



HAL
open science

Thermo-solar convection in magma oceans

Thibaut Clarté

► **To cite this version:**

Thibaut Clarté. Thermo-solar convection in magma oceans. Earth and Planetary Astrophysics [astro-ph.EP]. Université Grenoble Alpes [2020-..], 2021. English. NNT : 2021GRALU020 . tel-03731364

HAL Id: tel-03731364

<https://theses.hal.science/tel-03731364>

Submitted on 21 Jul 2022

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.

THÈSE

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ GRENOBLE ALPES

Spécialité : Sciences de la Terre et de l'Univers et de
l'Environnement

Arrêté ministériel : 25 mai 2016

Présentée par

Thibaut CLARTE

Thèse dirigée par **Nathanael SCHAEFFER**, Chercheur, Université
Grenoble Alpes
et codirigée par **Stéphane LABROSSE**, ENS de Lyon, Professeur

préparée au sein du **Laboratoire Institut des Sciences de la
Terre**
dans **l'École Doctorale Sciences de la Terre de l'Environnement
et des Planètes**

Convection thermo-solutale dans les océans de magma

Thermo-Solutal Convection in Magma Oceans

Thèse soutenue publiquement le **19 juillet 2021**,
devant le jury composé de :

Madame Pascale GARAUD

PROFESSEUR DES UNIVERSITES, Université de Santa Cruz,
Rapporteuse

Monsieur Michael LE BARS

DIRECTEUR DE RECHERCHE, CNRS, Rapporteur

Monsieur Nathanaël SCHAEFFER

CHARGE DE RECHERCHE, CNRS, Co-directeur de thèse

Monsieur Stéphane LABROSSE

PROFESSEUR DES UNIVERSITES, Université Grenoble Alpes, Co-
directeur de thèse

Madame Maylis LANDEAU

MAITRE DE CONFERENCE, Université de Paris, Examinatrice

Monsieur Renaud DEGUEN

PROFESSEUR DES UNIVERSITES, Université Grenoble Alpes,
Examineur, Président du Jury



Les savants admettent généralement qu'un jour notre globe finira [...] par suite du refroidissement intense qu'il subira [...]. Les uns pensent qu'il proviendra de l'abaissement de température que le Soleil éprouvera après des millions d'années ; les autres de l'extinction graduelle des feux intérieurs de notre globe

Jules Verne, *l'Île Mystérieuse*, 1875.

Remerciements

À l'issue de ces trois années de thèse j'ai bien du mal à faire le compte de tous ceux dont je suis l'actuel débiteur... Commençons par la fin de l'histoire :

Je tiens tout d'abord à remercier Pascale Garaud et Michaël le Bars pour avoir évalué mon manuscrit puis pour avoir, aux côtés de Maylis Landeau et Renaud Deguen, accepté de participer au jury de cette même thèse. Je veux évidemment remercier mes directeurs de thèse, Nathanaël Schaeffer et Stéphane Labrosse. À leur côté j'ai pu apprendre énormément tant du point de vue des savoirs que des savoir-faire, ce qui a été pour moi un vrai enrichissement. Merci beaucoup pour leur constante et inestimable bienveillance à mon égard.

Merci aux membres des secrétariats de l'ENS et de l'ISTerre pour leur patience, leur gentillesse et leur aide à l'encontre du dossier un peu particulier qu'a été quelquefois le mien. Je souhaite remercier également tous ceux qui, au département de sciences de la Terre et à la préparation à l'agrégation de Physique et de Chimie, m'ont permis de donner des cours ou m'y ont aidé. Enseigner pendant ces trois années, a été pour moi une grande joie, rien n'aurait été possible sans ces nombreux concours.

Un petit salut à toute la fine équipe du LGLTPE à l'ENS, sans ordre : Mélie, Quentin, Fanny, Jean, Delphine, Nadège, Danaé, Marianne, Auguste, Marie, Samuel, Pierre-Jean. Une mention singulière pour Momo, *alias* Adrien, *alias* ^{42}Mo , *alias* Jean-Marie Mellon Roger Valhubert, en raison de son voisinage pour le moins enrichissant. À Grenoble cette fois, je salue mes co-bureaux Benjamin et Maxime au 3e, Sylvie et Gaëlle au second étage! Je ne renie pas pour autant mes « origines » et pense aussi aux amis de physique et de chimie de l'ENS : Hélène, Vincent, Martin, Jérémy, David, Amélie et Emma qui m'ont heureusement donné de bons prétextes pour prendre l'air de l'autre côté de l'arche!

Merci aussi à mes vieux camarades que je n'ai pas encore cités, Xavier, Maxence, Antoine, Alexandre, Nathan, Arthur, Emma et Guillaume. Votre amitié m'est très chère. Merci aussi à toi Mathieu pour m'avoir accueilli en Allemagne et donné tant de bons conseils en début de thèse.

Dans un registre plus personnel, mais non moins sincère, je ne peux que penser à ma famille, mes parents, mon frère, ma sœur, mes grand-parents, qui m'ont toujours entouré et soutenu pendant mes études. Merci à mon grand-père pour avoir entretenu et stimulé ma curiosité toutes ces années durant. Enfin merci à toi Anaïs, pour avoir été à mes côtés pendant toute cette thèse et bien au-delà. Merci pour ton soutien, ton affection et la joie que tu me donnes.

Pour finir et plus anecdotiquement quelques mentions éparses : contrairement aux opinions les plus répandues je n'ai jamais eu qu'à me féliciter de la régularité de la

SNCF au cours de mes trajets professionnels, merci donc ! Merci au site de vulgarisation Luxorion pour m'avoir aidé à débiter mon introduction de thèse. . .

Un petit salut à Roger qui offre à tous les visiteurs du jardin Descartes un modèle de constance et de sérénité.

In fine, à tous ceux qui ont dû lire ou écouter mon « anglais », pour leur patience : Thank you, that's all folks !

Résumé

Cette thèse se consacre à l'étude de la convection thermo-solutale dans les océans de magma terrestres. On entend par ceux-ci une coquille sphérique de silicates liquides, analogue du manteau fondu des planètes telluriques. La Terre, à la fin de sa période d'accrétion est sensée avoir accueilli une telle structure suite, par exemple, à un impact géant permettant la formation de la Lune.

Les modèles consacrés à cet objet sont jusqu'à présent demeurés relativement simples. Ils postulent le bon mélange de l'océan du fait d'une convection thermique intense en son sein. Il se trouve que la cristallisation fractionnée basale d'un océan de magma pourrait conduire à nuancer une telle affirmation. Ce travail prétend proposer une contribution plus détaillée, via une approche hydrodynamique assistée de l'outil numérique.

Nous nous intéressons d'abord à l'influence sur la convection thermique en rotation, d'une condition aux limites particulière dite de Robin. Intermédiaire entre une condition de Neumann et de Dirichlet, cette dernière permet sous certaines conditions de modéliser un équilibre radiatif entre atmosphère et surface de l'océan. Nous montrons alors, dans un cadre purement thermique, que cette condition limite ne joue que peu de rôle dans un contexte rotatif (hormis du point de vue de la structure d'écoulement). Plus généralement, nous donnons la gamme de paramètres permettant de remplacer cette condition aux limites par d'autres, plus usuelles.

Dans un second temps, nous proposons une étude de la convection thermo-solutale dans un océan de magma non rotatif, cristallisant de la base vers le sommet. Nous énumérons les différents régimes de transport en vigueur dans le système en fonction des paramètres d'entrée et discutons de la durabilité d'une couche basale stablement stratifiée. Nous montrons, notamment, qu'un océan de magma terrestre surplombé par une atmosphère épaisse pourrait être incapable d'éroder une couche stratifiée basale pré-existante.

Abstract

This thesis manuscript main focus is the thermo-compositional convection in a terrestrial magma ocean. This latter is a spherical shell of liquid silicates, similar to a rocky planets' melt mantle. Earth may have undergone such a phasis during the end of its accretion period because of, for example, moon forming impact.

Up to now, most of physical models for terrestrial magma ocean remained quite simple, postulating a well-mixed ocean by vigorous thermal convection. This hypothesis could be mitigated by a basal incongruent crystallization. This work's objective is to provide a more detail model via hydrodynamical approach helped by numerical tool.

First, we study thermal convection in a rotating spherical shell submitted to a Robin boundary condition. This one is intermediate between Neumann and Dirichlet ones. It enables to model radiative equilibrium between atmosphere and surface of a terrestrial magma ocean. We show, in that pure thermal setup, that the Robin boundary condition plays little role in a rotation dominant context (except regarding convective structures). More generally, we give the range of parameters in which Robin boundary condition can be safely replaced by more usual ones.

Thereafter, we focus on the thermo-compositional convection inside a non-rotating terrestrial magma ocean crystallizing from the bottom upward. We list the different transport regimes developed by the system as a function of the input parameters, particularly we discuss the sustainability of a basal stably stratified chemical layer. We show that a terrestrial magma ocean under thick H_2O atmosphere may not be able to erode such a pre-existent basal layer.

Avant-propos

Le lecteur s'apercevra rapidement que cette thèse présente un caractère hybride : son coeur est constitué de deux articles de journaux scientifiques et est écrite en langue anglaise. L'introduction et la conclusion le sont au contraire en français.

C'est un jugement sans appel : aujourd'hui, conséquence du rôle « spécifique » joué par les États-Unis d'Amérique depuis 1945, aucun travail scientifique, modeste ou ambitieux, ne peut acquérir d'audience s'il n'est publié en anglais. Il m'était cependant pénible, d'un point de vue éthique, qu'un travail de trois ans réalisé grâce au concours indirect et involontaire de francophones unilingues, leur demeure définitivement inintelligible. Bien sûr, il est douteux que mon travail suscite un intérêt populaire. Mais, à l'inverse, on ne peut exclure de trouver quelques curieux parmi ceux-ci.

Dans cette optique, et pour le principe si l'on veut, je me suis efforcé de rendre la problématique et les enjeux de mon travail accessibles aux francophones. L'introduction et la conclusion sont donc écrits en langue française avec, c'est mon voeu, les précautions nécessaires pour être comprises de bacheliers ayant suivi un cursus scientifique au lycée. Dans cette optique, certains termes sont définis dans le glossaire lorsque le corps du texte ne donne pas d'éclaircissement suffisant les concernant.

Un dernier mot à propos des conventions d'écriture : on utilisera ici la notation des vecteurs à l'aide de caractères gras. Les subdivision du système métrique seront utilisées pour les durées, ainsi 10 000 ans s'écrira 10 ka. Les opérateurs gradient, divergence ou rotationnel seront notés avec l'opérateur nabla, ∇ .

Résumé vulgarisé

On a désormais de bonnes raisons de croire que, peu de temps après sa formation il y a environ 4,5 milliards d'années, la Terre a connu une période durant laquelle son manteau (à savoir la coquille sphérique s'étendant depuis la base de la croûte jusqu'à 3000 km de profondeur) était largement fondu. C'est ce manteau fondu, formant une profonde coquille sphérique de roches liquide qu'on appelle un océan de magma. Il est important de déterminer comment cette structure passée a pu se refroidir et cristalliser pour former notre manteau solide actuel. Cette connaissance nous donnerait une compréhension plus fine des couches les plus profondes du globe, de l'histoire de la Terre et de la tectonique des plaques.

Dans cette optique, notre contribution est basée sur la résolution d'équations de conservation fondamentales (conservation de la masse, de l'impulsion etc.) décrivant l'océan de magma. Ces équations sont résolues à l'aide d'outils numériques qui nous permettent de simuler la dynamique du système d'intérêt.

Les océans de magma sont supposés être peu visqueux et se refroidir par convection thermique. Concrètement, de même qu'une montgolfière remplie d'air chaud s'élève, le magma plus chaud de la base de l'océan s'élève jusqu'à la surface où il se refroidit avant de replonger. Cette circulation décrit ce qu'on appelle des courants de convection. Il s'agit d'un des trois modes de transport de l'énergie avec le rayonnement (transport en l'absence de milieu matériel intermédiaire, comme dans le cas des rayons du soleil) et la diffusion (transport de proche en proche dans un milieu matériel mais sans transport de matière).

À la surface de l'océan de magma, a pu s'établir un équilibre thermique avec une atmosphère primitive. Cette interaction a des implications mathématiques sur la résolution des équations de conservation mentionnées plus haut. Concrètement, il s'agit d'imposer une relation de proportionnalité entre le taux de refroidissement et la température de surface, ce qu'on appelle une condition limite de type Robin. Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés à l'influence de cette interaction particulière sur la dynamique de l'océan.

Pour cela, nous étudions comment évoluent les taux de transport d'énergie à travers l'océan ainsi que la vitesse et la structure des courants qui s'y développent en fonction des paramètres d'entrée. Ceux-ci font intervenir par exemple l'écart de température entre la base et la surface de l'océan ou bien la viscosité de ce dernier. Pour rationaliser notre démarche nous n'employons en fait qu'un petit nombre de paramètres sans dimension pour décrire le système (nombre de Rayleigh, de Prandtl...). Après analyse, nous avons pu déterminer dans quelle gamme de paramètres la convection thermique était altérée par la condition aux limites de type Robin.

C'est ensuite la composition de l'océan de magma qui a retenu notre attention. En effet, on l'a dit, l'océan de magma est supposé animé de puissants courants de convection qui le brassent et le mélangent. Néanmoins, si l'océan cristallise à sa base, il ne peut le faire que de façon partielle. Cela signifie que lors de la cristallisation le solide formé n'a pas la même composition que le liquide originel. Il est raisonnable de penser que ce phénomène puisse mener à un enrichissement en fer de la base de l'océan, qui deviendrait dès lors plus dense et moins apte à convecter. C'est pourquoi nous avons entrepris d'étudier les phénomènes de convection, non seulement dus aux écarts de température mais aussi de composition. On parle alors de convection thermo-compositionnelle, ou encore thermo-solutale.

Le système étudié dans un second temps est alors un océan de magma cristallisant de la base vers le sommet de façon partielle et se refroidissant depuis sa surface. Le changement de phase à la base de l'océan est modélisé par un couplage entre le flux thermique et chimique à l'interface inférieure de la coquille sphérique.

À l'issue de notre travail nous avons pu montrer que divers régimes de convection étaient possibles dans un océan de magma de type terrestre. Ce dernier peut être entièrement mélangé ou bien la convection peut se restreindre aux seules couches de surface, la base de l'océan demeurant stagnante, du fait de sa densification chimique. Nous avons finalement pu montrer dans quelles circonstances un océan de magma est capable d'éroder une couche stagnante basale grâce à sa convection de surface. Il apparaît, en fin de compte, qu'un océan de magma terrestre recouvert par une épaisse atmosphère serait incapable d'éroder la couche basale produite par la cristallisation fractionnée des roches liquides.

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Une brève histoire du concept d'océan de magma	2
1.1.1	Premiers modèles physiques de la naissance du système solaire	3
1.1.2	Le refroidissement de la Terre selon Buffon	4
1.1.3	Une Terre primitive liquide ?	6
1.1.4	L'apport des roches lunaires	8
1.1.5	Impact géant et océan de magma lunaire	11
1.1.6	Quelques modélisations géophysiques de l'océan de magma terrestre	13
1.1.7	Des témoignages géochimiques plus ambigus	14
1.1.8	Bilan	16
1.2	Enjeux, motivations et méthodes	16
1.2.1	Des océans de magma bien mélangés : le modèle standard	16
1.2.2	Impact de la cristallisation fractionnée et motivation de notre contribution	18
1.2.3	Le choix d'une approche hydrodynamique	19
1.2.4	L'adimensionnement du problème, une démarche préalable indispensable	22
1.2.5	Bilan	23
2	Influence of Robin Boundary Condition on Thermal Rotating Convection	25
2.1	Résumé	26
2.2	Abstract	26
2.3	Erratum	27
2.4	Introduction	27
2.5	Methods	30
2.5.1	Physical System	30
2.5.2	Numerical Tools	33
2.6	Linear Stability Analysis	35
2.6.1	Differences between FF and FT cases with respect to Ekman number	35

2.6.2	Transition from FF to FT owing to Robin boundary condition	39
2.6.3	Possible dependence on the Prandtl number	42
2.7	Non Linear Simulations	44
2.7.1	Behaviour of purely FT or FF setups	46
2.7.2	FF to FT transition	57
2.8	Discussion	63
3	Thermo-Solutal Convection in Magma Oceans	67
3.1	Résumé	69
3.2	Abstract	69
3.3	Introduction	70
3.3.1	The Concept of Magma Ocean	70
3.3.2	Terrestrial Case	70
3.3.3	Thermal Convection & Partial Crystallization	71
3.3.4	Thermo-solutal Convection	73
3.4	Methods	74
3.4.1	Physical System	74
3.4.2	Reference Fields	75
3.4.3	Equations of Conservation	76
3.4.4	Boundary Conditions	76
3.4.5	Parameters	78
3.4.6	Numerical Tools & Diagnoses	80
3.5	Heat and Mass Transport Regimes Observed	80
3.5.1	Fully Convective Regime	81
3.5.2	Erosion Regime	81
3.5.3	Enduring Stratification Regime	82
3.6	Regimes Diagram	85
3.6.1	Dependence with other parameters	86
3.6.2	Dependence on initial conditions	88
3.7	Discussion	90
4	Conclusion	95
4.1	Résumé	96
4.2	Perspectives	97
	Références	99
	Liste des Figures	111
	Liste des Tables	112

Glossaire	113
A Annexes	115
A.1 Explications additionnelles à l'introduction	116
A.1.1 À propos des théories de Buffon sur l'histoire de la Terre	116
A.1.2 À propos du mode de cristallisation de l'océan de magma	117
A.1.3 À propos de la cristallisation fractionnée et des mélanges binaires	119
A.2 Annexes au chapitre 2	123
A.2.1 Notations	123
A.2.2 Zonal Flows	123
A.2.3 Transition at a given Ra	124
A.2.4 3D representations	126
A.3 Annexes au chapitre 3	129
A.3.1 Notations	129
A.3.2 Latent heat contribution	130
A.3.3 Determining the Statistically Stationary State	131
A.3.4 Measuring the Height of Stratification	131

CHAPITRE 1

Introduction

La terre et les planètes au sortir du soleil, étoient donc brûlantes et dans un état de liquéfaction totale. Cet état de liquéfaction n'a duré qu'autant que la violence de la chaleur qui l'avoit produit ; peu à peu les planètes se sont refroidies [...].

Buffon, *Preuves de la théorie de la terre*, Art. 1

1.1	Une brève histoire du concept d'océan de magma	2
1.1.1	Premiers modèles physiques de la naissance du système solaire	3
1.1.2	Le refroidissement de la Terre selon Buffon	4
1.1.3	Une Terre primitive liquide?	6
1.1.4	L'apport des roches lunaires	8
1.1.5	Impact géant et océan de magma lunaire	11
1.1.6	Quelques modélisations géophysiques de l'océan de magma terrestre	13
1.1.7	Des témoignages géochimiques plus ambigus	14
1.1.8	Bilan	16
1.2	Enjeux, motivations et méthodes	16
1.2.1	Des océans de magma bien mélangés : le modèle standard	16
1.2.2	Impact de la cristallisation fractionnée et motivation de notre contribution	18
1.2.3	Le choix d'une approche hydrodynamique	19
1.2.4	L'adimensionnement du problème, une démarche préalable indispensable	22
1.2.5	Bilan	23

La Terre contemporaine possède une structure interne désormais bien connue dans ses grandes lignes¹. Notre planète est constituée en première approximation de quatre coquilles sphériques concentriques : la croûte, le manteau, le noyau externe et enfin la graine. Ces structures sont toutes aujourd’hui solides (mais non totalement indéformables) excepté le noyau externe qui est, quant à lui, liquide. Les sciences naturelles nous apprennent aussi que notre planète a connu une longue évolution depuis sa formation, peu après la naissance du système solaire, voilà plus de 4,5 Ga. Puisqu’on constate actuellement que la Terre solide se refroidit, on a de bonnes raisons de penser qu’elle était notoirement plus chaude à sa formation qu’aujourd’hui². On a même désormais de bonnes raisons de croire que notre planète était initialement si chaude qu’elle possédait, non pas des mers d’eau liquide mais un manteau entièrement liquide, un océan de magma.

Dans une première partie nous nous efforcerons de décrire comment ce concept d’une Terre primitive couverte de magma s’est formé au cours des trois derniers siècles pour acquérir une véritable consistance scientifique dans les dernières décennies. On résumera, ensuite, comment et pourquoi nous nous sommes proposés de contribuer à l’étude de cet objet.

1.1 Une brève histoire du concept d’océan de magma

On entend par océan de magma, une coquille sphérique de **silicates** liquides³ correspondant au manteau fondu d’une planète **tellurique**. Cet objet géophysique n’est *a priori* plus visible dans le système solaire actuel, il est notamment caractérisé par une faible viscosité ($\sim 0,01$ Pa s selon [Solomatov \(2007\)](#)⁴) et par l’occupation d’un volume « notable⁵ » du corps planétaire dont il est originaire. Le concept moderne d’océan de magma qui s’est révélé fructueux dans le domaine de la planétologie moderne n’a vraiment pris sa forme actuelle qu’au cours des années 1970 sous l’impulsion de l’aérospatiale et des outils de calcul.

Il serait néanmoins trompeur d’imaginer que l’océan de magma soit seulement né au retour des premiers échantillons lunaires en 1969. Au contraire, comme la plupart des concepts scientifiques il a connu une maturation progressive et a, tour à tour, été considéré avec plus ou moins de circonspection. L’océan de magma, en tant que re-

1. Par les investigations sismologiques notamment.

2. Il ne s’agit pas là d’un bilan thermique exhaustif, la cristallisation de la graine ou la désintégration radioactive contribuent par exemple, eux aussi aux émissions thermiques mesurées en surface.

3. Ce qui, à pression atmosphérique, implique des températures supérieures à 1200 K, [Sarafian et al. \(2017\)](#).

4. Valeur est intermédiaire entre celle du miel et de l’eau à température et pression ambiante.

5. Ce terme reste sujet à appréciation, mais les océans d’eau liquide contemporains n’occupent pas un volume suffisant à cet égard.

présentation d'une Terre primitive recouverte de roches en fusion naît plutôt avec les premières réflexions scientifiques sur l'évolution du système solaire et le bilan thermique de la Terre.

1.1.1 Premiers modèles physiques de la naissance du système solaire

L'Antiquité et l'astronomie de la Renaissance avaient formé les savants à voir les astres comme des corps obéissants à des lois géométriques. Néanmoins ce monde restait intrinséquement différent de l'environnement terrestre gouverné par ses propres lois.⁶ Ce paradigme, d'abord ébranlé au XVIIe siècle par les contributions de Bruno, Gallilée, Descartes ou Gassendi, fut définitivement périmé par Newton et sa loi de la gravitation universelle⁷ au siècle suivant. Désormais, les astres *et* la Terre faisaient partie d'un même monde susceptible d'évolution, soumis aux mêmes lois, descriptibles en un langage mathématique.

Un certain nombre de questions se posaient alors. Ces corps avaient-ils toujours eu la même forme? Ou bien au contraire avaient-ils évolués? Cette évolution se faisait-elle suivant des processus identiques à ceux connus de nos jours? Ou bien d'autres forces (aujourd'hui diminuées) s'exerçaient-elles autrefois? Ces questions, finalement, ont conservé toute leur pertinence scientifique jusqu'à notre époque.

Kant, reprenant une idée de [Swedenborg \(1734\)](#), élaborait une première théorie ([Kant, 1755](#)) de l'origine du système solaire. Selon le philosophe allemand, le Soleil naît de l'effondrement sous son propre champ de gravité d'un nuage de gaz. Celui-ci, chauffé à l'incandescence par friction, produit le Soleil⁸. Puis le corps mis en rotation (suivant un processus non décrit) s'allège d'anneaux successifs qui s'éloignent, se condensent, refroidissent et forment successivement les planètes. Notons au passage la naissance d'un concept qu'on retrouvera plus tard pour la formation de la Lune, la constitution par fission d'un corps satellite à partir d'un objet parent.

Le point qui retient notre attention ici, est que le modèle proposé par Kant conduit à un état primitif surchauffé et fluide des planètes y compris la Terre. Ces corps initialement chauds perdent par la suite leur chaleur accumulée et se refroidissent jusqu'à leur état actuel.⁹

6. La distinction entre le monde *sublunaire* imparfait et *supralunaire* relevant de lois intelligibles, opérée par [Aristote \(350 av. J.C.\)](#) en témoigne.

7. S'appliquant donc à tout corps doté d'une masse et pas seulement les astres.

8. Ce modèle est proche, dans sa conception, de celui de la [nébuleuse solaire](#) qui est aujourd'hui retenu pour la formation de notre étoile. Les apports des dernières décennies ont essentiellement consisté en la compréhension du mécanisme de production d'énergie de notre étoile : la fusion nucléaire.

9. Leibnitz avait déjà, semble-t-il, émis une telle hypothèse mais sans en donner de justification, à la fin du XVIIe siècle.

Figure 1.1 – Georges-Louis Leclerc, comte de Buffon (1707-1788), est surtout connu pour son colossal travail de naturaliste, il travailla en fait à la plupart des sciences naturelles qui prenaient alors leur essor. Portrait par François-Hubert Drouais, aujourd’hui visible au musée Buffon de Montbard.



1.1.2 Le refroidissement de la Terre selon Buffon

La question du refroidissement de la Terre a joué un rôle crucial dans le développement de la toute nouvelle géophysique, à savoir l’application de la physique à des objets géologiques. Il semble qu’un point crucial dans la compréhension de l’histoire de la Terre était connu depuis longtemps. On avait en effet connaissance de l’augmentation des températures avec la profondeur dans la croûte terrestre (en moyenne de l’ordre de 30 K/km). Cette contribution peut remonter à l’antiquité et simplement provenir de constatations réalisées dans les mines. Le premier à en faire relation est l’érudit Athanasius Kircher au XVII^e siècle ([Kircher, 1665](#)). À partir de cette remarque il était possible de comprendre qu’en dépit de la chaleur dispensée à la surface par le Soleil, la Terre solide *se refroidissait*.

Georges-Louis Leclerc, ci-devant comte de Buffon (voir [fig. 1.1](#)), avait pris conscience de ce phénomène¹⁰. Il proposa lui aussi une origine stellaire aux planètes. Plutôt que de les voir comme des fragments éjectés du Soleil par la force centrifuge, il postula que leur formation faisait suite à des impacts avec des « comètes »¹¹. Les débris, eux aussi surchauffés et liquides (l’auteur évoque un « torrent » de fluide en fusion), se seraient condensés en des planètes qui se seraient progressivement refroidies ([Leclerc, 1749](#)). On voit ici les prémisses d’une théorie conceptuellement proche de celle de l’impact géant.

Fort de cette hypothèse de départ et de la constatation d’un refroidissement du globe, Buffon entreprit d’utiliser ce phénomène pour estimer le temps écoulé sur Terre depuis la fin de la solidification de sa croûte. Chauffant à l’incandescence des sphères de différentes compositions¹² Buffon mesura le temps de refroidissement permettant de

10. Le contexte scientifique de ce raisonnement est succinctement exposé dans l’annexe [A.1.1](#).

11. La taille comme la masse des comètes n’étaient pas connues avec précision à cette époque.

12. Originellement des boulets de canon : le scientifique érita d’une fonderie à Buffon dans l’actuelle Côte-d’Or, en Bourgogne. Soucieux de valoriser les ressources minières de ses terres, Buffon appliqua une approche scientifique et méthodique à ses expérimentations métallurgiques, tout d’abord à son

TABLE PLUS EXACTE
Des temps du refroidissement des planètes et de leurs satellites.

CONSOLIDÉES JUSQU'AU CENTRE.	REFROIDIES à pouvoir LES TOUCHER.	REFROIDIES A LA TEMPÉRATURE ACTUELLE.	REFROIDIES à $\frac{1}{25}$ de la tempé- rature actuelle.
En..... 2936 ans.	En... 34270 $\frac{1}{2}$ ans.	LA TERRE. En... 74832 ans.	En... 168123 ans.
En..... 644	En... 7515	LA LUNE. En... 16409	En... 72514
En..... 2127	En... 24813	MERCURE. En... 54192	En... 187765
En..... 3596	En... 41969	VÉNUS. En... 91643	En... 228540
En..... 1130	En... 13034	MARS. En... 28538	En... 60326
En..... 9433	En... 110118	JUPITER. En... 240451	En... 483121
{ 1 ^{er} en 6238 2 ^e en 5262 3 ^e en 4788 4 ^e en 1936	En... 71166	SATÉLLITES DE JUPITER. En... 155986	En... 311973
	En... 61425	En... 135549	En... 271098
	En... 56651 $\frac{2}{3}$	En... 123700 $\frac{5}{6}$	En... 247401 $\frac{4}{6}$
	En... 22600 $\frac{1}{5}$	En... 49348	En... 98696
En..... 5140	En... 59911	SATURNE. En... 136821	En... 262020
En..... 4604	En... 53711	ANNEAU DE SATURNE. En... 88784	En... 177568
1 ^{er} en 3433 2 ^e en 3291 3 ^e en 3182 4 ^e en 1502 5 ^e en 421 $\frac{1}{5}$	En... 40021 $\frac{2}{25}$	SATÉLLITES DE SATURNE. En... 87392	En... 174784
	En... 38451	En... 83964	En... 167928
	En... 35878	En... 78329	En... 156658
	En... 17523 $\frac{1}{5}$	En... 38262 $\frac{1}{2}$	En... 76525
	En... 4916	En... 10739	En... 47558

Figure 1.2 – Table des résultats présentés par Buffon quant aux temps estimés de refroidissement des planètes à partir de l'incandescence, *fac simile* (Leclerc, 1774), p50. Le naturaliste procède par extrapolation à partir de relevés expérimentaux effectués sur des sphères de composition variable. Ce choix, d'une dépendance linéaire du temps de refroidissement vis à vis du rayon des corps, constitue la principale faiblesse du modèle utilisé.

les tenir en main sans risque. Ces mesures, par extrapolation, lui fournirent des temps de refroidissement pour des corps sphériques de taille et de composition variable (fer, grès, argile...). Il appliqua cette méthode aux planètes du système solaire ainsi qu'à leurs satellites (voir fig. 1.2). Buffon présenta finalement des temps de refroidissement pour la Terre de l'ordre de 70 ka (Leclerc, 1774), très supérieurs aux âges alors professés mais très en deçà de la valeur actuellement admise.

C'était probablement, une des premières fois qu'on utilisait un modèle physique d'évolution du globe pour en reconstituer l'histoire passée¹³. Néanmoins, pour faire preuve d'une certaine justesse, cette première expérimentation souffrait de bien des défauts d'une méthode scientifique encore balbutiante. On notera, avec un peu de scepticisme, les résultats extraordinairement précis, l'absence d'estimation d'erreur, l'obscurité des résultats bruts ou encore l'extrapolation linéaire de l'auteur¹⁴. Le plus malheureux reste sans doute le choix fait par Buffon de minorer la valeur des temps de refroidissement obtenus pour la Terre. Ainsi, bien que trouvant des valeurs proches de 10 Ma et y ajoutant foi¹⁵, il s'abstint de publier ses résultats, arguant d'un souci de vraisemblance auprès du lecteur (Blanckaer, 1994).

1.1.3 Une Terre primitive liquide ?

Au début du XIXe siècle, Laplace critiqua Buffon à propos, entre autres, de son hypothétique comète. Le scientifique français jugeait que de telles collisions cataclysmiques, faisant intervenir des objets jamais vus, étaient invraisemblables. Il formula (Laplace, 1796) de façon indépendante le modèle de la nébuleuse stellaire et soutient un mode de formation des planètes semblable à celui décrit déjà par Kant. Ce modèle bien que jouissant d'une forte popularité souffrait de défauts qui furent rapidement mis en évidence. Notamment, le moment cinétique¹⁶ du système solaire produit par fission est essentiellement possédé par le Soleil. Or on peut mesurer cette répartition à l'aide d'observations astronomiques et constater que, si le Soleil porte l'essentielle de la masse du système ($\simeq 99,86\%$), ce sont bien les planètes qui possèdent son moment cinétique

laboratoire de Montbard puis aux Grandes Forges de Buffon

13. Notons qu'Halley avait proposé en 1715 de mesurer le temps nécessaire aux fleuves pour apporter le sel contenu à l'heure actuelle dans les océans mais cette idée ne fut mise en pratique par Joly qu'en 1899 (Joly, 1899).

14. Buffon manquait en fait d'un modèle de transfert thermique qui ne fut établi, pour la diffusion, qu'au début du siècle suivant. Certes le rapport volume/surface d'une sphère varie linéairement avec le rayon, mais une analyse dimensionnelle de l'équation de la chaleur montre que le temps de diffusion caractéristique croît avec le carré de la taille de l'objet. Enfin Buffon sous estime lourdement la contribution du rayonnement solaire.

15. Buffon consigne ces résultats dans ses cahiers et en fait part à des correspondants épistolaires.

16. Ou moment angulaire que l'on peut interpréter comme une « quantité de rotation ». Le moment cinétique d'un point matériel M d'impulsion \mathbf{p} calculé par rapport à un point O est $\mathbf{L} = \mathbf{OM} \times \mathbf{p}$.

(à hauteur de 99,5%, [Cole \(2017\)](#)). Une autre objection, formulée par Maxwell¹⁷, portait sur la difficulté de condenser des anneaux dont les bords intérieurs et extérieurs circulaient à des vitesses différentes.

D'autres modèles de formation planétaire furent proposés par la suite sans parvenir à convaincre durablement la communauté scientifique naissante. Jeans au début du XXe siècle proposa par exemple que le passage rapide et proche d'une étoile ait arraché au Soleil, par effet de marée, des fragments qui devaient produire les planètes actuelles ([Milne, 2013](#))¹⁸. On retiendra néanmoins que dès le début, et tout au long de cette période, il n'était pas considéré comme invraisemblable que la Terre primitive eut traversé une période fluide et chaude.

C'est une hypothèse de départ semblable qu'utilisa William Thomson, baron Kelvin. Ce célèbre scientifique n'est pas tant connu pour l'étude d'une éventuelle cristallisation de la Terre primitive que pour son application des lois de diffusion thermique établies par Fourier au refroidissement séculaire du globe¹⁹.

Néanmoins, le point de départ choisi par Kelvin pour son modèle de refroidissement est l'hypothèse « de Leibniz » d'une Terre originelle fondue. En marge de son propos principal, Kelvin eut l'intuition que si la Terre avait connu un état originellement fondu, son mode de cristallisation dépendait de la compressibilité et de la variation de la température de fusion propres au magma originel. Avec beaucoup de prudence, le scientifique établit qu'au vu du comportement des roches de surface, on pouvait supposer que le refroidissement de l'océan de magma²⁰ originel avait dû conduire à la cristallisation de bas en haut d'un tel système ([Thomson, 1863](#)). Quelques précisions sont apportées à ce sujet dans la sous section [A.1.2](#).

En dépit de ces intuitions hardies, il ne faudrait pas croire que ces premiers concepts d'océans de magma aient rencontré une approbation unanime. Pris dans la controverse sur l'âge de la Terre, le modèle de Kelvin fut critiqué et ses faiblesses mises en avant. Notamment, on reprocha l'absence dans les registres géologiques d'une trace quelconque

17. Par simple application des lois de Kepler, qui énoncent entre autres une relation entre la vitesse et le demi grand axe de l'ellipse décrite par le corps en orbite.

18. Là encore on montra que la répartition actuelle du moment angulaire dans le système solaire n'était pas réalisable par ce mécanisme. En outre, la composition du Soleil devenait accessible par les techniques spectrographiques et invalidait que la Terre, par exemple ait la même composition moyenne que les couches externes de son étoile.

19. Kelvin établit que l'âge de la Terre devait se situer entre 20 et 400 *Ma*. Ce modèle était en fait incomplet dans la mesure où il méconnaissait les phénomènes de convection mantellique (contrairement à une idée reçue, la radioactivité bien qu'elle fut aussi ignorée n'induit pas une erreur considérable dans ce calcul), qui permettent de maintenir pendant des durées bien supérieures un flux de surface donné. Notons aussi que cette estimation, associée à l'âge du Soleil calculé en l'absence de connaissance sur la fusion nucléaire, devait conduire à une longue controverse sur l'âge de la Terre, l'opposant notamment aux biologistes évolutionnistes qui postulaient des durées plus importantes. La physique atomique, en livrant la source d'énergie du Soleil et en fournissant un chronomètre géologique fiable, trancha finalement le débat au milieu du XXe siècle ([Patterson et al., 1955](#)).

20. Le terme est postérieur, on l'utilisera par commodité.

de cette Terre fluide primitive.

En outre, de nouveaux modèles de formation des planètes apparurent. À partir des travaux de von Weizsäcker au milieu du XXe siècle ([Gamow and Hynek, 1945](#)) le modèle de la formation des planètes par accrétion à partir du disque entourant le Soleil dit protoplanétaire²¹ (et non plus directement de l'astre) s'imposa peu à peu comme l'hypothèse privilégiée²². Le modèle, très vite perfectionné (consulter par exemple les travaux et revues de [Ter Haar \(1948, 1967\)](#)) put intégrer des phénomènes physiques supplémentaires tels que les vents solaires ou l'influence du champ magnétique de l'étoile. Safronov dès 1969 (son ouvrage écrit en russe et publié à Moscou ne fut traduit en anglais qu'en 1972 dans [Safronov \(1972\)](#)) formula le modèle toujours d'actualité de formation des planètes à partir de planétésimaux, eux-même issus de la poussière du disque protoplanétaire. Dans ce nouveau cadre de pensée, nourri de l'analyse des météorites tombées sur Terre et de la [radiochronologie](#), l'océan de magma primordial s'il n'était pas formellement interdit ne constituait plus un point de départ naturel.

L'énergie nécessaire à la fusion (même partielle) de la Terre ne pouvait plus provenir que de l'énergie gravitationnelle libérée pendant la phase d'accrétion et de différenciation ainsi que de la désintégration d'éléments radioactifs. Or il n'était pas clair que le chauffage induit par ces phénomènes soit assez rapide, comparativement aux pertes radiatives de surface, pour fondre les couches supérieures du globe. Le scénario privilégié était celui d'une accrétion « froide et calme », c'était seulement sous l'action de la désintégration radioactive que la différenciation planétaire avait pu avoir lieu dans un second temps (ce modèle général est, par exemple, utilisé par [Birch \(1965\)](#)).

Le débat scientifique en était à ce point quand le développement de l'aéronautique, enclenché par la seconde guerre mondiale et ravivé par la guerre froide, allait fournir une nouvelle source de contraintes pour les modèles géophysiques.

1.1.4 L'apport des roches lunaires

Les raisons qui amenèrent Américains et Soviétiques à se lancer, au cours des années 1960, dans la course à la Lune furent principalement d'ordre politique et idéologique. Néanmoins les retombées scientifiques de cette compétition d'un nouveau style furent considérables pour la communauté des chercheurs. La connaissance des planètes du système solaire cessa d'être limitée aux seules observations terrestres pour impliquer des sondes spatiales automatiques et quelques vols habités. Il fut possible de collecter des données *in situ* et même de ramener en laboratoire les fruits d'une collecte extraterrestre.

21. Que certains font remonter aux tourbillons proposés par Descartes au XVIIe siècle, dans un contexte pré-Newtonien.

22. Notons que, contrairement aux modèles « cataclysmiques » de Jeans ou Buffon, on pouvait attendre d'un tel processus une relative abondance de planètes extrasolaires, que les observations modernes confirment bel et bien.



Figure 1.3 – Timbre commémoratif de 10 kopeks imprimé par l'URSS après la réussite de la mission *Luna 16*, premier retour d'échantillon lunaire par une sonde automatique en septembre 1970.



Figure 1.4 – Photo prise lors de la mission Apollo 17 (décembre 1972), au premier plan la mer des Pluies (*Mare Imbrium*, une des plaines de basaltes enrichies en **KREEP**), à l'horizon les Carpathes (exemple d'Highlands ou terres lunaires). Source NASA.

Des échantillons de roches lunaires furent collectés entre 1969 et 1976²³ par les missions *Apollo* et *Luna* (représentée fig. 1.3).

L'engouement pour ce que certains baptisèrent les « roches de la Génèse » fut considérable. Harold Urey, alors conseiller scientifique dans la planification des missions *Apollo*, n'aurait-il pas déclaré « Donnez moi une roche de la Lune et je vous donnerai l'histoire du système solaire » (Langin, 2021) ? Bien sûr il s'agissait aussi pour la communauté scientifique américaine de défendre un programme spatial coûteux. L'espoir était de découvrir des roches inaltérées datant des époques les plus reculées du système solaire. Contrairement aux registres terrestres, on pouvait s'attendre à ce que les roches lunaires n'aient subi, en l'absence d'atmosphère digne de ce nom, que l'érosion (très lente actuellement) due aux impacts météoritiques²⁴.

La surface de la Lune présente certaines caractéristiques parfaitement visibles à l'œil nu. On y voit des étendues sombres appelées *maria* (ou mers lunaires) au milieu de terrains plus clairs occupant la majorité de la surface et nommés *terres lunaires*²⁵. Les

23. Un certain renouveau de la course à l'espace, entre les États-Unis d'Amérique et la République Populaire de Chine cette fois, semble réveiller un intérêt politique pour notre satellite. Pour la première fois depuis un demi-siècle, de nouveaux échantillons lunaires ont été prélevés et rapatriés en décembre 2020 par la sonde chinoise Chang'e 5.

24. Bien que les roches lunaires aient constitué un apport incalculable à la compréhension de l'histoire du système solaire, les bombardements intenses de la fin de la période d'accrétion causèrent une érosion conséquente. Aussi, les promesses originellement formulées ne purent être toutes tenues et menèrent à un certain nombre de biais, comme l'illustre la controverse récente du grand bombardement tardif (Boehnke and Harrison, 2016; Chapman et al., 2007).

25. Ou *Lunar Highlands*, hautes-terres, dans la littérature scientifique.

observations astronomiques montrèrent dès le XVI^e siècle que ces dernières étaient plus accidentées et d'altitude plus élevées que les mers.

Les toutes premières analyses de roches lunaires (Warren, 1985; Wood et al., 1970) indiquèrent que ces terres lunaires (couvrant 86 % de la surface) étaient principalement (à plus de 90%) constituées de roches riches en *feldspaths* plagioclases (en pratique il s'agit d'anorthites, des aluminosilicates de calcium $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$). Cette abondance différenciait immédiatement la croûte lunaire de celle de notre planète. Puisque ces roches des terres lunaires sont caractérisées par une relative faible densité vis à vis de la plupart des magmas connus, on postula (Smith et al., 1970; Wood et al., 1970) que la croûte des terres lunaires s'était formée par cristallisation fractionnée d'un manteau fondu. On entend par là que la cristallisation avait produit un liquide et un solide de composition différente (des précisions supplémentaires sur le principe d'une cristallisation fractionnée sont données à la sous section A.1.3). Les roches ainsi formées avaient ensuite naturellement surnagé et constitué une croûte. Les datations opérées qui font de ces roches les plus vieilles retrouvées sur notre satellite plaident dans ce sens.

Par ailleurs, les mers lunaires, qui ont en fait été produites par des épanchements magmatiques remplissant des bassins d'impact (voir l'illustration fig. 1.4), sont supposées donner un échantillon des roches enfouies en profondeur sous la zone d'épanchement. On a pu montrer (voir par exemple Warren (1985)) que certaines de ces roches basaltiques étaient enrichies en éléments dits incompatibles, représentés par le potassium et le phosphore additionnés de terres rares, collectivement appelés *KREEP*²⁶. Il était donc possible d'interpréter ces échantillons comme les reliques d'un océan de magma enfoui et progressivement enrichi en tous les éléments qui ne s'étaient pas encore cristallisés. Les datations réalisées montrèrent le caractère postérieur de ces roches vis à vis de celles des terres lunaires.

Dernier point majeur, les analyses de l'abondance en terres rares des roches montrèrent une anomalie de profil remarquable entre terres et mers lunaires. Ces dernières étaient appauvries relativement aux premières en europium et ce de façon complémentaire (Taylor and Jakeš, 1974). Cet élément semblait lui aussi montrer que croûte et magma enrichi en *KREEP* avaient une origine commune produisant ce partage inégal en europium.

Ainsi, la composition si caractéristique des roches lunaires témoignait probablement d'une Lune primitive au manteau fondu. On trouvait cette fois des indices géologiques convainquants de l'existence d'un océan de magma originel. Ces découvertes et interprétations allaient jouer un rôle important dans le débat alors en cours sur l'origine de la Lune et plus généralement du système que celle-ci forme avec notre planète.

26. K(potassium) R(are) E(arths) E(lements) P(hosphore).

1.1.5 Impact géant et océan de magma lunaire

À l'époque des missions *Apollo*, plusieurs théories étaient en compétition pour expliquer la configuration actuelle du système Terre-Lune. De la même façon que pour l'origine des planètes, la question était de savoir si la Lune s'était formée extérieurement puis avait été capturée, si elle s'était formée en même temps que la Terre ou bien si elle en était issue postérieurement.

La théorie de la fission avait été formulée originellement par Georges Darwin²⁷ (Darwin, 1879). Partant du constat de l'éloignement progressif de notre satellite, il proposa d'extrapoler la dynamique jusqu'à un commencement où Terre et Lune étaient liés. Ce modèle, à la postérité assez longue (*e.g.* Binder (1974)), fait provenir la Lune des couches externes de la Terre et implique donc une similarité de composition entre notre satellite et ces dernières.

La théorie de la co-accrétion (voir par exemple Ruskol (1960)) proposait une formation similaire à celle des planètes à l'égard du Soleil. La Lune serait née du même disque qui produisit la Terre, enfantant donc un système double. On attend dans ce cas que la composition de la Lune soit identique à celle *moyenne* de la Terre.

Enfin la théorie de la capture²⁸ (dont le mécanisme fut décrit en 1955 par Gerstentkorn, mais on pourra se rapporter à Singer (1972) par exemple) postulait que la Lune s'était formée tout à fait extérieurement puis avait été capturée par la Terre. Le corps capturé a alors toutes les chances de l'être dans un plan orbital quelconque et de présenter une composition chimique très différente de celle de la Terre.

Ces différentes théories qui peuvent sembler si curieuses et abstraites aujourd'hui ne se résument pas à des préférences esthétiques. Il s'agissait d'hypothèses scientifiques qui s'affrontaient et faisaient appel aux connaissances alors disponibles afin de se départager. Avant les années soixante-dix, les contraintes sur les modèles se réduisaient aux observations astronomiques. Ces dernières donnaient accès aux propriétés mécaniques du système Terre-Lune, mais non à sa chimie par exemple et s'avèrent insuffisamment discriminantes. Les roches lunaires et les mesures (par exemple sismiques) conduites à sa surface allaient permettre un spectaculaire progrès. La Lune apparut comme appauvrie en éléments volatils et *sidérophiles* comme en fer. On estima que le noyau lunaire était proportionnellement plus petit que celui de la Terre. En outre, l'analyse des isotopes de l'oxygène indiquait une origine au moins partiellement commune entre la Terre et son satellite (Shearer et al., 2006).

