning experiments. Earth and Planetary Science Letters, 256 (3):567–576, 2007.
- CROWE, C., SCHWARZKOPF, J., SOMMERFELD, M. et TSUJI, Y. : <u>Multiphase Flows with Droplets</u> and Particles. CRC Press, USA, 1997.
- Сик, M. et Stewart, S. T. : Making the Moon from a Fast-Spinning Earth : A Giant Impact Followed by Resonant Despinning. Science, 338(6110):1047–1052, 2012.
- CUZZI, J. N., HOGAN, R. C., PAQUE, J. M. et DOBROVOLSKIS, A. R. : Size-selective Concentration of Chondrules and Other Small Particles in Protoplanetary Nebula Turbulence. <u>The</u> Astrophysical Journal, 546(1):496–508, 2001.
- DADONAU, M., PARTRIDGE, J. L. et LINDEN, P. F. : The effect of double diffusion on entrainment in turbulent plumes. Journal of Fluid Mechanics, 884, 2020.
- DAERR, A. et MOGNE, A. : Pendent_drop : An ImageJ Plugin to Measure the Surface Tension from an Image of a Pendent Drop. Journal of Open Research Software, 4(1):e3, 2016.
- DAHL, T. W. et STEVENSON, D. J. : Turbulent mixing of metal and silicate during planet accretion — And interpretation of the Hf–W chronometer. <u>Earth and Planetary Science Letters</u>, 295 (1):177–186, 2010.
- DALZIEL, S. B., LINDEN, P. F. et YOUNGS, D. L. : Self-similarity and internal structure of turbulence induced by Rayleigh–Taylor instability. Journal of Fluid Mechanics, 399:1–48, 1999.
- DAY, J. M. D., PEARSON, D. G. et TAYLOR, L. A. : Highly Siderophile Element Constraints on Accretion and Differentiation of the Earth-Moon System. Science, 315(5809):217–219, 2007.
- DAY, J. M. D., WALKER, R. J., JAMES, O. B. et PUCHTEL, I. S. : Osmium isotope and highly siderophile element systematics of the lunar crust. <u>Earth and Planetary Science Letters</u>, 289 (3):595–605, 2010.
- DEGUEN, R. : Formation des noyaux planétaires; convection et changements de phase à l'intérieur des planètes telluriques. HDR, Université Claude Bernard Lyon 1, Géophysique [physics.geo-ph], tel-01957298, 2018.
- DEGUEN, R., LANDEAU, M. et OLSON, P. : Turbulent metal-silicate mixing, fragmentation, and equilibration in magma oceans. Earth and Planetary Science Letters, 391:274–287, 2014.
- DEGUEN, R., OLSON, P. et CARDIN, P. : Experiments on turbulent metal-silicate mixing in a magma ocean. Earth and Planetary Science Letters, 310(3):303–313, 2011.
- DIDDEN, N. : On the formation of vortex rings : Rolling-up and production of circulation. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP, 30(1):101–116, 1979.
- DIMONTE, G. : Nonlinear evolution of the Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instabilities. Physics of Plasmas, 6(5):2009–2015, 1999.
- DIMONTE, G. : Spanwise homogeneous buoyancy-drag model for Rayleigh–Taylor mixing and experimental evaluation. Physics of Plasmas, 7(6):2255–2269, 2000.
- DIMONTE, G. et SCHNEIDER, M. : Density ratio dependence of Rayleigh–Taylor mixing for sustained and impulsive acceleration histories. Physics of Fluids, 12(2):304–321, 2000.
- DUPLAT, J., INNOCENTI, C. et VILLERMAUX, E. : A nonsequential turbulent mixing process. Physics of Fluids, 22(3):035104, 2010a.
- DUPLAT, J., JOUARY, A. et VILLERMAUX, E. : Entanglement Rules for Random Mixtures. <u>Physical</u> Review Letters, 105(3):034504, 2010b.
- DUPLAT, J. et VILLERMAUX, E. : Mixing by random stirring in confined mixtures. Journal of Fluid Mechanics, 617:51–86, 2008.
- DURRAN, D., WEYN, J. A. et MENCHACA, M. Q. : Practical Considerations for Computing Dimensional Spectra from Gridded Data. Monthly Weather Review, 145(9):3901–3910, 2017.
- EGGERS, J. et VILLERMAUX, E. : Physics of liquid jets. <u>Reports on Progress in Physics</u>, 71 (3):036601, 2008.
- ELGHOBASHI, S. : On predicting particle-laden turbulent flows. <u>Applied Scientific Research</u>, 52 (4):309–329, 1994.

