



Université  
de Toulouse

# THÈSE

En vue de l'obtention du

## DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par *l'Université Toulouse III – Paul Sabatier*  
Discipline ou spécialité : *Dynamique des fluides*

---

Présentée et soutenue par *Pauline ASSEMAT*  
Le 30 juin 2008

**Titre :** *Dynamique non-linéaire des écoulements confinés:  
application à l'instabilité de Marangoni-Bénard  
et aux écoulements entre surfaces texturées*

---

### JURY

*Pr. M. Azaiez (examineur)*  
*Pr. A. Bergeon (directeur de thèse)*  
*Pr. D. Henry (examineur)*  
*Pr. E. Knobloch (examineur)*  
*Pr. P. Le Quéré (examineur, président du jury)*  
*Pr. I. Mercader (rapporteur)*  
*Pr. F. Plouraboué (co-directeur de thèse)*  
*Pr. L. S. Tuckerman (rapporteur)*

---

**Ecole doctorale :** *MEGEP*  
**Unité de recherche :** *IMFT groupe GEMP*  
**Directeur(s) de Thèse :** *Alain Bergeon et Franck Plouraboué (co-directeur)*  
**Rapporteurs :** *membres du jury*

# Résumé

Le travail porte sur deux problématiques scientifiques : la formation de structures convectives induites par l'instabilité de Marangoni-Bénard et les propriétés de transport des écoulements entre surfaces texturées. Bien que physiquement distincts, ces deux systèmes présentent les points communs d'être assujettis à de fortes contraintes spatiales. Ils sont analysés par le biais de la théorie des bifurcations.

L'étude de la convection de Marangoni-Bénard a été menée dans des géométries cylindriques à section transverse circulaire et faiblement elliptique. La comparaison des deux situations dans le régime non-linéaire a été menée par l'étude des changements induits sur les diagrammes de bifurcation eux mêmes interprétés par la théorie des bifurcations en présence de symétries. Nous avons ensuite mené l'étude de cette instabilité en présence de mélanges fluides binaires sujets à l'effet Soret et dans des couches fluides bidimensionnelles. Ce travail a révélé la formation de structures convectives spatialement localisées appelées convectons dont nous avons révélé la formation sur un fond d'ondes de plus faible amplitude.

Enfin, nous avons étudié les propriétés de transport des écoulements entre surfaces texturées. Le système étudié est confiné transversalement à la direction de l'écoulement ce qui place cette étude dans le contexte de la microfluidique et de l'élaboration de micro-mélangeurs passifs. La simulation numérique et l'analyse des propriétés de transport de traceurs passifs est menée sur les équations issues d'un développement asymptotique faiblement inertiel dans un canal formé d'une succession périodique de cellules texturées.

# Abstract

The work focuses on two different physical situations : the convective structures resulting from the Marangoni-Bénard instability and the flow between patterned surfaces. The two systems are spatially constrained and are analysed using dynamical systems theories.

Marangoni-Bénard convection has been studied in cylindrical geometries with either a circular or a weakly elliptical cross-section. The comparison of the two situations is carried out in the non-linear regime and the corresponding bifurcation diagrams are analysed using bifurcation theory with symmetries. Two-dimensional Marangoni convection in binary mixtures with Soret effect has also been studied in large periodic domains. The results show the formation of steady convective structures localized in space called convectons and the onset of stable convectons embedded in a background of small amplitude standing waves.

Finally, the transport properties of flows in between patterned surfaces under weak inertia influence is studied. The flow is induced by a constant applied pressure gradient and the velocity field is calculated using an extension of the lubrication approximation taking into account the first order inertial corrections. Trajectories of tracers are obtained by integrating numerically the quasi-analytic velocity field. The transport properties are analysed by the study of Poincaré sections and their invariants.

# Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mes directeurs de thèse Alain Bergeon et Franck Plouraboué auprès de qui j'ai appris quantité de choses. Outre leur disponibilité, ils m'ont intégrée pleinement à leurs projets scientifiques en partageant à la fois leur expérience et leurs collaborations. J'ai pu ressentir pendant ces quatre ans, une véritable volonté de leur part de me rendre autonome dans l'exercice des activités de recherche et d'enseignement.