Les différents modèles présentés furent dès lors confrontés à des difficultés assez considérables. La fission ne parvenait que difficilement à reproduire la dynamique du

27. Fils du célèbre Charles Darwin.

28. Il en existe en fait deux variantes, suivant que le corps capturé l'est de façon intacte ou non, nous présentons le premier mécanisme ici.

système actuel (du point de vue de la répartition du moment angulaire), la co-accrétion ne rendait pas compte de l'appauvrissement de la Lune en fer, enfin la capture d'un corps extérieur était disqualifiée, entre autres, par les similarités de composition observées.

C'est dans cette conjoncture qu'un nouveau modèle allait se développer et s'imposer, l'impact géant. Ce dernier (formulé indépendamment par [Hartmann and Davis \(1975\)](#) et [Cameron and Ward \(1976\)](#)) postule²⁹ qu'un planétésimal de la taille de Mars baptisé conventionnellement *Theïa* est entré en collision avec la proto-Terre (alias *Gaïa*). Les deux corps étaient alors différenciés et tandis que le noyau de *Theïa* plongeait dans celui de *Gaïa*, un disque de débris se formait à partir de leurs manteaux respectifs. Ce disque, par accrétion produisit une Lune initialement fondue.

Comme on l'a illustré *via* le travail de Buffon ou de Jeans, l'idée que des évènements rares et cataclysmiques aient pu contribuer à la formation du système solaire n'était pas récente. Néanmoins ce type de propositions, en cela qu'elles semblent faire intervenir des arguments *ad hoc*, doivent pouvoir produire des preuves d'autant plus solides. Pour reprendre le cas de Buffon, postuler l'existence d'une comète idoine s'avérait épistémologiquement trop coûteux : rien de tel n'avait jamais été observé, d'autres modèles s'avéraient plus crédibles. En revanche, désormais pourvus d'une liste de contraintes plus fines, le nouveau modèle si cataclysmique qu'il soit, finit par apparaître plus compétitif que ses prédécesseurs. Parallèlement, le développement des simulations numériques et la disponibilité de ressources de calcul croissantes, permirent de comprendre que ce type de rencontre n'était pas à proprement parler « rare » à la fin de la période d'accrétion des planètes telluriques ([Canup, 2004](#)).

On peut, chose rare, marquer assez précisément la date du changement de paradigme dominant. La conférence de Kona (Hawaï, USA) en octobre 1984 vit si l'on peut dire le triomphe de la théorie de l'impact géant. Pour citer Dana Mackenzie « Avant la conférence, il y avait des partisans des trois théories « traditionnelles », plus quelques personnes qui commençaient à prendre l'impact géant au sérieux, et il y avait un énorme milieu apathique qui ne pensait pas que le débat serait un jour résolu. Par la suite, il n'y avait pratiquement que deux groupes : le camp de l'impact géant et les agnostiques » ([Mackenzie, 2003](#)). Ce basculement s'est logiquement traduit sur le terrain des publications scientifiques comme illustré fig. 1.5, les théories concurrentes cessèrent rapidement de motiver l'écriture de papiers et sont à l'heure actuelle à peu près abandonnées.

Le résultat final de cette petite révolution fut que la genèse du système Terre-Lune en fut bouleversée. La Terre semblait avoir connu au moins un impact géant. Ce dernier

29. Dans sa version canonique. Cette première version postulait une contribution importante de l'impacteur à la composition de la Lune. Or les analyses isotopiques des roches lunaires montrèrent dans les années 2000 une similarité encore plus poussée avec la Terre qu'on ne le pensait. Suite à cette « crise isotopique », de nouveaux modèles faisant intervenir des impacts successifs ou un impact unique d'une dynamique différente furent proposés afin de produire une Lune de composition essentiellement terrestre.

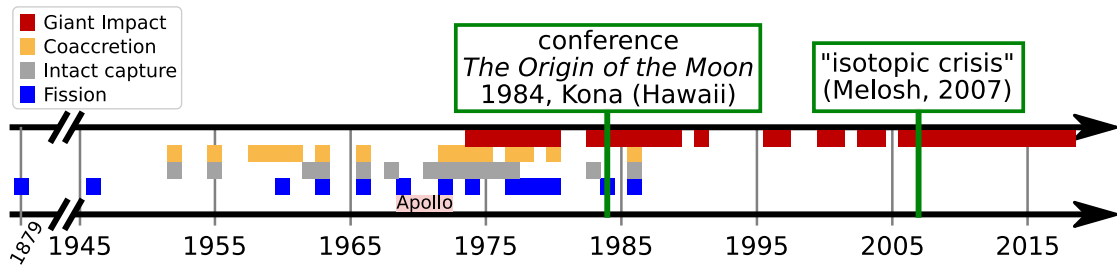


Figure 1.5 – Frise chronologique de quelques publications relatives à la formation de la Lune, les couleurs indiquent les hypothèses jugées les plus probables par les auteurs des différents articles. On fait figurer par un trait la conférence *The Origin of the Moon* 1984 à Kona (Hawaii) qui marqua durablement la communauté scientifique. Extrait de [Kobsch \(2020\)](#), avec l'aimable autorisation de l'auteur.

expliquait l'état initialement fondu de la Lune et son océan de magma. La Terre n'avait-elle donc pas, elle aussi, connu une phase similaire ?

1.1.6 Quelques modélisations géophysiques de l'océan de magma terrestre

Dès lors la communauté scientifique se pencha de nouveau sur ce concept. On montra que deux scénarios principaux non-exclusifs pouvaient mener à la constitution d'un océan de magma terrestre. L'un mettait en jeu une libération d'énergie intense sur un bref laps de temps, il s'agissait de l'impact géant sus-mentionné ([Melosh, 1990](#)). Le second reposait sur la capacité de la Terre à retenir la chaleur ([Abe, 1997](#)) libérée à un rythme plus lent par la désintégration radioactive³⁰, la libération d'énergie gravitationnelle (on pense par exemple à la différenciation du noyau) et les impacts de planétésimaux d'une taille plus modeste.

Les progrès des outils de simulation comme de modélisation ont permis au cours des dernières années le développement de nouveaux modèles d'évolution d'océan de magma faisant intervenir des phénomènes physiques supplémentaires. On a déjà mentionné le cas des phénomènes atmosphériques, illustrés par exemple par [Elkins-Tanton \(2008\)](#), [Lebrun et al. \(2013\)](#) ou [Hamano et al. \(2013\)](#) qui soulignèrent le rôle joué par ceux-ci dans le taux de refroidissement de l'océan, suggérant même des temps de vie bien supérieurs³¹ à ceux communément admis auparavant. La suspension de cristaux formés par une cristallisation partielle a, elle aussi, suscité des travaux comme ceux de [Solomatov \(2007\)](#), montrant que suivant leur flotabilité ces derniers pouvaient surnager ou se déposer suivant la viscosité du magma et la vitesse de ses courants. Il a été aussi suggéré que, du fait de la cristallisation fractionnée basale de l'océan de magma ainsi

30. Au moment de la fin de la période d'accrétion de la Terre, les éléments à faible demi-vie comme ²⁶Al ou ⁶⁰Fe étaient déjà éteints, mais la production thermique restait toutefois quatre fois plus intense qu'aujourd'hui ([Sleep, 2000](#)).

31. Se chiffrant en dizaines de Ma contre quelques dizaines de ka dans le cas d'une surface nue rayonnant vers l'espace.

que des propriétés de compressibilité du magma liquide, le premier manteau solide se soit constitué, non à la base de la coquille liquide, mais dans sa partie médiane (Caracas et al., 2019; Labrosse et al., 2007). L’océan est alors divisé en deux couches distinctes séparées par un solide. La dynamique de ce nouveau système peut s’avérer complexe, le solide développant éventuellement des modes de convection de translation (Morison et al., 2019) dès lors qu’il est autorisé à changer de phase à chaque interface (Agrusta et al., 2020; Labrosse et al., 2018; Morison, 2020).

Si le concept d’océan de magma terrestre s’est avéré extrêmement fertile quant à la production de modèles géophysiques ses traces géologiques et géochimiques furent sujettes à de plus longs débats.

1.1.7 Des témoignages géochimiques plus ambigus

On l’a vu précédemment, l’océan de magma terrestre bien qu’envisageable, restait hypothétique faute d’indice clair témoignant de son existence passée dans les registres géologiques. Il était raisonnable de s’attendre à ce que, comme dans le cas de la Lune, une croûte enrichie en *feldspath* témoigne aujourd’hui d’un océan de magma primordial. Or la croûte terrestre est très différente de celle de la Lune et ce depuis plusieurs milliards d’années. Il est vrai que contrairement à la plupart des corps solides du système solaire, la Terre voit sa surface constamment renouvelée (depuis au moins 3 *Ga*, voir par exemple Condie and Pease (2008)) par la tectonique des plaques. Celle-ci détruit et produit continuellement le plancher océanique. La croûte continentale, quant à elle, bien que plus durable ne s’est formée que progressivement et par la suite. Il existe donc tout une période de l’histoire de la Terre à laquelle aucune roche ne peut être attribuée. C’est cet âge, sans témoin géologique que l’on nomme *l’Hadéen*³².

Néanmoins certains auteurs, tels Ringwood (Ringwood, 1990), doutaient qu’une croûte feldspathique originelle, si peu dense puisse jamais être recyclée. Il semble que ce point ne soit plus régulièrement mis en doute, soit que les pressions plus importantes imposées dans l’océan de magma terrestre³³ défavorisent la formation durable de *feldspaths* peu denses, soit qu’un recyclage de la croûte éventuellement formée soit finalement possible. Ce consensus actuel est par exemple illustré par les revues de Chao et al. (2021) ou d’Elkins-Tanton (2012).

Faute de roches datant, comme sur la Lune, de l’époque même de la solidification d’un océan de magma originel, on a cherché dans les anomalies géochimiques de roches plus récentes des traces d’une telle structure. À la fin des années quatre-vingts, il sem-

32. Par référence au dieu grec des enfers, Hadès, et donc aux conditions de surface supposées « infernales », mais au sens biblique du terme.

33. Plus profond, mais surtout soumis à un champ de gravité six fois supérieur à celui de la Lune et quasi constant dans toute son épaisseur (Dziewonski and Anderson, 1981).

blait qu'une cristallisation fractionnée d'un océan de magma terrestre de la base vers la surface permettait d'expliquer la composition actuelle (notamment au regard du ratio magnésium/silicium) des roches du manteau supérieur. Pourtant, il apparut au début de la décennie suivante que les abondances en éléments rares de ce même manteau supérieur n'étaient pas compatibles avec le modèle de cristallisation précédemment décrit. Le débat, assez complexe dans son détail, aboutit à un consensus qui n'excluait pas une cristallisation partielle d'une certaine partie de l'océan de magma (Solomatov, 2007).

De plus solides arguments provinrent de l'analyse isotopique³⁴ du manteau. Tout d'abord, le ratio $^{182}\text{Hf}/^{182}\text{W}$ permit au début des années 2000 de contraindre l'époque de formation du noyau (e.g. Yin et al. (2002)). Celui-ci s'avéra relativement ancien (au plus 50 Ma postérieur à la formation du système solaire), de sorte qu'il semblait bien s'être séparé d'un milieu silicaté liquide. La détermination des coefficients de partition des éléments sidérophiles entre métal et silicate, indiqua quant à elle que cette différenciation avait dû se produire à environ 1000 km de profondeur. Ajoutons, que la chronologie de ces premières dizaines de millions d'années n'est pas parfaitement contrainte. Si l'étude des météorites les plus anciennement formées indique que les plus vieilles roches du système solaire remonteraient à 4,5682 milliards d'années (Bouvier and Wadhwa, 2010), l'impact géant qui a formé la Lune et aurait constitué l'océan de magma terrestre a pu avoir lieu entre 4,54 et 4,41 Ga avant le présent (Elkins-Tanton, 2012) soit un âge compatible avec celui de la formation du noyau. Parallèlement, l'étude de zircons dits hadéens³⁵ montre que la surface terrestre a connu un environnement compatible avec l'eau liquide³⁶ dès 4,38 Ga avant le présent (Harrison, 2009). L'impact géant n'a donc pu se produire que plusieurs millions d'années *avant* la formation de ces zircons, afin de permettre l'apparition d'une croûte solide et d'une hydrosphère.

Pour revenir aux indices géochimiques laissés par un océan de magma, des études (e.g. Caro et al. (2005)) des années 2000 montrèrent que le ratio $^{142}\text{Nd}/^{144}\text{Nd}$ du manteau différait significativement de celui observé dans les météorites chondritiques³⁷, en contradiction avec l'hypothèse classique d'un manteau de composition chondritique. Une solution pour réconcilier ces deux affirmations est de supposer que le manteau silicaté s'est formé à partir d'un liquide chondritique, par cristallisation fractionnée. Le liquide résiduel avait alors constitué un *réservoir*, aujourd'hui dissimulé, enrichi de façon complémentaire au déficit observé dans le manteau.

34. Rappelons que les isotopes d'un élément chimique donné présentent le même numéro atomique mais diffèrent par leur nombre de masse.

35. Minéraux de roches hadéennes ayant résisté au recyclage de leur roche mère et datables par radiochronologie.

36. Rappelons que la température d'ébullition croissant avec la pression, les conditions de surface de cette époque peuvent fort bien n'avoir eu qu'un rapport lointain avec celles régnant aujourd'hui, à titre d'information le point critique de l'eau se situe à environ 220 bars et 375° C (Kreith, 2000).

37. Supposées refléter la composition moyenne du système solaire, hors composés gazeux.

Ainsi, on peut prudemment affirmer que les analyses chimiques et isotopiques n'interdisent plus aujourd'hui l'existence passée d'une Terre silicatée liquide, autrement dit d'un océan de magma. Un tel objet ne constitue pas un ajout épistémologiquement couteux à l'histoire de la Terre dans la mesure où il apparaît comme une conséquence cohérente de la phase d'accrétion terrestre et/ou d'un impact géant.

1.1.8 Bilan

Les tout premiers modèles scientifiques de formation du système solaire postulaient déjà l'existence d'une Terre primitive fondue. Cette hypothèse se fondait principalement sur une constatation exacte, la Terre se refroidit, et sur des modèles de génération des planètes, qui s'avèrent erronés. Rétrogradé à un rang plus anecdotique, l'océan de magma perdit son caractère d'état initial obligatoire, faute de témoins géologiques de son passage et de mécanisme générateur. C'est finalement sur la Lune, et non sur Terre, que de solides indices géologiques le résuscitèrent suite à l'exploration *in situ* menée dans les années 1960 et 1970. La formation d'un consensus scientifique sur la naissance de la Lune suite à un impact géant raviva également l'intérêt pour un océan de magma, cette fois terrestre. Aujourd'hui, assez solidement étayé par les modèles géophysiques, l'océan de magma terrestre rencontre un accord croissant avec les résultats de la géochimie.

1.2 Enjeux, motivations et méthodes

Dès lors que l'on admet comme possible la formation d'un océan de magma lors des premières dizaines de millions d'années de la Terre primitive, on doit se demander comment un tel objet peut évoluer. Ainsi, il s'agit de comprendre comment cette Terre silicatée liquide a pu se refroidir, cristalliser et former notre manteau solide actuel. Répondre à cette question permettrait de mieux interpréter la structure actuelle du manteau, surtout connue par des observations sismiques. Cette démarche nous permettrait aussi de savoir quel fut l'état initial du globe lors du démarrage de la tectonique des plaques, phénomène toujours actif.

1.2.1 Des océans de magma bien mélangés : le modèle standard

Pour tirer des conclusions sur la dynamique de l'océan de magma terrestre, objet disparu, les scientifiques doivent s'appuyer sur des modèles. Ces derniers correspondent à des choix et des approximations qui sont du ressort du modélisateur. Jusqu'à présent, la majorité des modèles d'océans de magma produits faisaient l'hypothèse d'une structure homogène bien mélangée et dépendant seulement de la profondeur. Il s'agit le plus souvent de modèles « 1D », ne décrivant la dynamique du fluide qu'à partir de lois

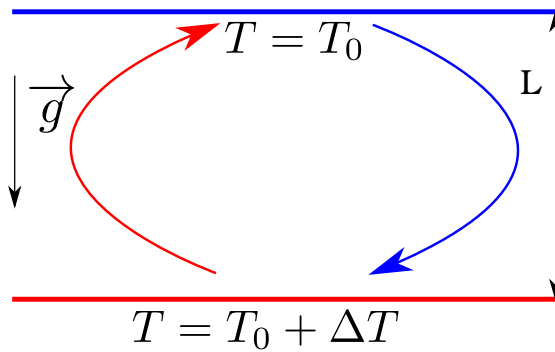


Figure 1.6 – Représentation schématique des courants de convection produits dans un système plan par l'imposition d'un gradient déstabilisateur thermique.

d'échelles³⁸ dont l'application pourrait être discutée. Ces choix sont justifiés par un phénomène particulier : la convection thermique.

La convection, c'est-à-dire au sens large le transfert d'énergie *via* le transfert de matière, est l'un des trois modes de transport existant avec le rayonnement (transfert par l'intermédiaire d'ondes électromagnétiques) et la diffusion (transfert par transmission de vibration élastique dans un milieu matériel). Un cas particulier en est la convection de Rayleigh-Bénard, que l'on peut décrire par une expérience élémentaire.

Figurons nous une couche plane de fluide infinie d'épaisseur L , caractérisée par une viscosité cinématique ν donnée, une masse volumique de référence ρ_0 , associée à une température T_0 , une diffusivité thermique κ et un coefficient de dilatation thermique isobare $\alpha > 0$. Ce système est placé dans un champ de gravité d'intensité g et soumis à un écart de température vertical ΔT , tel que la surface inférieure de la coquille soit plus chaude que sa limite supérieure. On observe, dès que ΔT dépasse une valeur ΔT_C dite *critique*, le développement de mouvements dits de convection thermique. Le fluide en contact avec la surface inférieure se réchauffe, se dilate puis s'élève sous l'effet de la poussée d'Archimède (il est moins dense que le fluide qu'il déplace). Le fluide de surface, quant à lui, se refroidit, se densifie et plonge (voir fig. 1.6 pour une description schématique de l'ensemble). Pour des valeurs assez faibles de $\Delta T/\Delta T_C$ ces mouvements ont un caractère ordonné, mais des valeurs plus hautes produisent un état éventuellement très turbulent.

Ce mécanisme fut élucidé et formalisé par Rayleigh (Rayleigh, 1916) suite aux observations de Bénard (Bénard, 1900). Bien que les structures (les cellules de Bénard) observées par ce dernier se soient avérées être, en définitive, dues à des variations de tension superficielle avec la température, on donna au phénomène le nom de convection de Rayleigh-Bénard. Lors de celle-ci, une part du transfert thermique est désormais assurée par le déplacement du fluide constituant le système (sauf cas particulier, l'autre

38. Donnant des relations entre les caractéristiques du système et son comportement sous la forme d'une loi de puissance valable *en moyenne*. Un exemple historique en est le célèbre Homme de Vitruve de Léonard de Vinci (*ca.* 1490), ce fameux dessin illustre par exemple que le rapport entre la hauteur de la tête h et la taille totale H d'un être humain est en général proche d' $1/10$, soit $h \propto H$.

mode mobilisé est la diffusion). Par là même, le mélange est d'autant plus efficace que la convection est intense.

En adoptant une formulation plus moderne, l'aptitude du système à convecter dépend d'une combinaison sans dimension (voir des remarques supplémentaires à ce propos section 1.2.4) des paramètres propres au système, nommée nombre de Rayleigh,

$$Ra = \frac{\alpha g L^3 \Delta T}{\nu \kappa}. \quad (1.1)$$

Ce nombre, lorsqu'il dépasse une valeur critique Ra_C , autorise le développement de mouvements de convection. Dans le cas cartésien idéal de limites horizontales infiniment peu rigides (imposant un gradient de vitesse nul) $Ra_C = \frac{27\pi^4}{4} \simeq 657$ (Rayleigh, 1916). En outre, et bien que les conditions aux limites et la géométrie diffèrent sensiblement, le manteau terrestre actuel avec un nombre de Rayleigh estimé proche de 10^7 convecte. Le calcul du nombre de Rayleigh caractéristique d'un océan de magma terrestre surfacique ne va pas sans certaines approximations (nous le situons entre 10^{18} et 10^{25}) mais est très supérieur à cette valeur (rappelons qu'un océan de magma est l'analogue *liquide* du manteau actuel). On s'attend donc à ce qu'un océan de magma convecte. Mais puisqu'on remarque expérimentalement que l'intensité du mélange réalisé croît avec le rapport Ra/Ra_C , il est même raisonnable de supposer que ce dernier convecte très vigoureusement. C'est cet argument, hypothèse de départ raisonnable, qui sous-tend le choix d'un océan bien mélangé. Conséquence directe du mélange efficace, les grandeurs locales (y compris l'entropie massique) caractérisant le système sont homogénéisées, une description par un profil isentropique devient alors possible (voir par exemple Solomatov (2007)).

1.2.2 Impact de la cristallisation fractionnée et motivation de notre contribution

Un point peut cependant conduire à nuancer cette affirmation, il s'agit de la cristallisation basale de l'océan. Le magma qui le constitue ne peut en aucun cas être considéré comme un corps pur et doit donc cristalliser de façon partielle. Une première estimation de la composition du magma peut l'assimiler à celle de l'olivine, principal constituant du manteau supérieur actuel, dans la mesure où l'océan de magma terrestre n'est autre qu'un manteau fondu. On peut schématiquement représenter l'olivine comme un mélange de deux pôles purs qui seraient, d'un côté la fayalite Fe_2SiO_4 de point de fusion bas et de haute densité, et de l'autre la forstérite Mg_2SiO_4 de point de fusion plus élevé et moindre masse volumique. Du fait de cette différence de température de fusion, on montre (par exemple à l'aide d'un diagramme binaire d'un mélange idéal, voir section A.1.3 et fig. A.3) que le premier solide produit est appauvri en fer.

La cristallisation qui se produit *a priori* à la base de l’océan est partielle et produit un solide moins riche en fer que le liquide dont il est issu. On peut schématiquement considérer que l’océan basal s’enrichit en fer. Il se densifie par conséquent, ce phénomène s’opposant au gain de flotabilité produit par le chauffage du liquide basal. Il est envisageable que la base de l’océan s’enrichisse tant en fer qu’une couche stratifiée stable en vienne à diminuer voir interdire le développement de la convection thermique. Ce phénomène pourrait donc remettre en cause le postulat portant sur le mélange d’un océan de magma surfacique.

C’est en gardant cette remarque à l’esprit que nous nous proposons de contribuer à l’étude des régimes de transport de masse comme de chaleur au sein de l’océan de magma terrestre. Questionnant l’hypothèse classique d’un océan bien mélangé, nous souhaitons dépasser la première étape des modèles à une dimension fondés sur les seules lois d’échelle. Cet objectif semble plus que jamais réalisable aujourd’hui, dans la mesure où des codes de résolution croissante permettent de simuler la dynamique de coquilles de fluides en rotation. Ces outils ont surtout été développés dans le cadre de l’étude du noyau externe et de la génération de champs magnétiques par des courants de fluides conducteurs. Néanmoins, l’océan de magma constitue un système très similaire au noyau externe. Les principales différences tiennent à l’absence de phénomènes de magnéto-hydrodynamique³⁹ et une géométrie un peu différente (courbure moindre). Cette démarche permettrait idéalement une nouvelle mise à l’échelle des paramètres du problème. Dans le chapitre 3, nous proposons une première approche de ce type.

1.2.3 Le choix d’une approche hydrodynamique

Pour réaliser cet objectif nous avons fait le choix d’une approche hydrodynamique assistée de l’outil numérique.

Cette approche est dite « hydrodynamique », car elle se base sur les équations locales de conservation utilisées dans le domaine éponyme de la physique⁴⁰. Ces équations de conservations, bien qu’en petit nombre, induisent des comportements d’une grande variété. Elles s’appliquent à l’énergie, la masse (en général ou bien d’un composé chimique en particulier) et à la quantité de mouvement⁴¹ aussi appelée impulsion. Pour illustrer notre propos, reprenons le cas mentionné section 1.2.1. La couche plane de fluide considérée est caractérisée en tout point par quatre champs dépendant de la localisation spatiale et du temps : la température T , la pression P , la masse volumique ρ et la vitesse \mathbf{v} . Pour simplifier la situation nous nous placerons dans le cadre des fluides in-

39. Due à la moindre conductivité électrique des [silicates](#), même si des dynamos restent envisageables dans certains océans de magma, voir par exemple [Freitas et al. \(2021\)](#).

40. On pourra se reporter à un certain nombre d’ouvrages tels [Bejan \(1984\)](#) ou [Rieutord \(2014\)](#).

41. Ordinairement notée $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$.

compressibles et de l'approximation de Boussinesq. Cette dernière consiste à faire varier la masse volumique avec la température⁴² uniquement dans le terme de flotabilité de l'équation de conservation de l'impulsion, suivant $\rho = \rho_0 + \rho_0\alpha(T - T_0)$ où T_0 et ρ_0 sont les température et masse volumique de référence.

Dans le système d'intérêt, la masse est conservée globalement et localement, ce qui s'écrit pour une particule donnée de fluide :

$$\partial_t \rho_0 + \nabla \cdot (\rho_0 \mathbf{v}) = 0, \quad (1.2)$$

i.e. la variation locale de densité $\partial_t \rho$ correspond au bilan des transferts aux frontières de la particule $\nabla \cdot (\rho \mathbf{v})$ et au bilan de « création ou annihilation » de matière, représenté par le second membre, nul habituellement. Puisque l'on travaille en approximant le fluide à un corps incompressible, l'équation se résume à $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$.

Dans le cas de l'énergie, le même type de bilan comptable conduit à écrire que :

$$\partial_t T + \mathbf{v} \cdot \nabla T - \kappa \nabla^2 T = 0, \quad (1.3)$$

avec $\mathbf{v} \cdot \nabla T$ le terme d'advection et $\kappa \nabla^2 T$ de diffusion thermique, modélisée par la loi de Fourier. Le second membre notant une éventuelle variation de chaleur locale, par exemple un chauffage par désintégration radioactive, nous le prenons nul ici par souci de simplification.

Enfin, la quantité de mouvement est, elle aussi conservée. Il s'agit, si l'on veut, d'appliquer la seconde [loi de Newton](#) écrite dans un formalisme Eulérien. On entend par là qu'au lieu de suivre l'évolution d'une particule donnée bien identifiée, on s'intéresse aux propriétés locales d'un milieu continu à une échelle mésoscopique. Dans ce cas, l'impulsion en ces coordonnées varie non seulement du fait des forces qui s'exercent sur la particule de fluide mais aussi *via* l'advection⁴³ de la quantité de mouvement. L'équation se formule alors,

$$\rho_0 (\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) = \Sigma_i \mathbf{F}_i, \quad (1.4)$$

où $\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}$ est le terme d'advection et $\Sigma_i \mathbf{F}_i$ la résultante des forces volumiques extérieures s'exerçant sur la particule de fluide.

Pour pouvoir détailler la somme des forces volumiques s'exerçant sur la particule de fluide, on est contraint d'utiliser des modèles. Dans le cas choisi pour exemple, la modélisation peut n'inclure que trois contributions : la résultante des forces de pression, le poids et la résultante des forces visqueuses. L'équation devient dans le cadre de l'approximation de Boussinesq (la viscosité, constante, étant celle d'un [fluide newtonien](#)) :

42. Ingrédient indispensable à la convection de Rayleigh-Bénard.

43. C'est à dire le transport par mouvement convectif.

$$\rho_0(\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) = -\nabla P + \nu \rho_0 \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{g} \rho_0 (1 - \alpha(T - T_0)). \quad (1.5)$$

Si l'on considère maintenant l'écart à un état de référence statique de température T_0 , masse volumique ρ_0 et pression définie par l'équation fondamentale de l'hydrostatique P_0 , on peut simplifier l'équation 1.5 en

$$\rho_0(\partial_t \mathbf{v} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}) = -\nabla(P - P_0) + \nu \rho_0 \nabla^2 \mathbf{v} - \mathbf{g} \alpha \rho_0 (T - T_0). \quad (1.6)$$

Une fois détaillées les relations de conservations, on pourrait croire le problème correctement et définitivement posé. Il manque en fait une part importante de contenu physique à cette description. On l'a vu, les relations de conservation constituent une description extrêmement générale du système. La variété des résultats obtenus provient également de deux ingrédients supplémentaires, les conditions aux limites et les conditions initiales. Si l'on se ramène à un exemple plus simple encore, un corps de position \mathbf{r} , soumis à la seule pesanteur uniforme peut se décrire *via* le seul principe fondamental de la dynamique : $\partial_t \mathbf{r} = \mathbf{g}$. Ce cadre suffit à décrire à la fois la trajectoire d'un boulet au sortir d'un canon et celle d'un parachutiste durant sa phase de chute libre. La différence entre ces deux trajectoires, on l'espère dissemblables, ne repose que sur les conditions aux limites et initiales associées à l'équation de conservation.

Ces conditions aux limites portent sur des valeurs imposées aux inconnues du problème, pour des points particuliers de l'espace des phases. Il est d'usage d'imposer ou bien la valeur de l'inconnue (on parle de condition de Dirichlet), ou bien d'imposer une valeur à sa dérivée (condition de Neumann). On constatera néanmoins, au chapitre 2, que des conditions aux limites moins communes peuvent être employées afin de modéliser des phénomènes physiques particuliers.

Dans le cas du parachutiste, on imposera initialement à ce dernier une vitesse purement horizontale ($\partial_t \mathbf{r}(t=0) \cdot \mathbf{g} = 0$) et une altitude donnée $h = \frac{\mathbf{r}(t=0) \cdot \mathbf{g}}{g}$. La même démarche doit être appliquée aux équations de conservation sus-mentionnées. On imposera, par exemple, dans l'équation 1.3 que la température soit constamment fixée à une valeur donnée à chacune des interfaces ($\forall t, T(0) = \Delta T, T(L) = 0$) et que le système soit initialement statique soumis à un champ de température diffusif (obtenu par résolution de l'équation de la chaleur).

Les conditions aux limites étant définies, les équations 1.2, 1.3 et 1.6 peuvent dès lors être résolues en chaque point du système. Cette démarche permet théoriquement de déterminer complètement l'évolution temporelle et le comportement du système d'intérêt. En pratique, la résolution analytique de ce système d'équation est impossible sans recourir à certaines approximations ou sans se placer dans des conditions particulières (par exemple imposer la stationnarité du fluide). On utilise donc des outils numériques

pour résoudre de façon approchée ces équations avec une résolution finie en temps et espace. Concrètement, nous obtenons pour différents pas de temps des cartographies des champs qui décrivent l’océan de magma (sa température, sa composition...) pour différents points du volume qu’il occupe⁴⁴.

Au cours de ce travail nous avons principalement fait usage du code XSHELLS, modifié à la marge pour tenir compte des aspects particuliers du système qui nous intéressait. Ce code (disponible librement sur <https://bitbucket.org/nschaeff/xshells>) est écrit pour simuler le comportement de coquilles sphériques de fluide incompressible en rotation (voir par exemple Kaplan et al. (2017) ou Guervilly et al. (2019)). Il inclut aussi, à volonté, les équations d’inductions couplées propres à la magnétohydrodynamique ainsi que des champs de température ou de composition dans le cadre de l’approximation de Boussinesq. Plus de détails sur le fonctionnement, l’installation ou l’utilisation du code sont donnés dans sa documentation et son manuel (<https://nschaeff.bitbucket.io/xshells/manual.html>).

1.2.4 L’adimensionnement du problème, une démarche préalable indispensable

Prenons un instant le temps de considérer les paramètres intervenant dans les équations de conservation sus-mentionnées. Certaines grandeurs sont des inconnues à déterminer ($v, T...$) d’autres sont des grandeurs d’entrée imposées ($\kappa, \nu...$). Un des objectifs usuel face à ce type de problème physique est de déterminer quelles grandeurs de sortie un système est susceptible de produire en fonction des grandeurs d’entrée qui lui sont fournies. Ou bien, de déterminer *l’évolution* des sorties lorsque les entrées varient. Dans cette optique, il serait tentant de faire varier successivement les différentes valeurs d’entrée puis d’observer le résultat obtenu. On s’en doute, dès que le système est un tant soit peu complexe cette méthode devient vite inapplicable.

Qui plus est, on peut montrer qu’elle est inutile. En faisant varier « à l’aveugle » ces différents paramètres on prend le risque de distinguer des configurations physiquement similaires. La méthode classique consiste plutôt à adimensionner le problème de sorte à faire apparaître un plus petit nombre de paramètres, sans dimension, dont dépend fondamentalement le système⁴⁵.

Il est donc possible de simplifier le problème qui était le nôtre au départ. Les équations 1.2, 1.3 et 1.6, une fois adimensionnées font apparaître les nouveaux paramètres et inconnues du problème. En utilisant, par exemple ΔT comme unité de température,

44. C’est à dire une coquille sphérique peu ou prou similaire dans sa forme à celle occupée par le manteau actuel.

45. Le lecteur curieux, intéressé par l’analyse dimensionnelle et les lois d’échelle pourra par exemple, outre les livres de référence se pencher sur quelques applications décrites dans Séon (2018)

L comme unité de longueur, L^2/ν comme unité de temps et $L^3/(\nu^2\rho_0)$ comme unité de pression, on peut réécrire les équations de la façon suivante,

$$\frac{\partial\Theta}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\Theta = \frac{1}{Pr_T} \nabla^2\Theta, \quad (1.7)$$

$$\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla\mathbf{u} \right) + \nabla\Pi = \nabla^2\mathbf{u} + Ra_T\Theta\mathbf{g}/g, \quad (1.8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1.9)$$

avec \mathbf{u} , Θ , et Π la vitesse, la température⁴⁶ et la pression adimensionnées. Apparaissent alors les nombres sans dimensions caractéristiques du problème, au nombre de deux, le nombre de Rayleigh $Ra_T = \frac{\Delta T L^3 \alpha g}{\nu^2}$ déjà mentionné section 1.2.1 et le nombre de Prandtl qui n'est autre que le rapport des diffusivités de température et de quantité de mouvement $Pr_T = \nu/\kappa$.

Cette reformulation est en soit un enseignement, on apprend par exemple qu'il est inutile de faire varier indépendamment ΔT , L , α , et g puisque tous n'interviennent que dans un seul nombre sans dimension. En pratique, un système où l'on multiplierait par deux la longueur L mais diviserait par 8 l'écart de température ΔT ne différerait pas dans son comportement du système de référence (il se serait agi d'une étude redondante).

L'étude du système ainsi optimisée, peut donc se conduire en faisant varier le nombre nécessaire et suffisant de paramètres sans dimension et en observant l'évolution des réponses⁴⁷, obtenues en résolvant numériquement les équations fondamentales gouvernant son comportement physique. Déterminer les lois qui gouvernent ces relations « entrée-sortie », revient à établir des lois d'échelle pour le système.

1.2.5 Bilan

Pourquoi s'intéresser à l'océan de magma terrestre et comment procéder ? Voilà quelle était notre problématique au début de cette seconde partie. Comme on l'a d'abord exposé, le devenir de cet objet bien particulier est de première importance pour comprendre l'histoire de notre planète et la genèse des mécanismes qui, comme la tectonique des plaques, l'animent aujourd'hui. Jusqu'à présent, les études nombreuses qui se sont penchées sur la modélisation de l'océan de magma terrestre ont pris le parti de le simplifier en le décrivant animé par un état convectif vigoureux. Ces modèles restent, pour

46. Redéfinie à une constante T_0 près.

47. Il peut-être judicieux de considérer des valeurs de sorties elles aussi adimensionnées, dans notre exemple on considérera volontiers le nombre de Reynolds de l'écoulement généré $Re = \frac{UL}{\nu}$ où U est la vitesse typique de l'écoulement et le nombre de Nusselt Nu qui peut se définir comme le rapport du flux mesuré sur le flux transporté par seule diffusion thermique (on estime ainsi la plus value de la convection au transfert thermique).

la plupart assez simples et s'appuient sur des lois d'échelles quelquefois d'application discutable.

Nous voyons, d'une part, des raisons de nuancer le postulat classique d'un mélange efficace, du fait de la cristallisation partielle se produisant à la base de l'océan. D'autre part, nous souhaitons obtenir de nouvelles mises à l'échelle de l'effet des paramètres sans dimension d'entrée sur la dynamique globale et locale du système, peu décrite jusqu'à présent. C'est pourquoi nous avons opté pour une approche hydrodynamique assistée de l'outil numérique. Pour cela, nous nous basons sur un petit nombre d'équations fondamentales décrivant le système. Celles-ci sont adimensionnées et résolues numériquement. En pratiquant l'exploration de l'espace des paramètres (c'est à dire faire varier les nombres sans dimension caractéristiques de l'océan de magma) nous déterminons le comportement du système associé.

Dans la suite de notre contribution, nous proposons deux applications de cette méthode générale et en détaillons à chaque fois les modalités d'application. Ces deux travaux sont présentés sous la forme d'articles de revues scientifiques tels qu'ils ont été (ou doivent être) proposés aux journaux. Le premier article ([Clarté et al., 2021](#)) nommé *Influence of Robin boundary condition on thermal rotating convection* traite de l'effet d'une condition aux limites particulière sur la convection dans un océan de magma en rotation (lui est adjoint l'*erratum* le concernant qui sera publié sous peu). Cette condition, dite de Robin, peut modéliser un équilibre radiatif entre l'océan et une atmosphère. Le second article, *Thermo-solutal convection in magma oceans*, non encore soumis, traite plus précisément des régimes de transport de masse et de chaleur dans un océan de magma quasi-statique cristallisant de la base vers le sommet.



Influence of Robin Boundary Condition on Thermal Rotating Convection

L'Hydrodynamique n'était apparemment pas un intérêt majeur de Robin [...] En dépit du fait que Robin était de toute évidence bien inséré dans l'establishment parisien de son époque, nous avons été incapables d'obtenir sa rubrique nécrologique pas plus qu'une photographie ou un portrait. [Traduction libre]

Gustafson, K. & Abe, T. in Gustave Robin (1855-1897), The Mathematical Intelligencer 20, 1998

2.1	Résumé	26
2.2	Abstract	26
2.3	Erratum	27
2.4	Introduction	27
2.5	Methods	30
2.5.1	Physical System	30
2.5.2	Numerical Tools	33
2.6	Linear Stability Analysis	35
2.6.1	Differences between FF and FT cases with respect to Ekman number	35
2.6.2	Transition from FF to FT owing to Robin boundary condition	39
2.6.3	Possible dependence on the Prandtl number	42
2.7	Non Linear Simulations	44
2.7.1	Behaviour of purely FT or FF setups	46
2.7.2	FF to FT transition	57
2.8	Discussion	63

2.1 Résumé

La convection thermique en géométrie sphérique est d'un usage très général dans la modélisation des structures planétaires ou stellaires. Le choix des conditions aux limites thermiques de ces modèles n'est pas toujours évident.

Pour comprendre ce qu'implique un tel choix, nous nous sommes intéressés aux effets de la condition limite sur la convection thermique dans une coquille en rotation. Cet intérêt s'est traduit par une étude linéaire¹ du système, suivie d'une seconde, non-linéaire² cette fois.

Pour cela, nous avons imposé une condition limite de type Robin au sommet du système. Celle-ci implique de lier linéairement, à une interface donnée, la valeur d'un champ et de sa dérivée à l'aide d'un facteur de proportionnalité, appelé nombre de Biot dans un contexte adimensionné. Cette condition, hybride d'un flux et d'une température fixée, peut évoluer continument de l'un à l'autre de ces cas classiques, en faisant varier le nombre de Biot entre 0 et une valeur infiniment grande.

Les résultats de notre étude ont montré que cette nouvelle condition limite n'exerçait une influence notable que dans des cas où la rotation de la coquille était négligeable par rapport à la dynamique du système. La seule exception à cette constatation reste les structures d'écoulement qui, quant à elles, conservent la trace de la condition aux limites employée.

Dans tous les cas, nous avons pu montrer que lorsque le nombre de Biot différait d'une gamme assez étroite de valeur (entre 0,03 et 30), la condition aux limites de type Robin pouvait être remplacée par l'une des conditions plus usuelles (fixant le flux ou la température).

2.2 Abstract

Convection in a spherical shell is widely used to model fluid layers of planets and stars. The choice of thermal boundary conditions in such models is not always straightforward.

To understand the implications of this choice, we report on the effects of the thermal boundary condition on thermal convection, in terms of instability onset, fully developed transport properties and flow structure.

We impose a Robin boundary condition, enforcing linear coupling between the temperature anomaly and its radial derivative, with the Biot number Bi as proportionality factor in non-dimensional form. Varying Bi allows us to transition from fixed temperature for $Bi = +\infty$, to imposed heat flux for $Bi = 0$.

1. Correspondant à une convection naissante, s'écartant insensiblement de l'état statique de référence.

2. S'intéressant au contraire à la convection pleinement développée.

We find that the onset of convection is only affected by Bi in the non-rotating case. Far from onset, considering an effective Rayleigh number and a generalized Nusselt number, we show that the Nusselt and Péclet numbers follow standard universal scaling laws, independent of Bi in all cases considered. However, for the non-rotating limit, the large-scale flow structure keeps the signature of the boundary condition with more vigorous large scales for smaller Bi , even though the global heat transfer and kinetic energy are the same. For all practical purposes, the Robin condition can be safely replaced by a fixed flux when $Bi \lesssim 0.03$ and by a fixed temperature for $Bi \gtrsim 30$. For turbulent rapidly rotating convection, the thermal boundary condition does not seem to have any impact, once the effective numbers are considered and a reference temperature profile has been chosen.

2.3 Erratum

In the Linear Stability Analysis section, the thermal reference field is not T_{ref} as mentioned in eq. 2.4 but is equal to $T_{ref} = \Delta T \frac{r_i}{r_e - r_i} \left(\frac{r_e^2}{r^2} - 1 \right) + T_0$. This error does not concern the Non-Linear part of this work.

In the Non-Linear part, all the Rayleigh numbers are overestimated of a factor 2.

2.4 Introduction

Thermal convection is the main heat transfer mechanism in the interiors of planets and many stars (Phillips, 2013) and is responsible for most of their dynamics. Rayleigh-Bénard convection, which is the flow developing in a plane layer subject to a potentially destabilising temperature difference, is commonly used as model for the dynamics of such astrophysical objects (Busse, 1989; Busse and Carrigan, 1976). It is also one of the most studied example of pattern-forming system (Cross and Hohenberg, 1993).

A horizontal layer of fluid heated from below and cooled from above can be unstably stratified – assuming, as is most usually the case, that the thermal expansion coefficient is positive. Indeed, in that case, the upper cold fluid is denser than the hot one at the bottom. It has been demonstrated (Chandrasekhar, 1961; Rayleigh, 1916) that for a large enough temperature gradient, the fluid adopts a convective state in which heat transport is partially realised by fluid motion.

Convection between two isothermal planes (i.e. with fixed temperature boundary condition, FT) modelled with the Boussinesq approximation constitutes the classical Rayleigh-Bénard thermal convection setup. Lord Rayleigh offered a model for such a phenomenon in 1916 Rayleigh as an explanation for the experiments of Bénard (1900). Other setups of the Rayleigh-Bénard system have been explored, for example by choosing

a fixed flux boundary condition (FF), which is closer to usual experimental conditions (Busse and Riahi, 1980). However, for geo- and astrophysical applications it can be difficult to choose between those two mathematical usual conditions: fixed field or fixed derivative, also known as Dirichlet and Neumann boundary conditions, respectively. Indeed, in some physical situations, the boundary conditions is more accurately described by a thermal flux proportional to the temperature itself, leading to

$$\beta T + \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (2.1)$$

with β a proportionality factor homogeneous to an inverse length-scale. Using a reference length-scale L , one can construct the non-dimensional Biot number

$$Bi = \beta L. \quad (2.2)$$

The boundary condition (2.1) is intermediate between the Neumann (FF) and Dirichlet (FT) conditions which are obtained for respectively $Bi = 0$ and $Bi \rightarrow \infty$, and is called the Robin boundary condition.

Robin boundary conditions appear naturally in the presence of weakly conductive boundaries (Busse and Riahi, 1980) or conductive-radiative empirical Newton's law (O'Sullivan, 1990). Note that linearised black body radiative equilibrium are often interpreted as Newton's law (for example in meteorological models, Savijärvi (1994)). Thermal contact between two layers of distinct length and thermal conductivity can also be modelled by a Robin boundary condition as done by Guillou and Jaupart (1995).

Modelling the radiative equilibrium between a liquid shell and an atmosphere is our initial motivation. More precisely, we are interested in understanding the behaviour of surface global magma oceans crystallizing from the bottom upward (Labrosse et al., 2015). Following the current scientific consensus, Earth may have undergone giant impacts during its formation (Solomatov, 2007). Such impacts were able to melt a large part of the nowadays solid mantle, producing what is called a magma ocean. This physical object is not known with extreme precision but was characterised, at its formation, by large depth ($\sim 1 \times 10^6$ m), low viscosity (~ 0.1 Pa s) and rapid flows (~ 10 m s⁻¹) (Solomatov, 2007). Modelling the cooling and the crystallization of this terrestrial global magma ocean is of large interest in order to get information about the early evolution of the Earth and other terrestrial planets. In that case, the radiative equilibrium between an atmosphere and the surface of the magma ocean may be modelled using a Robin boundary condition. Indeed, approximating this radiative equilibrium by an interaction between two black bodies, leads to set the heat flux at the upper boundary of the magma ocean to the difference between the radiative flux leaving the surface and the

one received from the atmosphere (assumed isothermal). Using Stefan-Boltzmann's law (Boltzmann, 1884) (which can be derived from Planck's law) and linearizing the flux variation with temperature leads to the Robin boundary condition.

Up to now, the influence of Robin boundary conditions has received scant attention. Linear stability analyses were conducted in a Cartesian system without rotation by Sparrow et al. (Sparrow et al., 1964), who determined that increasing the Biot number enables transitioning monotonously from FF to FT cases (in terms of critical Rayleigh numbers). This transition was found to occur in the range $Bi = 0.1$ to 100.

Several studies consider only the extremal cases of FT and FF, the latter being a model for the poorly conductive wall used in some experiments. In 2D Cartesian geometry, Chapman and Proctor (1980) showed, thanks to stability analysis calculations, the generation of much longer convective cells with symmetric FF, compared to the ones observed in symmetric FT configurations. A similar 3D setup was also considered by Busse and Riahi (1980) who showed that square-pattern convection planforms were preferred to two-dimensional rolls produced in the case of FT boundary conditions. Later, Ishiwatari et al. (1994) explored, by numerical integration in a Cartesian two-dimensional system, the effects of the different combinations of boundary conditions and internal heating on thermal convection. They observed similar effects on the wavelength of convection cells of the FF boundary conditions (independently of the presence of internal heating) as previously mentioned by Chapman and Proctor. All these Cartesian geometry studies show that FF produce convection patterns with larger wavelength than FT.