- ELGHOBASHI, S. et TRUESDELL, G. : On the two-way interaction between homogeneous turbulence and dispersed solid particles. I : Turbulence modification. <u>Physics of Fluids A : Fluid</u> Dynamics (1989-1993), 5(7):1790–1801, 1993.
- ELMORE, P. A., CHAHINE, G. L. et OGUZ, H. N. : Cavity and flow measurements of reproducible bubble entrainment following drop impacts. Experiments in Fluids, 31(6):664–673, 2001.
- Еммоля, H. W., Chang, C. T. et Watson, B. C. : Taylor instability of finite surface waves. Journal of Fluid Mechanics, 7(2):177–193, 1960.
- ENGEL, O. G. : Collisions of Liquid Drops With Liquids. Rap. tech., National Bureau of Standards, Washington, D. C., 1961.
- ENGEL, O. G. : Collisions of Liquid Drops With Liquids. Part 2 Crater Depth in Fluid Impact. Rap. tech., National Bureau of Standards, Gaithersburg, MD, 1962.
- ENGEL, O. G. : Crater Depth in Fluid Impacts. Journal of Applied Physics, 37(4):1798–1808, 1966.
- ENGEL, O. G. : Initial Pressure, Initial Flow Velocity, and the Time Dependence of Crater Depth in Fluid Impacts. Journal of Applied Physics, 38(10):3935–3940, 1967.
- ERRICO, R. M. : Spectra Computed from a Limited Area Grid. <u>Monthly Weather Review</u>, 113 (9):1554–1562, 1985.
- ESCUDIER, M. P. et MAXWORTHY, T. : On the motion of turbulent thermals. Journal of Fluid Mechanics, 61(3):541–552, 1973.
- FEDORCHENKO, A. I. et WANG, A.-B. : On some common features of drop impact on liquid surfaces. Physics of Fluids, 16(5):1349–1365, 2004.
- FISCHER, M. et GEORGES, J. : Limitations arising in the study of the fluorescence quenching of rhodamine 6G by iodides using cw-laser thermal lens spectrometry. <u>Spectrochimica Acta</u> Part A : Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 54(1):101–110, 1998.
- FISCHER, R. A., CAMPBELL, A. J. et CIESLA, F. J. : Sensitivities of Earth's core and mantle compositions to accretion and differentiation processes. <u>Earth and Planetary Science Letters</u>, 458:252–262, 2017.
- FISCHER, R. A., NAKAJIMA, Y., CAMPBELL, A. J., FROST, D. J., HARRIES, D., LANGENHORST, F., MIYAJIMA, N., POLLOK, K. et RUBIE, D. C. : High pressure metal-silicate partitioning of Ni, Co, V, Cr, Si, and O. Geochimica et Cosmochimica Acta, 167:177–194, 2015.
- FRANZ, G. J. : Splashes as Sources of Sound in Liquids. <u>The Journal of the Acoustical Society</u> of America, 31(8):1080–1096, 1959.
- GENDRON, P.-O., AVALTRONI, F. et WILKINSON, K. J. : Diffusion coefficients of several rhodamine derivatives as determined by pulsed field gradient-nuclear magnetic resonance and fluorescence correlation spectroscopy. Journal of Fluorescence, 18(6):1093–1101, 2008.
- GESSMANN, C. K. et WOOD, B. J. : Potassium in the Earth's core? Earth and Planetary Science Letters, 200(1):63–78, 2002.

- GIELEN, M. V., SLEUTEL, P., BENSCHOP, J., RIEPEN, M., VORONINA, V., VISSER, C. W., LOHSE, D., SNOEIJER, J. H., VERSLUIS, M. et GELDERBLOM, H. : Oblique drop impact onto a deep liquid pool. Physical Review Fluids, 2(8):083602, 2017.
- HALLETT, J. et CHRISTENSEN, L. : Splash and penetration of drops in water. Journal de Recherches atmosph{\'e}riques, 18(4):225-242, 1984.
- HALLIDAY, A. N. : Mixing, volatile loss and compositional change during impact-driven accretion of the Earth. Nature, 427(6974):505–509, 2004.
- HAN, J. et TRYGGVASON, G. : Secondary breakup of axisymmetric liquid drops. I. Acceleration by a constant body force. Physics of Fluids, 11(12):3650–3667, 1999.
- HAYNES, W. M. : <u>CRC Handbook of Chemistry and Physics</u>. CRC Press, 2016. ISBN 978-1-4987-5429-3.
- HINES, R. L. : Electrostatic Atomization and Spray Painting. Journal of Applied Physics, 37 (7):2730–2736, 1966.
- HOLSAPPLE, K. A. : The Scaling of Impact Processes in Planetary Sciences. <u>Annual Review of</u> Earth and Planetary Sciences, 21(1):333–373, 1993.
- HOLSAPPLE, K. A. et SCHMIDT, R. M. : Point source solutions and coupling parameters in cratering mechanics. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 92(B7):6350–6376, 1987.
- ICHIKAWA, H., LABROSSE, S. et KURITA, K. : Direct numerical simulation of an iron rain in the magma ocean. Journal of Geophysical Research, 115(B01404):1–12, 2010.
- JACOBS, J. W. et SHEELEY, J. M. : Experimental study of incompressible Richtmyer–Meshkov instability. Physics of Fluids, 8(2):405–415, 1996.
- JAIN, U., JALAAL, M., LOHSE, D. et MEER, D. v. d. : Deep pool water-impacts of viscous oil droplets. Soft Matter, 15(23):4629–4638, 2019.
- JALAAL, M., KEMPER, D. et LOHSE, D. : Viscoplastic water entry. Journal of Fluid Mechanics, 864:596–613, 2019.
- JAUPART, C. et MARESCHAL, J.-C. : <u>Heat Generation and Transport in the Earth</u>. Cambridge University Press, Cambridge, 2010. ISBN 978-1-139-49362-8.
- JAYARATNE, O. W. et MASON, B. J. : The coalescence and bouncing of water drops at an air/water interface. Proc. R. Soc. Lond. A, 280(1383):545–565, 1964.
- JEANS, J. H. : The propagation of earthquake waves. <u>Proceedings of the Royal Society of</u> London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 102(718): 554–574, 1923.
- JESSOP, D. et JELLINEK, A. : Effects of particle mixtures and nozzle geometry on entrainment into volcanic jets. Geophysical Research Letters, 41(11):3858–3863, 2014.
- JOHANSEN, A., OISHI, J. S., LOW, M.-M. M., KLAHR, H., HENNING, T. et YOUDIN, A. : Rapid planetesimal formation in turbulent circumstellar disks. Nature, 448(7157):1022–1025, 2007.