Je tiens également à remercier Edgar Knobloch de m'avoir accueillie dans son laboratoire à Berkeley et de m'avoir prodigué de précieux conseils. Je remercie également les membres de mon jury de thèse d'avoir accepté de lire ce travail en détail. Je n'aimerais pas oublier le personnel administratif de l'Université Paul Sabatier Catherine Bouteiller et de l'IMFT Suzy Bernard dont l'efficacité et la disponibilité ont été précieuses. Plus généralement, j'aimerais remercier l'ensemble des personnels de l'IMFT et du département de mécanique de l'Université Paul Sabatier.

Ma thèse ne se serait pas déroulée de la même manière sans la présence à la fois scientifique et amicale des thésards et post-doctorants du groupe GEMP. Tout d'abord je tiens à remercier les anciens, en particulier mes successifs voisins de bureau Xavier Barthélémy, Laurent Oxarango, Olivier Chapuis et Laurent Risser qui m'ont à la fois fait part de leur expérience scientifique mais aussi personnelle dans cette course marathonnienne qu'est la thèse. Je pense aussi à la nouvelle génération Romain Guibert, David Bailly, Ian Billanou, Fabien Chauvet et à tous les autres qui ont le mérite d'avoir subi ma période de rédaction sans économiser leurs encouragements et leur bonne humeur.

Je pense également aux amis ariégeois, à ceux de Bellevue, ceux de l'université et d'ailleurs qui ont été d'un soutien inconditionnel dans les moments difficiles. Sonia, merci pour m'avoir souvent rendu confiance en moi, Anouck merci de m'avoir soutenue tout au long de ces années.

Enfin je tiens à remercier ma famille, mon clan, toujours présents et qui m'ont donné l'envie et la force de me dépasser. Sans pouvoir les citer tous, je pense à mon grand-père qui m'a appris à compter et m'a donné le goût des sciences, à ma cousine pour m'avoir appris la persévérance, à mon frère pour être ce qu'il est, à mes parents sans qui je n'aurais pas pu mener ce projet à terme et pour m'avoir donné tout ce qu'ils pouvaient et bien plus encore.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
1.1	Instabilités de Marangoni-Bénard . . . . .	1
1.2	Ecoulements entre surfaces texturées . . . . .	5
1.3	Plan du manuscrit . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Instabilité de Marangoni Bénard</b>	<b>9</b>
2.1	Introduction . . . . .	9
2.2	Modélisation et mise en équation . . . . .	19
2.3	Analyse linéaire de stabilité de la solution conductive . . . . .	22
2.3.1	Linéarisation des équations . . . . .	22
2.3.2	Effet du confinement . . . . .	23
2.3.3	Symétries et conditions aux limites . . . . .	24
<b>3</b>	<b>Méthodes numériques</b>	<b>37</b>
3.1	Discrétisation en temps . . . . .	38
3.1.1	Introduction . . . . .	38
3.1.2	Discrétisation temporelle des équations de conservation de l'énergie et de la fraction massique . . . . .	39
3.1.3	Schéma de discrétisation de KIO . . . . .	40
3.2	Discrétisation spatiale . . . . .	41
3.2.1	Inversion du laplacien sur un cube . . . . .	42
3.2.2	Formulation du problème discret sur un élément courbe . . . . .	44
3.2.3	Résolution par diagonalisation partielle . . . . .	46
3.2.4	Application au cas des éléments spectraux . . . . .	48
3.3	Domaine périodique . . . . .	52
3.4	Méthode de continuation . . . . .	55
3.4.1	Formulation des méthodes de continuation et algorithme . . . . .	56
3.4.2	Implémentation d'un solveur par méthode de point fixe . . . . .	58
3.4.3	Analyse de stabilité linéaire . . . . .	60
3.4.4	Calcul direct des points fixes de bifurcation primaire . . . . .	61
<b>4</b>	<b>Marangoni-Bénard en géométrie cylindrique</b>	<b>67</b>
4.1	Introduction . . . . .	67
4.2	Géométrie parallélépipédique . . . . .	72
4.3	Géométrie cylindrique . . . . .	75
4.3.1	Cylindres à section circulaire . . . . .	76