In geophysical fluid dynamics, planetary rotation is often significant and rotational effects (Coriolis force) must be included in the physical model. In fact, rotation is able to impact dramatically Rayleigh-Bénard convection, altering convection patterns (elongated in Taylor columns) and increasing the intensity of the thermal gradient needed to start convection (Chandrasekhar, 1961).

Adding the influence of global rotation, Takehiro et al. (2002) studied horizontal layers of fluid with lateral boundaries and rotation axis inclined. They showed that, for a vertical axis of rotation, the behaviour of FF convection at the threshold becomes similar to the FT case when rotation is increased. In the case of a horizontal rotation axis, the two setups remain different, the FF one being characterised by a zero critical wavenumber.

More recently, Falsaperla et al. (2010) conducted studies on a Cartesian system with Robin boundary conditions influenced by weak rotation and also observed a monotonous transition from FF to FT when varying the Biot number.

Influence of Robin boundary conditions has been mainly studied in Cartesian geometry. On the other hand, both rotating and non-rotating convection in spherical shells

have been widely studied for its geophysical and planetary relevance but mostly using traditional boundary conditions (FF or FT).

The crystallization of the terrestrial magma ocean is a complex question which cannot be reduced to the influence of Robin boundary condition. Nevertheless, we have chosen to first focus on one of the fundamental aspect of our system of interest. The goal of this work is to study Rayleigh-Bénard convection in a spherical shell subjected to a Robin boundary condition at its upper boundary, with and without rotation. We first determine numerically the characteristics of the onset of convection with a linear stability analysis, and then we explore the non-linear properties of the same system in terms of convection efficiency. In all the following we focus first on the two end-member situations, the FF and FT configurations, before studying intermediate cases by varying the value of Bi . The robustness of these observations is tested by varying the value of the Prandtl number.

2.5 Methods

2.5.1 Physical System

We consider a spherical shell of aspect ratio $\eta = r_i/r_e = 2/3$ (all the parameters and fields used are listed in the appendix [A.2.1](#)), with r_e and r_i the external and internal radii, respectively, subjected to rotation of vector $\Omega\mathbf{e}_z$ and filled with a Newtonian fluid of constant kinematic viscosity ν , thermal conductivity k , reference density ρ_0 , specific heat capacity c_p and thermal expansivity α .

The system is subjected to a radial gravity field $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_r$, g being uniform. Note that this uniform value is relevant for thin shells (if the shell is thin enough, any variation of gravity inside can be neglected) but also generally speaking for Earth mantle studies. Indeed, due to the density distribution within the Earth, gravity at the bottom of the mantle is about 10.7 m.s^{-2} with variations below 10% up to the surface ([Dziewonski and Anderson, 1981](#)). Since our system of interest is the liquid equivalent of the current Earth mantle we have chosen to use a constant gravity. Nevertheless other mass and density distributions in other differentiated rocky bodies (Moon, Mars, Mercury ...) may lead to different gravity profile in their respective mantle. Consequently, other radial dependencies of the gravity field can be used in other contexts (e.g. $g \propto r$ for uniform density models, or $g \propto \frac{1}{r^2}$ for centrally condensed mass).

The physical behaviour of the system is basically monitored by three equations of conservation (conservation of momentum – the Navier-Stokes equation –, mass and energy) associated with boundary conditions. We assume the Boussinesq approximation, that is variations of density are neglected except in their contributions to the buoyancy

force in which the density varies as function of

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1 - \alpha(T' - T_0), \quad (2.3)$$

ρ being the density, while ρ_0 and T_0 are reference values of density and temperature and T' the temperature anomaly around T_0 .

The reference state is motionless (uniform zero velocity) and follows a radial conductive temperature profile T_{ref} between the two boundaries with given temperatures (FT)

$$T_{ref}(r) = \Delta T \frac{r_i}{r_e - r_i} \left(\frac{r_e}{r} - 1 \right) + T_0, \quad (2.4)$$

where ΔT is the total temperature difference of the reference profile across the shell. In the Boussinesq approximation, the value of T_0 plays no role and any value can be used such that the reference temperature profile satisfies the Robin boundary condition. In the following, temperatures are defined with respect to this reference.

The problem is rendered dimensionless using r_e as length scale, $\frac{\nu}{r_e}$ as velocity scale, ΔT as temperature scale and $\rho_0 \nu \Omega$ as pressure scale. The system is characterised by the following dimensionless numbers: the Biot number Bi , the Prandtl number $Pr = \nu \rho_0 c_p / k$, the Rayleigh number $Ra = \frac{g \alpha \Delta T r_e^3 \rho_0 c_p}{\nu k}$ and the Ekman number $Ek = \frac{\nu}{\Omega r_e^2}$.

The dimensionless conservation equations are then

$$\frac{\partial \Theta}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\Theta + \frac{T_{ref}}{\Delta T} \right) = \frac{1}{Pr} \nabla^2 \Theta \quad (2.5)$$

for the energy,

$$Ek \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) + 2\mathbf{e}_z \times \mathbf{u} + \nabla \Pi = Ek \nabla^2 \mathbf{u} + (Ra Ek / Pr) \Theta \mathbf{e}_r, \quad (2.6)$$

for the momentum and

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2.7)$$

for the mass, with \mathbf{u} , Θ and Π the fluid velocity, the temperature anomaly and the reduced pressure, respectively.

Mechanical boundary conditions imposed on \mathbf{u} are non-penetrative ($u_r = 0$), stress-free (*i.e.* tangential stress is null, that is with $[\boldsymbol{\sigma}]$ the tensor of viscous stresses of the fluid, \mathbf{t} the tangential and \mathbf{n} normal vector to the interface) ($[\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{t} = 0$ at the top ($r = r_e$) and no-slip ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$) at the bottom ($r = r_i$)). For the thermal boundary conditions, we impose a fixed temperature at the bottom (FT, *i.e.* $\Theta(r_i) = 0$) and a Robin boundary condition at the top (*i.e.* $-\beta r_e \Theta(r_e) = \frac{\partial \Theta}{\partial r}(r_e)$).

These conditions can be relevant for modelling a fluid undergoing a phase change at its bottom interface and subject to a radiative equilibrium at the top surface. Indeed,

pressure at the bottom is set by the fixed depth of the interface, which imposes the value of the temperature thanks to the liquid-solid equilibrium. Concerning the top interface, radiative equilibrium between a layer of fluid, with surface temperature $T(r_e)$ and surface heat flux $-k\partial_r T(r_e)$, and an isothermal atmosphere at temperature T_a leads to an energy balance,

$$\sigma(T_a^4 - T^4(r_e)) = k\partial_r T(r_e), \quad (2.8)$$

where $\sigma \simeq 5.67 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-4}$ is the coefficient of the Stefan-Boltzmann law giving the amount of heat flux produced by a black-body at a given temperature.

We further introduce the reference depth-dependent temperature T_{ref} such that its value at the surface is set by

$$\sigma(T_a^4 - T_{ref}^4(r_e)) = k\frac{\partial T_{ref}}{\partial r}(r_e), \quad (2.9)$$

and the depth-dependent temperature anomaly $\theta = T - T_{ref}$.

Assuming $\theta \ll T_0$, equation (2.8) can be expanded to give

$$-4\sigma T_{ref}^3(r_e)\theta = k\partial_r\theta(r_e). \quad (2.10)$$

Generally speaking, a Robin boundary condition applied on a field Y and its spatial derivative with respect to a space variable l at a boundary r_0 can be expressed as $BiY + \partial_l Y = 0$. With that definition $Bi = 0$ imposes a FF boundary condition (zero spatial derivative i.e. flux) while $Bi = +\infty$ imposes a FT boundary condition (temperature anomaly is zero at the interface).

The Biot number in the usual thermal context is written as $Bi = hL/k$, with h the convective heat transfer coefficient having the dimension of a $\text{W m}^{-2} \text{K}^{-1}$, k the thermal conductivity of the affected body and L its typical length scale. Bi can be estimated by different means depending on the type of heat transfer modelled. For material pieces in contact with a conductive-convective atmosphere, the thermal exchanges can be modelled by a thermal Newton's law with h a coefficient of the order of $10 \text{ W m}^{-2} \text{K}^{-1}$ (experimentally determined). As an illustration a meter-size piece of copper in contact with the atmosphere is characterised by $Bi \simeq 0.1$. Conversely, for a same size polystyrene piece, $Bi \simeq 1000$. Last example, a 5 cm glass of water cooled by contact with air in usual conditions of pressure and temperature is characterised by $Bi \simeq 5$. All these estimations can be computed from generic or specific handbooks (e.g. Kreith (2000)).

In the case described in eq. (2.10), $h = 4\sigma T_a^3$ so that

$$Bi = \frac{4\sigma T_a^3 L}{k}. \quad (2.11)$$

Table 2.1 – Dimensionless numbers characterizing a terrestrial global magma ocean, maximal and minimal values are given, computed from Solomatov (2007), Maas and Hansen (2015) and Snyder et al. (1994) (for typical values of the thermal conductivity). The extremal values for each parameter cover the full range between a fully liquid to a quasi solid (because of a high proportion of crystals in suspension) magma ocean. Finally, the range of parameters used in this study is precised.

Name (symbol)	Magma Ocean	Range in this paper
Ekman number (Ek)	3×10^{-13} to 3×10^{-9}	10^{-4} to ∞
Prandtl number (Pr)	5×10^1 to 4×10^8	0.03 to 30
Rayleigh number (Ra)	2×10^{18} to 9×10^{25}	10^4 to 10^9
Biot number (Bi)	3×10^5 to 3×10^{11}	0 to ∞

Here we choose to use the thickness of the shell $L = r_e - r_i$ as the typical length scale to compute and express the Biot number.

Even if our modelling remains unspecific to magma oceans (we basically model a spherical rotating shell of fluid) we should mention the estimated values of the dimensionless numbers characterizing a terrestrial magma ocean modelled by our method. Parameters given are those of a terrestrial fully liquid magma ocean.

Values are computed in both cases and reported in Tab. 2.1.

These parameters constitute extreme conditions for numerical simulations (for example in terms of Ek) which cannot be considered with current computational resources. Since we focus here on a specific aspect of such a system (modelled by a Robin boundary condition) we restricted our study to a more convenient parameter space (see Tab. 2.1).

In addition to radiative equilibrium, Robin boundary condition can also model thermal contact between two layers of distinct conductivity (λ_1 and λ_2) and thickness (L_1 and L_2). In that case, following Guillou and Jaupart (1995), a Robin boundary condition can be written at the frontier. It links linearly dimensionless temperature and flux by a factor $Bi = \frac{\lambda_2 L_1}{L_2 \lambda_1}$. Such a model could be used for internal oceans of icy satellites of Jupiter (Sotin and Tobie, 2004) or Saturn (Collins and Goodman, 2007) with a layer of liquid water lies below an ice crust. In that case, the ratio of the conductivities would be typically around 3 (Kreith (2000)). This means that a thick ice layer (typically 300 km) above a thin ocean (typically 10km) produces a small $Bi \simeq 0.1$ while a deep ocean below a thin icy crust (reverse thickness ratio) produces a large $Bi \simeq 10$ configuration.

2.5.2 Numerical Tools

We use the eigenvalue solver SINGE (freely available at <https://bitbucket.org/vidalje/singe>; Monville et al., 2019; Vidal and Schaeffer, 2015) in order to determine the critical Rayleigh number of the system, Ra_C , and, in terms of spherical harmonics, the order of azimuthal symmetry m of the most unstable mode at the onset of convection

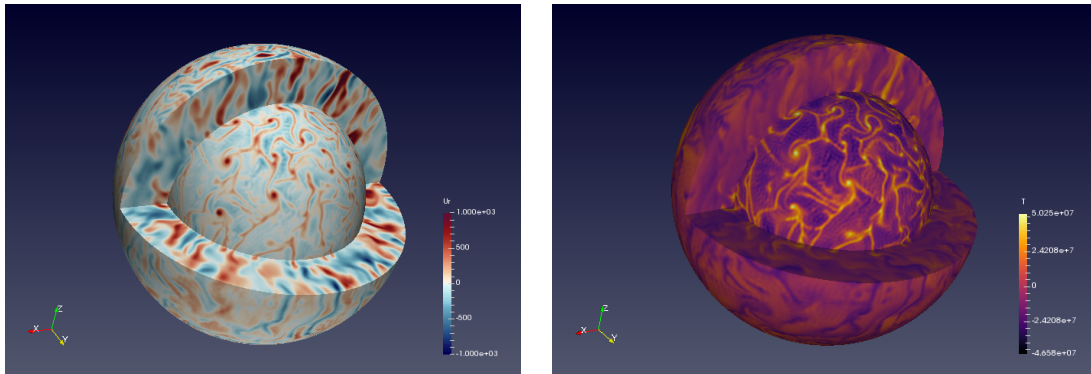


Figure 2.1 – 3D visualization of radial velocity (left) and temperature anomaly (right) of a nonlinear computation. Simulation run for $Ra = 9 \times 10^6$, $Pr = 3$, $Ek = 10^{-4}$ and $Bi = 0$. Internal and external surfaces have been defined slightly outside boundary layers.

in our system.

SINGE is a Python code conceived to determine the eigenvalues-eigenmodes of incompressible and stratified fluids in spherical cavities. SINGE uses the SLEPc solver (Vidal and Schaeffer, 2015), finite difference (2^{nd} order scheme with N_r points) in the radial direction and spherical harmonic decomposition, with degree l and azimuthal wave number m truncated at (l_{max}, m_{max}) . Equatorial symmetry or anti-symmetry is imposed.

The non-linear problem is solved by the XSHELLS code (freely available at <https://bitbucket.org/nschaeff/xshells>). This geodynamo code has been used to solve convection in spherical rotating shell (see for example Kaplan et al. (2017) or Guervilly et al. (2019)). XSHELLS solves the Navier-Stokes equation in spherical setup thanks to the toroidal-poloidal decomposition and a pseudo-spectral approach using the fast SHTns library (Schaeffer, 2013). Poloidal and toroidal scalars as well as temperature are expanded over spherical harmonics truncated in a similar way to SINGE. In the radial direction, XSHELLS uses a second order finite difference differentiation. Each simulation is run long enough to reach a statistically steady state. We then obtain a 3D-distribution of the anomalies of the main fields (temperature, velocity etc., see fig. 2.1 for example). We extract from these latter 2D maps of anomalies or global quantities at a given time or compute time-average data.

Both numerical codes have been modified for this study in order to take into account the Robin boundary conditions.

2.6 Linear Stability Analysis

2.6.1 Differences between FF and FT cases with respect to Ekman number

We determine the critical Rayleigh number and azimuthal wave number (when it is relevant) at the linear onset of convection for different rotation rates ($Ek = +\infty$ to 10^{-6}), in both FF and FT end-member cases. We checked that the symmetric modes (with respect to the equatorial plane) are always the preferred unstable modes at the linear onset of convection (i.e. their Ra_C is the smallest).

In fig. 2.2 we plot Ra_C as a function of Ek , for different values of Pr , in order to illustrate the existence of two regimes (expected from previous studies, e.g. [Gastine et al. \(2016\)](#)): in the first one ($Ek \rightarrow +\infty$) rotation does not affect Ra_C while this number increases when Ek decreases in the second regime. For small enough Ek , the expected power law $Ra_C \propto Ek^{-4/3}$ is observed ([Chandrasekhar, 1953](#)). Note that, although Ra_C is a relevant criterion to discriminate FF and FT setups at high values of the Ekman number, it is no longer the case when rotation impacts notably the critical Rayleigh number. The effect of the Prandtl number is contrasted: the general behaviour of Ra_C as a function of Ek is not affected by the value of Pr but its influence on the exact value of Ra_C depends on the Ekman number. For $Ek \geq 10^{-1}$, Pr has no visible effect since cases are differentiated only by their boundary conditions. This is in line with the classical behaviour of non-rotating Rayleigh-Bénard convection for which the onset of convection is known to be independent of the value of the Prandtl number (e.g. [Chandrasekhar, 1961](#)). On the other hand, for $Ek \leq 10^{-3}$, the $Pr = 0.3$ cases become distinct from the cases with larger values of Pr ($Pr = 3$ or 30).

Let us now turn to the azimuthal structure of the flow at the onset of convection. Fig. 2.3 shows the critical value of the azimuthal number m for the most unstable mode for both boundary conditions as a function of the Ekman number. We observe no difference between FF and FT configurations for high rotation rates: in the limit of small values of Ek , m scales as $Ek^{-1/3}$, as expected ([Busse, 1970](#)). For large values of Ek , the critical value of m tends toward a constant. In the case of $Bi = 0$, the transition to a constant value of m happens sharply at around $Ek = 2 \times 10^{-3}$. This particularity may be compared to the transition described by [Falsaperla et al. \(2010\)](#) at $Ek \simeq 10^{-2}$.

We should also mention that in the non-rotating case, $Ek = \infty$, the m number is not relevant. Indeed in a non rotating setup, the most unstable mode is degenerated in terms of m number. Nevertheless, in that case, the critical degree l can be determined and, with our chosen setup, is equal to 5 for a FF boundary condition and 6 for a FT one.

To observe more precisely the distinction between FF and FT cases, we plot in fig.

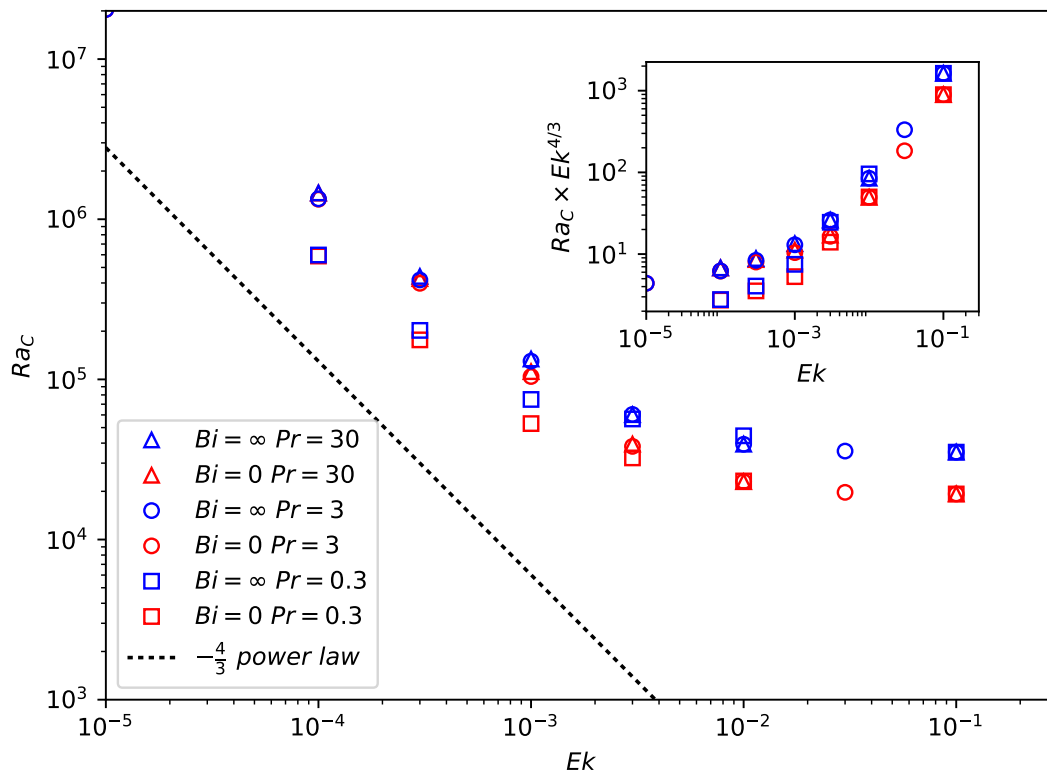


Figure 2.2 – Critical Rayleigh number Ra_C of FF and FT cases as a function of Ekman number Ek for Prandtl number values $Pr = 0.3, 3$ and 30 . For evanescent Ek Ra_C scales as $Ek^{-4/3}$ (represented by the dotted line). The insert is a compensated plot of the same data points.

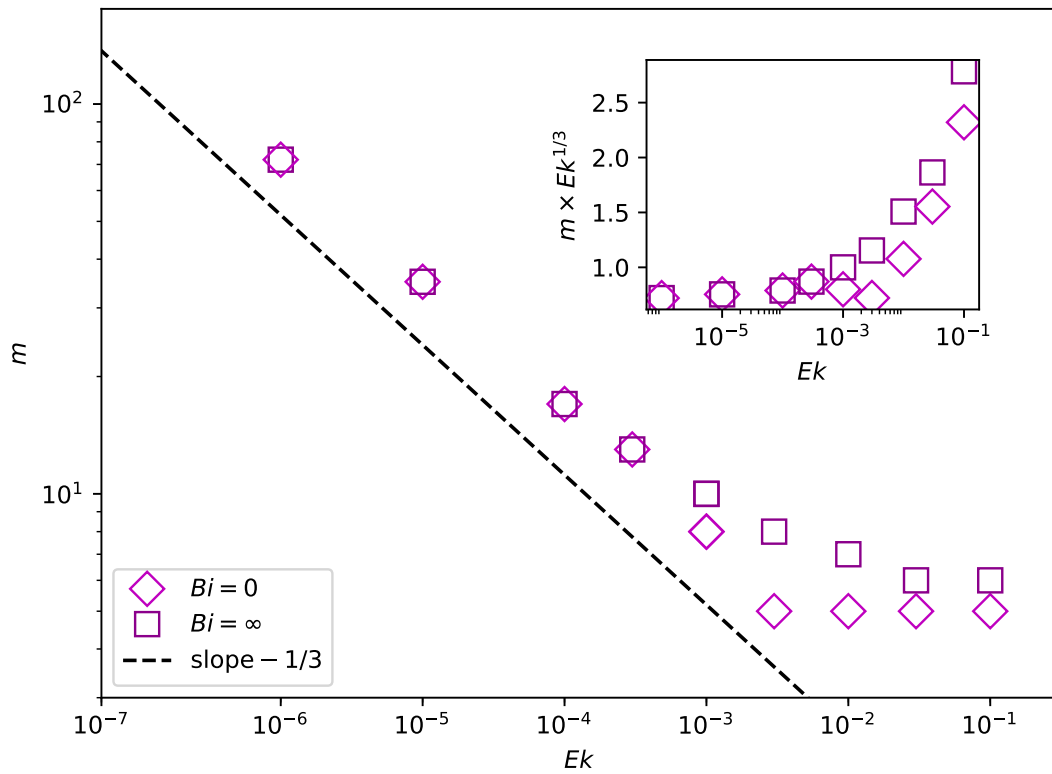


Figure 2.3 – Values of the critical azimuthal wave number m as a function of Ek for both FF ($Bi = 0$) and FT ($Bi = \infty$) cases. For small enough values of Ek , m scales as $Ek^{-1/3}$ (represented by the dashed line). Here, only $Pr = 3$ points are represented. The insert is a compensated plot of the same data points.

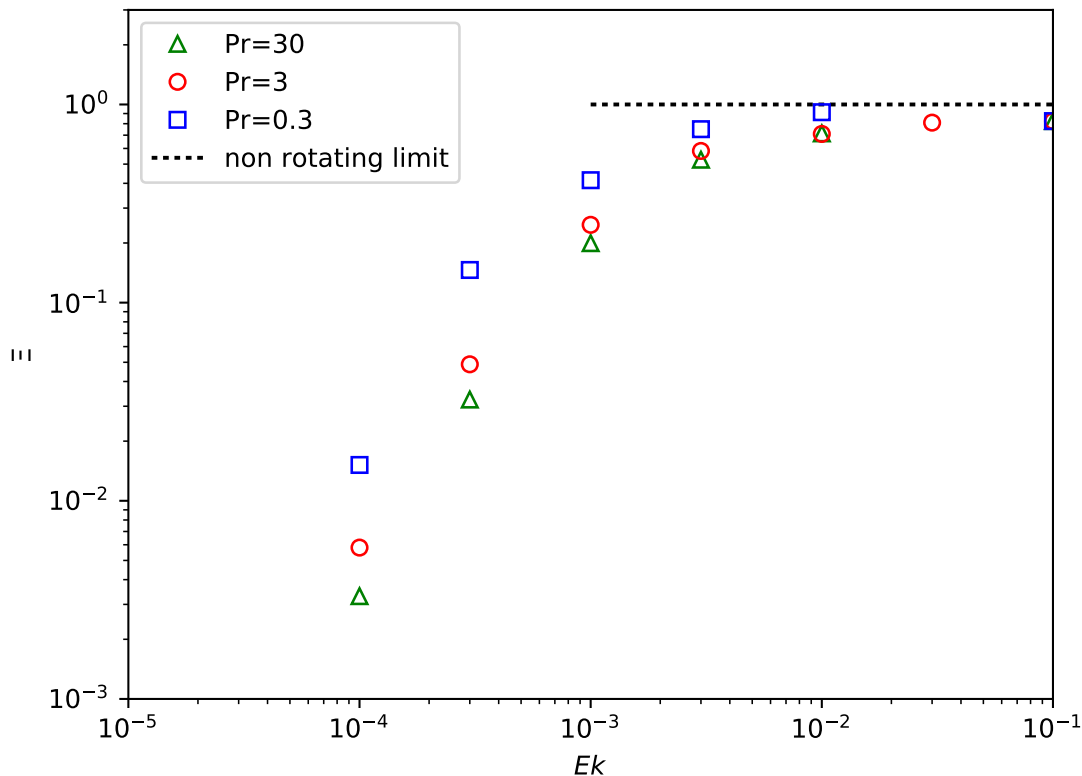


Figure 2.4 – Ξ i.e. difference of Ra_C between FF and FT cases for a given Ek normalised by the non rotating difference (cf eq. 2.12) as a function of Ek . Ξ decreases with the same general behaviour independently from Pr .

2.4

$$\Xi = \frac{Ra_C(Bi = \infty, Ek) - Ra_C(Bi = 0, Ek)}{Ra_C(Bi = \infty, Ek = \infty) - Ra_C(Bi = 0, Ek = \infty)}, \quad (2.12)$$

which quantifies the normalised difference between the FF and FT cases as a function of Ek . By definition, we have $\Xi \rightarrow 1$ when $Ek \rightarrow +\infty$.

For $Ek < 10^{-3}$, as shown on fig. 2.4, decreasing the Ekman number decreases the difference between FF and FT cases, independently from Pr . This growing similarity of $Ra_C(FF)$ and $Ra_C(FT)$ when rotational effects are increased is in good accordance with the conclusions of Takehiro et al. (2002). Indeed they show, in the case of top and bottom FF boundary conditions and for Cartesian models in which Ω is vertical, that when Ek goes to zero, $Ra_C(FF) \rightarrow Ra_C(FT)$. Consequently, we have chosen to limit our study to $Ek \geq 10^{-4}$.

Even though high similarities of Ra_C and azimuthal periodicity of the flow are observed at high rotation rates between the FF and FT cases, the structure of the solution, in particular its radial shape, depends strongly on the choice of boundary condition. In the FT case, the temperature is uniform at the boundary and lateral heterogeneity is restricted to the bulk of the domain whereas, in the FF case, temperature

is variable at the boundary. This is shown later, on figure 2.7.

After having considered the two extreme regimes (FF: $Bi \rightarrow 0$ and TF: $Bi \rightarrow +\infty$) we can now focus on the intermediate case in which the Biot number is arbitrary.

2.6.2 Transition from FF to FT owing to Robin boundary condition

We determine the critical Rayleigh number for different values of the Biot number with various Ekman numbers in the same range as formerly. Increasing Bi from 0 to $+\infty$ tunes the boundary condition from a fixed flux upper boundary condition to a fixed temperature one (FF to FT transition). We can reasonably expect that the amplitude of this transition is limited by the extremal cases described in section 2.6.1. Since the convective setup can evolve continuously from FF to FT configuration thanks to the Robin boundary condition, we expect (as the simplest hypothesis) significant influence of this condition on the onset only in the first regime (high Ekman numbers), in which a large Ra_C difference is observed.

In order to determine the evolution of the critical Rayleigh number with respect to the Biot number, we plot on fig. 2.5, for a given Ekman number, its normalised values,

$$\widetilde{Ra}_C = \frac{Ra_C(Bi)}{Ra_C(Bi = \infty)}. \quad (2.13)$$

A continuous and monotonous transition can be observed in terms of the critical Rayleigh number. Without rotation, the effect is the largest, with a minimum ratio of 0.5 ($Ra_C(FF) = Ra_C(FT)/2$). As expected from the previous section, the amplitude of the transition is reduced when the Ekman number is decreased. Finally, most of the transition occurs for $Bi \in [0.03, 30]$.

In order to further characterise the transition of the solution as a function of the Biot number, we define

$$\Gamma = \frac{Ra_C(Bi) - Ra_C(Bi = 0)}{Ra_C(Bi = \infty) - Ra_C(Bi = 0)} \quad (2.14)$$

which is plotted as function of Bi on fig. 2.6, for various values of the Ekman number. This quantity allows us to compare the behaviour of the transition regardless of its amplitude set uniformly to 1. It is worth noting that the transition shows a common behaviour for different combinations of mechanical boundary conditions (symmetric free-slip or no-slip boundary conditions) and rotation rates. The only noticeable difference from one configuration to the other is the location of the transition. Indeed, we are able to model every transition by

$$\gamma = \frac{Bi}{Bi_t + Bi}, \quad (2.15)$$

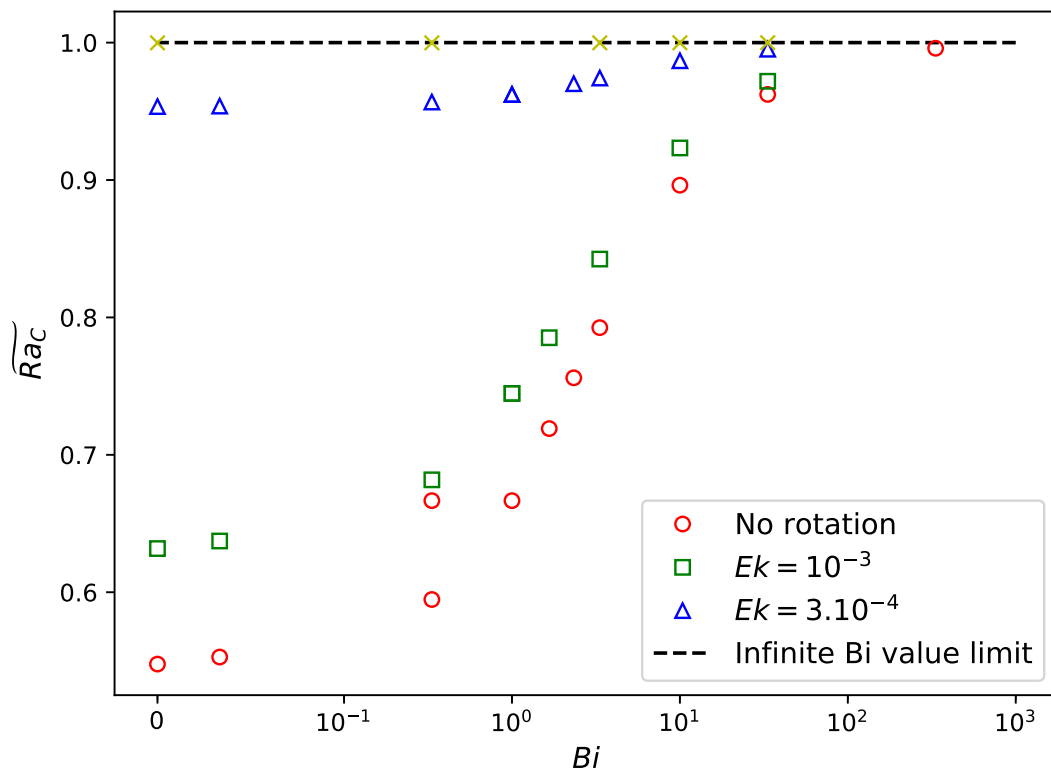


Figure 2.5 – \widetilde{Ra}_C (cf eq. 2.13) as a function of Bi for $Pr = 3$. The amplitude of the continuous transition from FF to FT is decreased when Ek is reduced. By definition, $\widetilde{Ra}_C \rightarrow 1$ when $Bi \rightarrow \infty$ (i.e. when the boundary condition goes to FT). The axis of abscissas uses a hybrid linear-logarithmic scale.

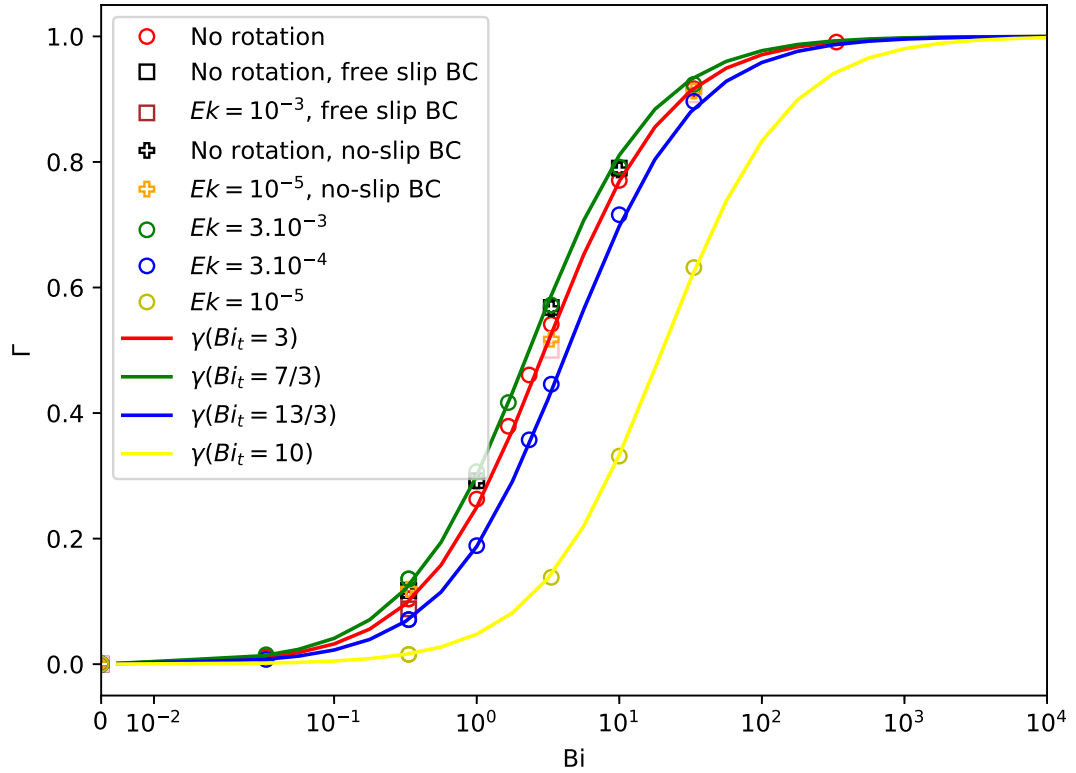


Figure 2.6 – $\Gamma = \frac{Ra_C(Bi) - Ra_C(Bi=0)}{Ra_C(Bi=\infty) - Ra_C(Bi=0)}$ as a function of Bi for various velocity boundary conditions at the top of the sphere and values of Ek , $Pr = 3$. It illustrates the transition of Ra_C from FF values ($\Gamma = 0$) to FT ($\Gamma = 1$) ones. If mechanical boundary condition is mentioned, this one is imposed at both boundaries, if not, the usual setup (free-slip at the top, no-slip at the bottom) is used, see 3.4.1. The axis of abscissas uses a hybrid linear-logarithmic scale.

where Bi_t is an unknown function of the Ekman number. This model, in which we estimated the suitable Bi_t , shows good agreement with data (fig. 2.6). We observe that, for moderate rotation rates ($Ek > 10^{-3}$), this threshold is almost constant with $Bi_t \approx 3$. This sets the intermediate regime roughly between $Bi = 0.3$ and $Bi = 30$. The evolution of the Bi_t parameter with the Ekman number is not monotonous: it first decreases with decreasing Ek then increases and becomes larger than its value for $Ek = \infty$ when $Ek < 10^{-3}$. Nevertheless, as mentioned previously in section 2.6.1, the amplitude of the transition –in term of Ra_C – becomes insignificant with such small values of the Ekman number.

We further discuss the evolution of the solution structure at the onset of convection as a function of the Biot number. Following the results obtained for the two end-member cases of FF and FT situations, discussed in section 2.6.1, we first study whether the azimuthal m number of the selected mode depends on the Biot and/or Ekman numbers. This enables us to build a schematic phase diagram of the flow structure at the onset, shown in fig. 2.7.

In the far left part (high Ek), solutions are weakly affected by rotation and can be described as FF like or FT like structures. When the Ekman number decreases, the solution becomes affected by rotation showing larger azimuthal number, i.e. a larger m value. Moreover intermediate lateral structures appear for intermediate Biot number, these cases show $m \in [m(Bi = 0), m(Bi \rightarrow +\infty)]$. Finally, when the Ekman number is very small, the azimuthal symmetry becomes independent of the Biot number. Nevertheless, FF and FT cases remain distinct since the radial extension is still a discriminating diagnostic. Indeed, FF configurations can be characterised by a smaller radial extension of the temperature perturbation compared to FT setups. Also, in the case of FF (and for $Bi \lesssim 30$), the temperature perturbation extends to the boundary whereas it is zero at the boundary for FT cases.

2.6.3 Possible dependence on the Prandtl number

We have shown in fig. 2.4, that the relative difference of Ra_C measured by the quantity Ξ , decreases when Ek decreases. This general behaviour is not substantially affected by the variation of Pr in the range $0.3 \leq Pr \leq 30$ that we investigated.

In order to discuss the robustness of our observations concerning the effect of Bi against variations of the Prandtl number, we studied the FF to FT transition in a non-rotating case for $Pr = 0.3$ and 30. A representation of the transition in terms of critical Rayleigh number is plotted in fig. 2.8. We can note that the transitional regime is almost independent from Pr . In particular, the range of Biot number over which the transition from FF to FT occurs is $0.3 \leq Bi \leq 30$.

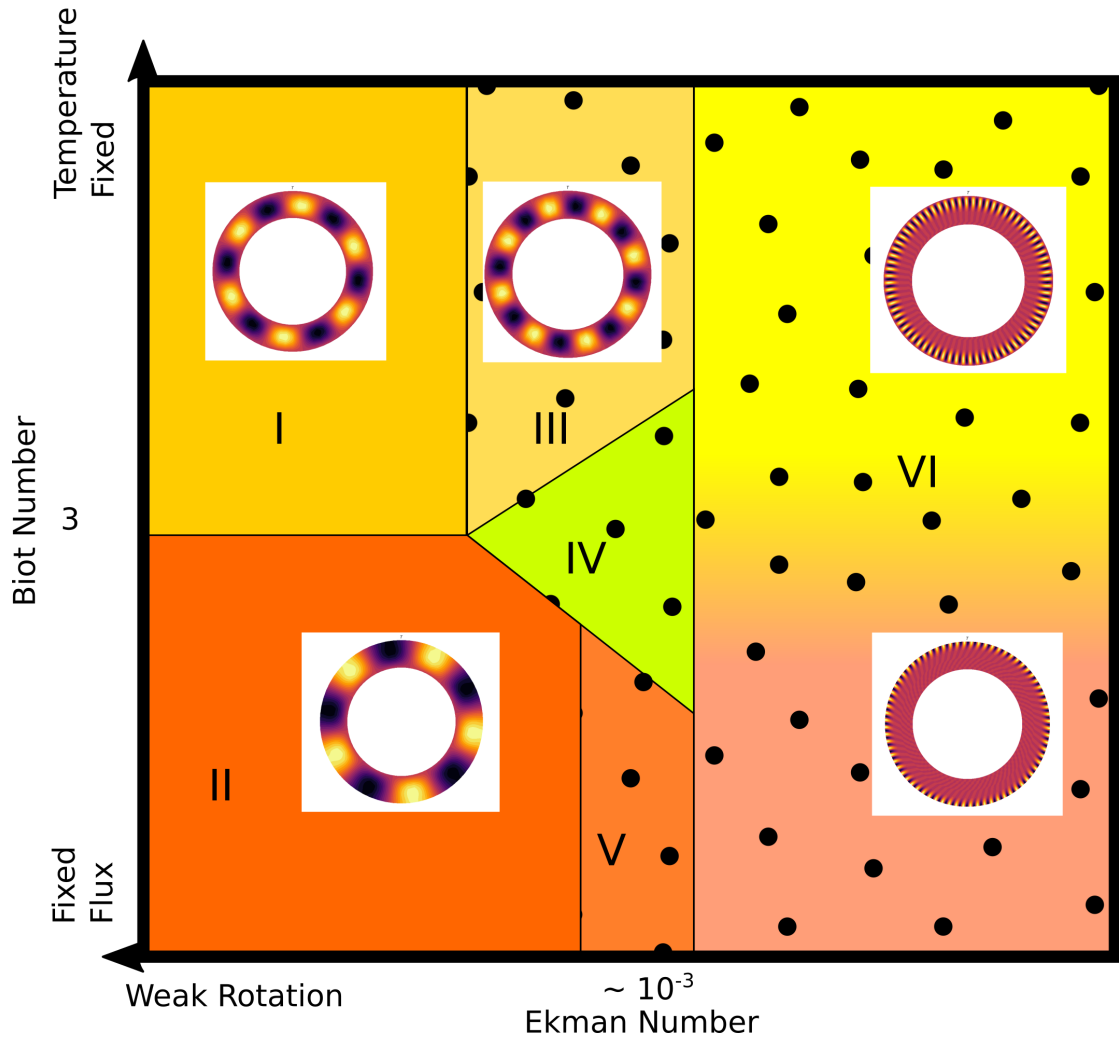


Figure 2.7 – Phase diagram of the solution structure at the linear onset of convection as a function of Ek and Bi , typical structures of temperatures anomalies and dependence on Bi or Ek is mentioned for each area. **I**: FT solution independent of rotation with constant value of m , **II**: FF solution independent of rotation with constant value of m , **III**: FT solution affected by rotation (m increases with rotation), **IV**: intermediate structure, **V**: FF solution affected by rotation, **VI**: common structure at high rotation rate.

Finally we consider the evolution of the flow structure in a meridional plane when Pr is varied in the presence of rotation ($Ek = 10^{-4}$). The radial cylindrical component u_s is plotted for FF and FT setups in fig. 2.9 II for $Pr = 0.3$ or 0.03 . Note that for larger value ($Pr = 3$ and 30), patterns similar to the $Pr = 0.3$ case were observed (not shown). For such large values ($Pr \geq 0.3$), we observe that the flow at the onset is totally contained outside the tangent cylinder – the cylinder with axis $\mathbf{\Omega}$ tangent to the inner boundary at the equator, see fig. 2.9 I. For lower values of Pr , we observe that the flow at the onset mainly develops within the tangent cylinder. This behaviour seems unaffected by the boundary condition imposed at the top interface.

In other words, when Pr is decreased, we observe a transition from a symmetric equatorial mode (localised near the equator) to a polar mode (localised near the poles, inside the tangent cylinder). We can compare our results with those for a thinner shell obtained by Garcia et al.. They determined a phase diagram of the selected modes at the onset, as a function of the rotation rate and Pr . For the same (Pr, Ek) couples they observed another transition than ours: from an equatorial attached mode to a spiralling columnar one. This difference can possibly be attributed to the different aspect ratio. Nevertheless in a previous study conducted with a similar shell as ours, Garcia et al. observed a transition from symmetric equatorial mode to anti-symmetric polar one for $Ek < 10^{-6}$, without mention of polar modes for higher Ek . Our results suggest that such polar mode can be found up to $Ek = 10^{-4}$.

2.7 Non Linear Simulations

In order to investigate the behaviour of the convective flow in the non-linear regime we conducted various non-linear numerical simulations for different values of Ra , Ek , Pr and Bi (see section 3.4.1). We aim to determine if thermal convection subjected to a Robin boundary condition shows specific behaviours for global parameters (convection efficiency or kinetic energy) as well as local ones (structure of the flow). We first consider end-member configurations (FF and FT), before comparing them with solutions for intermediate Biot number.

In the following, we use a global diagnostic, the Nusselt number, which we define as

$$Nu = \frac{1 - \eta}{\eta} \frac{\tilde{Q}}{\Delta T_{eff}} = \frac{1 - \eta}{\eta} \frac{Qr_e}{\Delta T_{eff} k} \quad (2.16)$$

where Q is the total heat flux leaving the system and ΔT_{eff} is the observed temperature difference across the system. The tilde symbolises the dimensionless character of the physical quantities. This definition of the Nusselt number is valid in the whole range of boundary conditions (from FF to FT) as imposed by the value of Bi . In order to

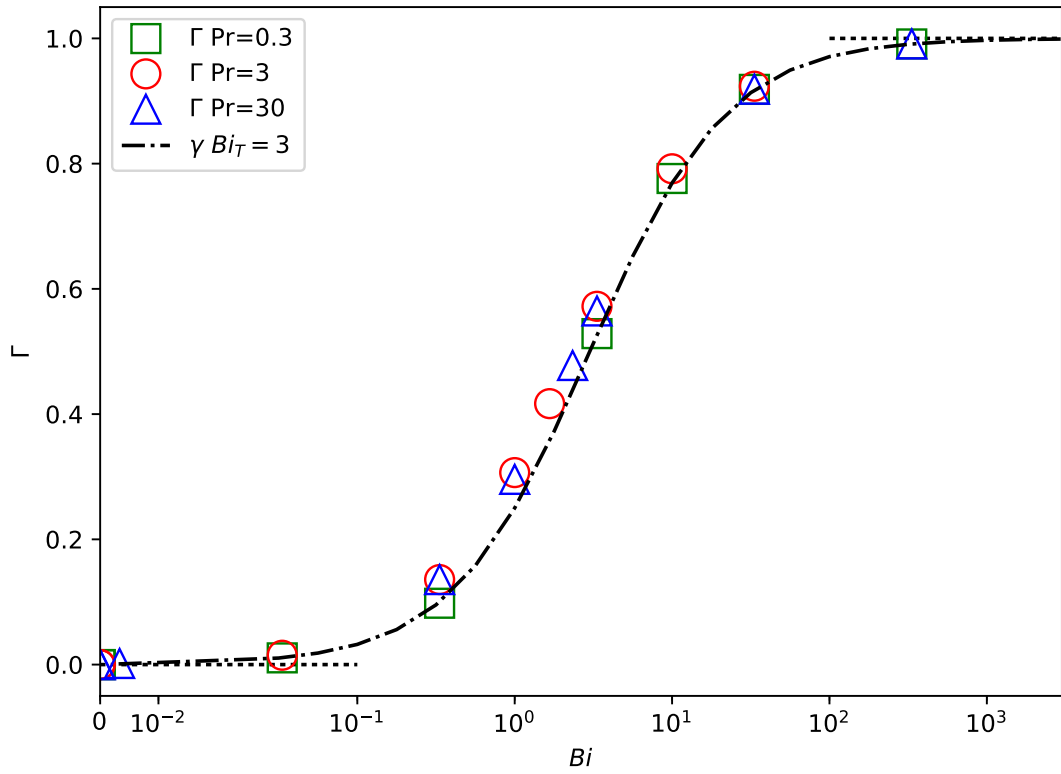


Figure 2.8 – $\Gamma = \frac{Ra_C(Bi) - Ra_C(Bi=0)}{Ra_C(Bi=\infty) - Ra_C(Bi=0)}$ as a function of Bi with variable Pr and $Ek = +\infty$. Γ goes to 0 (respectively 1) when the boundary condition goes to FF, i.e. $Bi = 0$ (respectively FT i.e. $Bi \rightarrow \infty$). The axis of abscissas uses a hybrid linear-logarithmic scale.