- JOSSERAND, C. et THORODDSEN, S. : Drop Impact on a Solid Surface. <u>Annual Review of Fluid</u> Mechanics, 48(1):365–391, 2016.
- KARATO, S.-i. et MURTHY, V.: Core formation and chemical equilibrium in the Earth—I. Physical considerations. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 100(1):61–79, 1997.
- KELLOGG, L. H. et TURCOTTE, D. L. : Homogenization of the mantle by convective mixing and diffusion. Earth and Planetary Science Letters, 81(4):371–378, 1987.
- KENDALL, J. D. et MELOSH, H. J. : Differentiated planetesimal impacts into a terrestrial magma ocean : Fate of the iron core. Earth and Planetary Science Letters, 448:24–33, 2016.
- KHATTAB, I. S., BANDARKAR, F. S., FAKHREE, M. A. A. et JOUYBAN, A. : Density, viscosity, and surface tension of water+ethanol mixtures from 293 to 323K. <u>Korean Journal of Chemical Engineering</u>, 2012.
- KLEINE, T., MEZGER, K., MÜNKER, C., PALME, H. et BISCHOFF, A. : 182Hf-182W isotope systematics of chondrites, eucrites, and martian meteorites : Chronology of core formation and early mantle differentiation in Vesta and Mars1 1Associate editor : R. J. Walker. <u>Geochimica</u> et Cosmochimica Acta, 68(13):2935–2946, 2004.
- KLEINE, T., MÜNKER, C., MEZGER, K. et PALME, H. : Rapid accretion and early core formation on asteroids and the terrestrial planets from Hf–W chronometry. <u>Nature</u>, 418(6901):952, 2002.
- KLEINE, T., TOUBOUL, M., BOURDON, B., NIMMO, F., MEZGER, K., PALME, H., JACOBSEN, S. B., YIN, Q.-Z. et HALLIDAY, A. N. : Hf–W chronology of the accretion and early evolution of asteroids and terrestrial planets. Geochimica et Cosmochimica Acta, 73(17):5150–5188, 2009.
- Кокиво, E. et Ida, S. : On Runaway Growth of Planetesimals. Icarus, 123(1):180-191, 1996.
- KOLMOGOROV, A.: The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds Numbers. Akademiia Nauk SSSR Doklady, 30:301–305, 1941.
- KRECHETNIKOV, R. et HOMSY, G. M. : Crown-forming instability phenomena in the drop splash problem. Journal of Colloid and Interface Science, 331(2):555–559, 2009.
- KRUIJER, T. S., KLEINE, T., FISCHER-GÖDDE, M. et SPRUNG, P. : Lunar tungsten isotopic evidence for the late veneer. Nature, 520(7548):534–537, 2015.
- KUMAR, A., CHATTERJEE, A. G. et VERMA, M. K. : Energy spectrum of buoyancy-driven turbulence. Physical Review E, 90(2):023016, 2014.
- KUROSAWA, K. et TAKADA, S. : Impact cratering mechanics : A forward approach to predicting ejecta velocity distribution and transient crater radii. <u>Icarus</u>, 317:135–147, 2019.
- LABROSSE, S., HERNLUND, J. W. et COLTICE, N. : A crystallizing dense magma ocean at the base of the Earth's mantle. <u>Nature</u>, 450(7171):866, 2007.
- LANDEAU, M., DEGUEN, R. et OLSON, P. : Experiments on the fragmentation of a buoyant liquid volume in another liquid. Journal of Fluid Mechanics, 749:478–518, 2014.
- LANDEAU, M., DEGUEN, R., PHILLIPS, D., NEUFELD, J. A., LHERM, V. et DALZIEL, S. B. : Metalsilicate mixing by large Earth-forming impacts. Earth and Planetary Science Letters, 564:

116888, 2021.

- LANDEAU, M., OLSON, P., DEGUEN, R. et HIRSH, B. H. : Core merging and stratification following giant impact. Nature Geoscience, 9(10):786–789, 2016.
- LE BORGNE, T., HUCK, P. D., DENTZ, M. et VILLERMAUX, E. : Scalar gradients in stirred mixtures and the deconstruction of random fields. Journal of Fluid Mechanics, 812:578–610, 2017.
- LECOANET, D. et JEEVANJEE, N. : Entrainment in Resolved, Dry Thermals. Journal of the Atmospheric Sciences, 76(12):3785–3801, 2019.
- LENEWEIT, G., KOEHLER, R., ROESNER, K. G. et SCHÄFER, G. : Regimes of drop morphology in oblique impact on deep fluids. Journal of Fluid Mechanics, 543:303–331, 2005.
- LENG, L. J.: Splash formation by spherical drops. Journal of Fluid Mechanics, 427:73–105, 2001.
- LE BORGNE, T., DENTZ, M. et VILLERMAUX, E. : The lamellar description of mixing in porous media. Journal of Fluid Mechanics, 770:458–498, 2015.
- LHERM, V. et DEGUEN, R. : Small-Scale Metal/Silicate Equilibration During Core Formation : The Influence of Stretching Enhanced Diffusion on Mixing. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 123(12):10,496–10,516, 2018.
- LHERM, V., DEGUEN, R., ALBOUSSIÈRE, T. et LANDEAU, M. : Rayleigh-Taylor instability during impact cratering experiments. arXiv :2012.10273 [physics], 2020.
- LHERM, V. et JELLINEK, A. M. : Experimental constraints on the distinct effects of ash, lapilli, and larger pyroclasts on entrainment and mixing in volcanic plumes. <u>Bulletin of Volcanology</u>, 81(12):73, 2019.
- LHUISSIER, H., SUN, C., PROSPERETTI, A. et LOHSE, D. : Drop Fragmentation at Impact onto a Bath of an Immiscible Liquid. Physical Review Letters, 110(26):264503, 2013.
- LI, J. et AGEE, C. B. : Geochemistry of mantle-core differentiation at high pressure. <u>Nature</u>, 381(6584):686, 1996.
- LIN, H., STOREY, B. D. et SZERI, A. J. : Rayleigh–Taylor instability of violently collapsing bubbles. Physics of Fluids, 14(8):2925–2928, 2002.
- LINDEN, P. F., REDONDO, J. M. et YOUNGS, D. L. : Molecular mixing in Rayleigh–Taylor instability. Journal of Fluid Mechanics, 265:97–124, 1994.
- LINDL, J. : Inertial Confinement Fusion : The Quest for Ignition and Energy Gain Using Indirect Drive. American Inst. of Physics, 1998. ISBN 978-1-56396-662-0.
- LOHSE, D. : Temperature spectra in shear flow and thermal convection. <u>Physics Letters A</u>, 196 (1):70–75, 1994.
- LOMBARDINI, M., PULLIN, D. I. et MEIRON, D. I. : Turbulent mixing driven by spherical implosions. Part 1. Flow description and mixing-layer growth. Journal of Fluid Mechanics, 748:85–112, 2014.

LOVERING, T. S. : Heat Conduction in Dissimilar Rocks and the Use of Thermal Models. GSA

Bulletin, 47(1):87-100, 1936.

- LUMLEY, J. L. : Similarity and the Turbulent Energy Spectrum. <u>The Physics of Fluids</u>, 10 (4):855–858, 1967.
- LUNDGREN, T. S., YAO, J. et MANSOUR, N. N. : Microburst modelling and scaling. Journal of Fluid Mechanics, 239:461–488, 1992.
- LUNINE, J. I., O'BRIEN, D. P., RAYMOND, S. N., MORBIDELLI, A., QUINN, T. et GRAPS, A. L. : Dynamical Models of Terrestrial Planet Formation. <u>Advanced Science Letters</u>, 4(2):325–338, 2011.
- MACKLIN, W. C. et METAXAS, G. J. : Splashing of drops on liquid layers. Journal of Applied Physics, 47(9):3963–3970, 1976.
- MARMOTTANT, P. et VILLERMAUX, E. : On spray formation. Journal of Fluid Mechanics, 498:73– 111, 2004a.
- MARMOTTANT, P. et VILLERMAUX, E. : Fragmentation of stretched liquid ligaments. <u>Physics of</u> Fluids, 16(8):2732–2741, 2004b.
- MASTROBUONO-BATTISTI, A., PERETS, H. B. et RAYMOND, S. N. : A primordial origin for the compositional similarity between the Earth and the Moon. Nature, 520(7546):212, 2015.
- MATHEW, J. et BASU, A. J. : Some characteristics of entrainment at a cylindrical turbulence boundary. Physics of Fluids, 14(7):2065–2072, 2002.
- MAXWELL, D. : Simple Z model for cratering, ejection, and the overturned flap. In Impact and explosion cratering : Planetary and terrestrial implications, p. 1003–1008, New York, USA, 1977. Pergamon Press.
- MELOSH, H. J. : <u>Impact cratering : A geologic process</u>. Oxford University Press, New York, 1989.
- MELOSH, H. J. : Impact cratering. <u>In Planetary Surface Processes</u>, Cambridge Planetary Science, p. 222–275. Cambridge University Press, Cambridge, 2011.
- Mesнкov, E. E. : Instability of the interface of two gases accelerated by a shock wave. <u>Fluid</u> Dynamics, 4(5):101–104, 1969.
- MEUNIER, P. et VILLERMAUX, E. : How vortices mix. Journal of Fluid Mechanics, 476:213–222, 2003.
- MIKAELIAN, K. O. : Rayleigh-Taylor and Richtmyer-Meshkov instabilities and mixing in stratified spherical shells. Physical Review A, 42(6):3400–3420, 1990.
- MIKAELIAN, K. O. : Viscous Rayleigh-Taylor instability in spherical geometry. <u>Physical Review</u> E, 93(2):023104, 2016.
- Мікамі, T., Cox, R. G. et Mason, S. G. : Breakup of extending liquid threads. <u>International</u> Journal of Multiphase Flow, 2(2):113–138, 1975.

MONTEUX, J., JELLINEK, A. M. et JOHNSON, C. L. : Why might planets and moons have early

dynamos? Earth and Planetary Science Letters, 310(3):349-359, 2011.

- MONTEUX, J., RICARD, Y., COLTICE, N., DUBUFFET, F. et ULVROVA, M. : A model of metal-silicate separation on growing planets. Earth and Planetary Science Letters, 287(3):353–362, 2009.
- MORARD, G. et KATSURA, T. : Pressure-temperature cartography of Fe-S-Si immiscible system. Geochimica et Cosmochimica Acta, 74(12):3659–3667, 2010.
- MORISHIMA, R., GOLABEK, G. J. et SAMUEL, H. : N-body simulations of oligarchic growth of Mars : Implications for Hf–W chronology. <u>Earth and Planetary Science Letters</u>, 366:6–16, 2013.
- MORTON, B. R. : Forced plumes. Journal of Fluid Mechanics, 5(1):151–163, 1959.
- MORTON, B. R., TAYLOR, S. G., S, F. R. et TURNER, J. S. : Turbulent gravitational convection from maintained and instantaneous sources. Proc. R. Soc. Lond. A, 234(1196):1–23, 1956.
- MORTON, D., RUDMAN, M. et JONG-LENG, L. : An investigation of the flow regimes resulting from splashing drops. Physics of Fluids, 12(4):747–763, 2000.
- MURPHY, D. W., LI, C., D'ALBIGNAC, V., MORRA, D. et KATZ, J. : Splash behaviour and oily marine aerosol production by raindrops impacting oil slicks. Journal of Fluid Mechanics, 780:536–577, 2015.
- MURTHY, V. R. : Early Differentiation of the Earth and the Problem of Mantle Siderophile Elements : A New Approach. Science, 253(5017):303–306, 1991.
- MUTCHLER, C. K. et HANSEN, L. M. : Splash of a Waterdrop at Terminal Velocity. <u>Science</u>, 169 (3952):1311–1312, 1970.
- NAKAJIMA, M., GOLABEK, G. J., WÜNNEMANN, K., RUBIE, D. C., BURGER, C., MELOSH, H. J., JACOBSON, S. A., MANSKE, L. et HULL, S. D. : Scaling laws for the geometry of an impactinduced magma ocean. arXiv :2004.04269 [astro-ph], 2020.
- NIMMO, F., PRICE, G. D., BRODHOLT, J. et GUBBINS, D. : The influence of potassium on core and geodynamo evolution. Geophysical Journal International, 156(2):363–376, 2004.
- OGUZ, H. N. et PROSPERETTI, A. : Bubble entrainment by the impact of drops on liquid surfaces. Journal of Fluid Mechanics, 219:143–179, 1990.
- OKAWA, T., SHIRAISHI, T. et MORI, T. : Production of secondary drops during the single water drop impact onto a plane water surface. Experiments in Fluids, 41(6):965, 2006.
- OLEVSON, K. L. R. : Energy balances for transient water craters. <u>US Geol. Surv. Prof. Pap</u>, D (650):189–194, 1969.
- OLSON, P., YUEN, D. A. et BALSIGER, D. : Convective mixing and the fine structure of mantle heterogeneity. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 36(3):291–304, 1984.
- O'NEILL, H. S. C. et PALME, H. : Composition of the Silicate Earth : Implications for Accretion and Core Formation. In JACKSON, I., éd. : The Earth's Mantle, p. 3–126. Cambridge University Press, Cambridge, 1998. ISBN 978-0-511-57310-1.