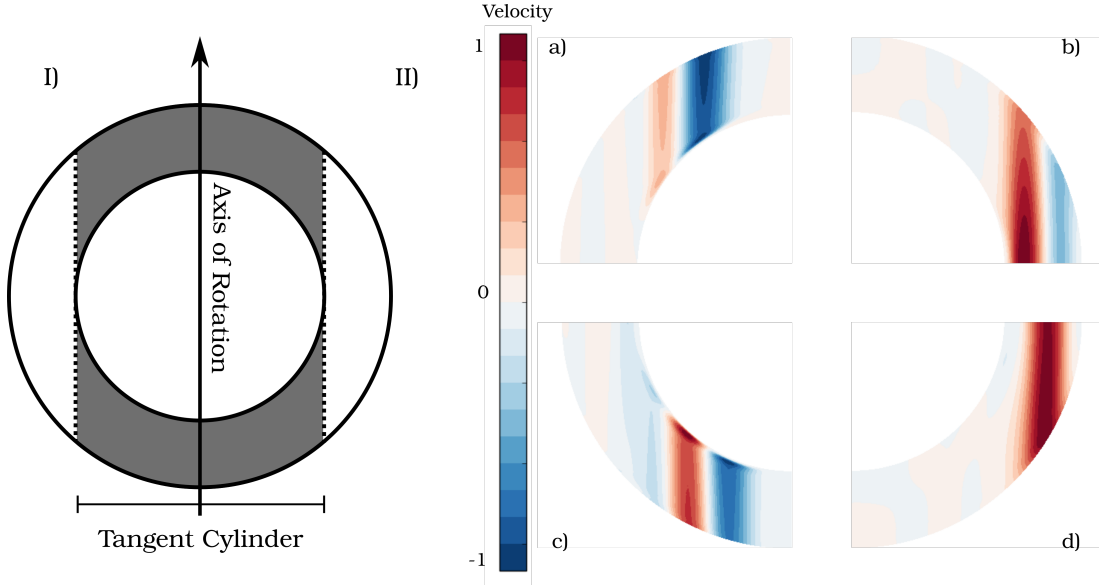


Figure 2.9 – I: Schematic of the tangent cylinder (grey) as a part of a spherical shell rotating about an axis. II: Quarter of meridional slices representing the radial cylindrical component of the velocity, u_s , at the onset of convection (linear mode, arbitrary amplitude) for FF (c and d) and FT (a and b) top boundary conditions and $Pr = 0.3$ (b and d) or 0.03 (a and c), $Ek = 10^{-4}$. We observe an effect of Pr on the flow, which appears outside of the tangent cylinder for $Pr = 0.3$ and inside it for $Pr = 0.03$.

facilitate the understanding, we note Q_{ref} the heat flux, computed in the motionless reference state (see eq. 3.2), leaving the system at the upper interface. When $Bi \rightarrow 0$, in a FF situation, $Q = Q_{ref}$, $\frac{Q(1-\eta)}{r_e \eta k} = \Delta T$ and $Nu = \frac{\Delta T}{T(r_i) - T(r_e)}$. When $Bi \rightarrow \infty$, in a FT situation, $T(r_i) - T(r_e) = \Delta T$, $\frac{\eta k \Delta T}{r_e (1-\eta)} = Q_{ref}$ and $Nu = \frac{Q}{Q_{ref}}$. In both end-member cases, the usual definitions of Nu for FF (see for example Long et al. (2020)) or FT (see for example Plumley and Julien (2019)) setups are obtained and Nu provides a dimensionless measure of the efficiency of heat transfer in all cases. According to this definition, $Nu = 1$ in the absence of convection. Consequently $Nu - 1$ will be preferred on some plots where $Ra \approx Ra_C$. Nu is used to quantify the efficiency of convection in the non-linear system in the statistically stationary regime, consequently its average over time will be presented in this regime.

2.7.1 Behaviour of purely FT or FF setups

Global diagnostics

First of all, we study end-member configurations in terms of Bi values, that is $Bi = 0$ or $Bi = \infty$, for rotating ($Ek = 10^{-4}$) or non-rotating cases, for $Pr = 0.3$ or 3 . The Rayleigh number has been set between $Ra \approx Ra_C$ and $Ra/Ra_C \approx 10^3$. As expected from numerous previous studies (e.g. Gastine et al., 2016; Long et al., 2020), several successive convection regimes are observable when Ra increases above Ra_C .

We first consider $Nu = f(Ra)$ as represented on fig. 2.10. We observe the well known convective behaviour (e.g. King et al. (2012) or Gastine et al. (2016)): an increase of Nu with Ra starting from $Nu = 1$ for $Ra \leq Ra_C$. Rotating cases show a higher Ra_C and a smaller Nu at a given Ra compared to the non-rotating cases. Since the slope of $Nu = f(Ra, Ek \neq \infty)$ is also steeper (it can approach $1/2$ for $Ra \approx 10^7$) rotating and non-rotating cases show increasingly similar Nu when Ra is increased. We do not reach large enough values of Ra to see the convergence of moderately rotating and non-rotating cases that has been documented (Gastine et al., 2015, 2016; King et al., 2012). Indeed the convective Rossby number, $R_{oc} = (\frac{RaEk^2}{Pr})^{1/2}$, used to compare *a priori* the Coriolis force to the buoyancy force Gilman (1977) of $Ek = 10^{-4}$ cases is always below 10 (see appendix A.2.2). Nevertheless, for weakly rotating cases, this convergence is well observed for $Ra > 10^6$. The comparison of FT and FF cases on the basis of Nu values at given Ra shows that the two configurations almost always show distinct behaviour. Generally speaking $Nu(FF) < Nu(FT)$. The only exception is noted for the $Ek = 10^{-4}$ cases when $Ra \approx Ra_C$ which shows no real difference between FF and FT configurations. This agrees with the fact that the Ra_C of these cases were found with the linear stability analysis to be very similar. Indeed, it is expected (Busse and Or, 1986; Gillet and Jones, 2006) that, near the threshold, the behaviour of the system is controlled by $\frac{Ra}{Ra_C} - 1$. In the non-rotating case, for large enough Ra , it is known that the Nusselt number scales as Ra^α where α is expected to be similar to $1/3$ ($1/3$ in Plumley and Julien (2019) for example or $2/7$ are both frequently used, see for example Gastine et al. (2015) or Iyer et al. (2020) for FT configuration and Long et al. (2020), King et al. (2012) or Johnston and Doering (2009) for symmetric FF one). Here, we observe $\alpha = 2/7$. This behaviour is well observed in our data set for the FT configuration. Nevertheless, a different exponent ($2/9$ here, as justified below) seems to be necessary to model the FF data. All these general observations can be applied to both $Pr = 0.3$ and $Pr = 3$ cases.

The differences observed in fig. 2.10 between FF and FT cases ($Nu(FT) > Nu(FF)$) at a given (Ra, Pr, Ek) can be explained by fundamental differences of the setups. In the first case, the stationary state is characterised by an effective difference of temperature ΔT_{eff} smaller than the fixed ΔT imposed in the FT case. To compare the values of Nu produced by FF and FT cases on an equal footing, we measure the effective Rayleigh number Ra_{eff} established in the stationary state defined as (see Calkins et al. (2015); Johnston and Doering (2009); Verzicco and Sreenivasan (2008)):

$$Ra_{eff} = \frac{Ra \Delta T_{eff}}{\Delta T}. \quad (2.17)$$

One can note that $Ra_{eff} = Ra$ when FT boundary condition is imposed at the upper interface. In order to precisely compare FF and FT configurations at the same Ra_{eff}

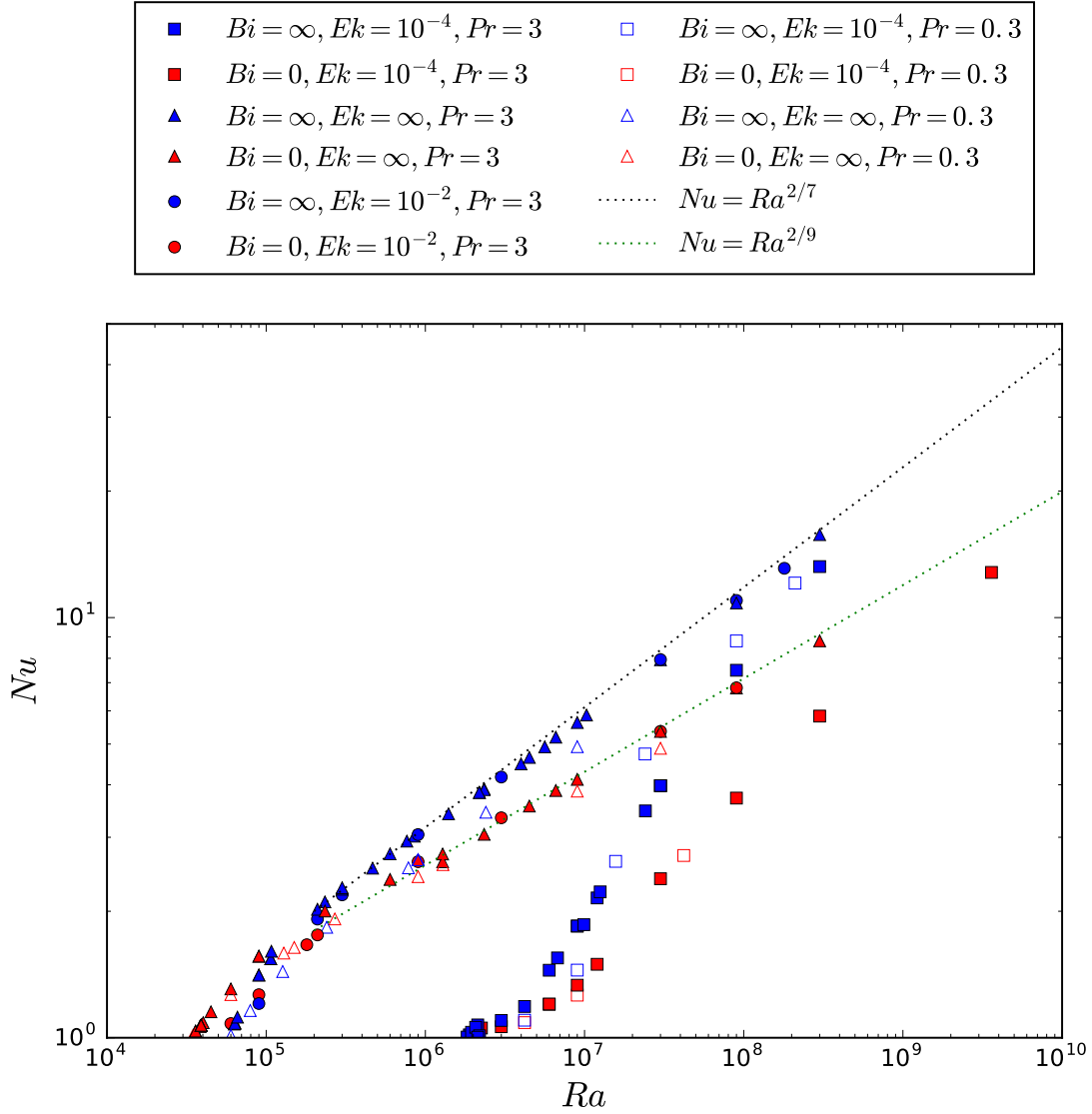


Figure 2.10 – Nusselt number, Nu , as a function of Ra for $Pr = 0.3$ (open symbols) or 3 (filled symbols) with ($Ek = 10^{-4}$: squares and $Ek = 10^{-2}$: circles) or without ($Ek = \infty$ circles) rotation and with fixed flux (red points) or fixed temperature (blue ones) at the upper boundary. The black dotted line represents the scaling $Nu \propto Ra^{2/7}$ relevant to model FT configurations while the $Nu \propto Ra^{2/9}$ –green dotted line– models the FF ones.

we first run a FF case then determine its Ra_{eff} in order to run a FT case at the same $Ra = Ra_{eff}$.

We plot, in fig. 2.11, Nu as a function of Ra_{eff} . One can notice that, for a given (Pr, Ek) , $Nu(Ra_{eff})$ follows the same behaviour independently of the top boundary condition except for cases near the threshold for non-rotating convection. This is reminiscent of the behaviour observed with the linear stability approach (§2.6) that showed that the threshold is highly dependent on the boundary conditions only in the absence of rotation. As expected, a fixed-flux boundary condition implies a lower critical Rayleigh-number (which has similar implication on the critical Ra_{eff} since $Ra \simeq Ra_{eff}$ for $Ra \simeq Ra_C$). Finally, as shown in previous studies (e.g. Calkins et al., 2015) FF and FT cases become indistinguishable for high enough values of Ra_{eff} (here typically $Ra_{eff} > 3 \times 10^5$), in terms of Nu and are in good agreement with the $2/7$ power law mentioned above.

Since one can write, in the FF case, $Ra_{eff,FF} \propto \frac{Ra}{Nu_{FF}}$, the new scaling $Nu_{FF} \propto Ra_{eff,FF}^{2/7}$ leads to $Ra_{eff,FF} \propto Ra_{FF}^{7/9}$ and $Nu_{FF} \propto Ra^{2/9}$ which was observed on fig. 2.10. Using our data to determine the coefficient of proportionality between $Ra_{eff,FF}$ and Ra_{FF} , we found for non rotating convection and $Pr = 3$ that, far enough from the onset of convection and along at least three orders of magnitude,

$$Ra_{eff,FF} \simeq 8.6 \times Ra_{FF}^{7/9}, \quad (2.18)$$

with a discrepancy below 5%.

The similarity of the FF and FT configurations observed at equal Ra_{eff} on the basis of Nu prompted us to look at other quantities. Aside from determining Nu of each configuration, we computed their Péclet Number in statistically steady state, $Pe = \frac{r_e u \rho_0 c_p}{k}$, where u is the rms flow velocity. As one can see on fig. 2.12, where Pe is plotted as a function of Ra_{eff} , for a given (Ek, Pr) the general behaviour far from the onset of convection is independent from the top boundary condition. For the rotating case, Pe increases sharply with Ra_{eff} near the onset, making it difficult to observe low values of Pe . $Pr = 0.3$ cases can be distinguished by a systematically smaller value of Pe for $Ek = \infty$ while they follow the same general behaviour as for the $Pr = 3$ points for rotating cases. We also observe the decrease of the gap between rotating and non-rotating configurations for high values of Ra_{eff} . They almost reach a unified regime characterised by a $Pe \propto Ra^{1/2}$ scaling as expected from Gastine et al. (2015) or Long et al. (2020) (since Pe can be deduced from the Reynolds number by the multiplication by a factor Pr independent of Ra). We plot two models $Pe \propto Ra^{1/2}$, one for each Pr value. Note that the difference of the proportionality factor between the models is in good accordance with a $Pe \propto Pr^{1/2}$ dependency –that is a $Re \propto Pr^{-1/2}$ relation found with a somehow different setup in Calzavarini et al. (2005), for example.

We should comment on the short range of Rayleigh numbers (around 10^8) for which $Ek = 10^{-4}$ cases show Pe values higher than their non-rotating counterparts, which is visible for both values of Pr . This overshoot can be explained by our use of the total velocity field to compute Pe . Indeed in a configuration of convection in a rotating spherical shell with upper free slip boundary condition, we expect the development of strong zonal flows (Yadav et al., 2015), responsible for up to 90% of the total kinetic energy, in a certain range of Ra . We then plot on fig. 2.13 similar quantities as in fig. 2.12 but using only the non-zonal (i.e. $m \neq 0$ components) velocity field to compute Pe . With this choice, the mentioned overshoot disappears. Moreover, the two branches attributed to low and high Pr values for $Ek = 10^{-4}$ which are distinct on fig. 2.12 collapse in fig. 2.13. Consequently, the distinction between these two branches is probably solely due to the presence of a strong zonal component at low Pr that is absent or weaker in the $Pr = 3$ cases with $Ra_{eff} < 10^7$. Some more comments are given about the contribution of the zonal-flows to the total kinetic energy in appendix A.2.2.

As a conclusion from the global diagnostics we just studied (Nu and Pe), for a given (Ek, Pr, Ra_{eff}), the behaviour of thermal convection in our system is independent of the top boundary condition (FT or FF) if $Ra_{eff} \gg Ra_C$. Therefore, the behaviour of the system can be predicted based on results with classical boundary conditions, provided Ra_{eff} is used instead of Ra . Moreover, this Ra_{eff} can be determined *a priori* in the non-rotating case from Ra value. This computation can likely be extended to finite Ek values as soon as Ra is large enough to be in the weakly rotating regime.

Temperature profiles

We also compare the two extreme configurations with respect to their temperature profile. We plot in fig. 2.14 radial profiles of mean temperature of FF and FT cases characterised by the same Ra_{eff} . More precisely we compute the mean radial temperature profile for several temperature fields saved at different times in the stationary state. Then, these mean radial profiles are used to produce a time averaged radial profile $\bar{T}(r)$. We finally plot $\frac{\bar{T}-T_{min}}{T_{max}-T_{min}}$ in order to compare the shape of the profiles since, by construction, ΔT_{eff} is the same in these two configurations. We can see in fig. 2.14 that temperature profiles of FF and FT configurations are almost identical when Ra_{eff} is large enough. In the case of a weakly supercritical simulation ($Ra \simeq Ra_C$), temperature profiles are more similar to diffusive ones since convection is not well developed.

Flow structure

Convection can also be studied on the basis of the spatial structure of the flow. We consider first the structures in the meridional plane and then in equatorial ones.

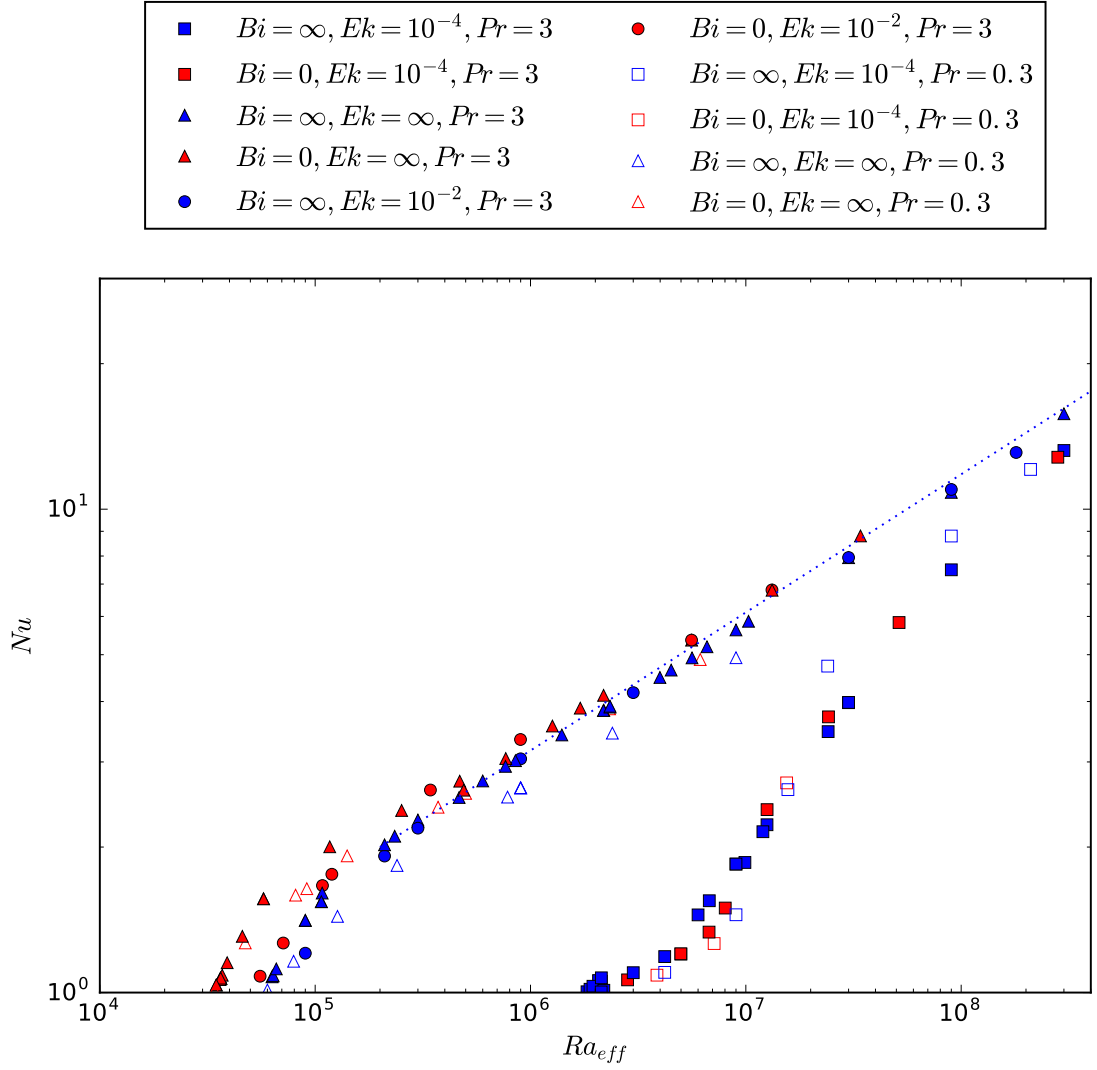


Figure 2.11 – Nu as a function of Ra_{eff} (2.17) for the same data as in fig. 2.10. For a given Pr , FF and FT points follow the same behaviour except near the threshold for non-rotating convection. $Nu \propto Ra^{2/7}$ is plotted with a blue dotted line.

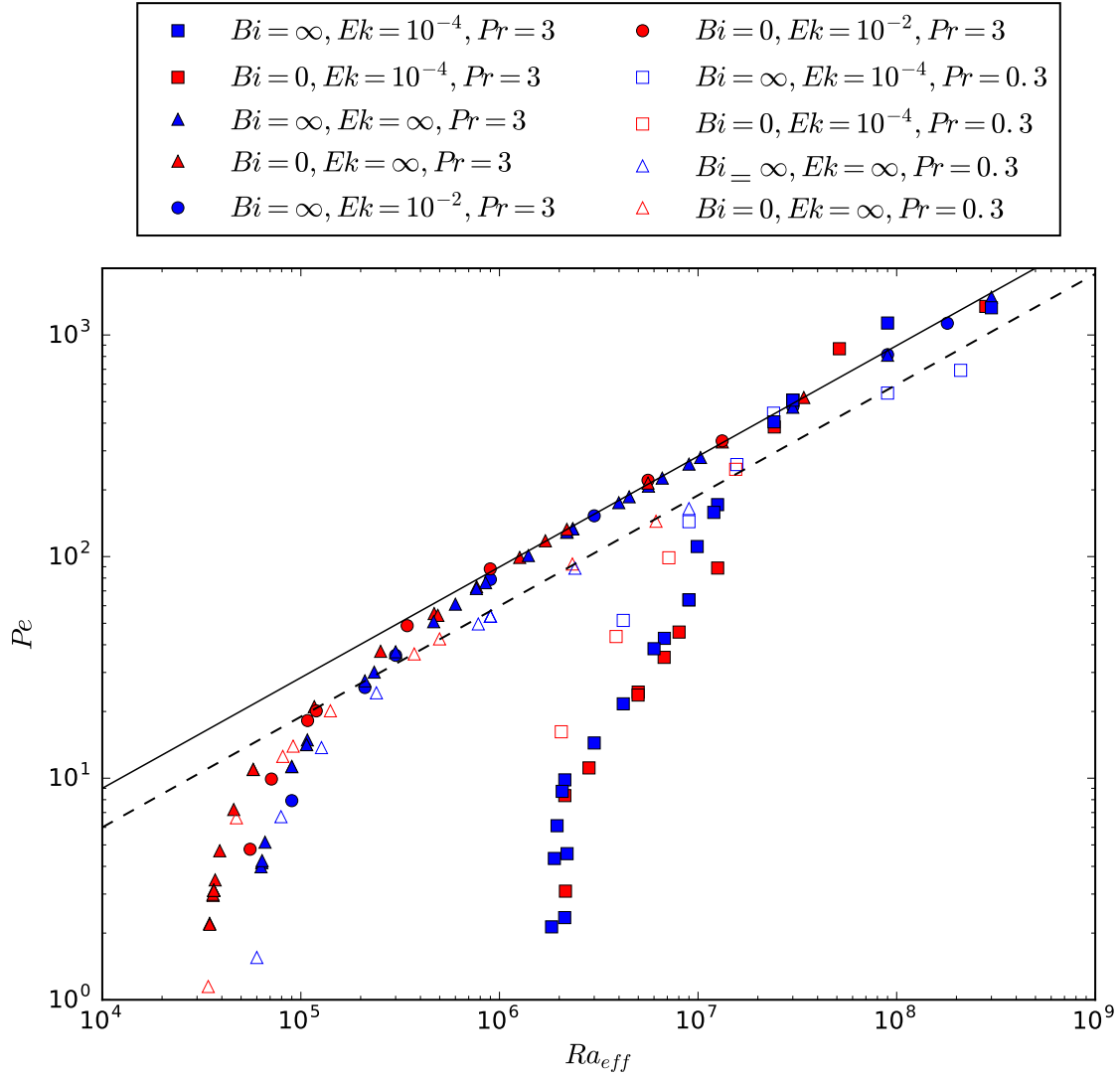


Figure 2.12 – Péclet number Pe as a function of Ra_{eff} for the same data as plotted in fig. 2.11. Except for $Ra_{eff} \simeq Ra_C$, FF and FT configurations follow the same behaviour at a given Ek, Pr . For large enough Ra_{eff} , Pe becomes independent of Ek . Solid and broken lines are 1/2 slope scalings for $Pr = 3$ and $Pr = 0.3$.

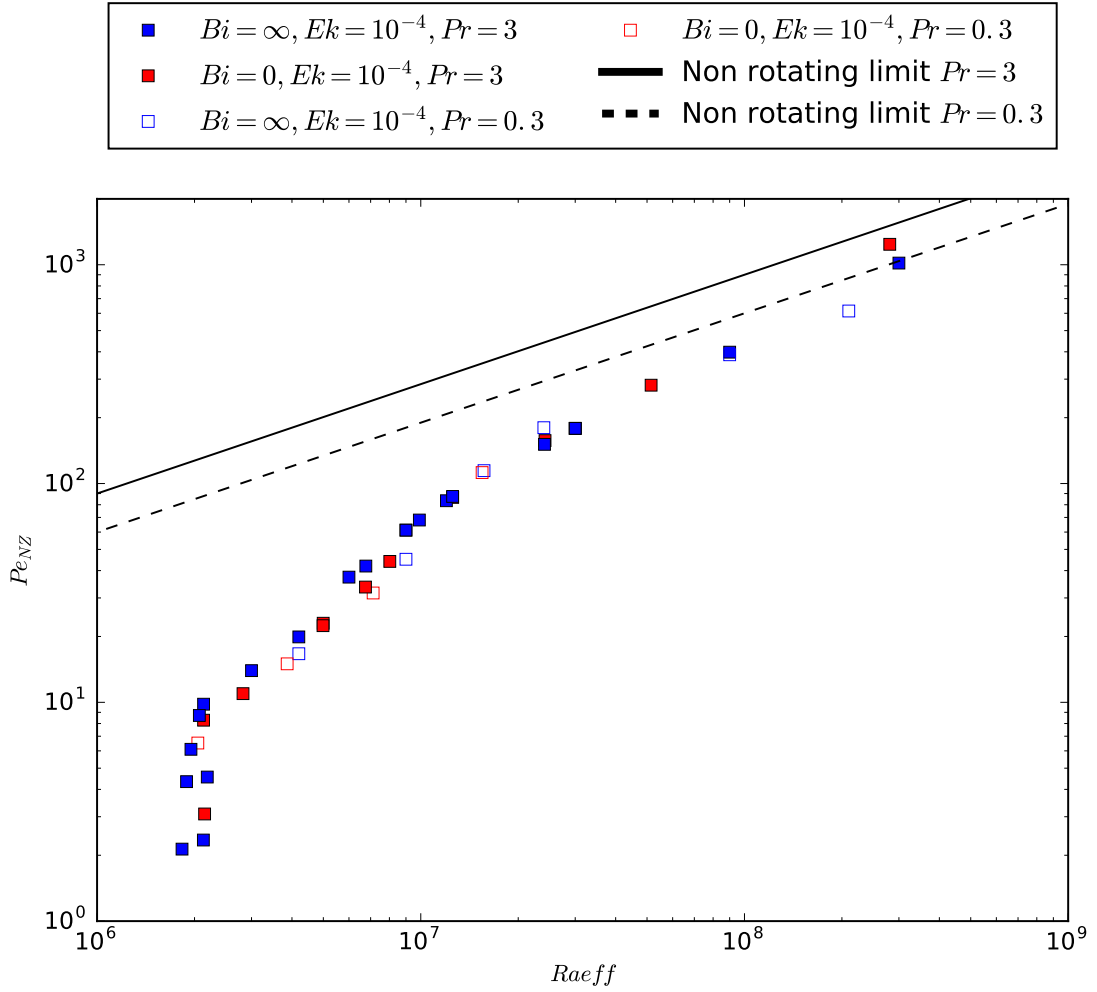


Figure 2.13 – Non-zonal component of Pe as a function of Ra_{eff} for $Ek = 10^{-4}$ cases. Similar behaviour is observed regardless of (Pr, Bi) : Pe values approaches the non-rotating limit when Ra_{eff} is increased. The overshoot observed in fig. 2.12 is suppressed with the subtraction of the zonal component.

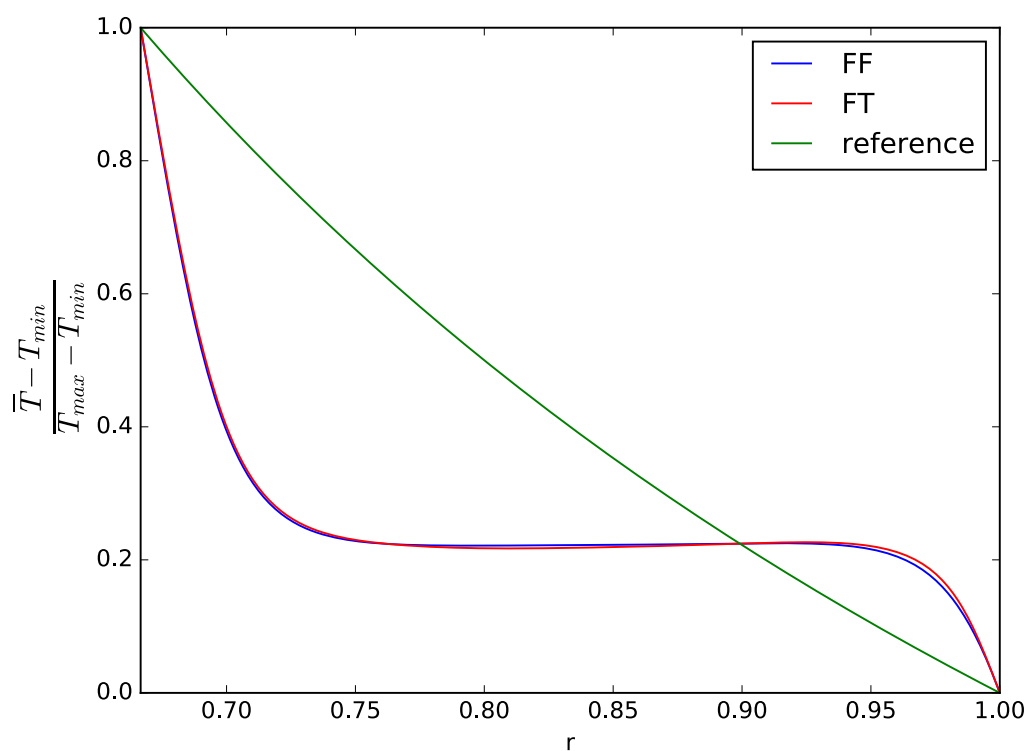


Figure 2.14 – Radial temperature profiles averaged in time and normalised by the mean temperature difference across the shell, $\frac{\bar{T} - T_{min}}{T_{max} - T_{min}}$. Reference, FF and FT profiles are compared, $Ek = \infty, Pr = 3, Ra_{eff} \approx 5.6 \cdot 10^6$. For large enough Ra_{eff} , equal Ra_{eff} configurations show similar profiles.

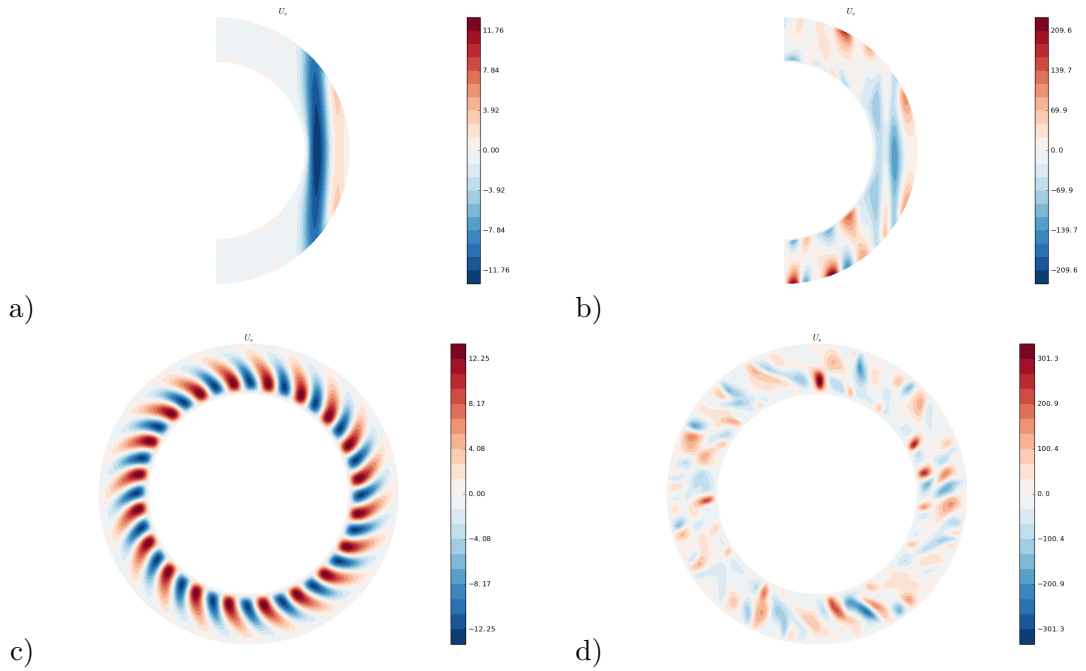


Figure 2.15 – Meridional (a and b) and equatorial (c and d) maps of radial velocity at $Ek = 10^{-4}$, $Pr = 3$ and $Bi = \infty$. a and c: $Ra = 9 \cdot 10^6$, b and d: $Ra = 9 \cdot 10^7$. a: the flow is only active outside the tangent cylinder, b: the flow is active in the whole shell. c and d: flow loses its lateral organization when Ra is increased of a factor 10.

The meridional slices enable us to investigate the disposition of the flow with respect to the tangent cylinder in the rotating cases (without rotation this concept is not relevant). As shown in fig. 2.15(a) moderate supercriticality implies that flow is not active inside the tangent cylinder. When Ra is increased enough (b), this spatial organization is lost and the flow occupies the whole shell. Nevertheless in both cases, the influence of rotation can be noticed thanks to the alignment of the flow along columns of axis Ω .

As a remark, we noticed in some cases (e.g. $Bi = \infty$, $Ek = 10^{-4}$, $Pr = 3$, $Ra = 3 \times 10^7$ i.e. in rotating cases at moderate Ra/Ra_C) the development of an anti-symmetric component of the velocity field with respect to the equatorial plane. This component was never stronger than the symmetric one. The anti-symmetric component of the flow is mostly seen within the tangent cylinder where the Taylor-Proudman constraint does not link both hemispheres.

Then, we choose to compare the respective properties of structures at equal Ra/Ra_C in order to compare slightly supercritical configurations. For higher Ra , equal Ra_{eff} plots are compared since it has been shown that this number was an accurate criterion to fairly compare FF and FT configurations.

We can see on fig. 2.16 that it is usually possible to discriminate FF from FT cases without consideration of (Ek, Pr) by checking if temperature anomalies extend to the upper boundary or not. This is illustrated clearly in the non-rotating configuration

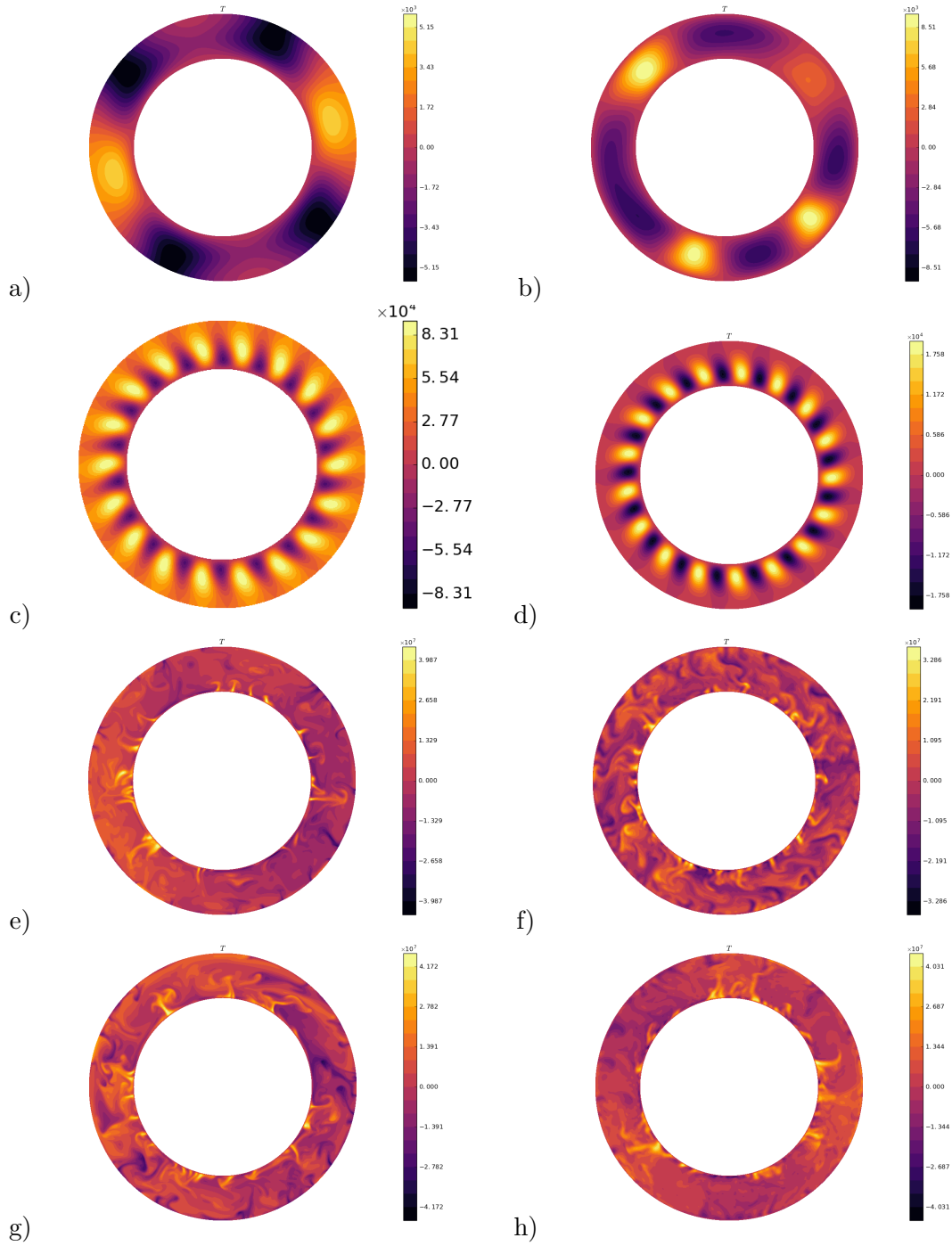


Figure 2.16 – Equatorial maps of temperature anomalies ($l = 0$ component is subtracted, $Pr = 3$ for all cases); left $Bi = 0$ (FF), right $Bi = \infty$ (FT); c,d,g,h: rotating cases ($Ek = 10^{-4}$), a,b,e,f: non rotating ones; a,b,c and d: $Ra/Ra_C \simeq 1.1$, e,f,g and h: $Ra_{eff} = 3.10^8$. Except difference of thermal upper boundary layer, structures of FF and FT thermal anomalies are similar for each line.

(see first line for slightly supercritical case and third one for higher Ra/Ra_C) and in the rotating case (see second line for slightly supercritical simulations and last one for moderate Ra/Ra_C).

Except for the vertical extent of the thermal anomalies near the upper boundary, it is nearly impossible to visually distinguish between FF and FT equatorial temperature snapshots on the basis of the size of the anomalies or their spatial organization. We extend this comparison to 3D structures in the appendix [A.2.4](#).

In the slightly supercritical rotating cases (second line) we observe the lateral periodicity ($m = 17$) predicted by the linear stability analysis (see fig. [2.7](#) and [2.3](#)), which is identical for both FF and FT boundary condition. It is worth to remark the high temperature equatorial anomaly which is characteristic of the fixed flux configuration.

2.7.2 FF to FT transition

We now focus on the transition from FF to FT configurations produced by an increase of the Biot Number from 0 to infinite limit values. We restrict our set of parameters to the $Pr = 3$ simulations. For various Ra and Ek we determined Nu when the Biot number evolves from one limit to the other.

Transition with respect to Nu

Intermediate Bi values cases can be compared with FF and FT ones on the basis of their Nu , as plotted on fig. [2.17](#) as a function of Ra_{eff} . They follow the same behaviour as for FF and FT cases, which shows that Ra_{eff} constitutes the relevant variable characterizing these different types of thermal convection subjected to different boundary conditions. We did similar observations on the basis of Pe rather than Nu .

As in the section [2.7.1](#) we compute Ra_{eff} as a function of Bi for ($Ek = \infty, Pr = 3$). We found that for fixed Ra , Ra_{eff} increases continuously and monotonically from FF to FT values following

$$Ra_{eff}(Bi) = Ra_{eff,FF} + \Delta Ra_{eff} \frac{Bi}{Bi + Bi_t}, \quad (2.19)$$

with ΔRa_{eff} the difference between FF and FT values of Ra_{eff} (which can be determined by eq. [2.18](#)) and Bi_t a threshold of approximate value 3 – we noticed that Bi_t increased slightly with Ra . Our data show a good agreement with this model on three orders of magnitude of Ra (discrepancies are always smaller than 10%).

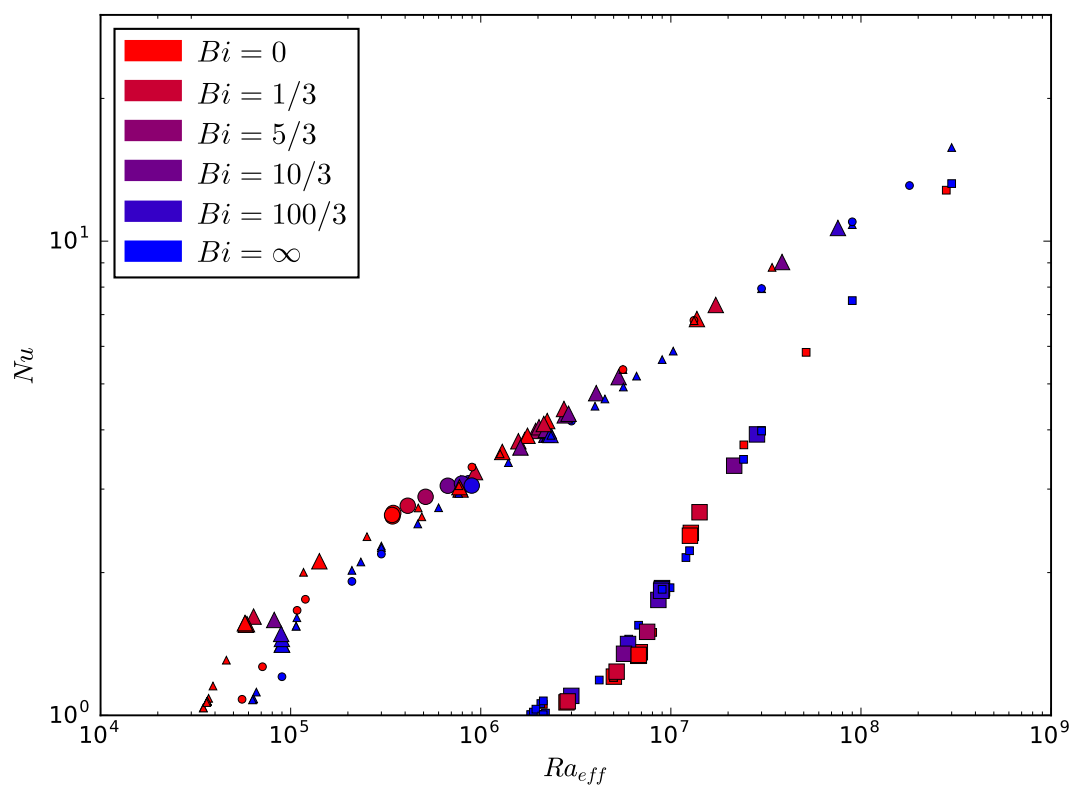


Figure 2.17 – Nusselt number Nu as a function of Ra_{eff} for the same representation code as in fig. 2.10. Intermediate Bi cases have been added to the fig. 2.10 data. They are plotted with big symbols, coloured according to their Bi value. As in the fig. 2.10, points are distributed along two main branches determined by the value of Ek . Except for $(Ek = \infty, Ra \approx Ra_C)$ points, intermediate Bi points are located on the same branches as extremal ones and then follow the same scalings as described in fig. 2.10.