- ORON, D., ARAZI, L., KARTOON, D., RIKANATI, A., ALON, U. et SHVARTS, D. : Dimensionality dependence of the Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instability late-time scaling laws. Physics of Plasmas, 8(6):2883–2889, 2001.
- O'ROURKE, J. G., KORENAGA, J. et STEVENSON, D. J. : Thermal evolution of Earth with magnesium precipitation in the core. Earth and Planetary Science Letters, 458:263–272, 2017.
- OTSU, N. : A Threshold Selection Method from Gray-Level Histograms. <u>IEEE Transactions on</u> Systems, Man, and Cybernetics, 9(1):62–66, 1979.
- OTTINO, J. M. : <u>The Kinematics of Mixing : Stretching, Chaos, and Transport</u>. Cambridge University Press, Cambridge, 1989. ISBN 978-0-521-36878-0.
- PLESSET, M. S. : On the Stability of Fluid Flows with Spherical Symmetry. Journal of Applied Physics, 25(1):96–98, 1954.
- POPINET, S. : Gerris : a tree-based adaptive solver for the incompressible Euler equations in complex geometries. Journal of Computational Physics, 190(2):572–600, 2003.
- POPINET, S. : An accurate adaptive solver for surface-tension-driven interfacial flows. Journal of Computational Physics, 228(16):5838–5866, 2009.
- POPPE, T., BLUM, J. et HENNING, T. : Analogous Experiments on the Stickiness of Micron-sized Preplanetary Dust. The Astrophysical Journal, 533(1):454–471, 2000.
- PROSPERETTI, A. et OGUZ, H. N. : The Impact of Drops on Liquid Surfaces and the Underwater Noise of Rain. Annual Review of Fluid Mechanics, 25(1):577–602, 1993.
- PROSPERETTI, A. : Viscous effects on perturbed spherical flows. <u>Quarterly of Applied</u> Mathematics, 34(4):339–352, 1977.
- PUMIR, A., SHRAIMAN, B. I. et SIGGIA, E. D. : Exponential tails and random advection. <u>Physical</u> Review Letters, 66(23):2984–2987, 1991.
- PUMPHREY, H. C. et ELMORE, P. A. : The entrainment of bubbles by drop impacts. Journal of Fluid Mechanics, 220:539–567, 1990.
- QADDAH, B., MONTEUX, J., CLESI, V., BOUHIFD, M. A. et LE BARS, M. : Dynamics and stability of an iron drop falling in a magma ocean. <u>Physics of the Earth and Planetary Interiors</u>, 289:75–89, 2019.
- QADDAH, B., MONTEUX, J. et LE BARS, M. : Thermal evolution of a metal drop falling in a less dense, more viscous fluid. Physical Review Fluids, 5(5):053801, 2020.
- RANZ, W. E. : Applications of a stretch model to mixing, diffusion, and reaction in laminar and turbulent flows. <u>AIChE Journal</u>, 25(1):41–47, 1979.
- RAY, B., BISWAS, G. et SHARMA, A. : Regimes during liquid drop impact on a liquid pool. Journal of Fluid Mechanics, 768:492–523, 2015.
- RAYLEIGH, J. W. S. : Scientific papers (Vol. 2 : 1881-1887). Cambridge University Press, 1899.
- RAYMOND, S. N., SCHLICHTING, H. E., HERSANT, F. et SELSIS, F. : Dynamical and collisional

constraints on a stochastic late veneer on the terrestrial planets. <u>Icarus</u>, 226(1):671–681, 2013.

- REIN, M. : Phenomena of liquid drop impact on solid and liquid surfaces. <u>Fluid Dynamics</u> Research, 12(2):61–93, 1993.
- REYNOLDS, O. : On the floating of drops on the surface of water depending only on the purity of the surface. Proc. Lit. Phil. Soc. Manchester, 21(1), 1881.
- RIBE, N. M. : Analytical Approaches to Mantle Dynamics. In SCHUBERT, G., éd. : Treatise on Geophysics (Second Edition), p. 145–196. Elsevier, Oxford, 2015. ISBN 978-0-444-53803-1.
- RICARD, Y. : Physics of Mantle Convection. In SCHUBERT, G., éd. : Treatise on Geophysics (Second Edition), p. 23–71. Elsevier, Oxford, 2015. ISBN 978-0-444-53803-1.
- RICARD, Y., ŠRÁMEK, O. et DUBUFFET, F. : A multi-phase model of runaway core-mantle segregation in planetary embryos. Earth and Planetary Science Letters, 284(1):144–150, 2009.
- RICHARDS, J. M. : Experiments on the penetration of an interface by buoyant thermals. Journal of Fluid Mechanics, 11(3):369–384, 1961.
- RICHTMYER, R. D. : Taylor instability in shock acceleration of compressible fluids. Communications on Pure and Applied Mathematics, 13(2):297–319, 1960.
- RIGHTER, K. : Prediction of metal-silicate partition coefficients for siderophile elements : An update and assessment of PT conditions for metal-silicate equilibrium during accretion of the Earth. Earth and Planetary Science Letters, 304(1):158–167, 2011.
- RINGWOOD, A. E. : Chemical evolution of the terrestrial planets. <u>Geochimica et Cosmochimica</u> Acta, 30(1):41–104, 1966.
- RUBIE, D. C., MELOSH, H. J., REID, J. E., LIEBSKE, C. et RIGHTER, K. : Mechanisms of metal-silicate equilibration in the terrestrial magma ocean. <u>Earth and Planetary Science</u> Letters, 205(3):239–255, 2003.
- RUBIE, D. C., NIMMO, F. et MELOSH, H. J. : Formation of the Earth's Core. In Schubert, G., éd. : Treatise on Geophysics (Second Edition), p. 43–79. Elsevier, Oxford, 2015. ISBN 978-0-444-53803-1.
- RUBIE, D. C., FROST, D. J., MANN, U., ASAHARA, Y., NIMMO, F., TSUNO, K., KEGLER, P., HOLZHEID, A. et PALME, H. : Heterogeneous accretion, composition and core-mantle differentiation of the Earth. Earth and Planetary Science Letters, 301(1):31–42, 2011.
- RUBIN, A. M. : Dikes vs. diapirs in viscoelastic rock. Earth and Planetary Science Letters, 119 (4):641–659, 1993.
- RUBIN, A. M. : Propagation of Magma-Filled Cracks. <u>Annual Review of Earth and Planetary</u> Sciences, 23(1):287–336, 1995.
- RUDGE, J. F., KLEINE, T. et BOURDON, B. : Broad bounds on Earth's accretion and core formation constrained by geochemical models. Nature Geoscience, 3(6):439, 2010.

SALVADOR, R., CALBÓ, J. et MILLÁN, M. M. : Horizontal Grid Size Selection and its Influence on

Mesoscale Model Simulations. Journal of Applied Meteorology and Climatology, 38(9):1311–1329, 1999.

- SAMUEL, H., TACKLEY, P. J. et EVONUK, M. : Heat partitioning in terrestrial planets during core formation by negative diapirism. Earth and Planetary Science Letters, 290(1):13–19, 2010.
- SAMUEL, H. : A re-evaluation of metal diapir breakup and equilibration in terrestrial magma oceans. Earth and Planetary Science Letters, 313-314:105–114, 2012.
- SASAKI, T. et ABE, Y. : Rayleigh-Taylor instability after giant impacts : Imperfect equilibration of the Hf-W system and its effect on the core formation age. <u>Earth, Planets and Space</u>, 59 (9):1035–1045, 2007.
- SCHERSTÉN, A., ELLIOTT, T., HAWKESWORTH, C., RUSSELL, S. et MASARIK, J. : Hf–W evidence for rapid differentiation of iron meteorite parent bodies. <u>Earth and Planetary Science Letters</u>, 241(3):530–542, 2006.
- SCHMIDT, W. : From tea kettles to exploding stars. Nature Physics, 2(8):505-506, 2006.
- SCHOTLAND, R. M. : Experimental results relating to the coalescence of water drops with water surfaces. Discussions of the Faraday Society, 30(0):72–77, 1960.
- SCORER, R. S. : Experiments on convection of isolated masses of buoyant fluid. Journal of Fluid Mechanics, 2(6):583–594, 1957.
- SHOEMAKER, E. M. : Interpretation of Lunar Craters. In KOPAL, Z., éd. : Physics and Astronomy of the Moon, p. 283–359. Academic Press, 1961. ISBN 978-1-4832-3240-9.
- SIEBERT, J., BADRO, J., ANTONANGELI, D. et RYERSON, F. J. : Metal-silicate partitioning of Ni and Co in a deep magma ocean. Earth and Planetary Science Letters, 321-322:189–197, 2012.
- SIEBERT, J., BADRO, J., ANTONANGELI, D. et RYERSON, F. J. : Terrestrial Accretion Under Oxidizing Conditions. <u>Science</u>, 339(6124):1194–1197, 2013.
- SIEBERT, J., CORGNE, A. et RYERSON, F. J. : Systematics of metal-silicate partitioning for many siderophile elements applied to Earth's core formation. <u>Geochimica et Cosmochimica Acta</u>, 75(6):1451–1489, 2011.
- SMITH, C. R., SABATINO, D. R. et PRAISNER, T. J. : Temperature sensing with thermochromic liquid crystals. Experiments in Fluids, 30(2):190–201, 2001.
- SMOLUCHOWSKI, M. v. : Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen. Zeitschrift für Physikalische Chemie, 92U(1):129–168, 1918.
- SOLOMATOV, V. : Magma Oceans and Primordial Mantle Differentiation. <u>In</u> SCHUBERT, G., éd. : <u>Treatise on Geophysics (Second Edition)</u>, p. 81–104. Elsevier, Oxford, 2015. ISBN 978-0-444-53803-1.
- SPOHN, T. et SCHUBERT, G. : Thermal equilibration of the Earth following a giant impact. Geophysical Journal International, 107(1):163–170, 1991.
- SRÁMEK, O., RICARD, Y. et DUBUFFET, F. : A multiphase model of core formation. <u>Geophysical</u> Journal International, 181(1):198–220, 2010.