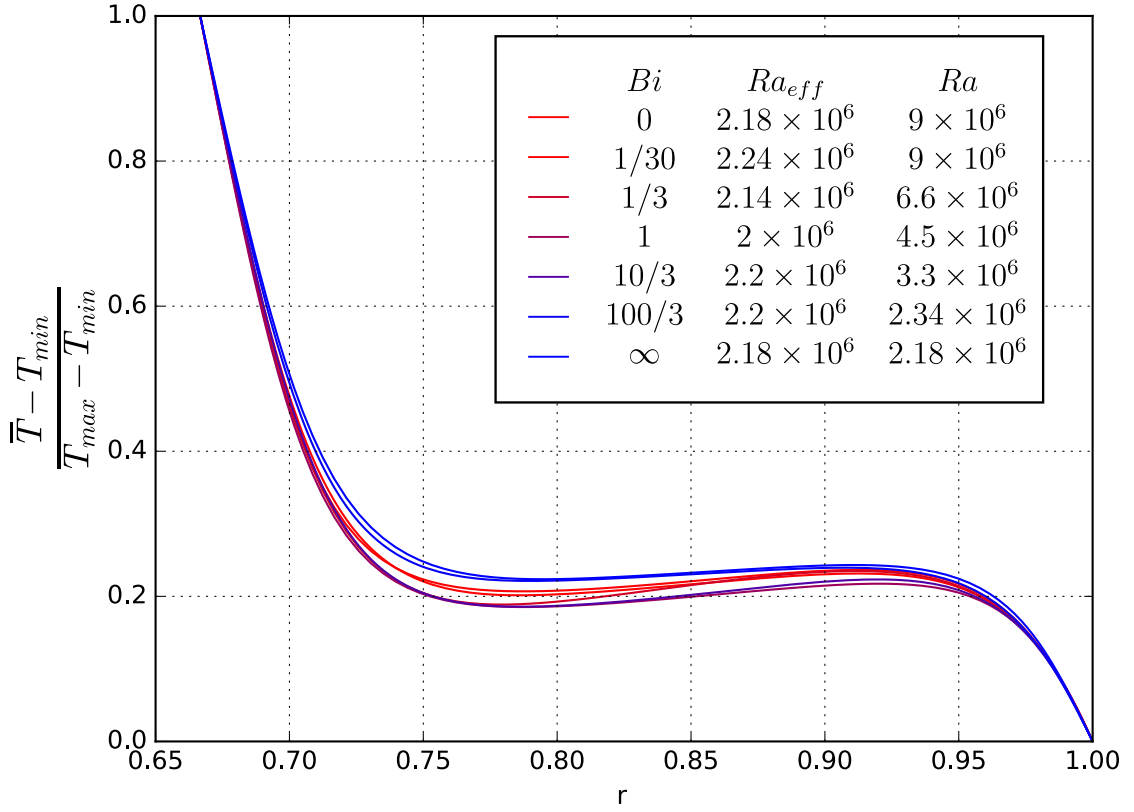


Figure 2.18 – Normalised and time-averaged radial temperature profiles for quasi constant $Ra_{eff} \simeq 2.2 \times 10^6$ but variable (Ra, Bi) , ($Ek = \infty, Pr = 0.3$). Similar profiles are obtained, nevertheless, three different behaviour can be distinguished: for large (FT), small (FF) and intermediate Bi values.

Transition for a given effective Rayleigh number

Even if equal Ra_{eff} implies similar Nu regardless of Bi , is it possible to detect differences in the flow structure at constant Ra_{eff} with respect to the Bi value? As an illustration we plot the radial profiles of temperature (fig. 2.18) of seven cases of approximately equal Ra_{eff} and variable Bi . Note that we could not obtain a collection of cases with exactly constant Ra_{eff} but variable (Ra, Bi) , since the value of Bi_t used in eq. 2.19 evolves slightly with Ra , nevertheless differences are below 10%. These profiles have been time averaged over fields extracted from the statistically stationary regime. Here we focused on non-rotating systems with $Ra \gg Ra_C$. As one can see, the general structure of the profiles is the same: the temperature difference is concentrated in narrow boundary layers located at both shell limits, while the interior of the shell is homogenised by convection and exhibits a slightly stabilizing temperature profile. While the profiles are nearly identical near the boundaries, the middle temperature is affected by Bi . This dependency is not monotonous: intermediate (i.e. between 1 and 30) Bi profiles have the lowest mean temperature, FF ones show medium temperature and FT cases the highest mean temperature.

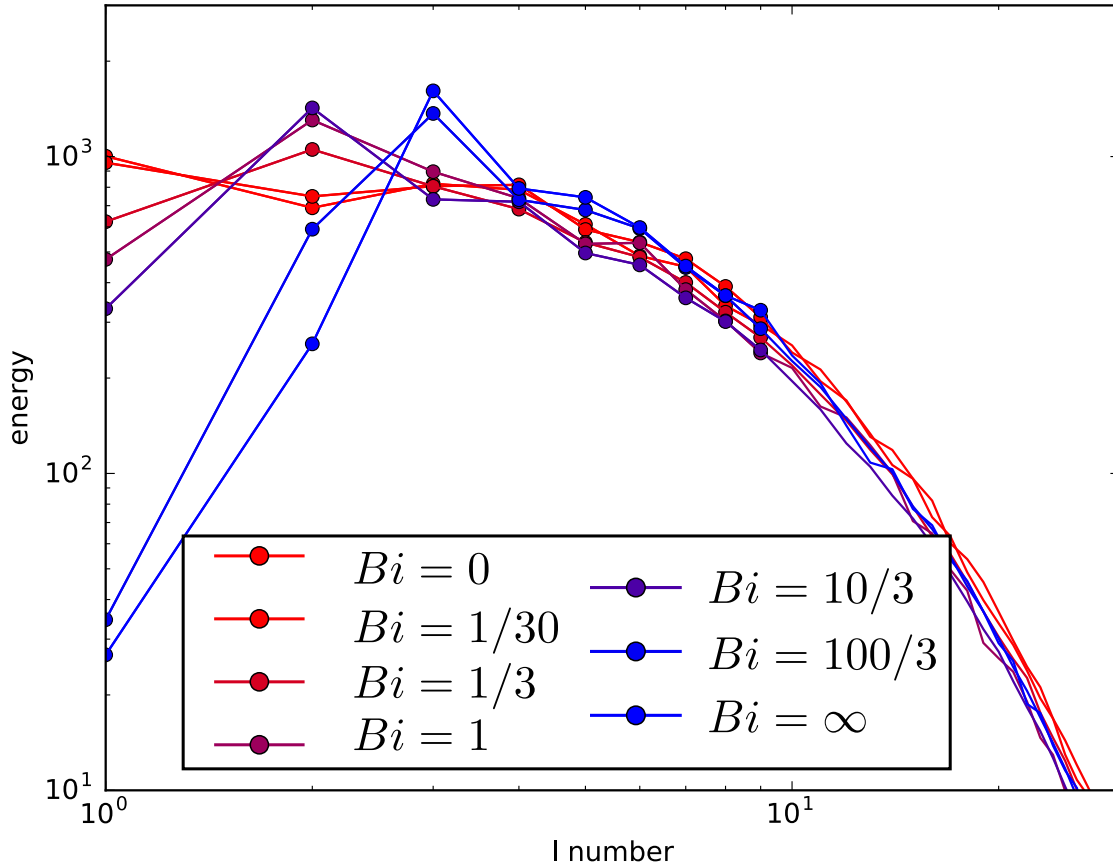


Figure 2.19 – Time averaged energy spectrum of the velocity (sum of toroidal and poloidal components over the whole shell) for roughly constant $Ra_{eff} \simeq 2.2 \times 10^6$, $Ek = \infty$, $Pr = 3$ but variable Bi . For $Bi \leq 0.1$, $l = 1$ is the dominant mode, intermediate values ($1/3 \leq Bi < 10/3$) favour $l = 2$, and $l = 3$ dominates at high Bi like in FT configuration. The total kinetic energy in all these configurations varies by less than 10%.

In order to give a quantitative description of the spatial structure of the flow, we plotted the velocity spectrum (fig. 2.19) for each of these cases. With the information provided by the spectra it is possible to identify the three regimes suggested by the radial profiles of the fig. 2.18. Indeed, the low, intermediate and high Bi value cases are characterised respectively by a dominance of $l = 1, 2$ and 3 . Finally small-scale flows are favoured at higher Bi (that is FT-like top boundary condition) while the different spectra become indistinguishable as soon as $l \geq 7$.

To conclude this section, we have shown that even if Ra_{eff} is the relevant parameter to compare convection efficiency of FF and FT cases, differences in the flow structure are observed at constant Ra_{eff} but variable Bi (without rotation). For rotating configurations (particularly at $Ek = 10^{-4}$), it has been impossible to bring out important differences of the flow structure between FF and FT cases.

Convection regimes for variable Biot number

Rotating and non-rotating thermal convections are known to show various regimes depending on the intensity of the thermal forcing (Gastine et al., 2016; Long et al., 2020). Usually these successive regimes are spotlighted by scaling laws deduced from $Nu = f(Ra)$ or $Pe = f(Ra)$ graphs. Here we choose to combine these two in a $Pe_{NZ} = f(Nu - 1)$ graph (more usual graphs have been presented in the beginning of this section 2.7.1, see fig. 2.12 and 2.11). The non-zonal component of Pe is solely used since it excludes zonal winds that do not participate to the radial thermal transfer. We observe on fig. 2.20 different branches on which points are distributed mainly following their Ekman number ($Ek = 10^{-2}$ points are poorly distinguishable from non-rotating ones). For low Pe and Nu , two branches of specific Ek are visible. They are well modelled by a $Pe \propto (Nu - 1)^{1/2}$ relation. For higher Nu , these two branches join a new one with a steeper slope ($Pe \propto (Nu - 1)^{7/4}$). The non-rotating branch joins this steeper branch for $Nu \simeq 1$ while the rotating branch joins it for $Nu \simeq 20$. We observe no strong influence of Bi or Ek on these branches except in the non-rotating one for small $Nu - 1$: FT points seem to show systematically slightly higher Pe compared to FF ones. Remarkably, there is almost no dependence on Pr in this representation – although only $Pr = 0.3$ and 3 are considered.

We further interpret these different branches relatively to convection regimes. Small Pe and $Nu - 1$ are characteristic of a slightly supercritical convection that is a weakly non-linear (WNL) regime in which the convective flow is mainly monitored by $\frac{Ra}{Ra_C}$. From usual scaling laws (see Busse and Or (1986) and Gillet and Jones (2006)) relative to the WNL regime, we expect that on the one hand

$$Nu - 1 \propto \left(\frac{Ra}{Ra_C} - 1 \right), \quad (2.20)$$

and on the other hand, when the mean thermal profile remains similar to the diffusive one (which is appropriate for $Ra \simeq Ra_C$), we expect following the equilibrium between viscous dissipation rate and mean buoyancy power (see eq. 3.3 in Gastine et al. (2016) and eq. 2.16 in Gastine et al. (2015))

$$\frac{Ra(Nu - 1)}{Pr^2} \propto \frac{\nu U_C^2}{\mathcal{L}_C^2}, \quad (2.21)$$

where U_C and \mathcal{L} are the respective typical velocity and length of the convective flow. Keeping only terms of order 1 in $Nu - 1 \rightarrow 0$ leads to

$$Pe \propto ((Nu - 1)Ra_C)^{1/2} \mathcal{L}_C. \quad (2.22)$$

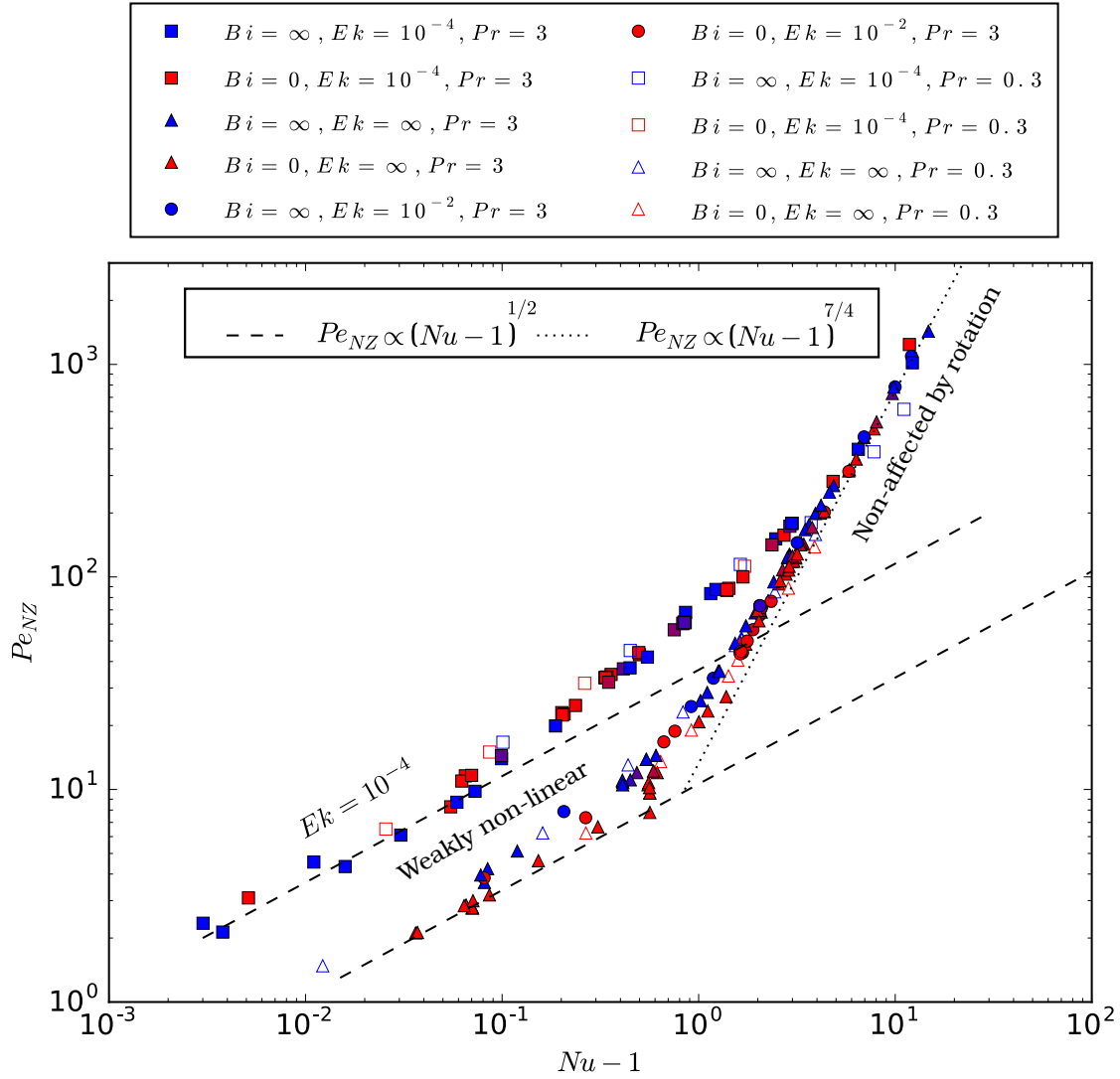


Figure 2.20 – Non-zonal component of Pe as a function of $Nu - 1$ for various Ek, Pr, Bi coded by shape, filling and colour of the symbols respectively (as in fig. 2.17 and 2.10). We distinguish two main regimes: the weakly non-linear regimes at low Pe and $Nu \simeq 1$ following the two broken-line models and the weakly or non-rotating regimes represented by the dotted line.

This dependence ($Pe_{NZ} \propto (Nu - 1)^{1/2}$) is illustrated by the broken lines of the fig. 2.20. Since Ek has a strong influence on the Ra_C as well as on \mathcal{L}_C (see section 2.6) – decreasing Ek makes the former increase and the latter decrease – the separation of the points between a rotating and a non-rotating branch can be understood. As shown in the linear stability analysis section 2.6, rotation impacts poorly the onset of convection for $Ek > 10^{-3}$, which explains why results for $Ek = 10^{-2}$ fall on the non-rotating branch. Since both Ra_C and \mathcal{L}_C can be expressed as Ek functions using appropriate scaling laws, a $Pe \propto Ek^{-1/2}$ dependency can be predicted. Nevertheless we are not able to test it since the scaling laws are established for smaller Ek than those we used here. Finally, Bi has generally a weak or no influence on Ra_C except in the non-rotating configuration which explains the small difference between FF and FT points in the non-rotating branch.

The highest values of Pe, Nu are characteristic of the non- or weakly rotating regime. We presented above (§ 2.7.1) the usual scaling laws used in the non-rotating limit for Pe and Nu (see fig. 2.12 and 2.10). The combination of both these laws leads to

$$Pe \propto Nu^{7/4}, \quad (2.23)$$

which is the slope observed in fig. 2.20, for high $Nu - 1 \simeq Nu$. Note that our scaling law is very similar to the one found for this regime in another study of thermal convection with a different system and mechanical boundary conditions (King and Aurnou, 2013). In the non-rotating branch, Ek is no longer a discriminating factor as expected. Remarkably, lower Pr points are not easily distinguished from the $Pr = 3$ group of points. This is worth noting since both Pe and Nu exhibit dependencies on Pr (see Figs. 2.11 and 2.12).

Between these WNL and non-rotating regimes, a transitional regime is expected for rotating simulations. We observe it roughly between $Nu \simeq 1.1$ and $Nu \simeq 20$, it is characterised by an intermediate slope between the two end-members. Following a former study (Gastine et al., 2016) we expect a somehow higher ($Nu \simeq 1.5$) value of Nu as a lower limit of this regime. Note that since we never use Ek smaller than 10^{-4} , we do not expect to significantly observe a rapidly rotating regime (Gastine et al., 2016; Long et al., 2020).

As a conclusion, we observe that variable Bi convective simulations follow the same general behaviour in term of convective regimes as the two better know end-members.

2.8 Discussion

Our objective was to study the influence on thermal convection of Robin boundary condition (characterised by the Biot number) on a rotating spherical shell of fluid

heated from below by an isothermal lower interface. This boundary condition has been implemented on the anomalies of temperature and thermal flux at the top interface.

We used, first, linear stability analysis to determine the properties of this boundary condition through the transition from fixed flux to fixed temperature at the upper boundary (see 2.6). This transition is obtained by varying the Biot number which monitors the linear relationship between the flux and the temperature for a Robin boundary condition at the interface. We observe a continuous transition in terms of critical Rayleigh number of the system between the two end members. This transition is significant only at weak rotation for which the two end-member regimes (FF and FT) remain distinct. In the regime of high Ek (roughly $Ek > 10^{-4}$), a transition occurs approximately for $Bi \in [0.03, 30]$. We give a simple fit for the evolution of the critical Rayleigh number as a function of Bi during this transition. Outside of this range, the general behaviour of the onset of convection can be described as the traditional FF or FT configuration. These results are in good accordance with previous work of Sparrow et al. (1964). In terms of solution structure at the onset of the convection, we offer a schematic phase diagram showing the existence of FF-like, FT-like or intermediate structures depending on Ek and Bi . We have extended our results concerning the FF to FT transition, at least without rotation, to other velocity boundary conditions and other Pr numbers.

Non-linear simulations have been conducted subsequently (see 2.7) to study vigorous convection. We have shown that the relevant parameter to compare convective cases subjected to the whole range of boundary conditions authorised by a variable Bi is a Rayleigh number based on the effective mean temperature difference across the shell. We provided a simple model for the evolution of Ra_{eff} as a function of Bi for non rotating configurations.

In terms of global diagnostics quantifying convection (for example the Nusselt number or the Péclet number), the transition at a given Ra_{eff} shows valuable amplitude only for non-rotating and $Ra_{eff} \simeq Ra_C$ configurations. Indeed, in this case Ra_C depends significantly on Bi , while by construction Ra_{eff} ignores this effect. For other values of the parameters, the transition amplitude is considerably reduced. Concerning the organization of the flow, the transition is observable as long as the solution remains not too turbulent (that is $Ra_{eff} \simeq Ra_C$). For respectively small and large enough Bi the system behaviour is very similar to the end-member setups. It is only when $Bi \in [0.03, 30]$ that intermediate specific structures can be noticed while global diagnostics remain unchanged, quasi identical to those of FF and FT configuration. Since Ra_{eff} is not an input parameter, we also studied the transition at fixed Ra and propose a model for the evolution of Nu as a function of Bi (see appendix A.2.3). We observe a noticeable transition only for $Bi \in [0.03, 30]$, this one can be modelled as a simple function of Bi . The transition is in fact characterised by a unique parameter determined by (Ra, Pr, Ek) .

Consequently, the range of Biot number for which the results significantly differ from end-member FF or FT boundary conditions is quantified in this paper. Depending on the object of application, computing the Biot number allows one to decide whether it is worth considering the full Robin boundary condition or, otherwise, which end-member model to use. In practice we have shown that Robin boundary conditions can be safely replaced within the framework described in 3.4.1 – by fixed flux boundary condition for $Bi < 0.03$ and by fixed temperature for $Bi > 30$. Furthermore, for rapid rotation ($Ek \leq 10^{-4}$), no effect of the Biot number has been observed. This also implies that the FF and FT cases at the same Ra_{eff} cannot be easily distinguished. This conclusion holds for the boundary condition of the temperature anomalies around the same given reference profile. In the case where the reference profile also depends on the boundary conditions, it is therefore reasonable to assume that all differences are due to the changes in the reference profile.

Considering the application to convection in magma ocean planets, we obtained (following the definition given in eq. 2.11 and the references given in 3.4.1) a Biot number of order 10^{10} which implies that a fixed temperature at the upper surface is the proper boundary condition to apply. This remains true even if we should bear in mind that a geophysical object like a terrestrial magma ocean evolved with time by cooling and freezing. We must expect that the huge Bi computed here decreases when the ocean evolves and becomes thinner. Indeed Bi is directly proportional to the thickness of the system, inducing a reduction of a factor 100 to 1000 of the Biot number with the crystallization of the ocean.

Nevertheless it is only for very thin layers of high thermal conductivity below a cold atmosphere that FT modelling becomes irrelevant. For a caricatural example, a liquid mercury layer of a hundred of meters below an atmosphere at 300 K sets a Biot number of about 60 which places this system in the intermediate regime. Extreme cases like metric sized liquid layers authorise low Biot number, that is FF boundary conditions. We emphasize that this observation concerns only boundary conditions applied to anomalies, while the reference (conductive) temperature profile might obey to different boundary conditions. Note also that a reference temperature with lateral variations, could affect, conversely, the boundary conditions applied to anomalies. This is not considered here and is left for another study.

However, we also mentioned in the introduction other physical thermal systems which can be modelled using Robin boundary condition. One of them is the superposition of two thermally conductive layers. In that case it is easier to produce configurations for which $Bi < 1$, as thin water ocean (of thickness H) below thick ice layer (thickness H_S). Except top mechanical boundary condition, our physical model is appropriate to describe this kind of systems (namely internal oceans of icy satellites). Furthermore,

in this situation, the boundary condition depends on the lateral length-scale ℓ of the temperature anomaly. For large length-scale, the Biot number is unchanged, but for small length-scales $\ell \ll H_S$ an effective $Bi_\ell = BiH/\ell$ (see [Guillou and Jaupart, 1995](#)). In this context, it may be appropriate to use a Robin boundary condition with a Biot dependent on the length-scale, or at least to use fixed-temperature for the smallest scales of the system.

We have not considered the influence of a symmetric top and bottom Robin boundary conditions or the effects of varying the aspect ratio. However, our results bear much generality, and are very likely relevant to most convection setup, as soon as Nu and Ra_{eff} are used to characterise the system. It would also be surprising if other gravity or temperature profiles could change our conclusions.

Global and deep oceans of hypothetical exo-planets could constitute another appropriate geophysical subject for such modelling. Robin boundary condition could be chosen to model various relations between a field and its derivative at an interface. We could, for example, contemplate modelling partial crystallization of a two component liquid using this method. Indeed the evolution of the liquid composition C at the solid/liquid interface during the crystallization (due to the fact that the produced solid does not have the same composition as the initial liquid) could be modelled by fixing a chemical flux j_C determined by the local composition of the fluid. Such a relation could be made linear by a relation similar to $K C + j_C = 0$ with K a coefficient similar to the Biot number.

Acknowledgements

We acknowledge discussions with Thierry Alboussière concerning the general definition of the Nusselt number. Computations were performed on the Froggy platform of CIMENT (<https://ciment.ujf-grenoble.fr>), supported by the Rhône-Alpes region (CPER07_13 CIRA), OSUG2020 LabEx (ANR10 LABX56) and EquipMeso (ANR10 EQPX-29-01). ISTerre is part of Labex OSUG2020 (ANR10 LABX56). JV acknowledges funding from the European Research Council (ERC) under the European Union’s Horizon 2020 research and innovation program (grant agreement no. 847433). SL has been funded by the French Agence Nationale de la Recherche (grant no. ANR-15-CE31-0018-01, MaCoMaOc). The open-source numerical codes XSHELLS and SINGE are available at <https://nschaeff.bitbucket.io/xshells/> and <https://bitbucket.org/vidalje/singe/downloads/>. Most figures were produced using matplotlib (<http://matplotlib.org/>) or paraview (<http://www.paraview.org/>).



Thermo-Solutal Convection in Magma Oceans

– *Je n'ai jamais pu dormir en avion, les turbulences ...*

– *Pardon ?*

– *Turbulences ; les radiations solaires chauffent la croûte terrestre, l'air chaud monte, l'air froid descend : turbulences. C'est désagréable ...*

John McTiernan, *À la poursuite d'Octobre Rouge VF*, 1990, Paramount Pictures

3.1	Résumé	69
3.2	Abstract	69
3.3	Introduction	70
3.3.1	The Concept of Magma Ocean	70
3.3.2	Terrestrial Case	70
3.3.3	Thermal Convection & Partial Crystallization	71
3.3.4	Thermo-solutal Convection	73
3.4	Methods	74
3.4.1	Physical System	74
3.4.2	Reference Fields	75
3.4.3	Equations of Conservation	76
3.4.4	Boundary Conditions	76
3.4.5	Parameters	78
3.4.6	Numerical Tools & Diagnoses	80
3.5	Heat and Mass Transport Regimes Observed	80
3.5.1	Fully Convective Regime	81
3.5.2	Erosion Regime	81
3.5.3	Enduring Stratification Regime	82

3.6	Regimes Diagram	85
3.6.1	Dependence with other parameters	86
3.6.2	Dependence on initial conditions	88
3.7	Discussion	90

3.1 Résumé

Les océans de magma sont des coquilles épaisses de silicates fondus. Il semble que la plupart des planètes telluriques aient pu connaître de telles structures au cours de leur histoire, la Terre y compris, durant les quelques dizaines de millions d'années suivant leur formation. On suppose généralement que les océans de magma sont bien mélangés par la convection. Néanmoins, du fait d'une cristallisation basale partielle, une couche stratifiée pourrait se constituer dans la partie inférieure de la coquille liquide.

Nous nous intéressons donc à la convection thermo-solutale¹ dans un océan de magma terrestre de surface cristallisant à sa base. Ce phénomène est modélisé par une condition limite basale liant les flux chimiques et thermiques.

Nous avons observé trois grands types de régimes de convection. Le premier correspond à une convection mobilisant toute la coquille. Le second à l'érosion progressive et inéluctable d'une couche stratifiée basale par une convection de surface. Enfin, le troisième voit co-exister une couche basale stablement stratifiée et une couche convective de surface, cela indéfiniment. Nous avons pu montrer que le type de régime sélectionné pouvait être prédit par un nombre sans dimension w qui est un rapport des nombres de Rayleigh que nous pouvons exprimer à partir de grandeurs d'entrée du problème. Dès lors que $w < 3$, nous observons que toute couche stratifiée initiale est, à plus ou moins longue échéance, érodée et remélangée par la convection de surface. Nos résultats suggèrent en revanche qu'un océan de magma, refroidissant lentement du fait d'une épaisse couverture atmosphérique, est incapable d'éroder une stratification initiale.

3.2 Abstract

Magma oceans are deep shells of liquid silicates. Following the scientific consensus most of rocky planets may have known such structures, including Earth. Even if those systems are supposed to be vigorously convective and well mixed, partial crystallization could lead to the formation of a stratified basal layer.

We study thermo-solutal convection in a terrestrial magma ocean, undergoing partial crystallization at its bottom interface, modelled by a specific boundary condition coupling thermal and compositional fluxes.

We observe different convection regimes depending on the intensity of the basal latent heat flux, the secular cooling and the thermo-solutal coupling. These are: wholly convective regime, erosion regime –during which a basal layer is eventually mixed by surface convection–, and enduring stratification regime –for which the basal layer is

1. À savoir où la température mais aussi la composition peuvent contribuer aux variations de flotabilité, les deux champs diffusant par ailleurs de façon indépendante.

preserved. We show that this dynamics is essentially monitored by the Rayleigh ratio w . This one can be computed *a priori* from input parameters. For $w < 3$, any basal stratification is ultimately eroded by surface convection. We suggest that, when the cooling is slow enough, Earth’s magma ocean may not have been able to mix a basal stratified layer.

3.3 Introduction

3.3.1 The Concept of Magma Ocean

Magma oceans are geophysical objects currently not found in our solar system. They consist in a deep (no less than several tens of kilometers) shell of low viscosity liquid silicates, analogous to a molten mantle. In the 70’s, the specific nature of lunar surface rocks (that is old anorthosite lunar highlands and younger KREEP enriched basaltic plains, [Warren \(1985\)](#); [Wood et al. \(1970\)](#)) sampled by the Apollo and Luna missions have lead to the development of this new concept. In brief, the Moon’s mantle was initially molten, *i.e.* made of a lunar magma ocean. Over time, its incongruent crystallization produced buoyant feldspaths (base of the old anorthositic crust). Later the residual liquid, enriched in KREEP elements, reached the surface and flooded large basins forming some of the lava plains today called *maria* (see for example [Elkins-Tanton et al. \(2011\)](#)). Historically, this primitive molten state of the lunar mantle and the apparent similarity of lunar and terrestrial rocks composition formed the basis of the giant impact model for the formation of the current Earth-Moon system (see [Canup \(2004\)](#)). We should also bear in mind that evidence of the past existence of a magma ocean has also been found from the analysis of meteorites originated from Mars and Vesta ([Kleine et al., 2004](#)).

3.3.2 Terrestrial Case

Following the current scientific consensus, Earth may have undergone giant impacts during its formation ([Solomatov, 2007](#)). Such impacts (as the postulated Moon-forming one) were able to melt a large part of the nowadays solid mantle ([Nakajima and Stevenson, 2014](#)), producing a magma ocean. Due to its larger size (and heat production rate) Earth was able to initiate plate tectonics after fully crystallizing its mantle, which erased almost every clue of a primitive magma ocean ([Elkins-Tanton, 2012](#)). Nevertheless more discrete testimonies of this object have been found under the form of geochemical traces. Particularly, $^{182}\text{Hf}/^{182}\text{W}$ ratio comparison between Earth and Moon rocks gave some evidences about the past presence of a magma ocean. It indicates that Earth core was formed quite quickly (some tens of million years) which is compatible with a largely molten Earth ([Yin et al., 2002](#)). Similarly, these comparisons show that the core of the

moon forming impactor should have extracted most of the siderophile elements present in the Earth mantle, which implies a substantial metal-silicate equilibration (Touboul et al., 2015). One could also mention that Fe isotopes signatures found in the Isua Supracrustal Belt (Greenland) rocks can be explained by the melting of a magma ocean cumulate component in the upper mantle (Williams et al., 2021).

Thus, the initially liquid terrestrial mantle had to cool down and freeze in order to produce our current ductile mantle, animated by convective motion. Due to a steeper liquidus than the isentropic temperature profile, terrestrial magma ocean are assumed to crystallize from the bottom upward. Nevertheless, if almost every solid is denser than its liquid equivalent at atmospheric pressure and then sinks in it, we should bear in mind that liquids are more compressible than solids. This implies that under strong enough pressures (several hundreds of kilometers Agee and Walker (1993)) a solid can be positively buoyant and rise up to an equilibrium depth even if it would have sunk at lower pressures. Moreover, since the crystallization is necessarily uncongruent (see sec. 3.3.3), composition effect may also lead to solids less dense than liquid. Eventually, the solidification of a terrestrial magma ocean may have built a mid-layer of solid that separated the magma ocean into two distinct parts (top and bottom magma oceans). Thus the solid shell thicken respectively downward and upward (see Caracas et al. (2019); Labrosse et al. (2015)).

The structure of the solid mantle at the end of this crystallisation time is of great interest for us. It determines an initial state for plate tectonics or may explain seismic anomalies observed at the bottom of the mantle today (Labrosse et al., 2007). Crystal suspension (Solomatov, 2007) and interaction with the atmosphere (Hamano et al., 2013; Lebrun et al., 2013), for example, were studied in that context. It has been shown that a thick H₂O atmosphere was able to slow significantly the cooling time of a surface magma ocean (up to several tens of Myr, whereas simple black body radiation leads to far shorter lifetimes, about some tens of thousand years).

Finally, we should also bear in mind that magma oceans are probably not specific to the Earth-Moon system. It is highly probable that almost every rocky planet or large enough rocky planetesimal (in our solar system as in other ones) knew a “lava-world” phase. The instrumentation improvements develop the interest in discovering exoplanets undergoing a magma ocean phase (Chao et al., 2021).

3.3.3 Thermal Convection & Partial Crystallization

The terrestrial surface magma ocean is not known with extreme precision but was probably characterised, at its formation, by a large depth ($\sim 1 \times 10^6$ m), low viscosity (~ 0.1 Pa s) and rapid flows (~ 10 m s⁻¹) (Solomatov, 2007). Indeed, low viscosity and

tremendous radiative heat loss at the surface are expected to produce a vigorous thermal convection.

Thermal convection is the main heat transfer mechanism in the interiors of planets and many stars (Phillips, 2013), it is responsible for most of their dynamics. Rayleigh-Bénard convection is commonly used as a model for the dynamics of such astrophysical objects (Busse, 1989; Busse and Carrigan, 1976). Rayleigh-Bénard convection is the flow which develops in a plane layer subject to a potentially destabilising temperature difference. A horizontal layer of fluid heated from below and cooled from above can be unstably stratified – assuming, as it is most usually the case, that the thermal expansion coefficient is positive. Indeed, in that case, the upper cold fluid is denser than the hot one at the bottom. It has been demonstrated (Chandrasekhar, 1961; Rayleigh, 1916) that for a large enough temperature gradient, the fluid adopts a convective state in which heat transport is partially carried out by fluid motion. Moving from planar to spherical geometry has multiple influences –on heat transport for example (Jarvis et al., 1995)– but do not alter the general dynamics.

Coming back to the terrestrial magma ocean, its postulated strong convection implies its interior to be well mixed and essentially isentropic (Solomatov, 2000). This understandable assumption has often been chosen as a way of simplification and a reason to use 1D models. Nevertheless, an important physical property of the liquid magma ocean is its composition. Indeed, magma are not pure compounds which means that, almost systematically, they partially crystallize. This implies that, for a given composition of an initial liquid, its cooling down and freezing produces a solid and a residual liquid of different compositions.

Thanks to a rough approximation, one is able to model the magma ocean composition as an olivine one with only two main end-members. One is a magnesium-rich with composition Mg_2SiO_4 and density $3.3 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$, the other is a denser ($d = 4.4 \times 10^3 \text{ kg m}^{-3}$) and iron rich component Fe_2SiO_4 . This binary liquid has to cool down and freeze. Schematically this process is illustrated by the fig. 3.1. Thus, when the solid is crystallized, residual liquid composition is altered. Since iron-rich component has the lowest fusion point and is the less abundant component, the solid gets depleted in iron with respect to the initial liquid while the liquid is going to be enriched in it.

This mechanism can end up in a general basal enrichment of a surface magma ocean crystallizing from the bottom upward and, eventually, to the constitution of a chemically stratified basal layer. Such stably stratified magma ocean could be found less prompt to develop vigorous convection and to homogenize its composition (inversely, in a basal magma ocean crystallizing from the top downward, partial crystallization would have a destabilizing effect).

Conversely, since a weak mass flux is expected at the surface of the magma ocean, the

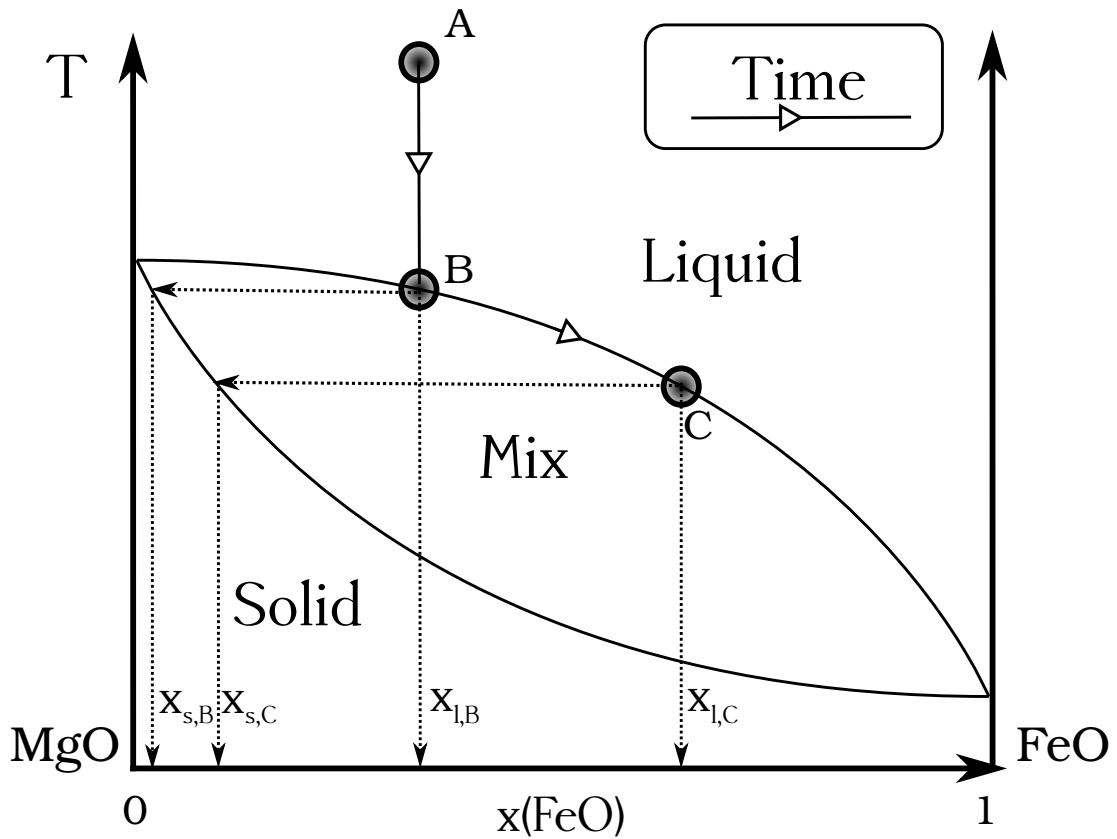


Figure 3.1 – Schematic representation of a binary diagram (composition x as a function of temperature T) relative to an ideal mixture of two components, here an iron rich (FeO) and iron depleted one (MgO). The trajectory of the cooling down of a liquid in initial state A (composition x_{lB}) is represented by empty arrows. The first solid appears in B with the composition x_{sB} . Solidification leads to a diminution in MgO fraction up to an arbitrary point C.

surface compositional gradient (stabilizing) can be neglected. Thus, the top destabilizing thermal gradient may remain undisputed and able to generate a convection limited to the upper part of the system.

3.3.4 Thermo-solutal Convection

It is then necessary to solve the competition between stabilizing solutal and destabilizing thermal gradients to determine in which regime a terrestrial magma ocean would be. For example, is a chemically stratified basal layer able to survive the erosion produced by a convective layer above?

With this goal in mind, the compositional buoyancy contribution –that is chemical composition– must be taken into account, leading to consider double-diffusive convection. This one refers to various instability phenomena produced by two different fields influencing buoyancy. The two fields are most of the time two chemical concentrations or –as it is presented here– a chemical and a thermal field, both diffusing at different rates. This difference is merely estimated with the ratio of their diffusion coefficient called the

Lewis number Le (estimated to be around 100 to 1000 for magma oceans). Numerous former works have determined different regimes of double-diffusive convection (salt fingering or oscillatory diffusive instability, Radko (2013)) depending on the stabilizing or destabilizing nature of “quick” and “slow” to diffuse fields. Even if it was applied firstly to oceanography (Radko, 2013), double diffusive convection is also ubiquitous in planetary interiors (Hansen and Yuen, 1990) or astrophysics (*e.g.* Garaud (2018)). In our surface magma ocean model, the destabilizing field (*i.e.* the temperature) diffuses faster than the composition ($Le \ll 1$) which has a stabilizing effect. This corresponds to an oscillatory diffusive instability.

In addition to proper double-diffusive phenomena we must take into account all the mechanisms by which an initially stably stratified layer can be eroded by a contiguous convective layer. This problem received attention in stellar (*e.g.* Pratt et al. (2017)) or geophysical contexts (*e.g.* Davaille et al. (2003)). It seems that up to now, few studies (except Bouffard et al. (2020) for example) have considered time-dependent spherical stably stratified layers subjected to erosion.

In this article we use a hydrodynamical approach and numerical tools in order to determine the mass and energy transport regimes in a crystallizing terrestrial surface magma ocean.

3.4 Methods

3.4.1 Physical System

The system we choose to model is a surface magma ocean of 10^3 km deep delimited by an already solidified mantle at the bottom and an atmosphere at the top. This magma ocean undergoes a partial crystallization at its bottom interface (we do not consider particle suspension effects) and a secular cooling, we neglect any radiogenic heat production. The system is studied in a stationary state in which there is no net growing of the mantle. Consequently the basal mass flux is compensated by a volumic sink term in order to enforce a null mass flux at the surface.

We consider a spherical shell of aspect ratio $\eta = r_i/r_e = 5/6$ (all the parameters and fields used are listed in the appendix A.3.1), with r_e , S_e and r_i , S_i the external and internal radii and surfaces respectively. This shell is filled with a Newtonian fluid of constant kinematic viscosity ν , thermal conductivity k , reference density ρ_0 , specific heat capacity c_p and thermal expansivity α .

The fluid is constituted of two components, one of them called the heavy one. It defines a mass concentration C and a compositional expansion coefficient $\beta = -\rho^{-1} \frac{\partial \rho}{\partial C}$. The two components are assumed to form an ideal solution, the heavy one is charac-

terized by a density ρ_h , a reference mass concentration ξ_0 and a diffusivity coefficient D .

3.4.2 Reference Fields

The system is subject to a radial gravity field $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_r$, with g assumed as uniform. In fact this uniform value is relevant for thin shells (in which variation of gravity can be neglected) but also in the case of Earth mantle studies. Gravity at the bottom of the mantle is about 10.7 m.s^{-2} and varies of less than 10% up to the Earth's crust (Dziewonski and Anderson, 1981). Here our system of interest is equivalent to a molten Earth's mantle. Consequently, we use a constant gravity.

We assume that a basal heat flux $Q_i = S_i q_i$ is injected in the system while the whole shell is subject to a uniform internal heating H . This term does not express exclusively radiogenic heat production but essentially secular cooling in the case of a terrestrial magma ocean. Moreover a compositional flux $J_i = j_i S_i$ is imposed at the bottom interface and is completely compensated by a uniform sink term H_C in order to suppress the surface compositional flux.

We use the Boussinesq approximation, that is variations of density are neglected except in their contributions to the buoyancy force in which the density ρ varies as

$$\frac{\rho}{\rho_0} = 1 - \alpha(T' - T_0) - \beta(C' - C_0), \quad (3.1)$$

ρ_0 and T_0 are reference values of density and temperature and T' the temperature anomaly around T_0 .

The reference state is motionless (uniform zero velocity) and follows radial diffusive temperature and compositional profiles T_{ref} and C_{ref} between the two boundaries.

Solving the heat equation for a system subject to a basal heat flux density q_b and a uniform heat source h_T allows us to write,

$$T_{ref}(r) = \frac{1}{3} \left(\frac{-h_T r^2}{2\kappa} - \frac{h_T r_i^3}{\kappa r} + \frac{3q_b r_i^2}{\kappa r} \right), \quad (3.2)$$

with $h_T = H/\rho c_P$ and κ the thermal diffusivity.

Solving the mass conservation of the heavy component for a system subject to a basal mass flux exactly compensated by a uniform sink-term h_C leads to

$$C_{ref}(r) = \frac{h_C}{3} \left(\frac{-r^2}{2} - \frac{r_e^3}{r} + \frac{3r_e^2}{2} \right), \quad (3.3)$$

with $h_C = H_C/\rho_h D$.

In the following, temperatures and concentrations in heavy component are defined

with respect to these two reference profiles.

3.4.3 Equations of Conservation

The physical behavior of the system is basically monitored by four equations of conservation (conservation of momentum –the Navier-Stokes equation–, total mass, heavy component mass and energy) associated with boundary conditions.

The problem is rendered dimensionless using $\delta L = r_e - r_i$ as length scale, $\frac{\nu}{\delta L}$ as velocity scale, $\delta T = \frac{h_T \delta L^2}{\kappa}$ as temperature scale, $\delta C = h_C \delta L^2$, $\delta q = H \delta L$ as a thermal density flux scale and $d^2/\rho\nu^2$ as pressure scale.

The system of equations is characterised by the following dimensionless numbers: the thermal and chemical Prandtl numbers $Pr_T = \nu\rho_0 c_p/k$ and $Pr_C = \nu/D$ (Pr_C is also called Schmidt number) and the thermal and chemical Rayleigh numbers $Ra_T = \frac{g\alpha\delta T\delta L^3}{\nu^2}$ and $Ra_C = \frac{g\beta\delta C\delta L^3}{\nu^2}$.

The dimensionless conservation equations are then

$$\frac{\partial\Theta}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\Theta + \frac{T_{ref}}{\delta T} \right) = \frac{1}{Pr_T} \nabla^2 \Theta \quad (3.4)$$

for the energy,

$$\frac{\partial\Xi}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \left(\Xi + \frac{C_{ref}}{\delta C} \right) = \frac{1}{Pr_C} \nabla^2 \Xi \quad (3.5)$$

for the composition in heavy element,

$$\left(\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} \right) + \nabla \Pi = \nabla^2 \mathbf{u} + (Ra_T \Theta + Ra_C \Xi) \mathbf{e}_r, \quad (3.6)$$

for the momentum and

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (3.7)$$

for the mass, with \mathbf{u} , Θ , Ξ and Π the fluid velocity, the temperature anomaly and the reduced pressure respectively.

3.4.4 Boundary Conditions

Specific boundary conditions have been chosen and implemented in order to model a stationary (motionless limits) magma ocean crystallizing from the bottom upward.

At first, regarding thermal boundary conditions, we impose a fixed temperature boundary condition at the top (*i.e.* $\Theta(r_i) = 0$) to model thermal equilibrium with an overheated atmosphere. In this case the top boundary condition could be more precisely modelled by a Robin boundary condition, nevertheless it has been shown that a fixed temperature boundary condition can be safely used alternatively in the case of a terrestrial magma ocean (Clarté et al., 2021).

At the bottom we impose a specific boundary condition we call *uniform-T boundary condition*. This one has a different behavior for the mean value and the lateral fluctuations (we numerically process differently $l = 0$ and $l \neq 0$ spherical harmonic degrees) of the field. The mean value (computed over the whole interface) of the thermal flux is fixed (*i.e.* $\frac{\partial \Theta}{\partial r}(r_i, l = 0) = 0$) but it can vary locally around this fixed mean value. Conversely, the mean temperature value is free to vary while it has to remain uniform on the whole boundary. All these mechanisms correspond to a situation for which the pressure at the bottom is set by the uniform depth of the limit, which imposes a uniform value of the temperature thanks to the liquid-solid equilibrium.

Finally, for the composition, we set its flux at the top interface ($\frac{\partial \Xi}{\partial r}(r_e) = 0$) which means that no mass is lost through the atmosphere. This point could be discussed since evaporation can occur for high enough surface temperatures, (*e.g.* [Perez-Becker and Showman \(2013\)](#), [Kite et al. \(2016\)](#)).

The bottom compositional flux is coupled with the thermal one. Indeed, we assume that partial crystallization, occurs at the bottom interface of the system, altering the composition of the liquid. We model it the simplest way by assuming that the light component only crystallizes while the heavy one remains in the liquid (although in reality, both components are present in the two phases with different proportions). Consequently, the basal latent heat flux is linked (in fact proportional) to the heavy component flux, and if this latent heat flux is assumed to be the only contributor to the basal heat flux we are able to write,

$$\frac{\partial C}{\partial r}(r = r_i) = \frac{k\xi_0}{\rho_h D \mathcal{L}} \frac{\partial T}{\partial r}(r = r_i), \quad (3.8)$$

with \mathcal{L} the specific latent heat, thanks to the energy balance. Eq. 3.8 expresses this link between the energy needed to crystallize a certain amount of fluid and the mass of residual liquid produced during this transformation. This relation is applied to the reference fields (T_{ref}, C_{ref}) as well as the anomalies (T, C).

In fact, eq. 3.8 is equivalent to express a relation between the composition and temperature scales,

$$\delta C = \varphi d \frac{\xi_0 k}{\rho_h D \mathcal{L}} \delta T \quad (3.9)$$

(when $d = \frac{3\eta^2(1-\eta)}{(1-\eta^3)}$ is a geometrical parameter and $\varphi = q_i/\delta q$ the dimensionless basal latent heat flux) and between the two Rayleigh numbers,

$$Ra_C = Ra_T Le^2 \Lambda \varphi \gamma d \quad (3.10)$$

with $Le = \kappa/D$ the Lewis number, $\gamma = \rho_0/\rho_h$ the density contrast and $\Lambda = \frac{\beta \xi_0 c_P}{\mathcal{L} \alpha}$ the

dimensionless coupling parameter. In the following, for convenience, we use the relation

$$Ra_C = -Ra_T \lambda. \quad (3.11)$$

Using reference quantities defined in sec. 3.4.3, the reference buoyancy fields C_{ref} and T_{ref} (defined eq. 3.2 and 3.3) can be written in a dimensionless framework,

$$C_{ref}/\delta C = \frac{-r_e}{3} \left(\frac{r^2}{2r_e} + \frac{r_e^2}{r} - \frac{3r_e}{2} \right), \quad (3.12)$$

$$T_{ref}/\delta T = \frac{1}{3} \left[-\frac{r^2}{2} + \frac{r_i^2}{r} (3\varphi - r_i) \right]. \quad (3.13)$$

We also considered non-coupled systems as a comparison tool for which T_{ref} as well as C_{ref} are coupled at the base (that is their basal slope is made proportional) of the ocean but not the anomalies with respect to them (Θ and Ξ). In that case, the bottom boundary condition is a mere fixed flux boundary condition for T and C . In the following we qualify this configuration of “no-coupling” which differs from the “thermo-solutal basal coupling”.

Mechanical boundary conditions imposed on \mathbf{u} are non-penetrative ($u_r = 0$), stress-free at the top (*i.e.* tangential stress is null at $r = r_e$, that is $([\boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{n}) \cdot \mathbf{t} = 0$, with $[\boldsymbol{\sigma}]$ the tensor of viscous stresses of the fluid, \mathbf{t} the tangential and \mathbf{n} normal vector to the interface) and no-slip at the bottom ($\mathbf{u} = \mathbf{0}$ at $r = r_i$). This is equivalent to a basal contact with the already crystallized mantle and the free-surface of an ocean in contact with an atmosphere without primitive crust at the top.

3.4.5 Parameters

A factor which is not included in our work is the role played by rotation effects on convection. In fact, rotation is able to impact dramatically Rayleigh-Bénard convection, altering convection patterns (elongated in Taylor columns) and increasing the intensity of the thermal gradient needed to start convection (Chandrasekhar, 1961). The convective Rossby number $R_{oc} = \left(\frac{Ra}{Pr} \frac{Ek^2}{r} \right)^{1/2}$ is frequently used as a parameter to estimate how much rotation can affect convection. R_{oc} estimates roughly the ratio of buoyancy to Coriolis forces (Gilman, 1977). This means that for $R_{oc} \gg 1$ convection may not be affected by the rotation effects and can be treated without taking it into account. In the case of fully convecting deep magma oceans we find $R_{oc} \sim 100$.

Obviously, since we are interested in cases for which convection may not be strong enough to fully mix the liquid shell, our system would probably be influenced by rotation. Nevertheless we choose to focus on the effect of the thermo-solutal coupling. Adding rotation effect is left for a future work.

Table 3.1 – Dimensionless numbers characterizing a terrestrial global magma ocean, maximal and minimal values are given, computed from Solomatov (2007), Maas and Hansen (2015), Snyder et al. (1994), Chao et al. (2021) and our own calculations *c.f.* appendix A.3.2. The extremal values for each parameter cover the full range between a fully liquid magma ocean to a suspension, containing 50% of crystals in volume, and from no- to thick-atmosphere covered surface. Finally, the range of parameters used in this study is precised.

Name (symbol)	Magma Ocean	Range in this paper
Convective Rossby number (R_{oc})	10^{-2} to 10^2	∞
Thermal Prandtl number (Pr_T)	10^1 to 10^3	0.3 to 3
Thermal Rayleigh number (Ra_T)	10^{24} to 10^{30}	10^5 to 10^8
Lewis number (Le)	10^4	10
Latent heat flux number (φ)	10^{-1} to 1	10^{-4} to 10^3
Thermo-solutal coupling number λ	10^4	0 to -10^3

The system can be adequately described using a few dimensionless numbers which are listed in Tab. 3.1 with their estimated range of values in the case of a terrestrial magma ocean. These parameters constitute extreme conditions for numerical simulations (for example in terms of Ra) which cannot be considered with current computational resources. Since we focus here on a specific aspect of such a system (modelled by the thermo-solutal coupling) we restricted our study to a more convenient parameter space which is also given in the same table.

The φ parameter (proportion of latent heat in the total heat budget compared to the secular cooling) has been estimated thanks to a small model detailed in the appendix A.3.2. For a 10^3 km deep surface magma ocean, we found $\varphi \sim 10^{-1}$. Since the surface to volume ratio of the magma ocean can evolve with its freezing we should bear in mind that φ increases *a priori* with the crystallization, reaching $\simeq 7$ for $\eta = 0.99$ for example.

Since our system is, in fact, characterized by three Rayleigh numbers (that is $Ra_T, \varphi Ra_T, \lambda \varphi Ra_T$) we define, for more convenience two effective Rayleigh numbers RaX_0 (with $X = C$ or T), on the basis of the thermal or compositional reference (C_{ref}, T_{ref}) gradients across the shell ($\Delta X_{ref} = X_{ref}(r = r_i) - X_{ref}(r = r_e)$). Here, $RaT_0 = Ra_T(\delta T = \Delta T_{ref})$ and $RaC_0 = Ra_C(\delta C = \Delta C_{ref})$. This enables us to define the ratio of the effective Rayleigh number

$$w = \frac{-RaC_0}{RaT_0}, \quad (3.14)$$

$w \rightarrow 0$ implies chemical stabilization is negligible while $w \rightarrow \infty$ traduces the opposite case. w is proportional to the inverse of the density ratio R_0 which is known to be the major control parameter of double-diffusive convection regime (see for example Garaud (2018)) in a context of a constant gradient setup. Here $w = Le/R_0$. We also define the

parameter p quantifying the proportion of latent heat in the surface heat flux,

$$p = \frac{3\varphi\eta^2}{1 - \eta^3 + 3\varphi\eta^2} \quad (3.15)$$

wich goes from 0 to 1 when $\varphi \in [0, +\infty[$.

The following results will be presented with respect to the new parameter trio: (RaT_0, w, p) . RaT_0 describes the thermal Rayleigh number quantifying the destabilizing global gradient whatever it comes from. w gives the strength of the stabilizing gradients with respect to the destabilizing ones. p indicates if the surface flux is due to the crystallization ($p \rightarrow 1$) or the secular cooling ($p \rightarrow 0$). A terrestrial magma ocean is expected to be characterized by $(RaT_0 \sim 10^{24}$ to 10^{30} , $w \sim 10^1$ to 10^3 , $p \simeq 0.6$ to 0.8).

3.4.6 Numerical Tools & Diagnoses

The problem is solved by the XSHELLS code (freely available at <https://bitbucket.org/nschaeff/xshells>). This code has been used to solve convection in spherical rotating shell (see for example Kaplan et al. (2017) or Guervilly et al. (2019)). XSHELLS solves the Navier-Stokes equation in spherical setup thanks to the toroidal-poloidal decomposition and a pseudo-spectral approach using the fast SHTns library (Schaeffer, 2013). Poloidal and toroidal scalars as well as temperature and composition are expanded over truncated spherical harmonics. In the radial direction, XSHELLS uses a second order finite difference differentiation. The numerical code has been modified for this study in order to take into account the thermo-chemical basal coupling described in sec. 3.4.4.

Each simulation is run long enough to reach a statistically steady state. We then obtain a 3D-distribution of the anomalies of the main fields (temperature, velocity etc.). From these, we extract 2D maps of anomalies or global quantities at a given time and compute time-averaged data. We mainly use the following diagnoses: the total kinetic energy E_c , the chemical and thermal Nusselt numbers $Nu_C = \Delta C_{ref}/\Delta C_{conv}$ and $Nu_T = \Delta T_{ref}/\Delta T_{conv}$ (ΔX_{ref} is the total gradient across the shell imposed by the reference field X_{ref} and ΔX_{conv} the same quantity computed in the convective statistically stationary state).

3.5 Heat and Mass Transport Regimes Observed

We conducted numerous simulations to explore the parameter space defined by the ranges of the table 3.1. This implies mainly varying RaT_0, w, p (equivalent to λ, φ, Ra), Pr_T and the coupling setup. Generally speaking we did not observe influence of the coupling configuration. The only exception to this point is an effect on the convective

threshold for $p \ll 1$, $Pr_T = 0.3$, the coupled cases being seen more stable (their critical Rayleigh number is higher) than the non-coupled ones.

The exploration of the (w, p) parameter plane is limited by the convective domain of the system which is determined by RaT_0 . This one was never more than 10^8 . Typically, increasing w increases the critical value of RaT_0 . Once the non-convective configurations have been eliminated, the remaining cases are studied and classified on the basis of their convective state.

3.5.1 Fully Convective Regime

Most of the configurations show a classical full convection, that is a convection active in the whole shell, as soon as $w < 1$. From the beginning of the convection, the shell is wholly convective, as represented by the radial component of the velocity, plotted on fig. 3.2, which is non-zero inside the whole shell except in the top and bottom boundary layer. Once the statistically stationary state is reached (and made visible by the stationarity of the Nusselt numbers, see fig. A.8), compositional, velocity and temperature profiles show a specific shape. Velocity and solutal profiles are drawn on fig. 3.3 (temperature has an equivalent behavior). The compositional profile is mostly constant in the bulk of the shell, as expected due to the convective homogenization. One sees that solutal profiles show the expected shape due to the boundary condition, with a constant mean flux (identical to the reference one) at the bottom and a zero flux at the top. One can notice that an –expected– consequence of the homogenization is the decrease in concentration gap between top and bottom interfaces. The initial composition difference is partly reduced and concentrated near the bottom limit, where rigid mechanical boundary conditions imposes zero velocity and then no mixing.

3.5.2 Erosion Regime

In other cases, usually $3 \gtrsim w \gtrsim 1$ the convection begins by developing only in the upper part of the shell, the remaining part being motionless. This bottom shell is stably stratified in terms of total buoyancy, this being a consequence of a stronger compositional stabilizing gradient. Nevertheless, the limit between the convective and the non-convective shell moves downward. The stratified layer is eroded and its content mixed in the convective layer. The profiles drawn on fig. 3.4 give an illustration of the phenomenon. During the first part of the simulation ($t < 3$), flow is observed mainly for $r > 5.2$. Then between $t = 2$ and $t = 6$ the limit is moved downward. When the statistically stationary state is reached, the general configuration of the flow is hardly distinguishable from one in a fully convective regime.

Practically, this regime is recognized using mean square velocity radial profiles.

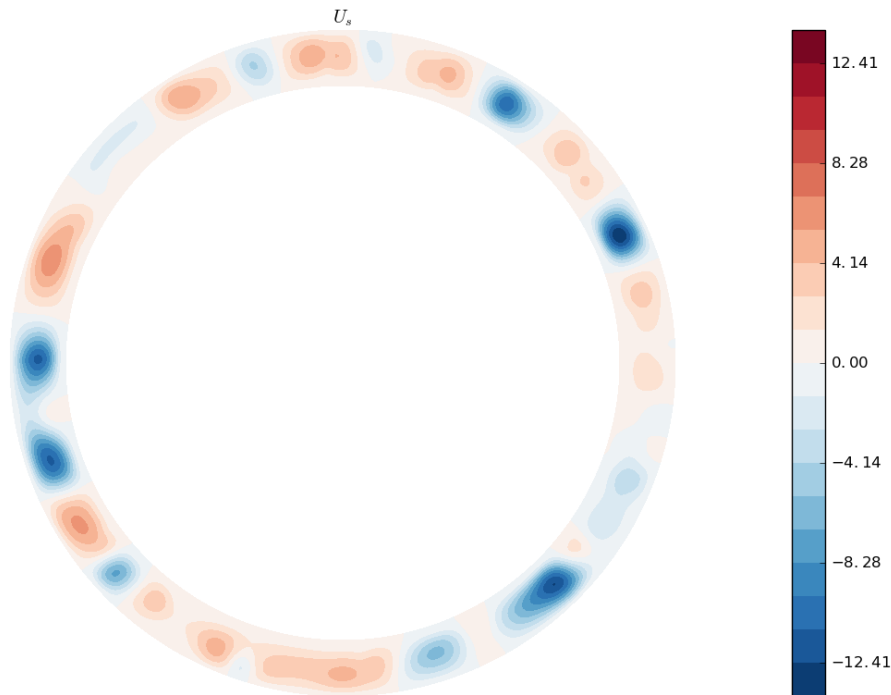


Figure 3.2 – Equatorial view of the radial component of the velocity field, T and C fields are coupled at the lower boundary, $RaT_0 \simeq 5.10^4$, $w \simeq 0.58$, $p \simeq 0.2$, $Pr_T = 3$. Note that the whole shell is convective.

When a range (and not the single basal point) of basal radii is characterized by zero mean square velocity and is progressively shrunk down to a fully convective configuration, the case is assigned to the erosion category.

3.5.3 Enduring Stratification Regime

For some configurations characterized by $w > 3$ a different erosion scenario is observed. After surface convection develops above a stably stratified layer and begins to mix it, the erosion weakens then vanishes before all the stratified layer is consumed. This final state is described by the profiles on fig. 3.5. Consequently, the statistically stationary state is always characterized by an enduring stratification below a convective layer, as illustrated by the fig. 3.6. The erosion process is very similar to the one described in section 3.5.2. It is illustrated by the fig. 3.7, in that simulation the convective area extends from $r \simeq 5.4$ to $r \simeq 5.1$. Even if the enduring stratification area is largely reduced, the mean square velocity profile at the bottom boundary indicates clearly the absence of flow near –and not only at– the bottom boundary.

Practically the same process as in the erosion category is used to recognize enduring stratification cases. Those are characterized by a range of basal radii characterized by zero mean square velocity which can be shrunk but never erased until the stationary

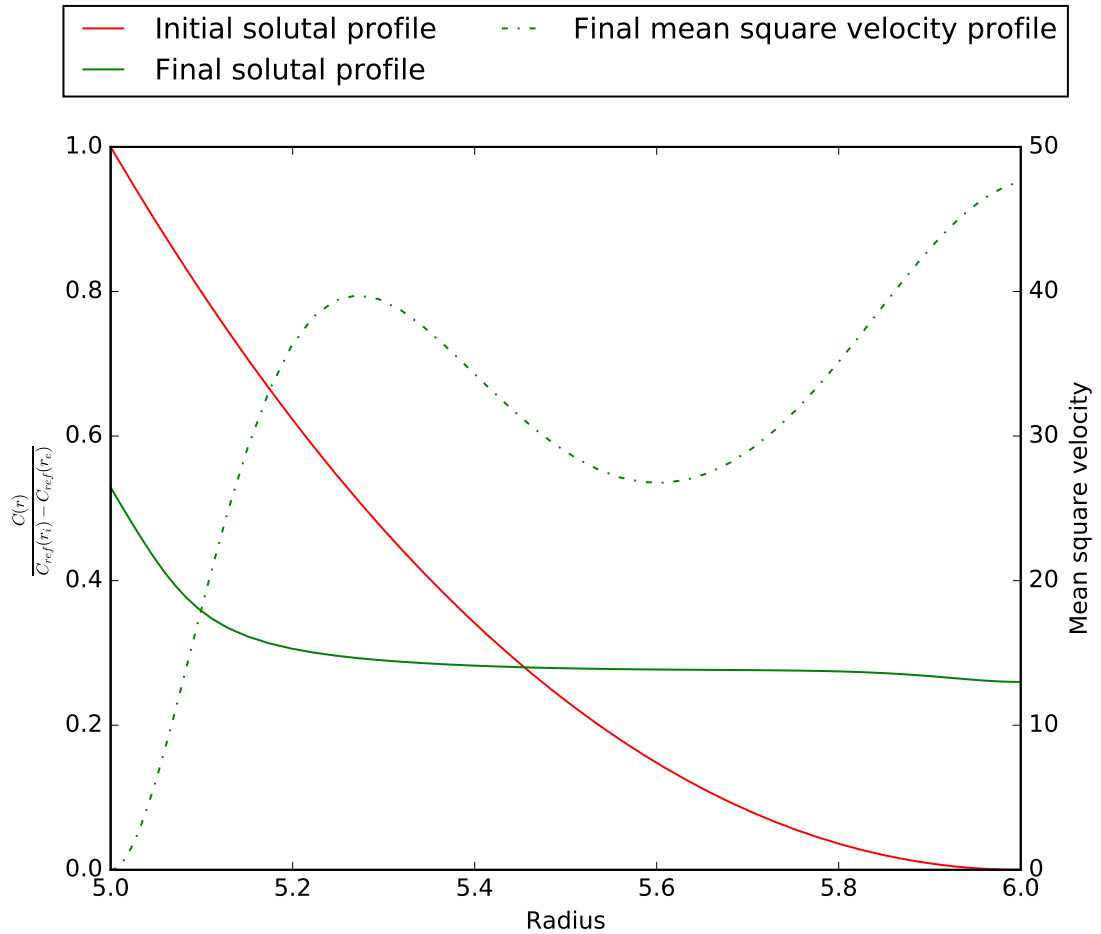


Figure 3.3 – Renormalized composition $\frac{C(r)}{C_{ref}(r_i) - C_{ref}(r_e)}$ (left axis) and mean square velocity (right axis) as a function of the radius in the shell for initial (static) and final states. T and C fields are coupled at the lower boundary, $RaT_0 \simeq 5.10^4$, $w \simeq 0.58$, $p \simeq 0.2$, $Pr_T = 3$. Note that convection has a tendency for mixing the interior of the shell, reducing the initial solutal gradient. Rigid bottom boundary condition imposes zero velocity for $r = r_i$.

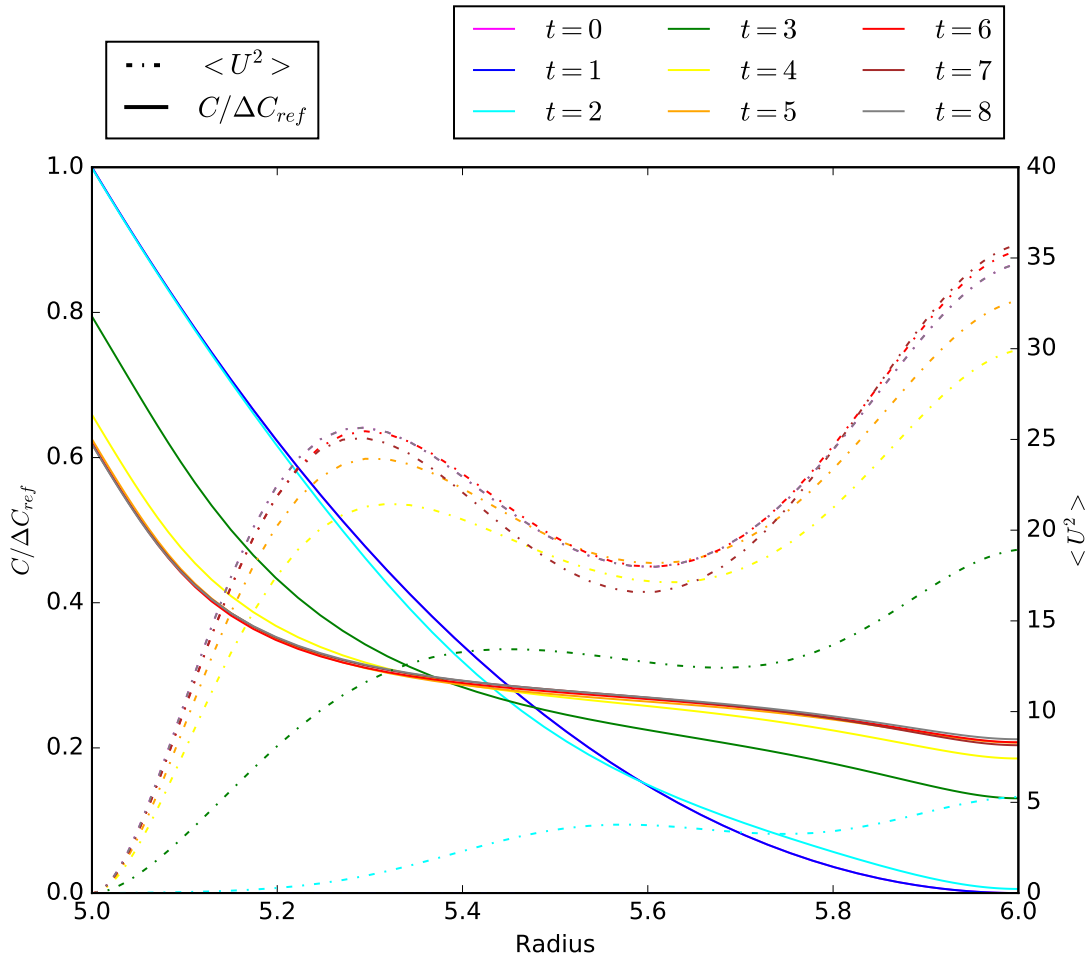


Figure 3.4 – Renormalized composition (left axis) and mean square velocity (right axis) as a function of the radius in the shell for different time-steps (viscous time is used here) from initial (static) to final states. $RaT_0 \simeq 4.5 \times 10^4$, $w \simeq 1.3$, $p \simeq 2.5 \times 10^{-3}$, $Pr_T = 3$. Up to $t = 2$, convection is only present in the upper part of the shell while the lowest one is static, occupied by a stable solutal gradient. Afterward, the stable layer is eroded by the surface convection until its total disappearance.

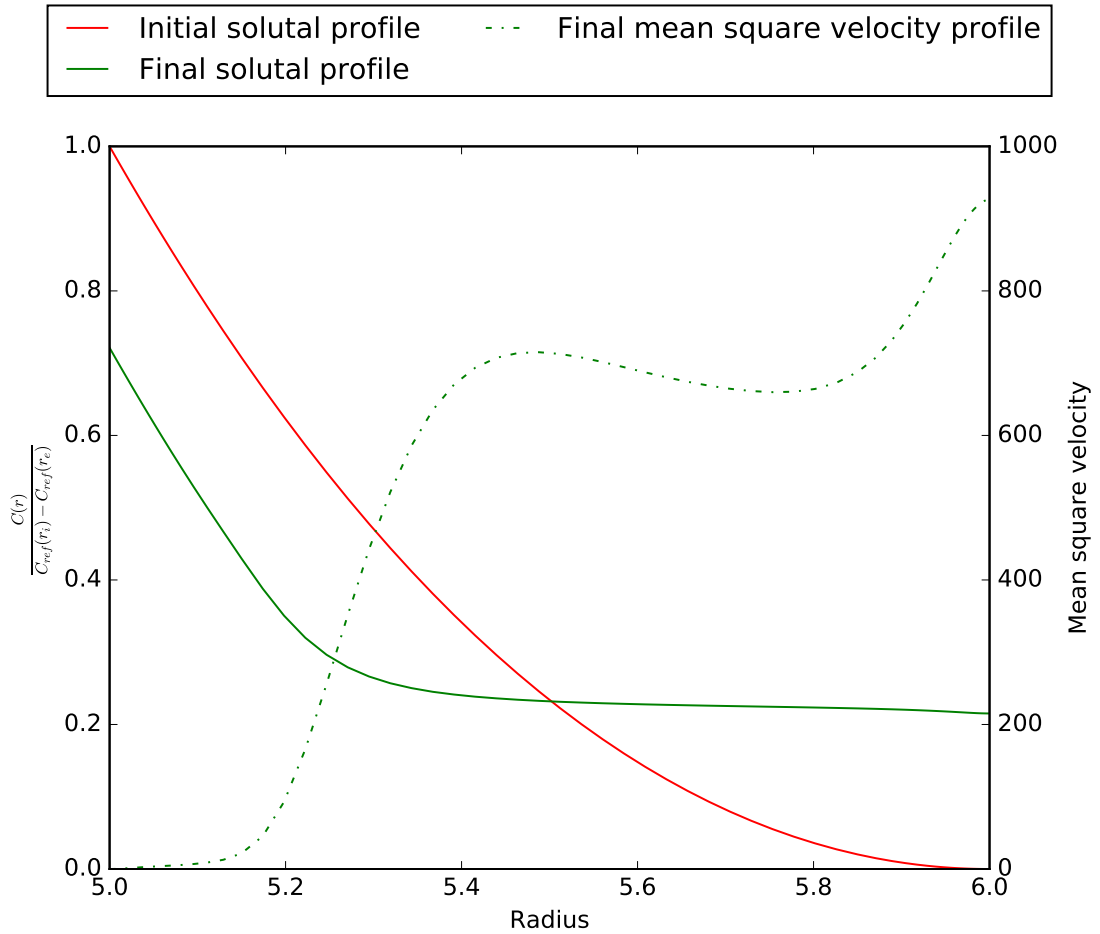


Figure 3.5 – Renormalized composition (left axis) and mean square velocity (right axis) as a function of the radius in the shell for initial (static) and final states. $RaT_0 \simeq 4.10^7$, $w \simeq 3.1$, $p \simeq 0.999$, $Pr_T = 3$. Note that convection only mixes the superior part of the shell, above static basal stratified layer.

regime is reached.

3.6 Regimes Diagram

As mentioned in the section 3.5, the three different convection regimes (that is full convection, erosion and enduring stratification) have been observed for specific ranges of parameters. On fig. 3.8 we plot on the (p, w) parameter plane the type of regime observed. We find that decreasing w –*i.e.* decreasing the intensity of the stabilizing gradients– leads to a succession of the three regimes, independently from p . Beginning from a non-convective (motionless and diffusive) configuration which is not represented here, the first convection type to develop is the enduring stratification one, with a final stratified layer (found to become thinner with the decrease in w). Then, when the convection is able to erode the whole stratified layer, the erosion regime is reached. The

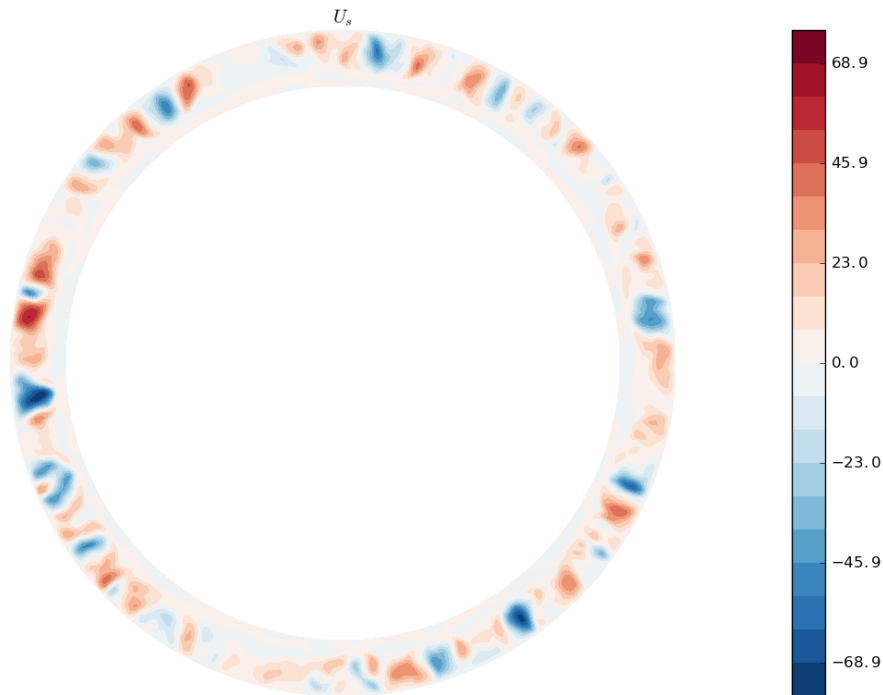


Figure 3.6 – Equatorial snapshot of the radial velocity component taken during the statistically stationary phase. Note that the bottom of the shell is occupied by a stagnant layer. T, C are coupled at the bottom, $RaT_0 \simeq 3 \times 10^6$, $w \simeq 3.1$, $p \simeq 0.99$, $Pr_T = 3$

transition is visible for $w \simeq 3$. Eventually when the shell becomes able to convect fully from the very beginning, the system is in the fully convective regime. This last transition is observed for $w \simeq 1$. The fact that w is the main control parameter is not entirely surprising since it is known to monitor most of double-diffusion convection regimes in the case of constant gradient setups.

The phase diagram appears to be robust with respect to variations of Ra_T , coupling configuration and Pr_T , at least in the range investigated and given in table 3.1. As a conclusion, since the w value computed for a terrestrial magma ocean should be about or larger than 10, we expect the system to be in the enduring stratification regime phase. It may imply that a terrestrial magma ocean would not be able to erode a pre-existent chemical stratification built by partial crystallization. In that case the system would only know evolution through net growing of the solid mantle, a process we did not implement here. Nevertheless we add a caveat: the phase diagram drawn fig. 3.8, could be altered in the case of more extreme RaT_0 values.

3.6.1 Dependence with other parameters

In addition we should mention that some other configurations of the system have been experimented –not shown in this article– including $Le = 1$ setups in a very restrained

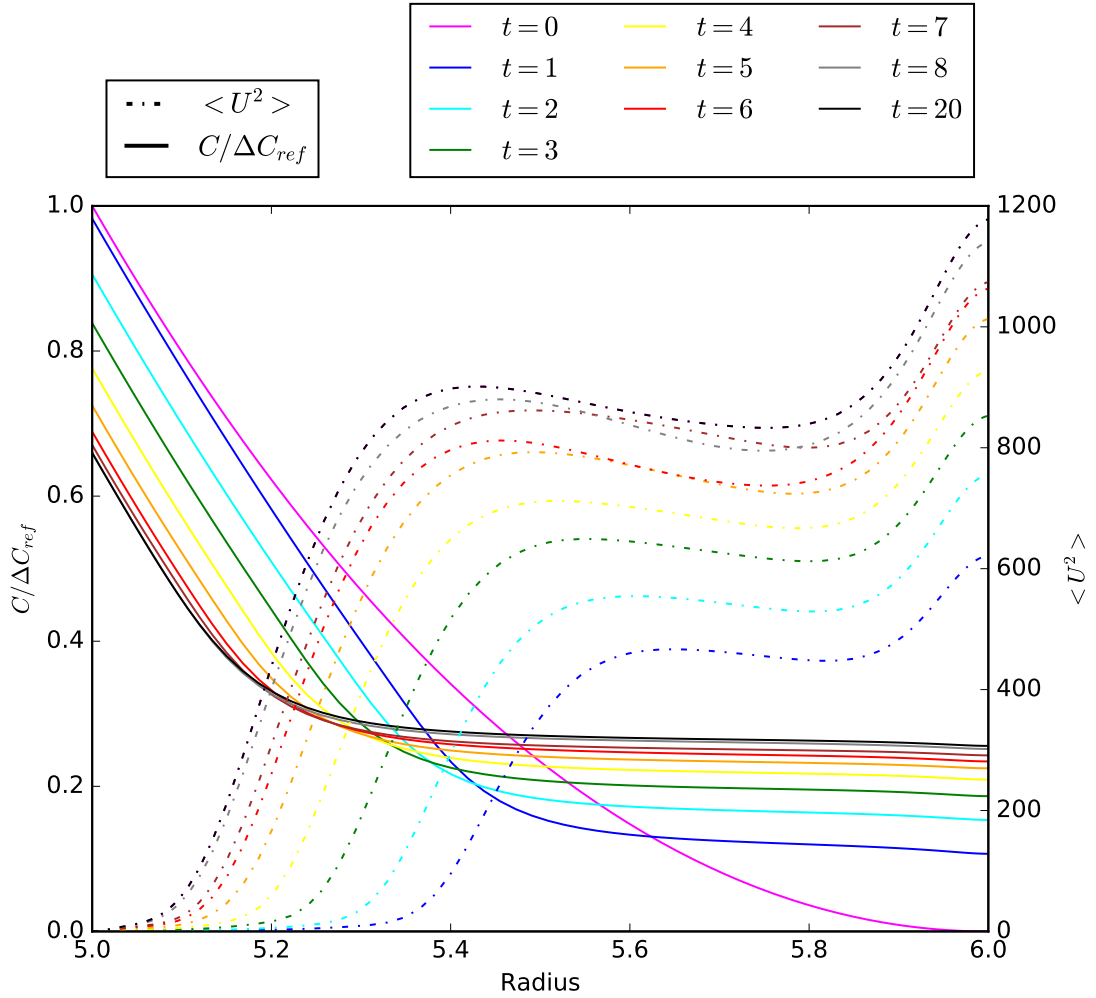


Figure 3.7 – Renormalized composition (left axis) and mean square velocity (right axis) as a function of the radius in the shell for different time-steps from initial (static) to final states. T and C fields are not coupled, $RaT_0 \simeq 4.2 \times 10^6$, $w \simeq 2.7$, $p \simeq 0.99$, $Pr_T = 3$. Note that after an initial eroding phase, the limit of the convective shell becomes stationary and preserves a part of the initial stratified layer.

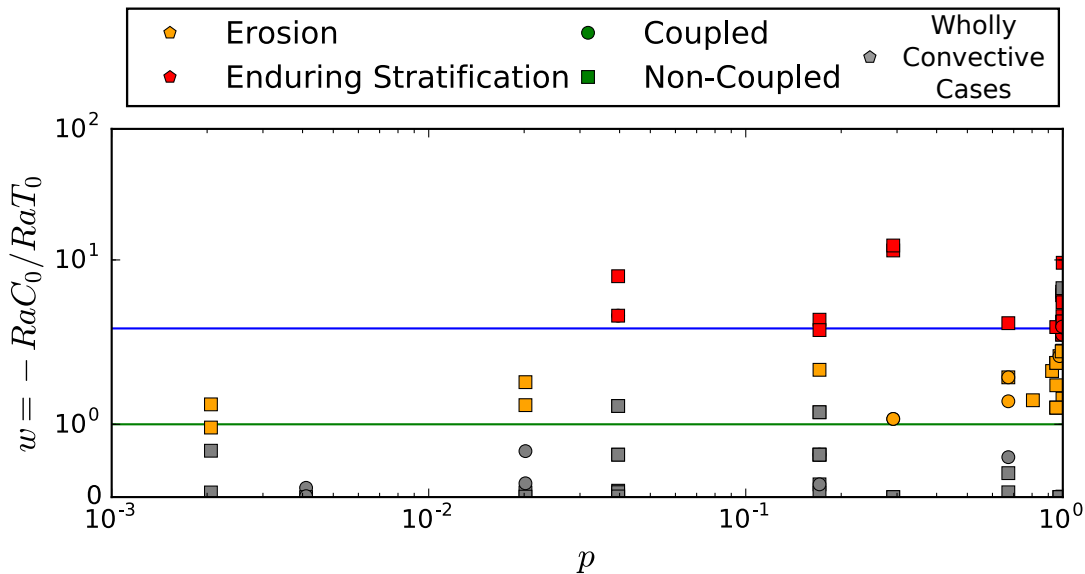


Figure 3.8 – Convection regimes diagram in the p (proportion of latent heat in the surface flux), w (ratio of the chemical and thermal Rayleigh numbers) parameter plane. Color codes the different convection regimes, markers indicate the potential coupling at the bottom of the shell. Note that the different regimes seem to be mainly determined by the w parameter, with a transition from the fully convective regime to the erosion one at $w \simeq 1$ (green line), and then to the enduring stratification one for $w \simeq 3$ (blue line).

space parameter exploration. Slightly surcritical cases with $Le = 1$ have shown spatially localized convection. This one is developed along all the depth of the shell but remains localized in a small volume (around one eighth), the remaining volume being entirely motionless and chemically stratified. Convection encased in a surface spherical shell and global erosion of a stratified basal layer were not observed, which may imply that the $Le \neq 1$ configuration is not a superfluous ingredient in this model.

3.6.2 Dependence on initial conditions

A possible weakness of our modelization consists in the pre-existing chemical stratified layer. Are our results robust with respect to an initial homogenized fluid layer? To answer this question we performed a small number of numerical simulation identical to former ones but with an initial flat composition profile. We plot on fig. 3.9 a representative example of these simulations. The buoyancy profiles obtained when the initial composition profile is uniform (that is $C_{ref}/\delta C + \Xi(t = 0)$), independent from the radius, are drawn as a function of the radius. With time, a stably stratified chemical layer is built from the bottom upward.

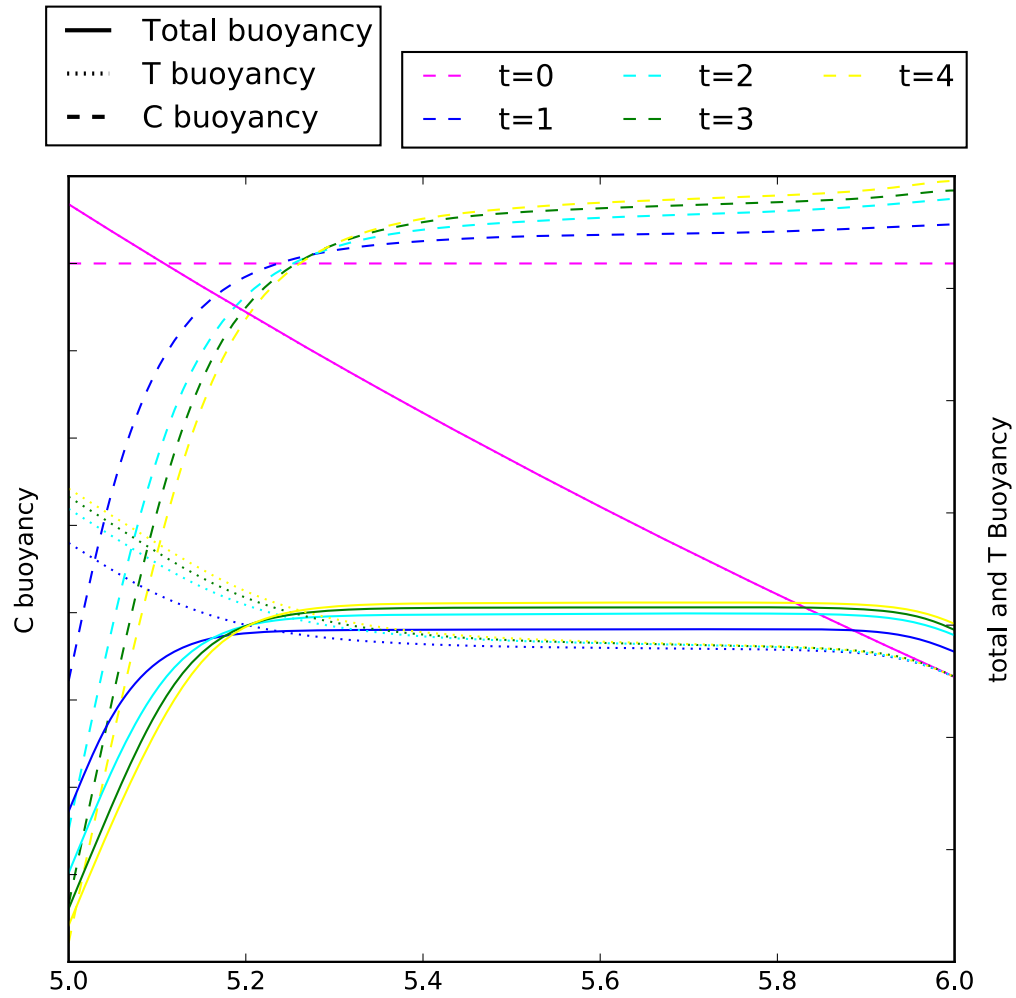


Figure 3.9 – Renormalized solutal, thermal and total buoyancy radial profiles (arbitrary units are used) determined from the initial state (static, uniform composition) to the final one, T and C fields are not coupled, $\varphi = 5.10^2$, $\lambda = -4$, $Ra_T = 10^5$, $Pr_T = 3$. Note that with time a chemical layer, stably stratified is built from the bottom upward.

3.7 Discussion

Our objective was to study the heat and mass transport regimes in a surface terrestrial magma ocean, crystallizing non-congruently from the bottom upward. We chose to model it as a statistically stationary system, in which the reference and possibly the anomalies of the temperature and composition fields are coupled at the bottom limit (see section 3.4.4). The system is monitored by three main physical input quantities, the basal latent heat flux (*i.e.* the crystallization rate), the secular cooling and the intensity of the thermo-solutal coupling (modelling the partial basal crystallization).

First of all, we do not observe strong consequences on convection of the implementation of a basal thermo-solutal coupling on both reference fields and anomalies. The only confirmed influence of the coupling has been observed on the onset of convection for $Pr = 0.3$. In all other cases, coupled and non-coupled configurations were hardly distinguishable.

We observed three main types of transport regimes (see section 3.5). A fully convective one, for which the whole shell is mixed. An erosion regime, characterized by the inevitable destruction of an initial basal chemically stratified layer by a surface convection. Finally, an enduring stratification regime has also been observed, in which the basal stratification is durably maintained, preventing the mixing of all the magma ocean.

Coming back to our initial configuration, we established the phase diagram of these three regimes as a function of the ratio of the thermal and chemical Rayleigh numbers defined by the respective thermal and chemical gradients imposed on the shell by the reference fields. It has been shown that the frontier between the enduring stratification regime and the erosion one was defined by a ratio $w = -RaC_0/RaT_0 \simeq 3$. The value estimated in the case of a terrestrial magma ocean is about 10 and should locate the terrestrial magma ocean in the enduring stratification regime. This point is illustrated by the regime diagram presented fig. 3.10 where the $w = 3$ line is drawn on the λ, φ parameter plane together with the alleged parameter space occupied by a terrestrial magma ocean (located in the enduring stratification regime).

Even if, because of our initial state, we often postulated the existence of the layer, prior to the development of convection, we have also shown that using a well mixed initial state does not seem to alter the final configuration of the system. Moreover, following Chidester et al. (2020) for example, allows us to contemplate the existence of an initial basal layer (of different structure than ours) as a consequence of a giant impact. For very energetic collisions, a non-negligible part of the impactor's iron core would be mixed with the Earth's mantle and did not merged immediately with the core. This phenomenon may then form a mantle basal layer enriched in iron.

Finally, we can safely establish that, in the case of a small Rayleigh ratio (here

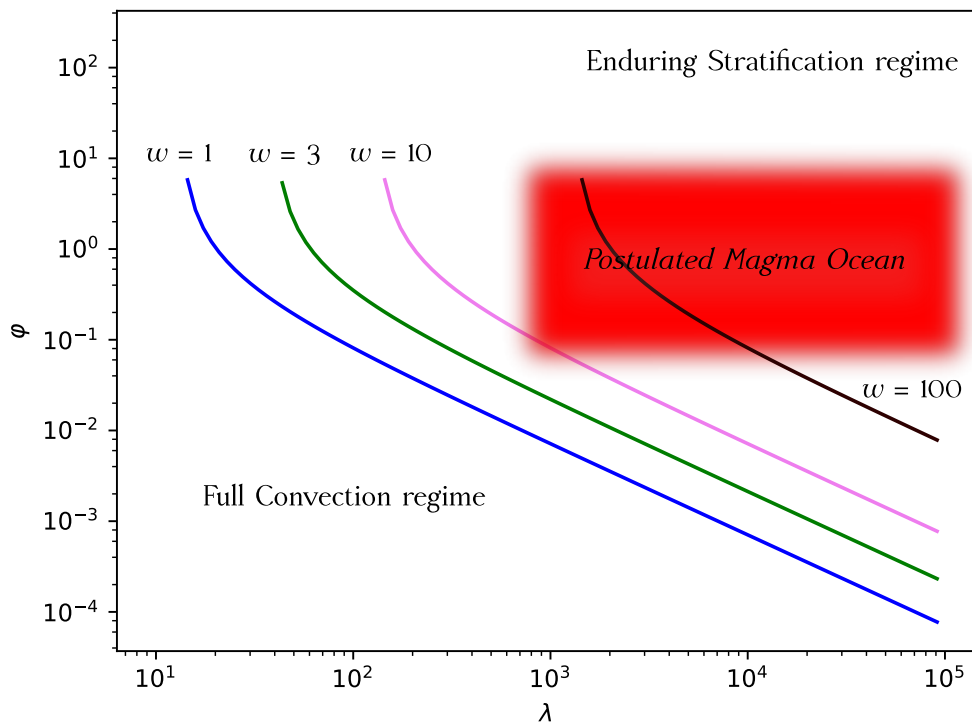


Figure 3.10 – Regime diagram of a terrestrial magma ocean in the (λ, φ) parameter space, following the value of the Rayleigh ratio w . Blue line indicates the $w = 1$ equation, delimiting the wholly convective regime (below this line). Green line indicates the $w = 3$ equation delimiting the enduring stratification regime (above this line). The alleged parameter space characterizing a terrestrial magma ocean, during most of its crystallization period, is colored in red and is located in the enduring stratification area. Nevertheless it is possible that the w threshold giving the frontiers of the enduring stratification regimes would be higher in the case of more turbulent cases. Consequently we also drawn $w = 10$ and $w = 100$.

we found a threshold such that, $w < 3$, though the value could be altered by a more turbulent setup), any stratified layer would be ultimately eroded or prevented to form. We conclude that the usual hypothesis of a well-mixed and isentropic convective magma ocean remains relevant, even in presence of a stabilizing basal thermo-solutal coupling, if the Rayleigh ratio is small enough. If it is not the case, the initial hypothesis would become more doubtful. We then have to contemplate the possibility for the terrestrial magma ocean to have known a non-convective regime, increasing the lifetime of a magma ocean and producing an unstably stratified solid mantle. Let us remind that even if our magma ocean model is quasi-static, an enduring stratification regime does not prevent a long term evolution of a more realistic structure, caused by the growing of the basal solid mantle.