- STEVENSON, D. J. : Fluid dynamics of core formation. <u>In</u> NEWSOM, H. E. et JONES, J. H., éds : <u>Origin of the earth</u>, p. 231–249. Oxford University Press, New York, 1990. ISBN 978-0-19-506619-7.
- STEVENSON, D. J. : Planetary science : Mission to Earth's core a modest proposal. <u>Nature</u>, 423(6937):239, 2003.
- STIXRUDE, L., de KOKER, N., SUN, N., MOOKHERJEE, M. et KARKI, B. B. : Thermodynamics of silicate liquids in the deep Earth. Earth and Planetary Science Letters, 278(3):226–232, 2009.
- STIXRUDE, L., SCIPIONI, R. et DESJARLAIS, M. P. : A silicate dynamo in the early Earth. <u>Nature</u> <u>Communications</u>, 11(1):935, 2020.
- SUN, Y., ZHOU, H., YIN, K., ZHAO, M., XU, S. et LU, X. : Transport Properties of Fe2SiO4 Melt at High Pressure From Classical Molecular Dynamics : Implications for the Lifetime of the Magma Ocean. Journal of Geophysical Research : Solid Earth, 123(5):3667–3679, 2018.
- TAKITA, H. et SUMITA, I. : Low-velocity impact cratering experiments in a wet sand target. Physical Review E, 88(2):022203, 2013.
- TANIGUCHI, H. : Surface tension of melts in the system CaMgSi2O6-CaAl2Si2O8 and its structural significance. Contributions to Mineralogy and Petrology, 100(4):484–489, 1988.
- TARDUNO, J. A., COTTRELL, R. D., DAVIS, W. J., NIMMO, F. et BONO, R. K. : A Hadean to Paleoarchean geodynamo recorded by single zircon crystals. <u>Science</u>, 349(6247):521–524, 2015.
- TARDUNO, J. A., COTTRELL, R. D., WATKEYS, M. K., HOFMANN, A., DOUBROVINE, P. V., MAMAJEK,
 E. E., LIU, D., SIBECK, D. G., NEUKIRCH, L. P. et USUI, Y. : Geodynamo, Solar Wind, and
 Magnetopause 3.4 to 3.45 Billion Years Ago. Science, 327(5970):1238–1240, 2010.
- TAYLOR, G. I. : The formation of emulsions in definable fields of flow. Proc. R. Soc. Lond. A, 146(858):501–523, 1934.
- TAYLOR, G. I. : The instability of liquid surfaces when accelerated in a direction perpendicular to their planes. I. <u>Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and</u> <u>Physical Sciences</u>, 201(1065):192–196, 1950.
- THOMAS, V. A. et KARES, R. J. : Drive Asymmetry and the Origin of Turbulence in an ICF Implosion. Physical Review Letters, 109(7):075004, 2012.
- THOMPSON, R. S., SNYDER, W. H. et WEIL, J. C. : Laboratory simulation of the rise of buoyant thermals created by open detonation. Journal of Fluid Mechanics, 417:127–156, 2000.
- THOMSON, J. J. et NEWALL, H. F. : V. On the formation of vortex rings by drops falling into liquids, and some allied phenomena. <u>Proceedings of the Royal Society of London</u>, 39(239-241):417–436, 1886.
- TOMOTIKA, S. : Breaking up of a drop of viscous liquid immersed in another viscous fluid which is extending at a uniform rate. Proc. R. Soc. Lond. A, 153(879):302–318, 1936.
- TONKS, W. B. et MELOSH, H. J. : Magma ocean formation due to giant impacts. Journal of Geophysical Research : Planets, 98(E3):5319–5333, 1993.

- TRUSCOTT, T. T., EPPS, B. P. et BELDEN, J. : Water Entry of Projectiles. <u>Annual Review of Fluid</u> Mechanics, 46(1):355–378, 2014.
- TRYGGVASON, G. : Numerical simulations of the Rayleigh-Taylor instability. <u>Journal of</u> Computational Physics, 75(2):253–282, 1988.
- TURNER, J. S. : The 'starting plume' in neutral surroundings. Journal of Fluid Mechanics, 13 (3):356–368, 1962.
- TURNER, J. S. : The dynamics of spheroidal masses of buoyant fluid. <u>Journal of Fluid Mechanics</u>, 19(4):481–490, 1964.
- TURNER, J. S. : Buoyant Plumes and Thermals. <u>Annual Review of Fluid Mechanics</u>, 1(1):29–44, 1969.
- TURNER, J. S. : <u>Buoyancy Effects in Fluids</u>. Cambridge University Press, 1973. ISBN 978-1-316-58316-6.
- TURNER, J. S. : Turbulent entrainment : the development of the entrainment assumption, and its application to geophysical flows. Journal of Fluid Mechanics, 173:431–471, 1986.
- TURNER, J. S. et TAYLOR, G. I. : Buoyant vortex rings. <u>Proceedings of the Royal Society of</u> London. Series A. Mathematical and Physical Sciences, 239(1216):61–75, 1957.
- ULVROVÁ, M., COLTICE, N., RICARD, Y., LABROSSE, S., DUBUFFET, F., VELÍMSKÝ, J. et ŠRÁMEK, O. : Compositional and thermal equilibration of particles, drops, and diapirs in geophysical flows. Geochemistry, Geophysics, Geosystems, 12(10):1–11, 2011.
- van der MEER, D. : Impact on Granular Beds. <u>Annual Review of Fluid Mechanics</u>, 49(1):463–484, 2017.
- van Rijn, C. J. M., Westerweel, J., van Brummen, B., Antkowiak, A. et Bonn, D. : Self-similar jet evolution after drop impact on a liquid surface. Physical Review Fluids, 6(3):034801, 2021.
- VENAILLE, A. et SOMMERIA, J. : A dynamical equation for the distribution of a scalar advected by turbulence. Physics of Fluids, 19(2):028101, 2007.
- VENAILLE, A. et SOMMERIA, J. : Is Turbulent Mixing a Self-Convolution Process? <u>Physical</u> Review Letters, 100(23):234506, 2008.
- VERMA, M. K., KUMAR, A. et PANDEY, A. : Phenomenology of buoyancy-driven turbulence : recent results. New Journal of Physics, 19(2):025012, 2017.
- VILLERMAUX, E. : Fragmentation. Annual Review of Fluid Mechanics, 39(1):419-446, 2007.
- VILLERMAUX, E. et DUPLAT, J. : Mixing as an Aggregation Process. <u>Physical Review Letters</u>, 91 (18):184501, 2003.
- VILLERMAUX, E. et DUPLAT, J. : Coarse Grained Scale of Turbulent Mixtures. <u>Physical Review</u> Letters, 97(14):144506, 2006.
- VILLERMAUX, E. : Simple ideas on mixing and fragmentation. <u>Chaos : An Interdisciplinary</u> Journal of Nonlinear Science, 14(3):924–932, 2004.