A next step in the modelling of magma oceans would be to determine how a stably stratified basal layer could be built from a well mixed initial state thanks to partial crystallization. Another improvement could be to implement and study the effects of rotation. This one could be negligible in the case of a vigorous convection but not necessarily in the presence of a stably stratified layer. Rotation is known to diminish the efficiency of the convection (Chandrasekhar, 1953; Levy and Fernando, 2002), exerting Taylor-Proudman constraint, it also imposes a latitude dependency which is absent of our setup. Another improvement could be to modulate the thermo-solutal basal coupling with the local concentration. Concretely it would consist in using a more realistic binary diagram to monitor the coupling, instead of our simplified version. In this study, we generally ignored the interaction between the liquid system and the already solidified shell at its base. Indeed, due to viscosity contrast (eighteen orders of magnitudes of viscosity difference between the fully liquid and the solid), the two dynamics follow very different typical time scales. In the long term, nevertheless, it could be beneficial to take into account the behavior of these interactions with the solidified mantle. Previous studies (see for example Agrusta et al. (2020); Morison (2020)) have shown that convection in a mantle bounded above and below by magma oceans could produce translation modes, with melting-freezing at their interfaces. This mechanism would authorize indirect exchanges between a basal and a surface magma oceans. New generations of models including solid and liquid dynamics may constitute a fruitful way in the understanding of the terrestrial magma ocean.

We emphasize that, even if our main focus was on the terrestrial magma ocean, good evidence have already indicated that this type of liquid silicate shell could be quite common in the history of solid planets in the solar system and further (see Chao et al. (2021)). Since our model remains quite generic it could be easily applied to other large rocky bodies.

Acknowledgements

We thank Renaud Deguen, Pascale Garaud, Maylis Landeau and Michaël Lebars for all their questions and remarks, which provided great help.

Declaration of interest

The authors report no conflict of interest.

...



CHAPITRE 4

Conclusion

Dupond : Pour nous l'aclaire est faire, n'est-ce pas, Dupont ?

Dupont : Je dirais même plus l'affaire est claire. C'est mon opinion et je la partage...

Hergé, *Les bijoux de la Castafiore*

4.1	Résumé	96
4.2	Perspectives	97

4.1 Résumé

L'océan de magma terrestre est devenu, du point de vue de la science moderne, une étape de l'histoire de la Terre primitive. Il suscite désormais des études variées de la part des spécialistes du globe et de la mécanique des fluides. Au cours de ce travail de doctorat, nous nous sommes efforcés d'apporter une modeste contribution à la compréhension de sa dynamique propre.

Les régimes de transport de masse et d'énergie au sein d'un océan de magma terrestre de surface ont constitué notre principal centre d'intérêt. Nous nous sommes, pour cela, appuyés sur une démarche de modélisation qui traite l'océan comme une coquille de fluide, soumise aux lois de conservation usuelles de l'hydrodynamique. En dépit de leur simplicité apparente, c'est seulement à l'aide de l'outil numérique et plus particulièrement du code de géodynamo XSHELLS, que nous avons pu étudier le comportement du système ainsi modélisé.

Dans un premier mouvement, nous nous sommes penchés sur l'impact d'un équilibre thermique avec une atmosphère sur le système d'intérêt : un océan de magma iso-compositionnel en rotation. La convection thermique dans les coquilles en rotation a déjà suscité un certain nombre de travaux appuyés au cours des dernières décennies. Notre contribution a consisté à étudier l'influence d'une condition aux limites particulières, dite de Robin, de nature intermédiaire entre celle de Neuman et celle de Dirichlet. En imposant une relation linéaire entre un champ et sa dérivée au moyen d'un nombre sans dimension appelé nombre de Biot, nous avons pu faire évoluer continument cette condition aux limites et en étudier les répercussions.

Notre étude s'est divisée en deux parties distinctes. L'une, linéaire, a porté sur les seuils de convection. L'autre a abordé les régimes de transport d'énergie et les structures d'écoulement réalisées par la convection développée. Nous avons pu montrer, de façon très générale, que la condition de type Robin n'exerçait d'influence notable que dans un contexte de faible rotation. Nous avons également donné une méthode basée sur l'usage de nombres de Rayleigh effectifs pour décrire le comportement non-linéaire du système à l'aide de lois d'échelle bien établies par ailleurs. Enfin nous avons pu montrer qu'hors d'une échelle réduite de valeurs, la condition aux limites de type Robin pouvait être remplacée par celles plus usuelles de Dirichlet ou de Neumann.

Dans un second temps, nous avons porté notre attention sur un océan de magma cette fois bi-compositionnel cristallisant de la base vers le sommet et non-rotationnel. Dans cette optique, une condition aux limites couplant température et composition a été utilisée afin de modéliser une cristallisation partielle, produisant un liquide résiduel densifié. Le système, essentiellement gouverné par un taux de cristallisation, de refroidissement interne et une variable de couplage thermo-solutal, a été étudié du point de vue de la

dynamique de convection. Nous avons pu montrer *in fine* que le système pouvait adopter différents régimes allant de la convection complète de la coquille de fluide, jusqu'à son partitionnement entre une convection de surface et des couches profondes stratifiées stablement. Le nombre de Richardson, dont nous avons montré qu'il pouvait être estimé *a priori*, nous a fourni un diagnostic capable d'anticiper le type de régime adopté. De premières estimations semblent indiquer qu'un océan de magma terrestre de surface, protégé par une épaisse atmosphère, pouvait ne pas être capable d'éroder une couche stratifiée initiale.

Ajoutons que ces deux études numériques n'ont pu être conduites en respectant tous les nombres sans dimension caractéristiques de notre objet d'étude. Certes, ces derniers ne sont qu'imparfaitement connus, mais leur modélisation même approximative est hors de portée des ressources de calcul actuellement disponibles. On gardera cependant à l'esprit que cela ne signifie pourtant pas nécessairement que les régimes naturels soient, quant à eux, inaccessibles. Il est parfois possible d'atteindre des valeurs de paramètres suffisantes pour placer la simulation dans le bon régime. Ici cependant, nous avons donc dû nous contenter de modélisations requérant des résolutions plus accessibles.

4.2 Perspectives

À l'issue de cette contribution, le constat à faire quant à la connaissance des océans de magma, est évidemment celui d'un travail encore immense à accomplir, et cela également dans des domaines scientifiques non maîtrisés par l'auteur de ces lignes. On se risquera néanmoins à aborder quelques futures avancées possibles.

Les résultats proposés *supra* semblent indiquer la possibilité de préserver une couche stratifiée pré-existante dans le cadre d'un océan de magma, refroidissant relativement lentement. Resterait à étudier la possibilité de bâtir une telle couche stratifiée dans un contexte déjà vigoureusement convectif. On pourrait également s'interroger sur les possibles traces géochimiques laissées par une telle structure.

Par la suite, la poursuite des travaux présentés dans le chapitre 3, dans un cadre rotatif et plus turbulent, constitue une perspective logique. Il est également possible, à court terme, de complexifier le modèle actuellement utilisé, en tenant compte d'un véritable diagramme binaire à l'interface de changement de phase ou d'une atmosphère couplée à la dynamique de cristallisation. On gardera cependant à l'esprit, que multiplier les modélisations physiques rend d'autant plus difficile l'attribution des causes aux dynamiques identifiées.

La généralisation des modèles numériques de simulation des océans de magma et l'augmentation des capacités de calcul à moyen terme, offre la possibilité d'atteindre

des domaines plus extrêmes de l'espace des paramètres¹. Cette démarche permet, de façon générale, d'étendre ou de délimiter la validité des lois d'échelle et des régimes de transport.

Enfin à plus long terme, il est possible d'envisager la mise en place de modèles globaux incluant les dynamiques de chacune des coquilles géologiques. Actuellement chaque sous-système a été la cible d'efforts de modélisation distincts. Les éventuelles interactions avec les autres sous-systèmes sont alors considérablement simplifiées (nos travaux des chapitres 2 et 3 ne font pas exception à ce constat). On gardera à l'esprit que ces choix sont tout à fait raisonnables dans un contexte de première approche du problème, de ressources scientifiques limitées et d'écart d'échelle temporelle de modélisation².

L'alternative consisterait à grouper des modèles complets de chaque système, interagissant librement avec les autres. On pourrait ainsi mettre en évidence des dynamiques d'interaction entre noyau, manteau et océan de magma. Les précédents travaux montrant l'importance des flux inter-système (par exemple entre le manteau solide et les océans de magma profond et de surface) semblent montrer qu'une telle démarche n'est pas superflue.

Enfin, on se rappellera que même si notre travail a porté sur l'océan de magma terrestre, ce dernier ne constitue pas une perspective indépassable. Le système modélisé ici l'est avec beaucoup de généralité si bien qu'il peut, avec quelques précautions, s'appliquer à beaucoup d'objets similaires. On soupçonne, désormais, l'existence passée ou actuelle d'océans de magma dans le système solaire ou sur des planètes extra-solaires. Ces possibilités offrent donc un domaine d'application des plus considérables aux modélisateurs, et ce en attendant de possibles données directes. L'époque où nous pourrions étudier un océan de magma contemporain à la surface d'une planète lointaine n'est peut-être plus si éloignée désormais.



1. En terme de vitesse de rotation ou de turbulence par exemple.

2. Par exemple, océan de magma et manteau solide ne convectent *a priori* pas à des vitesses comparables, du fait de leurs viscosités très différentes, de ratio proche de 10^{18} .

Bibliographie

- Y. Abe. Thermal and chemical evolution of the terrestrial magma ocean. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 100(1-4) :27–39, 1997.
- C. B. Agee and D. Walker. Olivine flotation in mantle melt. Earth and Planetary Science Letters, 114(2-3) :315–324, 1993.
- R. Agrusta, A. Morison, S. Labrosse, R. Deguen, T. Alboussi re, P. Tackley, and F. Duffet. Mantle convection interacting with magma oceans. Geophysical Journal International, 220(3) :1878–1892, 2020.
- Aristote. Peri Ouranou. 350 av. J.C.
- A. Bejan. Convection Heat Transfer. John Wiley and Sons, 1984.
- A. B. Binder. On the origin of the moon by rotational fission. The moon, 11(1-2) : 53–76, 1974.
- F. Birch. Speculations on the earth’s thermal history. Geological Society of America Bulletin, 76(2) :133–154, 1965.
- C. Blanckaer. Le temps, grand ouvrier de la nature. Les cahiers de Science & Vie, 244, 1994.
- P. Boehnke and T. M. Harrison. Illusory late heavy bombardments. Proceedings of the National Academy of Sciences, 113(39) :10802–10806, 2016.
- L. Boltzmann. Ableitung des stefan’schen gesetzes, betreffend die abh ngigkeit der w rmestrahlung von der temperatur aus der electromagnetischen lichttheorie. Annalen der Physik, 258(6) :291–294, 1884. doi : 10.1002/andp.18842580616. URL <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/andp.18842580616>.

- M. Bouffard, M. Landeau, and A. Goument. Convective erosion of a primordial stratification atop earth's core. Geophysical Research Letters, 47(14) :e2020GL087109, 2020.
- A. Bouvier and M. Wadhwa. The age of the solar system redefined by the oldest pb–pb age of a meteoritic inclusion. Nature geoscience, 3(9) :637–641, 2010.
- F. H. Busse. Thermal instabilities in rapidly rotating systems. J. Fluid Mech., 44(3) : 441–460, 1970.
- F. H. Busse. Fundamentals of thermal convection. In W. R. Peltier, editor, Mantle Convection. Plate Tectonics and Global Dynamics, volume 4 of The fluid mechanics of astrophysics and geophysics, chapter 2, pages 23–95. Gordon and Breach, New York, 1989.
- F. H. Busse and C. R. Carrigan. Laboratory simulation of thermal convection in rotating planets and stars. Science, 191(4222) :81–83, 1976. doi : 10.1126/science.191.4222.81.
- F. H. Busse and A. C. Or. Convection in a rotating cylindrical annulus : thermal rossby waves. J. Fluid Mech., 166 :173–187, 1986.
- F. H. Busse and N. Riahi. Nonlinear convection in a layer with nearly insulating boundaries. J. Fluid Mech., 96(2) :243–256, 1980. doi : 10.1017/S0022112080002091.
- H. Bénard. Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide propageant de la chaleur par convection en régime permanent. Rev. Gen. Sci. Pures Appl. Bull. Assoc., 11 : 1309–1328, 1900. URL <https://ci.nii.ac.jp/naid/10006421530/en/>.
- M. A. Calkins, K. Hale, K. Julien, D. Nieves, D. Driggs, and P. Marti. The asymptotic equivalence of fixed heat flux and fixed temperature thermal boundary conditions for rapidly rotating convection. J. Fluid Mech., 784, 2015.
- E. Calzavarini, D. Lohse, F. Toschi, and R. Tripiccion. Rayleigh and Prandtl number scaling in the bulk of Rayleigh–Bénard turbulence. Phys. Fluids, 17(5) :055107, 2005. doi : 10.1063/1.1884165. URL <https://doi.org/10.1063/1.1884165>.
- A. G. Cameron and W. R. Ward. The origin of the moon. In Lunar and Planetary Science Conference, volume 7, 1976.
- R. M. Canup. Dynamics of lunar formation. Annu. Rev. Astron. Astrophys., 42 :441–475, 2004.
- R. Caracas, K. Hirose, R. Nomura, and M. D. Ballmer. Melt–crystal density crossover in a deep magma ocean. Earth and Planetary Science Letters, 516 :202–211, 2019.

BIBLIOGRAPHIE

- G. Caro, B. Bourdon, B. J. Wood, and A. Corgne. Trace-element fractionation in hadean mantle generated by melt segregation from a magma ocean. Nature, 436(7048) :246–249, 2005.
- S. Chandrasekhar. The instability of a layer of fluid heated below and subject to Coriolis forces. P. Roy. Soc. A-Math. Phys., 217(1130) :306–327, 1953. doi : 10.1098/rspa.1953.0065. URL <https://royalsocietypublishing.org/doi/abs/10.1098/rspa.1953.0065>.
- S. Chandrasekhar. Hydrodynamic and Hydrodynamic stability. Oxford University Press, 1961.
- K.-H. Chao, R. deGraffenried, M. Lach, W. Nelson, K. Truax, and E. Gaidos. Lava worlds : From early earth to exoplanets. Geochemistry, page 125735, 2021.
- C. J. Chapman and M. R. E. Proctor. Nonlinear rayleigh–bénard convection between poorly conducting boundaries. J. Fluid Mech., 101(4) :759–782, 1980.
- C. R. Chapman, B. A. Cohen, and D. H. Grinspoon. What are the real constraints on the existence and magnitude of the late heavy bombardment? Icarus, 189(1) : 233–245, 2007.
- B. Chidester, S. J. Lock, and S. T. Stewart. Planetary differentiation in the aftermath of giant impacts. American Geophysical Union fall meeting presentation, December 2020. <https://agu.confex.com/agu/fm20/meetingapp.cgi/Paper/741869>.
- U. R. Christensen. Zonal flow driven by strongly supercritical convection in rotating spherical shells. J. Fluid Mech., 470 :115–133, 2002.
- T. T. Clarté, N. Schaeffer, S. Labrosse, and J. Vidal. The effects of a robin boundary condition on thermal convection in a rotating spherical shell. Journal of Fluid Mechanics, 918 :A36, 2021. doi : 10.1017/jfm.2021.356.
- G. H. A. Cole. The science of planets around stars. CRC Press, 2017.
- G. C. Collins and J. C. Goodman. Enceladus’ south polar sea. Icarus, 189(1) :72–82, 2007.
- K. C. Condie and V. Pease. When did plate tectonics begin on planet Earth?, volume 440. Geological Society of America, 2008.
- M. C. Cross and P. C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. Rev. Modern Phys., 65(3) :851–1112, 1993.

- G. H. Darwin. Xiii. on the precession of a viscous spheroid, and on the remote history of the earth. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, (170) :447–538, 1879.
- A. Davaille, M. Le Bars, and C. Carbonne. Thermal convection in a heterogeneous mantle. Comptes Rendus Geoscience, 335(1) :141–156, 2003.
- A. M. Dziewonski and D. L. Anderson. Preliminary reference earth model. Physics of the earth and planetary interiors, 25(4) :297–356, 1981.
- L. T. Elkins-Tanton. Linked magma ocean solidification and atmospheric growth for earth and mars. Earth and Planetary Science Letters, 271(1-4) :181–191, 2008.
- L. T. Elkins-Tanton. Magma oceans in the inner solar system. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 40 :113–139, 2012.
- L. T. Elkins-Tanton, S. Burgess, and Q.-Z. Yin. The lunar magma ocean : Reconciling the solidification process with lunar petrology and geochronology. Earth and Planetary Science Letters, 304(3-4) :326–336, 2011.
- P. Falsaperla and G. Mulone. Stability in the rotating Bénard problem with newton–robin and fixed heat flux boundary conditions. Mech. Res. Commun., 37(1) :122 – 128, 2010. ISSN 0093-6413. doi : <https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2009.11.002>. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S009364130900158X>.
- D. Freitas, J. Monteux, D. Andraut, G. Manthilake, A. Mathieu, F. Schiavi, and N. Cluzel. Thermal conductivities of solid and molten silicates : Implications for dynamos in mercury-like proto-planets. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 312 : 106655, 2021. ISSN 0031-9201. doi : <https://doi.org/10.1016/j.pepi.2021.106655>. URL <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0031920121000133>.
- G. Gamow and J. A. Hynek. A new theory by cf von weizsäcker of the origin of the planetary system. The Astrophysical Journal, 101 :249–254, 1945.
- P. Garaud. Double-diffusive convection at low prandtl number. Annual Review of Fluid Mechanics, 50 :275–298, 2018.
- F. Garcia, J. Sánchez, and M. Net. Antisymmetric polar modes of thermal convection in rotating spherical fluid shells at high Taylor numbers. Phys. Rev. Lett., 101(19) : 194501, 2008.
- F. Garcia, F. R. N. Chambers, and A. L. Watts. Onset of low prandtl number thermal convection in thin spherical shells. Phys. Rev. Fluids, 3(2) :024801, 2018.

BIBLIOGRAPHIE

- T. Gastine, J. Wicht, and J. M. Aurnou. Turbulent rayleigh–bénard convection in spherical shells. J. Fluid Mech., 778 :721–764, 2015.
- T. Gastine, J. Wicht, and J. Aubert. Scaling regimes in spherical shell rotating convection. J. Fluid Mech., 808 :690–732, 2016.
- N. Gillet and C. A. Jones. The quasi-geostrophic model for rapidly rotating spherical convection outside the tangent cylinder. J. Fluid Mech., 554 :343–369, 2006.
- P. A. Gilman. Nonlinear dynamics of Boussinesq convection in a deep rotating spherical shell-i. Geophys. Astrophys. Fluid Dyn., 8(1) :93–135, 1977. doi : 10.1080/03091927708240373.
- C. Guervilly, P. Cardin, and N. Schaeffer. Turbulent convective length scale in planetary cores. Nature, 570(7761) :368, 2019.
- L. Guillou and C. Jaupart. On the effect of continents on mantle convection. J. Geophys. Res. Solid Earth, 100(B12) :24217–24238, 1995.
- K. Hamano, Y. Abe, and H. Genda. Emergence of two types of terrestrial planet on solidification of magma ocean. Nature, 497(7451) :607–610, 2013.
- U. Hansen and D. A. Yuen. Nonlinear physics of double-diffusive convection in geological systems. Earth-Science Reviews, 29(1-4) :385–399, 1990.
- T. M. Harrison. The hadean crust : evidence from > 4 ga zircons. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 37 :479–505, 2009.
- W. K. Hartmann and D. R. Davis. Satellite-sized planetesimals and lunar origin. Icarus, 24(4) :504–515, 1975.
- M. Ishiwatari, S. Takehiro, and Y. Hayashi. The effects of thermal conditions on the cell sizes of two-dimensional convection. J. Fluid Mech., 281 :33–50, 1994.
- K. P. Iyer, J. D. Scheel, J. Schumacher, and K. R. Sreenivasan. Classical 1/3 scaling of convection holds up to $ra = 1015$. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 117(14) :7594–7598, 2020. ISSN 0027-8424. doi : 10.1073/pnas.1922794117. URL <https://www.pnas.org/content/117/14/7594>.
- G. T. Jarvis, G. A. Glatzmaier, and V. I. Vangelov. Effects of curvature, aspect ratio and plan form in two-and three-dimensional spherical models of thermal convection. Geophysical & Astrophysical Fluid Dynamics, 79(1-4) :147–171, 1995.

- H. Johnston and C. R. Doering. Comparison of turbulent thermal convection between conditions of constant temperature and constant flux. Phys. Rev. Lett., 102 :064501, Feb 2009. doi : 10.1103/PhysRevLett.102.064501. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.064501>.
- J. Joly. An estimate of the geological age of the earth. Annu. Rep. Smithsonian. Inst., pages 247–288, 1899.
- I. Kant. Allgemeine Naturgeschichte und Theorie des Himmels. Johann Friederich Petersen, 1755.
- E. J. Kaplan, N. Schaeffer, J. Vidal, and P. Cardin. Subcritical thermal convection of liquid metals in a rapidly rotating sphere. Phys. Rev. Lett., 119 :094501, Aug 2017. doi : 10.1103/PhysRevLett.119.094501. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.119.094501>.
- E. M. King and J. M. Aurnou. Turbulent convection in liquid metal with and without rotation. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 110(17) :6688–6693, 2013.
- E. M. King, S. Stellmach, and J. M. Aurnou. Heat transfer by rapidly rotating Rayleigh–Bénard convection. J. Fluid Mech., 691 :568–582, 2012. doi : 10.1017/jfm.2011.493.
- A. Kircher. Mundus Subterraneus. Apud Joannem Janssonium & Elizeum Weyerstraten, 1665.
- E. S. Kite, B. Fegley Jr, L. Schaefer, and E. Gaidos. Atmosphere-interior exchange on hot, rocky exoplanets. The Astrophysical Journal, 828(2) :80, 2016.
- T. Kleine, K. Mezger, C. Münker, H. Palme, and A. Bischoff. 182hf-182w isotope systematics of chondrites, eucrites, and martian meteorites : Chronology of core formation and early mantle differentiation in vesta and mars. Geochimica et Cosmochimica Acta, 68(13) :2935–2946, 2004.
- A. Kobsch. Behaviour of feldspars during the Giant impact. PhD thesis, ENS de Lyon, Université Lyon 1, 2020.
- F. Kreith. The CRC Handbook of Thermal Engineering. Springer, 2000.
- S. Labrosse, J. Hernlund, and N. Coltice. A crystallizing dense magma ocean at the base of the earth’s mantle. Nature, 450(7171) :866–869, 2007.
- S. Labrosse, J. W. Hernlund, and K. Hirose. Fractional melting and freezing in the deep mantle and implications for the formation of a basal magma ocean. The Early Earth : Accretion and Differentiation, Geophysical Monograph, 212 :123–142, 2015.

BIBLIOGRAPHIE

- S. Labrosse, A. Morison, R. Deguen, and T. Alboussière. Rayleigh–bénard convection in a creeping solid with melting and freezing at either or both its horizontal boundaries. Journal of Fluid Mechanics, 846 :5–36, 2018.
- G. Langin. William hartmann : "la thèse de grand bombardement tardif s'effondre". Ciel & Espace, 576 :74–80, 2021.
- P.-S. Laplace. Exposition du Système du Monde. Imprimerie du Cercle Social, 1796.
- T. Lebrun, H. Massol, E. Chassefière, A. Davaille, E. Marcq, P. Sarda, F. Leblanc, and G. Brandeis. Thermal evolution of an early magma ocean in interaction with the atmosphere. J. Geophys. Res. Planets, 118(6) :1155–1176, 2013.
- G.-L. Leclerc. Histoire Naturelle, générale et particulière, avec la description du Cabinet du Roi. Pillot, 1749.
- G.-L. Leclerc. Suppléments à l'Histoire Naturelle, générale et particulière. Ledoux, 1774.
- M. Levy and H. Fernando. Turbulent thermal convection in a rotating stratified fluid. Journal of Fluid Mechanics, 467 :19, 2002.
- R. S. Long, J. E. Mound, C. J. Davies, and S. Tobias. Scaling behaviour in spherical shell rotating convection with fixed-flux thermal boundary conditions. J. Fluid Mech., 889, 2020.
- C. Maas and U. Hansen. Effects of earth's rotation on the early differentiation of a terrestrial magma ocean. J. Geophys. Res. Solid Earth, 120(11) :7508–7525, 2015.
- D. Mackenzie. The Big Splat, or how our Moon came to be. 2003.
- H. Melosh. Giant impacts and the thermal state of the early earth. Origin of the Earth, pages 69–83, 1990.
- E. A. Milne. Sir James Jeans : A Biography. Cambridge University Press, 2013.
- R. Monville, J. Vidal, D. Cébron, and N. Schaeffer. Rotating double-diffusive convection in stably stratified planetary cores. Geophys. J. Int., 219(Supplement 1) :S195–S218, 2019.
- A. Morison. Convection in the primitive mantle in interaction with global magma oceans. PhD thesis, ENS de Lyon, Université Lyon 1, 2020.
- A. Morison, S. Labrosse, R. Deguen, and T. Alboussière. Timescale of overturn in a magma ocean cumulate. Earth and Planetary Science Letters, 516 :25–36, 2019.

- M. Nakajima and D. J. Stevenson. Investigation of the initial state of the moon-forming disk : Bridging sph simulations and hydrostatic models. Icarus, 233 :259–267, 2014.
- C. T. O’Sullivan. Newton’s law of cooling—a critical assessment. Am. J. Phys., 58(10) : 956–960, 1990.
- C. Patterson, G. Tilton, and M. Inghram. Age of the earth. Science, 121(3134) :69–75, 1955.
- D. Perez-Becker and A. P. Showman. Atmospheric heat redistribution on hot jupiters. The Astrophysical Journal, 776(2) :134, 2013.
- A. C. Phillips. The physics of stars. John Wiley & Sons, 2013.
- M. Plumley and K. Julien. Scaling laws in rayleigh-benard convection. Earth and Space Science, 6(9) :1580–1592, 2019.
- J. Pratt, I. Baraffe, T. Goffrey, T. Constantino, M. Viallet, M. Popov, R. Walder, and D. Folini. Extreme value statistics for two-dimensional convective penetration in a pre-main sequence star. Astronomy & Astrophysics, 604 :A125, 2017.
- T. Radko. Double Diffusive Convection. Cambridge University Press, 2013.
- L. Rayleigh. On convection currents in a horizontal layer of fluid, when the higher temperature is on the under side. Lond. Edinb. Dubl. Phil. Mag., 32(192) :529–546, 1916. doi : 10.1080/14786441608635602. URL <https://doi.org/10.1080/14786441608635602>.
- M. Rieutord. Une introduction à la dynamique des fluides. De Boeck, 2014.
- A. E. Ringwood. Origin of the Earth, chapter Was There a Terrestrial Magma Ocean. Oxford University Press, 1990.
- E. Ruskol. On the origin of the moon. 1. the formation of circumterrestrial swarm of bodies. Astron. zh, 37 :690–702, 1960.
- V. S. Safronov. Evolution of the protoplanetary cloud and formation of the earth and the planets. IPST, 1972.
- E. Sarafian, G. A. Gaetani, E. H. Hauri, and A. R. Sarafian. Experimental constraints on the damp peridotite solidus and oceanic mantle potential temperature. Science, 355(6328) :942–945, 2017.
- H. Savijärvi. Meteorology of the terrestrial planets. Surv. Geophys., 15(6) :755–773, Nov 1994. ISSN 1573-0956. doi : 10.1007/BF00666092. URL <https://doi.org/10.1007/BF00666092>.

BIBLIOGRAPHIE

- N. Schaeffer. Efficient spherical harmonic transforms aimed at pseudospectral numerical simulations. Geochemistry, Geophys. Geosystems, 14(3) :751–758, 2013. doi : 10.1002/ggge.20071. URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/ggge.20071>.
- T. Séon. Les lois d'échelle. Odile Jacob, 2018.
- C. K. Shearer, P. C. Hess, M. A. Wieczorek, M. E. Pritchard, E. M. Parmentier, L. E. Borg, J. Longhi, L. T. Elkins-Tanton, C. R. Neal, I. Antonenko, et al. Thermal and magmatic evolution of the moon. Reviews in Mineralogy and Geochemistry, 60(1) : 365–518, 2006.
- S. F. Singer. Origin of the moon by tidal capture and some geophysical consequences. The moon, 5(1-2) :206–209, 1972.
- N. H. Sleep. Evolution of the mode of convection within terrestrial planets. Journal of Geophysical Research : Planets, 105(E7) :17563–17578, 2000.
- J. Smith, A. Anderson, R. Newton, E. Olsen, A. Crewe, M. Isaacson, D. Johnson, and P. Wyllie. Petrologic history of the moon inferred from petrography, mineralogy and petrogenesis of apollo 11 rocks. Geochimica et Cosmochimica Acta Supplement, 1 : 897, 1970.
- D. Snyder, E. Gier, and I. Carmichael. Experimental determination of the thermal conductivity of molten $\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ and the transport of heat through magmas. J. Geophys. Res. Solid Earth, 99(B8) :15503–15516, 1994. doi : 10.1029/94JB01018. URL <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/94JB01018>.
- V. Solomatov. Fluid dynamics of a terrestrial magma ocean. Origin of the Earth and Moon, 1 :323–338, 2000.
- V. Solomatov. 9.04 - magma oceans and primordial mantle differentiation. In G. Schubert, editor, Treatise on Geophysics, pages 91 – 119. Elsevier, Amsterdam, 2007. doi : 10.1016/B978-044452748-6.00141-3.
- C. Sotin and G. Tobie. Internal structure and dynamics of the large icy satellites. C R Phys, 5(7) :769–780, 2004.
- E. M. Sparrow, R. J. Goldstein, and V. K. Jonsson. Thermal instability in a horizontal fluid layer : effect of boundary conditions and non-linear temperature profile. J. Fluid Mech., 18(4) :513–528, 1964. doi : 10.1017/S0022112064000386.
- E. Swedenborg. Principia : Opera Philosophica et Mineralia. Fridericus Hekelius, 1734.

- S. Takehiro, M. Ishiwatari, K. Nakajima, and Y. Hayashi. Linear stability of thermal convection in rotating systems with fixed heat flux boundaries. Geophys. Astrophys. Fluid Dyn., 96(6) :439–459, 2002. doi : 10.1080/0309192021000036996.
- S. R. Taylor and P. Jakeš. The geochemical evolution of the moon. Pergamon Press, 1974.
- D. Ter Haar. Recent theories about the origin of the solar system. Science, 107(2782) : 405–411, 1948.
- D. Ter Haar. On the origin of the solar system. Annual Review of Astronomy and Astrophysics, 5(1) :267–278, 1967.
- W. Thomson. On the secular cooling of the earth. Transactions of the Royal Society of Edinburgh, 23 :157–170, 1863.
- M. Touboul, I. S. Puchtel, and R. J. Walker. Tungsten isotopic evidence for disproportional late accretion to the earth and moon. Nature, 520(7548) :530–533, 2015.
- R. Verzicco and K. R. Sreenivasan. A comparison of turbulent thermal convection between conditions of constant temperature and constant heat flux. J. Fluid Mech., 595 :203–219, 2008.
- J. Vidal and N. Schaeffer. Quasi-geostrophic modes in the Earth’s fluid core with an outer stably stratified layer. Geophys. J. Int., 202(3) :2182–2193, 07 2015. ISSN 0956-540X. doi : 10.1093/gji/ggv282. URL <https://doi.org/10.1093/gji/ggv282>.
- P. H. Warren. The magma ocean concept and lunar evolution. Annual Review of Earth and Planetary Sciences, 13(1) :201–240, 1985.
- H. M. Williams, S. Matthews, H. Rizo, and O. Shorttle. Iron isotopes trace primordial magma ocean cumulates melting in earth’s upper mantle. Science Advances, 7(11) : eabc7394, 2021.
- J. A. Wood, J. S. Dickey Jr, U. B. Marvin, and B. Powell. Lunar anorthosites and a geophysical model of the moon. Geochimica et Cosmochimica Acta Supplement, 1 : 965, 1970.
- R. K. Yadav, T. Gastine, U. R. Christensen, L. D. V. Duarte, and A. Reiners. Effect of shear and magnetic field on the heat-transfer efficiency of convection in rotating spherical shells. Geophys. J. Int., 204(2) :1120–1133, 12 2015. ISSN 0956-540X. doi : 10.1093/gji/ggv506. URL <https://doi.org/10.1093/gji/ggv506>.

BIBLIOGRAPHIE

Q. Yin, S. Jacobsen, K. Yamashita, J. Blichert-Toft, P. Télouk, and F. Albarede. A short timescale for terrestrial planet formation from hf–w chronometry of meteorites. Nature, 418(6901) :949–952, 2002.



Table des figures

1.1	Portrait de Buffon.	4
1.2	Table des résultats présentés par Buffon.	5
1.3	Luna 16.	9
1.4	Panorama lunaire.	9
1.5	Frise chronologique de quelques publications relatives à la formation de la Lune.	13
1.6	Représentation schématique des courants de convection.	17
2.1	3D visualization of radial velocity and temperature anomaly of a nonlinear computation.	34
2.2	Critical Rayleigh number Ra_C of FF and FT cases as a function of Ekman number Ek for Prandtl number values $Pr = 0.3, 3$ and 30	36
2.3	Values of the critical azimuthal wave number m as a function of Ek for both FF ($Bi = 0$) and FT ($Bi = \infty$) cases.	37
2.4	Ξ i.e.difference of Ra_C between FF and FT cases for a given Ek normalised by the non rotating difference (cf eq. 2.12) as a function of Ek . Ξ decreases with the same general behaviour independently from Pr	38
2.5	\widetilde{Ra}_C as a function of Bi for $Pr = 3$	40
2.6	$\Gamma = \frac{Ra_C(Bi) - Ra_C(Bi=0)}{Ra_C(Bi=\infty) - Ra_C(Bi=0)}$ as a function of Bi for various velocity boundary conditions.	41
2.7	Phase diagram of the solution structure at the linear onset of convection as a function of Ek and Bi	43
2.8	$\Gamma = \frac{Ra_C(Bi) - Ra_C(Bi=0)}{Ra_C(Bi=\infty) - Ra_C(Bi=0)}$ as a function of Bi	45
2.9	Meridional representations of convective flows.	46
2.10	Nusselt number, Nu , as a function of Ra	48
2.11	Nu as a function of Ra_{eff}	51
2.12	Péclet number Pe as a function of Ra_{eff}	52
2.13	Non-zonal component of Pe as a function of Ra_{eff} for $Ek = 10^{-4}$ cases.	53
2.14	Radial temperature profiles averaged in time.	54
2.15	Meridional and equatorial maps of radial velocity.	55
2.16	Equatorial maps of temperature anomalies.	56

TABLE DES FIGURES

2.17	Nusselt number Nu as a function of Ra_{eff} with intermediate Bi cases.	58
2.18	Normalised and time-averaged radial temperature profiles for quasi constant $Ra_{eff} \simeq 2.2 \times 10^6$	59
2.19	Time averaged energy spectrum of the velocity for roughly constant $Ra_{eff} \simeq 2.2 \times 10^6$	60
2.20	Non-zonal component of Pe as a function of $Nu - 1$ for various Ek, Pr, Bi	62
3.1	Schematic representation of a binary diagram.	73
3.2	Equatorial view of the radial component of the velocity field when the whole shell is convective.	82
3.3	Renormalized composition and mean square velocity as a function of the radius in the shell when it is convective.	83
3.4	Renormalized composition and mean square velocity as a function of the radius in the shell, erosion regime.	84
3.5	Renormalized composition and mean square velocity as a function of the radius in the shell, enduring stratification regime.	85
3.6	Equatorial snapshot of the radial velocity component, enduring stratification regime.	86
3.7	Renormalized composition and mean square velocity as a function of the radius in the shell, time evolution of the enduring stratification regime.	87
3.8	Convection regimes diagram in the p, w parameter plane.	88
3.9	Renormalized solutal, thermal and total buoyancy radial profiles (arbitrary units are used) determined from the initial state (static, uniform composition) to the final one, T and C fields are not coupled, $\varphi = 5.10^2, \lambda = -4, Ra_T = 10^5, Pr_T = 3$. Note that with time a chemical layer, stably stratified is built from the bottom upward.	89
3.10	Regime diagram of a magma ocean in the φ - λ space parameter, following the value of the Rayleigh ratio w	91
A.1	Apparition et migration des espèces avec le refroidissement du globe selon Buffon.	117
A.2	Comparaison de deux types différents d'océans de magma isentropiques.	119
A.3	Exemple de diagramme binaire liquide-solide schématique.	122
A.4	Kinetic energy ratio as a function of the convective Rossby number.	124
A.5	Nusselt Number as a function of the Biot Number.	125
A.6	Σ transition parameter as a function of Bi	127
A.7	3D representation of the temperature anomaly.	128
A.8	Nu_T & Nu_C as functions of time.	131
A.9	Schematic of the determination of the height of stratification.	132



Liste des tableaux

2.1	Dimensionless numbers characterizing a terrestrial global magma ocean	33
3.1	Dimensionless numbers characterizing a terrestrial global magma ocean.	79



feldspath Minéral de formule générale $(\text{Ca,Na,K})(\text{Al,Si})_4\text{O}_8$, de la famille des aluminosilicates . Les feldspaths plagioclases se restreignent aux minéraux de formule $(\text{Ca,Na})(\text{Al,Si})_4\text{O}_8$.

fluide newtonien Modèle physique de fluide idéalisé, supposant que ce dernier conserve ses propriétés de fluide quelle que soit les contraintes qui s'exercent sur lui. Cette approximation fonctionne remarquablement bien pour des gammes de contraintes raisonnables appliquées à nombre de gaz ou de liquide. Les contre exemples connus en sont par exemple la « pâte intelligente » ou la pâte dentifrice qui se comportent tantôt comme un solide, tantôt comme un fluide suivant la vitesse de manipulation.

KREEP Acronyme anglais désignant un groupe d'éléments chimiques : K(potassium) R(are) E(arths) E(lements) P(hosphore), particulièrement caractéristiques des roches les plus récentes présentes à la surface de la Lune.

loi de Newton Au nombre de trois, ces lois énoncées par Newton de la dynamique fondent la mécanique moderne. La première énonce le principe d'inertie, la deuxième le principe fondamental de la dynamique, la dernière le principe d'action-réaction.

nébuleuse solaire Dite aussi primordiale ou stellaire, il s'agit du nuage de gaz qui, par son effondrement, a formé le Soleil et son système planétaire.

radiochronologie Ensemble de méthodes de datation absolue reposant sur la désintégration d'éléments radioactifs.

sidérophile Qualifie un élément qui, à l'équilibre thermodynamique en présence de plusieurs phases liquides, se concentrera plus particulièrement dans la phase riche en fer.

silicate Tout minéral essentiellement formé de tétraèdres de formule SiO_4 et éventuellement de cations métalliques.

tellurique Qualifie un corps planétaire disposant d'une surface solide, éventuellement recouverte d'une atmosphère ne représentant qu'un faible volume du total, par exemple : Vénus, Mercure. Défini par opposition aux planètes de gaz, par exemple : Jupiter, Saturne.



S'il n'y a pas de solution, c'est qu'il n'y a pas de problème.

Proverbe Shadock

A.1	Explications additionnelles à l'introduction	116
A.1.1	À propos des théories de Buffon sur l'histoire de la Terre	116
A.1.2	À propos du mode de cristallisation de l'océan de magma	117
A.1.3	À propos de la cristallisation fractionnée et des mélanges binaires	119
A.2	Annexes au chapitre 2	123
A.2.1	Notations	123
A.2.2	Zonal Flows	123
A.2.3	Transition at a given Ra	124
A.2.4	3D representations	126
A.3	Annexes au chapitre 3	129
A.3.1	Notations	129
A.3.2	Latent heat contribution	130
A.3.3	Determining the Statistically Stationary State	131
A.3.4	Measuring the Height of Stratification	131

A.1 Explications additionnelles à l'introduction

A.1.1 À propos des théories de Buffon sur l'histoire de la Terre

De façon peu surprenante, les opinions de Buffon sur l'histoire de la Terre ont évolué au cours de la vie du naturaliste. Les thèses mentionnées au chapitre 1 ne constituent que l'étape finale et aboutie de travaux qui s'étalèrent sur plusieurs dizaines d'années.

On peut, pour résumer, affirmer que les opinions sur la Terre défendues par Buffon ont évolué suivant le consensus scientifique du moment sur la source de la chaleur atmosphérique. Il est manifeste qu'à cette époque, la compréhension du climat et du cycle des saisons était encore très confuse. Le rôle du rayonnement solaire, dans ces variations de température, semblait difficile à déterminer pour les savants du XVIIIe siècle qui commençaient, pour la première fois, à disposer de thermomètres fiables.

Pour revenir à notre sujet, Buffon fut d'abord convaincu du caractère dominant du rayonnement solaire sur les températures atmosphériques. Postulant par ailleurs que notre étoile ne devait que peu ou pas évoluer, il proposa, à rebours de ses travaux suivants, un caractère fixe aux climats des différentes planètes y compris la Terre.

Par la suite, Buffon pris connaissance des travaux du Français de Mairans. Ce dernier, fort d'une théorie de l'absorption de la lumière par les milieux matériels et des premiers relevés systématiques de température, constata un écart de température saisonnier très inférieur à celui prédit par son modèle. Il semble que de Mairans ait interprété cet écart comme la seule conséquence de la variation d'épaisseur atmosphérique à traverser par les rayons du soleil. Plutôt que de modifier son modèle¹, de Mairans postule que le rayonnement solaire est en fait d'intensité mineure devant un apport thermique d'origine terrestre. De Mairans invoque alors, à l'appui de sa thèse, le gradient thermique effectivement observé dans les mines. Ce postulat d'un rayonnement solaire négligeable devant le géotherme, bien qu'assez tôt discutée, eut une longue postérité y compris dans la culture populaire².

Toujours est-il que cet argumentaire convainquit Buffon. C'est donc sur cette base que le naturaliste français bâtit son modèle de refroidissement terrestre. La Terre, originellement inhabitable s'était peu à peu refroidie. Buffon en tire alors des conclusions sur le développement de la vie. Selon lui, les premières formes de vies, adaptées à un climat tropical, n'ont pu apparaître³ qu'aux pôles (premières régions habitables) avant de migrer vers l'équateur avec le refroidissement du globe.

Ce modèle s'inscrit, en fait, dans une démarche plus générale de reculer aussi loin

1. Il est vrai que peu de théories concurrentes étaient alors sur les rangs.

2. On la retrouve par exemple mentionnée dans plusieurs romans de Jules Verne, au cours de la seconde moitié du siècle suivant.

3. À cette époque la génération spontanée a encore un crédit considérable, les travaux de Pasteur (entre autres) ne sonneront son glas qu'un siècle plus tard.

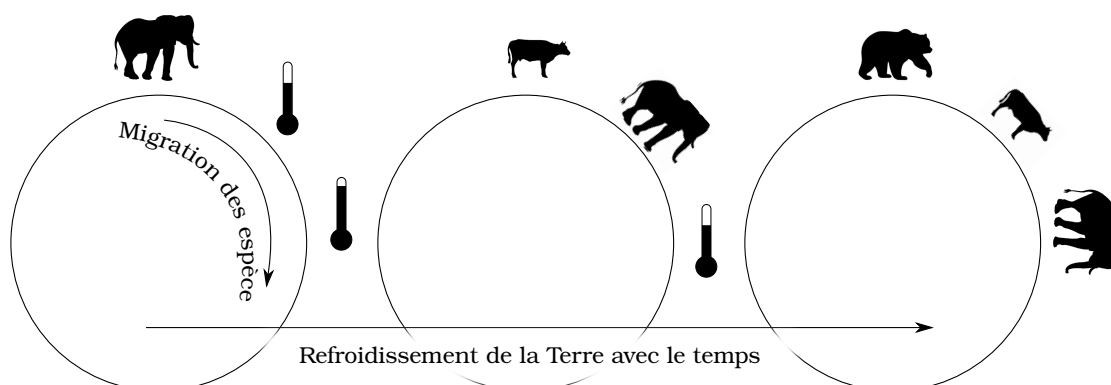


Figure A.1 – Représentation schématique de l'apparition successive et de la migration des espèces du pôle vers l'équateur avec le refroidissement du globe selon Buffon.

que possible l'intervention du surnaturel. Newton avait pensé montrer que le système solaire et sa stabilité requerrait une intervention divine originelle et régulière : Buffon propose une formation accidentelle des planètes⁴. L'organisation de la vie animale et sa diversité semblent inexplicables à ses contemporains : Buffon propose là encore un modèle de développement naturel des espèces.

Ainsi pour conclure, nous ne pensons pas qu'il faille interpréter les travaux de Buffon comme la présentation d'un modèle pensé comme indépassable. Il s'agirait plutôt de l'exposition d'une démarche visant à élargir le champ de l'explicable à l'aide des modèles naissants de la physique mathématique.

A.1.2 À propos du mode de cristallisation de l'océan de magma

Dans une de ses communications sur la détermination de l'âge de la Terre au moyen de son taux de refroidissement actuel, Thomson (1863) évoque comme situation initiale un océan de magma commençant à cristalliser. Il évoque alors les rôles respectifs de la compressibilité du liquide et de la sensibilité de la température de fusion à la pression pour justifier d'une cristallisation possible de bas en haut. On s'efforcera ici de donner quelques éléments de compréhension de ce raisonnement.

On sait qu'un corps pur de masse m subissant un changement de phase à une pression et température donnée (P_f, T_f) , voit sa masse volumique évoluer d'une quantité ρ à $\rho + \Delta\rho$ ⁵ tandis qu'une certaine quantité d'énergie appelée chaleur latente est échangée (notée $\delta H = m\mathcal{L}$, \mathcal{L} étant la chaleur latente massique). Si l'on prend l'exemple d'une fusion/solidification, l'ensemble des couples (P_f, T_f) autorisant la coexistence des deux phases définit une ligne de changement de phase. Clapeyron établit⁶, en 1834, la relation

4. Même si, par là, il introduit un autre évènement inexplicé. De son propre aveu, l'origine de la comète d'impact reste inexplicée.

5. Dans le cas de l'eau, bien connu, le solide est moins dense que le liquide (à pression atmosphérique) mais la situation inverse est, de loin, la plus courante.

6. Aujourd'hui il est plus commode de déduire la relation de Clapeyron à partir de l'égalité des

éponyme qui lie la pente de la frontière de changement de phase aux variations sus-mentionnées de propriété physique, de sorte que

$$\frac{\partial P_f}{\partial T_f} = \frac{\mathcal{L}\rho(\rho + \Delta\rho_f)}{T_f\Delta\rho_f}. \quad (\text{A.1})$$

La question ici est de savoir à quelle profondeur un océan de magma serait susceptible de débiter sa cristallisation. Sachant que la pression augmente avec la profondeur suivant la relation fondamentale de l'hydrostatique,

$$\nabla P = \rho\mathbf{g}, \quad (\text{A.2})$$

(avec \mathbf{g} l'accélération de la gravité) et en négligeant les variations des paramètres $\rho, \Delta\rho_f, \mathcal{L}$ avec la température et la pression la pression de changement de phase évolue elle aussi conjointement avec l'enfouissement. Dans le cas d'un solide plus dense que son liquide, on s'attend donc à voir la température de fusion augmenter avec la profondeur, c'est à dire que comprimer un solide le rend plus difficile à fondre.

Ce petit calcul nous renseigne quant à l'évolution de la température de fusion, reste à la comparer à la température effective établie dans le liquide en fonction de la profondeur. Imaginons qu'on s'intéresse à une particule de fluide (caractérisée par une pression et température P, T) que l'on comprime de façon adiabatique (sans échange thermique avec l'extérieur) et réversible (sans création d'entropie). Le fluide est caractérisé par un coefficient de dilatation thermique isobare $\alpha = V^{-1}\partial_T V|_P$. La variation d'entropie massique ds du système étant nulle,

$$ds(T, P) = 0 = dT \left. \frac{\partial s}{\partial T} \right|_P + dP \left. \frac{\partial s}{\partial P} \right|_T. \quad (\text{A.3})$$

En utilisant une relation de Maxwell appliquée à l'enthalpie libre massique et l'expression de la capacité thermique massique à pression constante c_P en fonction de l'entropie, on obtient

$$\left. \frac{\partial T}{\partial P} \right|_s = - \frac{\partial s / \partial P}{\partial s / \partial T} = \frac{\alpha T}{c_P \rho}. \quad (\text{A.4})$$

Cette relation définit un profil de température dit isentropique ou quelquefois adiabatique. Il est possible d'appliquer un tel profil à un corps correctement homogénéisé (par exemple par une advection suffisamment vigoureuse, voir section 1.2.1), prenons le parti de l'appliquer à un océan de magma hypothétique. On constate que, dans le cas le plus courant où un corps chauffé voit sa masse volumique diminuer ($\alpha > 0$),

variations du potentiel chimique de deux phases en équilibre. Ce formalisme n'existait pas à l'époque de Clapeyron.

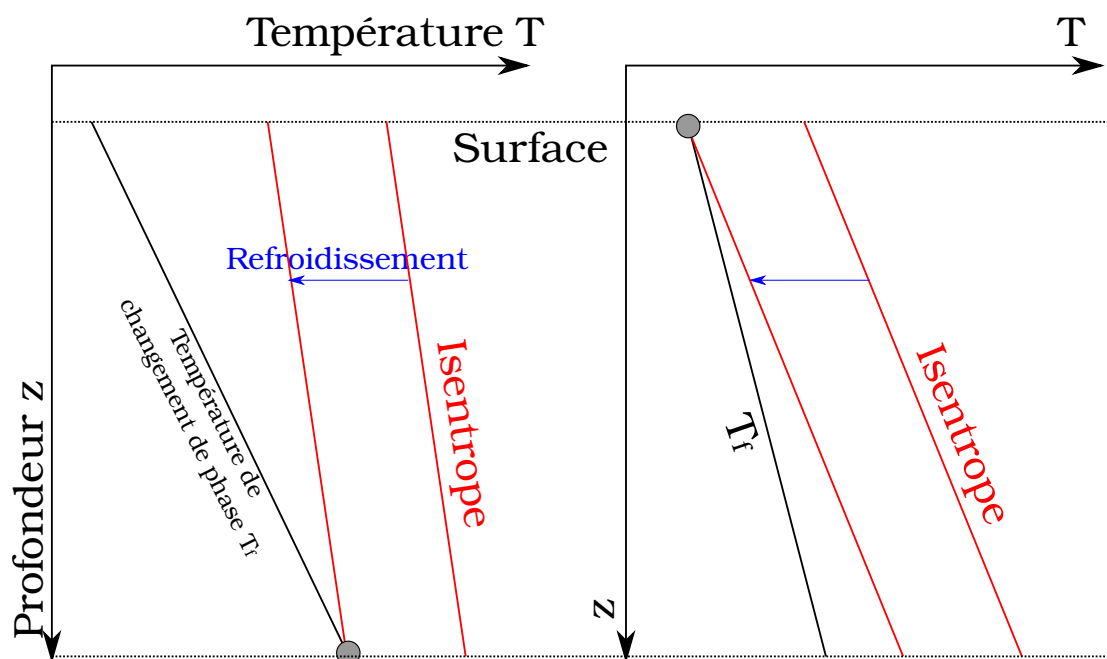


Figure A.2 – Comparaison de deux types différents d’océans de magma. Dans le premier cas, le profil isentropique (en rouge) est de plus forte pente, le refroidissement homogène de l’océan (flèche bleue) place alors l’intersection avec la courbe de changement de phase (en noir) à la base de l’océan. Dans le cas inverse, la solidification se produit d’abord au sommet (ligne pointillée horizontale) de l’océan. L’intersection des profils, marquant la première cristallisation, est marquée d’un point gris dans les deux configurations.

augmenter la pression (*i.e.* la profondeur) accroît également la température du système.

Il importe donc de savoir qui, de la température isentropique ou de la température de changement de phase, évolue le plus vite avec la pression. Cette donnée permet de savoir où débutera la cristallisation d’un océan de magma lors d’un refroidissement homogène. Si c’est la température de changement de phase qui augmente le plus rapidement avec la profondeur, alors le magma cristallisera de haut en bas. Dans le cas inverse, la solidification se déroulera à partir de la base de l’océan (ces deux possibilités sont illustrées fig. A.2). Au vu des données alors disponibles, Kelvin proposa qu’un océan fait de roches « ordinaires » cristalliserait de bas en haut.

A.1.3 À propos de la cristallisation fractionnée et des mélanges binaires

Dans une optique de simplification, on peut d’abord aborder les changements de phases par leur application aux corps purs. Ceux-ci s’opèrent de façon congruente, c’est à dire que la composition chimique des deux phases lorsqu’elles peuvent coexister⁷ est, évidemment, identique. Tel n’est généralement pas le cas dès que l’on s’intéresse à un

7. Suivant les coordonnées du système vis à vis du point critique dans l’espace des paramètres

mélange⁸. Prenons l'exemple d'un mélange de composition donnée, initialement sous forme solide et chauffé peu à peu. Le solide va produire un premier liquide lorsque la température atteint celle du *solidus*, sa composition est différente de celle du solide originel. Avec l'augmentation de la température, une quantité croissante de solide se liquéfiera modifiant la composition moyenne des deux phases. *In fine*, lorsque la température atteint celle du *liquidus*, tout le solide est passé en phase liquide, de composition à nouveau identique à celle du solide originel.

Les corps peuvent se mêler suivant divers régimes, mais on pourra avoir une première idée de leur comportement dans le cadre d'un changement de phase liquide/solide, via l'analyse du mélange idéal de deux corps⁹. On entend par là que ceux-ci sont parfaitement miscibles en toutes proportions et que les interactions entre les constituants de la solution ne dépendent pas de la nature de ces constituants. Pour finir, on supposera pouvoir exprimer les potentiels chimiques (notés $\mu_i^X = \partial_{n_i} G$ où X est la phase, i le composant, G l'enthalpie libre du système et n la quantité de matière) comme seule fonction de leur fraction dans la phase solide et liquide,

$$\mu_i^X = \mu_i^X(0) + RT \ln(x_i^X), \quad (\text{A.5})$$

avec $\mu(0)$ le potentiel de référence, R la constante des gaz parfaits, T la température et x la fraction molaire en i .

Il est envisageable de déterminer, dans ce cadre très idéalisé, les compositions des phases liquides et solides coexistants pour des températures comprises entre celles du liquidus et du solidus. Pour chaque composé I , noté par exemple 1 et 2, un équilibre entre les deux phases existe à pression donnée, noté schématiquement



auquel est associé une enthalpie¹⁰ H_i^0 et une constante de réaction K_i^0 , à pression de référence. En outre, l'égalité des potentiels chimiques de chaque espèce entre les deux phases est assurée à l'équilibre thermodynamique, on écrit donc

$$RT \ln(x_i^L/x_i^S) = \mu_i^S(0) - \mu_i^L(0), \quad (\text{A.7})$$

qui devient après dérivation par rapport à la température et utilisation de la relation

8. À quelques situations particulières près comme les composés définis ou les azéotropes qui se comportent comme des corps purs, ce fait empêche par exemple la distillation d'éthanol pur directement à partir d'un binaire eau-alcool riche en eau.

9. Un exemple concret de mélange idéal en serait le binaire Au / Ag.

10. Ici la réaction étant un changement d'état, il ne s'agit que de la chaleur latente de changement de phase.

de Van't Hoff¹¹ appliquée à l'équilibre sus-mentionné,

$$d_T \ln(x_i^L/x_i^S) = \frac{H_i^0}{RT^2}. \quad (\text{A.8})$$

En intégrant cette relation entre un état quelconque et le changement de phase du corps pur de température T_i^* on obtient pour chacun des composés,

$$\ln(x_i^L/x_i^S) = \frac{H_i^0}{R}(1/T_i^* - 1/T). \quad (\text{A.9})$$

La fraction molaire d'un des composés dans une phase s'exprimant en fonction de l'autre on dispose donc de deux équations à trois inconnues (T, x_1^S, x_1^L par exemple). Ainsi, en se donnant T , on peut déterminer la composition du liquide et du solide stable correspondant.

La méthode présentée *supra* ne doit être entendue que comme un modèle idéalisé. En pratique les compositions des différentes phases sont obtenues expérimentalement, en étudiant des courbes de refroidissement par exemple.

On synthétise habituellement les caractéristiques d'un mélange binaire dans un diagramme où la composition (ici, par exemple, la fraction massique en l'un des composants) est tracée en fonction de la température ou de la pression¹². Les courbes sont les solidus et liquidus et définissent un fuseau à l'intérieur duquel une température donnée impose la coexistence d'un solide et d'un liquide de compositions différentes¹³. La fig. A.3 nous propose une illustration de la construction d'un tel diagramme binaire liquide/solide où les deux composants sont notés schématiquement Y et W.

Si l'on imagine qu'un liquide, initialement en A (de composition et température donnée) se refroidit, la trajectoire suivie sera d'abord verticale (il y a refroidissement sans modification de composition). Lorsque le mélange atteint le liquidus (en B) un premier solide se forme, on lit sa composition comme l'intersection du solidus avec l'horizontale d'équation $T = T(B)$. Ce solide a alors pour composition $x_B \neq x_A$ la composition moyenne initiale. La formation de plus en plus de solide avec la cristallisation conduit donc à modifier la composition du liquide de façon complémentaire. Dans notre cas, le liquide produit est riche en W, le solide est donc appauvri en ce même composant ce qui décale « vers la droite » la composition, en suivant toujours le liquidus. Ce phénomène se poursuit, potentiellement jusqu'à ce que le liquide ne soit plus composé que de W et cristallise comme un corps pur.

11. $d_T \ln K_i^0 = \frac{H_i^0}{RT^2}$.

12. Fixer l'un des deux assure que l'état du système soit entièrement déterminé par un seul paramètre intensif lors de la coexistence de deux phases.

13. Pour la lecture de ce type de diagrammes on se reportera aux manuels de thermodynamique chimique de Math-Spé ou de Licence, mais en un mot l'intérieur du fuseau ne se lit pas comme l'extérieur qui suit les règles ordinaires. Le premier s'utilise en utilisant le « théorème de l'horizontale » et le « théorème des moments chimiques ».

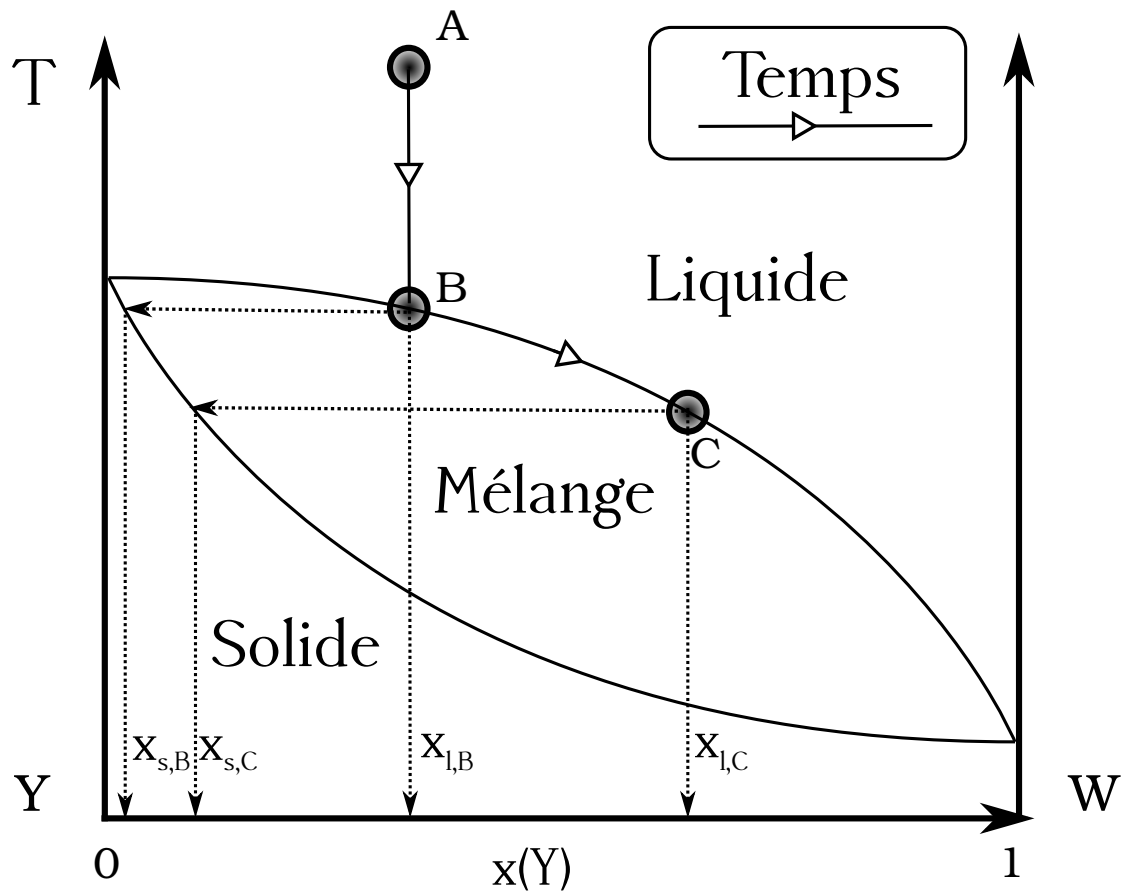


Figure A.3 – Exemple de diagramme binaire liquide-solide dans l'approximation d'un mélange idéal de deux composés schématiquement notés Y et W. La flèche blanche indique le trajet suivi par une particule de liquide subissant un refroidissement puis une cristallisation fractionnée de A à C.

A.2 Annexes au chapitre 2

A.2.1 Notations

Parameter	Symbol
External radius	r_e
Aspect ratio	η
Rotative vector	$\boldsymbol{\Omega}$
Gravity acceleration	\mathbf{g}
Kinematic viscosity	ν
Thermal conductivity	k
Specific heat capacity	c_p
Density	ρ
Thermal expansivity	α
Atmosphere temperature	T_a
Shell thickness	L
Thermal gradient accross the shell	ΔT
Azimuthal wave number	m
Spherical harmonic degree	l

Field	Symbol
Temperature	T
Reference conductive temperature	T_{ref}
Dimensionless temperature departure from T_{ref}	Θ
Dimensionless pressure anomaly	Π
Dimensionless velocity anomaly	\mathbf{u}

A.2.2 Zonal Flows

As presented in section 2.7.1, the development of a strong zonal flow is observed for low or intermediate Ra in rotating simulations. The convective Rossby number $R_{oc} = (\frac{Ra Ek^2}{Pr})^{1/2}$ is frequently used as a parameter to study the evolution of zonal flows. R_{oc} estimates roughly the ratio of buoyancy to Coriolis forces (Gilman, 1977). Small R_{oc} implies strong influence of rotation while the infinite limit corresponds to a flow not affected by rotation. In order to study this phenomenon we plot on fig. A.4, the ratio of the total kinetic energy E over the non-zonal component of this energy, E_{NZ} , as a function of R_{oc} . The larger is the ratio, the stronger is the zonal flow.

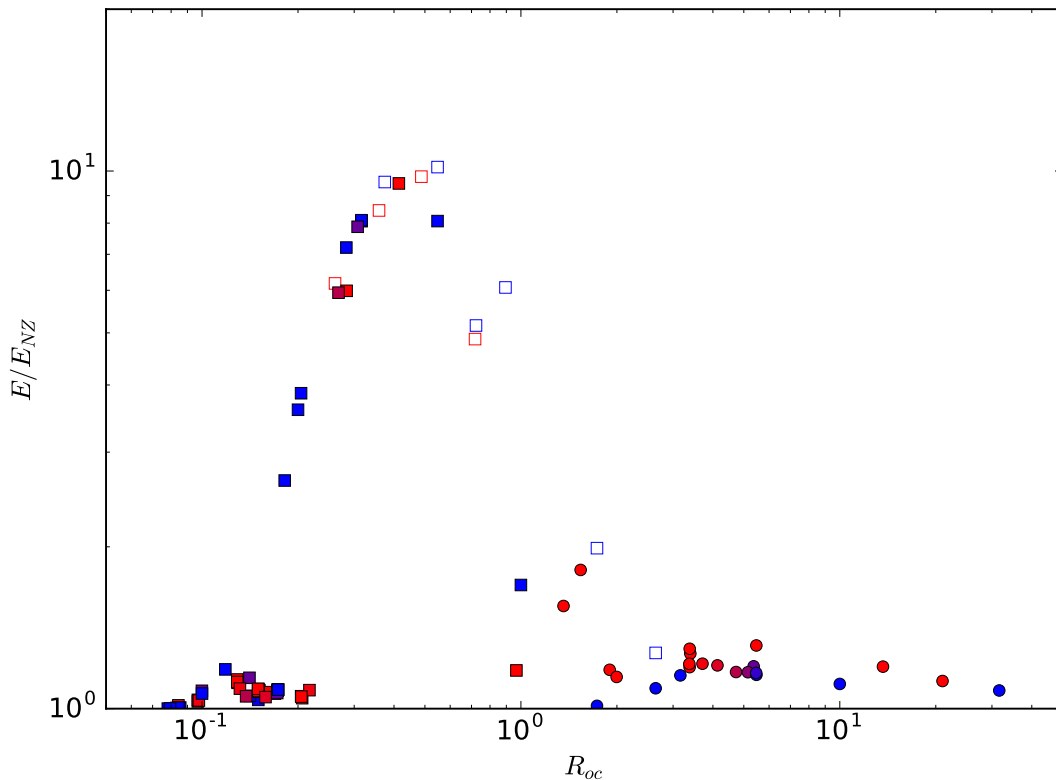


Figure A.4 – Kinetic energy ratio, $\frac{E}{E_{NZ}}$ as a function of the convective Rossby number R_{oc} for various (Ek, Pr, Bi) . Legend is similar to fig. 2.20. Zonal flows are mainly active for small Ek and $R_{oc} \in [0.1, 1]$.

For the two values of Ek , we observed the zonal flow first grows with R_{oc} then decreases. Moreover the zonal flow is almost negligible for the weakly rotating configuration (a flat maximum is observed for $R_{oc} \simeq 8$). For $Ek = 10^{-4}$ we observe a maximum for $R_{oc} \simeq 0.5$ at which the zonal flow represent more than 90% of the total kinetic energy of the system. This maximum is compatible with previous results realised with different boundary conditions (see [Yadav et al. \(2015\)](#) or [Christensen \(2002\)](#)). We also observe that Pr and Bi do not seem to alter significantly the general behaviour of the zonal flows, only small modification of the maximum being noticed. Finally, fig. A.4 shows that the $Ek = 10^{-4}$ data do not reach very high R_{oc} values (~ 3 at most) which explains that we do not really observe the disappearance of the influence of the rotation on such simulations (see fig. 2.10 for example).

A.2.3 Transition at a given Ra

It was also possible to study the transition observed at constant Ra , when Bi varies from 0 to infinity. As shown previously this choice is not optimal to compare equivalent configurations but only uses input parameters.

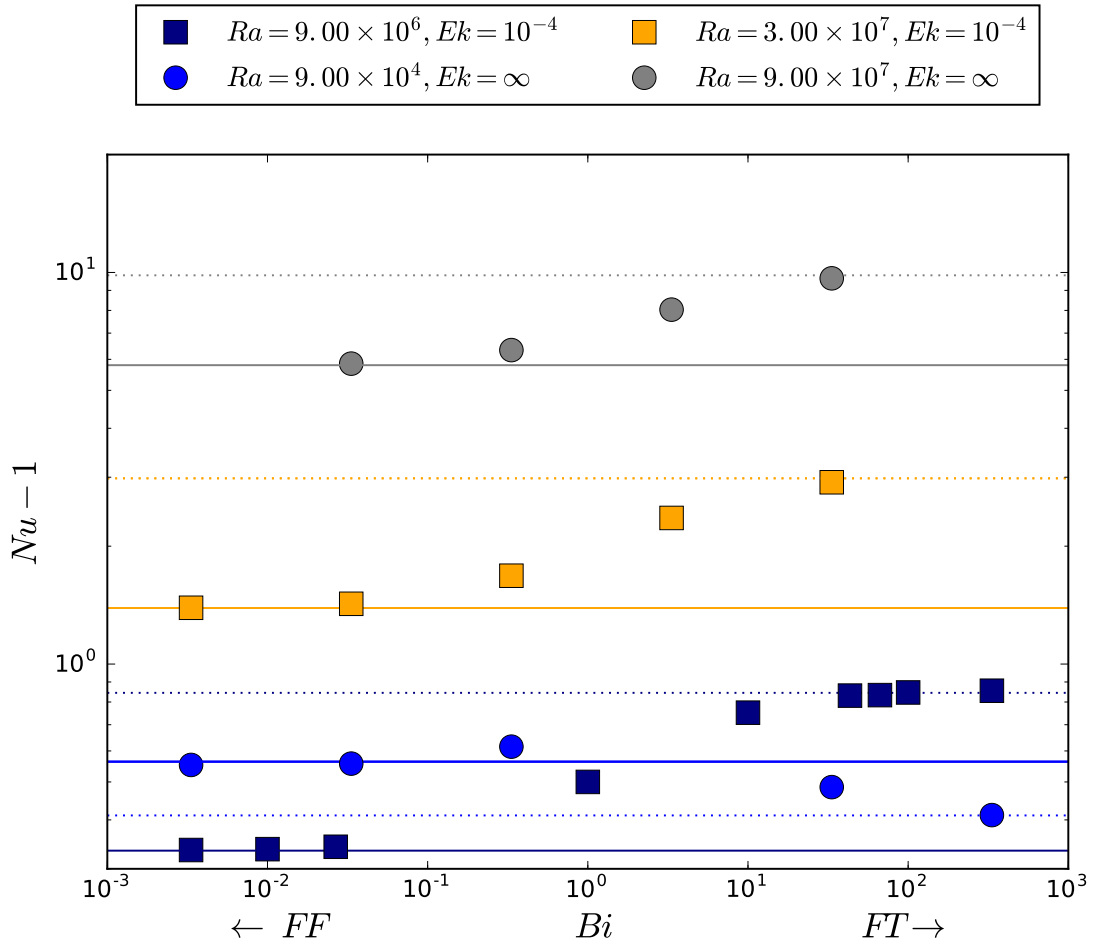


Figure A.5 – Nusselt Number as a function of the Biot Number for various $(Ra, Ek, Pr = 3)$ simulations. Each data subset defined by (Ra, Ek) is plotted by symbols of the same colour and shape. FF ($Bi = 0$) and FT ($Bi \rightarrow \infty$) limits are represented respectively by solid and dotted lines of the same colour.

Fig. A.5 shows $Nu - 1$ as function of Bi for various values of (Ra, Ek) . The amplitude of the transition by definition depends on $Nu(Bi = 0) - Nu(Bi = \infty)$ which is a function of (Ra, Ek, Pr) . For all cases but one, Nu increases with Bi – at equal Ra , FT cases are more efficient in terms of heat transfer. The exception is explained below. Fig. A.5 shows that in the most common cases the transition from FF to FT is monotonous and continuous. Moreover, the transition occurs mainly between $Bi = 10^{-1}$ and $Bi = 10^2$.

In order to study more specifically the transition itself, we then plot for a given global diagnostics $X(Ra, Ek, Bi)$ (here $X = Nu - 1$) the quantity

$$\Sigma = \frac{X - X(Bi = \infty)}{X(Bi = 0) - X(Bi = \infty)}. \quad (\text{A.10})$$

By construction, Σ evolves from 0 to 1 when Bi goes from 0 to $+\infty$ and it can be interpreted as a transition parameter. This quantity has been computed for the same

subset that was used to produce fig. A.5 and is plotted on fig. A.6. First of all, we notice that the large majority of the data subsets associated to a given (Ra, Ek) couple follows the same continuous and monotonous transition. The quantity

$$\Sigma_0 = \frac{Bi}{Bi + Bi_T} \quad (\text{A.11})$$

gives an approximation of the evolution of Σ , when the central value $Bi_T \approx 1$ to 3. This approximation is closer to the data points for rotating cases. Note that Σ is very similar to the quantity γ used to model $Ra_C = f(Bi)$ in section 2.6.2. We observe a slight evolution of Bi_T with Ra and Ek . The only notable exception to these observations is the slightly supercritical, $Ra = 9 \times 10^4$ non-rotating case (blue dots), which is anomalous. For this case, the transition is not monotonous and is characterised by a minimum for $Bi \approx 1$. In fact, this case is one of the few configurations in which the most efficient heat transfer is obtained for intermediate value of Bi . This specific behaviour is linked to the vicinity of the critical Rayleigh number in this simulation as well as to the large relative difference between Ra_C for FF or FT boundary conditions in this case. As seen in the section 2.6.1, $Ra_C(\text{FF}, Pr, Ek) < Ra_C(\text{FT}, Pr, Ek)$ and $\frac{(Ra_C^{\text{FT}}, Ek) - Ra_C(\text{FF}, Ek)}{Ra_C(\text{FT}, Ek=\infty) - Ra_C(\text{FF}, Ek=\infty)}$ decreases with Ek . Moreover, $Nu - 1$ is proportional to $\frac{Ra}{Ra_C} - 1$ near the threshold of convection (Gastine et al. (2016) and Gillet and Jones (2006)). Thus, for this case characterised by $(Ra = 9 \times 10^4 \approx Ra_C, Ek = \infty, Pr = 3)$ we can reasonably expect that $Nu(\text{FF}) > Nu(\text{FT})$ which means that increasing Bi leads to a transition from higher to smaller values. Moreover, since $Ek = \infty$ the relative amplitude of the transition is large and implies high variations of $\frac{Ra}{Ra_C}$ with Bi since Ra remains constant. This produces the non-monotonous variation of Nu with Bi .

We also consider other global diagnostics: $\langle Et \rangle$ which is the root mean square value of the temperature anomaly and P_{conv} which is the root mean square of $u\Theta$ and found similar behaviour as for Nu with respect to Bi .

A.2.4 3D representations

Fig. A.7 shows 3D maps of temperature anomalies ($l=0$ component subtracted) for sub-shells of our system – boundary layers excluded – for $Pr = 3$. FF and FT configurations are compared for quasi equal Ra_{eff}, Ek . For cases with $Ra_{eff} = 3 \cdot 10^8$, the effect of boundary condition is hardly visible. Conversely, cases with lower Ra_{eff} with a strong effect of rotation show differences in the location of the anomalies with respect to the tangent cylinder (see fig. 2.9 I).

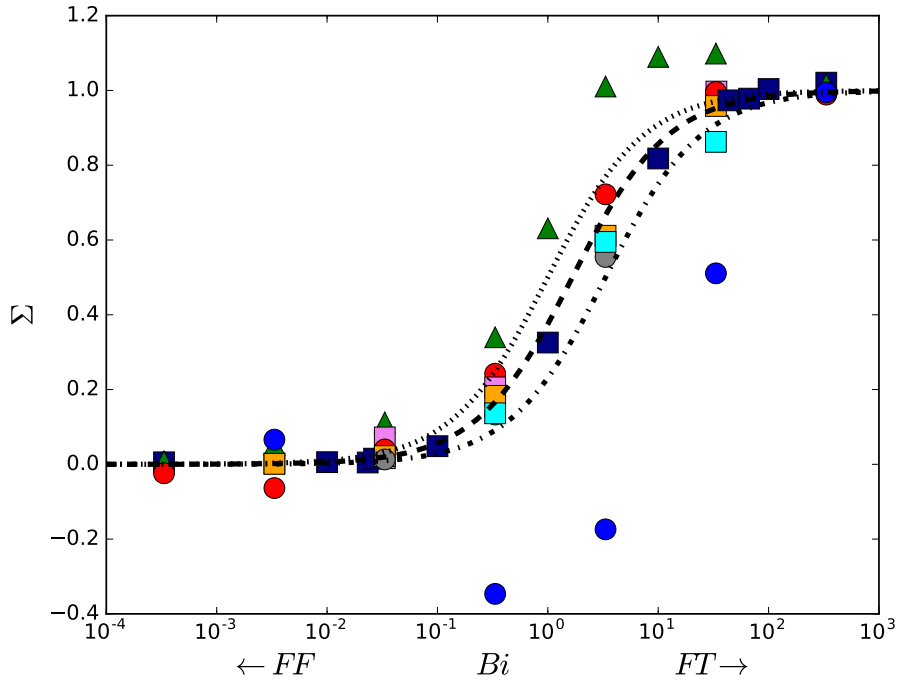
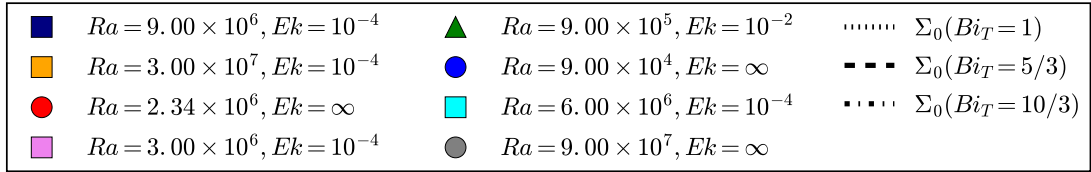


Figure A.6 – Σ transition parameter (cf. eq. A.10, computed with $X = Nu - 1$) from FF ($Bi = 0$) to FT ($Bi = \infty$) as a function of the Biot Number for various ($Ra, Ek, Pr = 3$) simulations. Σ_0 trends (cf. eq. A.11) are plotted for three transition values: $Bi_T = 1, 5/3, 10/3$. Some cases show a large deviation from the trends, which is explained in the main body of this appendix.

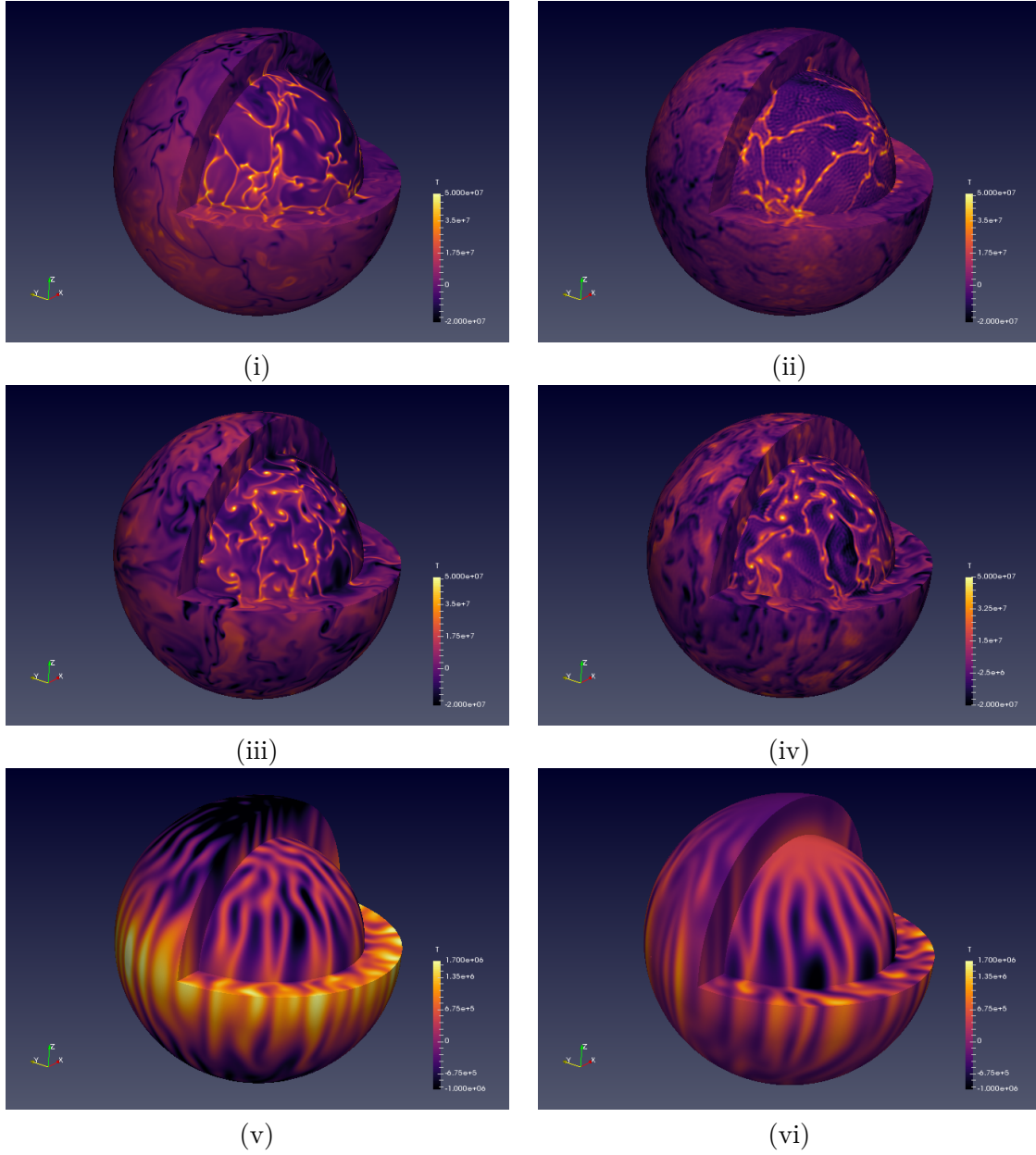


Figure A.7 – 3D representation of the temperature anomaly ($l=0$ subtracted) inside a shell of radial limits 0.7 and 0.95 with $Pr = 3$. Rotational axis is z . Left column FF, right one FT. For each line (Ra_{eff}, Ek) is kept approximately constant. First line $(3 \times 10^8, \infty)$. Second line $(3 \times 10^8, 10^{-4})$. Third line $(10^7, 10^{-4})$.

A.3 Annexes au chapitre 3

A.3.1 Notations

Parameter	Symbol
External radius	r_e
Aspect ratio	η
Rotative vector	Ω
Gravity acceleration	\mathbf{g}
Kinematic viscosity	ν
Thermal conductivity	k
Specific heat capacity	c_p
Mean density	ρ
Heavy component density	ρ_h
Thermal expansivity	α
Compositional expansivity	β
Atmosphere temperature	T_a
Shell thickness	δL
Thermal gradient across the shell	ΔT
Azimuthal wave number	m
Spherical harmonic degree	l
Height of stratification	h
Erosion velocity	u_e
Proportion of latent heat in the surface heat flow	p
Composition jump across the stratified layer	$\Delta \xi$

Field	Symbol
Temperature	T
Reference conductive temperature	T_{ref}
Dimensionless temperature departure from T_{ref}	Θ
Concentration in heavy component	C
Reference concentration profile	C_{ref}
Dimensionless concentration departure from C_{ref}	Ξ
Dimensionless pressure anomaly	Π
Dimensionless velocity anomaly	\mathbf{u}

A.3.2 Latent heat contribution

We use the geometrical parameters of the sec. 3.4.1. Assuming the system is vigorously mixed by strong convection while crystallizing as a pure body at its bottom interface, one can write that the temperature profile T_m in the shell is an adiabatic one with the basal temperature $T_{L,r_e\eta} = T_m(r_e\eta)$ fixed by the liquidus. We use Clausius-Clapeyron's relation written on the (P_L, T_L) coordinates of the phase change

$$\frac{\partial P_L}{\partial T_L} = \frac{\mathcal{L}M}{T\Delta v_L} \quad (\text{A.12})$$

in order to estimate the slope of the liquidus and determine the basal liquidus temperature from a 1 atmosphere fusion temperature $T_{L,0}$ ($M, \Delta v$ being the molar mass and the molar volume variation during the phase change). Assuming $\Delta v, \rho, \alpha, \mathcal{L}$ and g are independent of the pressure and temperature, we write the estimated temperature profile

$$T_m(r, r_i) = T_{L,0} \exp\left[\frac{\rho g \Delta v (r_e - r_i)}{\mathcal{L}M} + \alpha g (r_i - r) / c_P\right]. \quad (\text{A.13})$$

Now if we imagine that the crystallization makes the solid mantle thicker of an infinitely small dr_i additional radius in a time dt , this solidification is going to release a certain amount of latent heat $dE = \rho \mathcal{L} 4\pi r_i^2 dr_i$. In the meantime since the depth of the bottom interface has evolved, the solidification temperature does the same. This implies a shift in the adiabatic bottom reference temperature and thus a global cooling or warming of the whole shell. We write this energetic variation of internal energy

$$U(r_i) = \int_{r_i}^{r_e} dV c_P \rho T_m(r, r_i). \quad (\text{A.14})$$

At the end of the day we found, $\frac{dU}{dr_i} = \frac{U(r_i+dr) - U(r_i)}{dr}$

$$\frac{dU}{dr_i} \simeq T_{L,0} e^{\frac{g(r_e - r_i)}{d}} c_P \rho 4\pi (1 - \mathcal{G}) [(r_e^2 + 2r_e d + 2d^2) - e^{(r_e - r_i)/d} (r_i^2 + 2r_i d + 2d^2)] \quad (\text{A.15})$$

where $d = c_P / \alpha g$ and $\mathcal{G} = \frac{\Delta v \rho c_P}{\mathcal{L}M\alpha}$ the ratio of the adiabat and liquidus slopes. We write, from the definitions used in sec. 3.4.2,

$$\varphi = \frac{dE/dt}{HV} = -\frac{dE/dt}{dU/dt} = -\frac{dE/dr_i}{dU/dr_i} \quad (\text{A.16})$$

In our case, $\mathcal{G} > 1$ and crystallizing the magma ocean implies to cool down the liquid. Using the physical values postulated for a terrestrial magma ocean (listed in tab. 3.1) and an initial aspect ratio of 5/6, we compute $\varphi \sim 10^{-1}$.

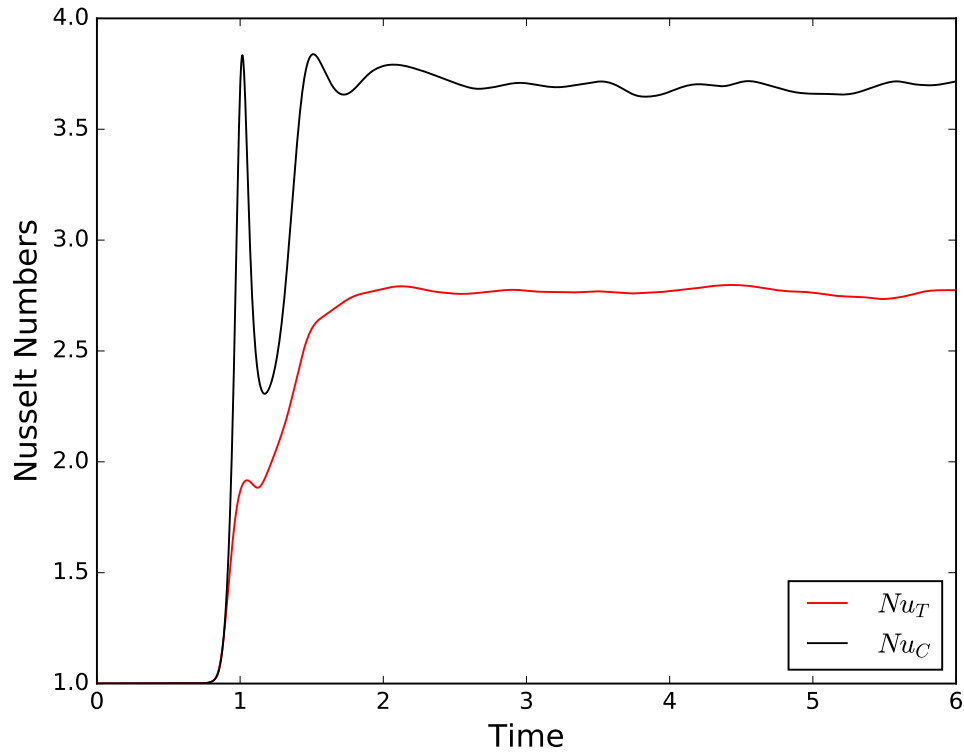


Figure A.8 – Nu_T & Nu_C as functions of time. T and C fields are coupled at the basis, $\varphi = 5.10^{-2}$, $\lambda = -10$, $Ra_T = 10^5$. For $t > 3$, the state is statistically stationary.

A.3.3 Determining the Statistically Stationary State

We determine the extent of the statistically stationary state thanks to the stationarity of the Nusselt numbers, as illustrated fig. A.8.

A.3.4 Measuring the Height of Stratification

In order to determine the height of stratification at a given time, we use a method based on the compositional profile, as illustrated fig. A.9.

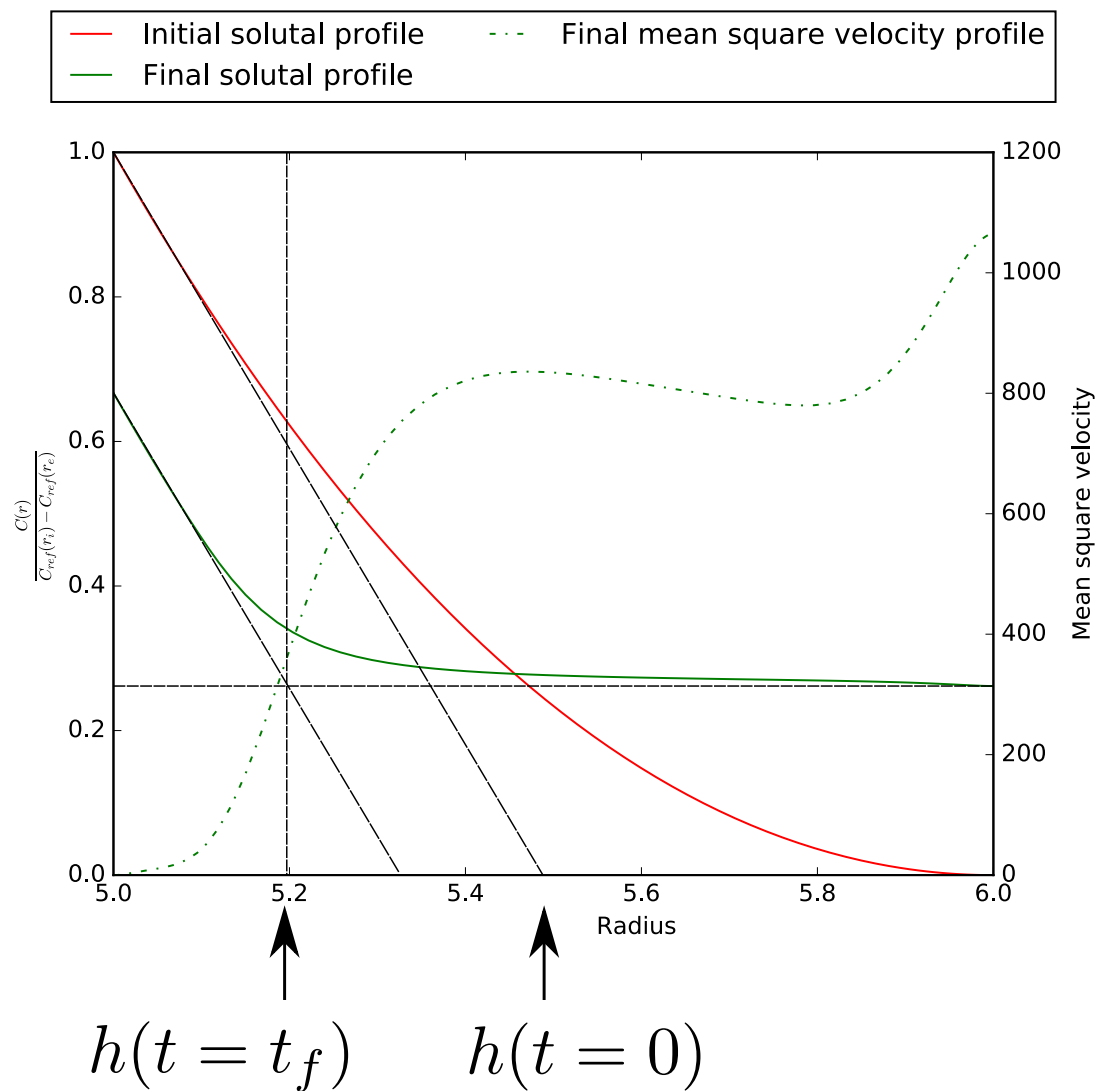


Figure A.9 – Schematic of the determination of the height of stratification h , using surface concentration at the top and oblique asymptote at the bottom of the shell (guides are drawn with broken lines). Here the initial height of stratification ($t = 0$) determined by this method is about 5.5, the final ($t = t_f$) one 5.2