- VILLERMAUX, E. : Mixing Versus Stirring. Annual Review of Fluid Mechanics, 51(1):null, 2019.
- VILLERMAUX, E. et INNOCENTI, C. : On the geometry of turbulent mixing. Journal of Fluid Mechanics, 393:123–147, 1999.
- VLEDOUTS, A., VANDENBERGHE, N. et VILLERMAUX, E. : Fragmentation as an aggregation process. Proceedings of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 471(2184):20150678, 2015.
- WACHEUL, J.-B. et LE BARS, M. : Experiments on fragmentation and thermo-chemical exchanges during planetary core formation. <u>Physics of the Earth and Planetary Interiors</u>, 276:134–144, 2018.
- WACHEUL, J.-B., LE BARS, M., MONTEUX, J. et AURNOU, J. M. : Laboratory experiments on the breakup of liquid metal diapirs. Earth and Planetary Science Letters, 403:236–245, 2014.
- WALKER, R. J. : Highly siderophile elements in the Earth, Moon and Mars : Update and implications for planetary accretion and differentiation. <u>Geochemistry</u>, 69(2):101–125, 2009.
- WALKER, R. J., BERMINGHAM, K., LIU, J., PUCHTEL, I. S., TOUBOUL, M. et WORSHAM, E. A. : In search of late-stage planetary building blocks. <u>Chemical Geology</u>, 411:125–142, 2015.
- WALSH, A. M., HOLLOWAY, K. E., HABDAS, P. et de BRUYN, J. R. : Morphology and Scaling of Impact Craters in Granular Media. <u>Physical Review Letters</u>, 91(10):104301, 2003.
- WALSH, K. J., MORBIDELLI, A., RAYMOND, S. N., O'BRIEN, D. P. et MANDELL, A. M. : A low mass for Mars from Jupiter's early gas-driven migration. Nature, 475(7355):206–209, 2011.
- WARHAFT, Z. : Passive Scalars in Turbulent Flows. <u>Annual Review of Fluid Mechanics</u>, 32 (1):203–240, 2000.
- WILLE, G., MILLOT, F. et RIFFLET, J. C. : Thermophysical Properties of Containerless Liquid Iron up to 2500 K. International Journal of Thermophysics, 23(5):1197–1206, 2002.
- WILLIAMS, J.-P. et NIMMO, F. : Thermal evolution of the Martian core : Implications for an early dynamo. <u>Geology</u>, 32(2):97–100, 2004.
- WOOD, B. J. : Accretion and core formation : constraints from metal-silicate partitioning. <u>Philosophical Transactions of the Royal Society A : Mathematical, Physical and Engineering</u> <u>Sciences</u>, 366(1883):4339–4355, 2008.
- WOOD, B. J., WALTER, M. J. et WADE, J. : Accretion of the Earth and segregation of its core. <u>Nature</u>, 441(7095):825, 2006.
- WOODWARD, B. : Exploration by sailplanes of the structure of thermals. Swiss Aero Review, 4:155–156, 1956.
- WOODWARD, B. : A theory of thermal soaring. Swiss Aero Review, 6:321-326, 1958.
- WOODWARD, B. : The motion in and around isolated thermals. <u>Quarterly Journal of the Royal</u> Meteorological Society, 85(364):144–151, 1959.
- WORTHINGTON, A. M. : A Study of Splashes. Longmans, Green, and Company, 1908.

- WÜNNEMANN, K., COLLINS, G. S. et ELBESHAUSEN, D. : Limitations of Points-Source Analogy for Meteorites Impact and Applications. <u>Large Meteorite Impacts and Planetary Evolution</u> IV, p. 2, 2008.
- XU, M., ZHANG, J., LI, Q. et LU, S. : The influence of liquid pool temperature on the critical impact Weber number for surface bubble formation. <u>International Journal of Heat and Mass</u> Transfer, 127:677–682, 2018.
- YAKHOT, V.: Large-scale coherence and "anomalous scaling" of high-order moments of velocity differences in strong turbulence. Physical Review E, 49(4):2887–2899, 1994.
- YIN, Q., JACOBSEN, S. B., YAMASHITA, K., BLICHERT-TOFT, J., TÉLOUK, P. et ALBARÈDE, F. : A short timescale for terrestrial planet formation from Hf–W chronometry of meteorites. <u>Nature</u>, 418(6901):949–952, 2002.
- YOUNGS, D. L. et WILLIAMS, R. J. R. : Turbulent mixing in spherical implosions. <u>International</u> Journal for Numerical Methods in Fluids, 56(8):1597–1603, 2008.
- ZHANG, L. V., BRUNET, P., EGGERS, J. et DEEGAN, R. D. : Wavelength selection in the crown splash. Physics of Fluids, 22(12):122105, 2010.
- ZHAO, B., LAW, A. W. K., LAI, A. C. H. et ADAMS, E. E. : On the internal vorticity and density structures of miscible thermals. Journal of Fluid Mechanics, 722, 2013.
- ZHBANKOVA, S. L. et KOLPAKOV, A. V. : Collision of water drops with a plane water surface. Fluid Dynamics, 25(3):470–473, 1990.
- ZHOU, K., WANG, S., LU, X., CHEN, H., WANG, L., CHEN, J., YANG, X. et WANG, X. : Production Flux and Chemical Characteristics of Spray Aerosol Generated From Raindrop Impact on Seawater and Soil. Journal of Geophysical Research : Atmospheres, 125(13):e2019JD032052, 2020.
- ZHOU, Y.: Rayleigh–Taylor and Richtmyer–Meshkov instability induced flow, turbulence, and mixing. II. <u>Physics Reports</u>, 723-725:1–160, 2017.
- ZIEGLER, L. B. et STEGMAN, D. R. : Implications of a long-lived basal magma ocean in generating Earth's ancient magnetic field. <u>Geochemistry, Geophysics, Geosystems</u>, 14(11):4735–4742, 2013.