4.3.2	Cylindre à section transverse elliptique . . . . .	89
4.3.3	Ensemble des résultats publiés . . . . .	92
<b>5</b>	<b>Marangoni-Bénard et états localisés</b>	<b>115</b>
5.1	Description théorique . . . . .	116
5.2	Marangoni-Bénard avec effet Soret . . . . .	122
5.2.1	Equations et adimensionalisation . . . . .	122
5.2.2	L'instabilité . . . . .	124
5.3	Résultats . . . . .	128
5.3.1	Etats stationnaires, homoclinic snaking . . . . .	129
5.3.2	Solutions instationnaires . . . . .	134
5.3.3	Ensemble des résultats publiés . . . . .	140
<b>6</b>	<b>Ecoulements entre surfaces texturées</b>	<b>169</b>
6.1	Le contexte . . . . .	169
6.1.1	Les mélangeurs actifs . . . . .	171
6.1.2	Les mélangeurs passifs . . . . .	171
6.2	Modélisation . . . . .	173
6.3	Méthodes et outils d'analyse . . . . .	177
6.3.1	Adaptation des méthode aux éléments spectraux . . . . .	177
6.3.2	Calcul des trajectoires . . . . .	178
6.3.3	Calcul des points fixes et de la matrice de monodromie . . . . .	182
6.4	Analyse . . . . .	186
6.4.1	Analyse théorique . . . . .	186
6.4.2	Etude quantitative . . . . .	190
<b>7</b>	<b>Conclusion</b>	<b>201</b>
7.1	Instabilités de Marangoni-Bénard . . . . .	201
7.2	Ecoulements entre surfaces texturées . . . . .	203

# Chapitre 1

## Introduction

Le travail que nous présentons dans ce manuscrit porte sur deux problématiques scientifiquement différentes : la formation de structures convectives par l'instabilité de Marangoni-Bénard et les propriétés de transport des écoulements entre surfaces texturées aux échelles de la microfluidique. Ces problématiques ont néanmoins des points communs. Dans les deux cas, les systèmes étudiés présentent de fortes contraintes spatiales. Pour l'instabilité de Marangoni-Bénard, le système est confiné latéralement dans un cylindre dont le rapport d'aspect est d'ordre de grandeur de la longueur d'onde de l'instabilité. Pour les écoulements entre surfaces texturées, le système est confiné transversalement à la direction de l'écoulement ce qui place d'ailleurs cette étude dans le contexte de la microfluidique. Les deux systèmes sont étudiés numériquement et les résultats interprétés en grande partie par la théorie des systèmes dynamiques. Les outils théoriques et numériques sont donc imbriqués dans les deux études. Dans la suite de ce chapitre, nous présentons succinctement les travaux que nous avons réalisés. Les points communs en terme de méthodologie apparaîtront clairement lors de la lecture du manuscrit. Nous terminons ce chapitre par une présentation du plan du manuscrit.

### 1.1 Instabilités de Marangoni-Bénard

Bien que les instabilités thermoconvectives soient devenues un paradigme dans l'étude des systèmes dynamiques, leur maîtrise n'en reste pas moins un enjeu majeur dans un large spectre de disciplines. L'un des champs d'application parmi les plus significatifs est la technologie de fabrication des matériaux, alliages ou semi-conducteurs, par solidification.

Il existe plusieurs procédés couramment utilisés. Dans l'un d'eux dit de zone flottante (figure 1.1), une partie d'un barreau polycristallin vertical est localement fondu et la source de chaleur progressivement déplacée vers le haut dans la direction du barreau nourricier. Dans la zone fondue qui se maintient par capillarité, les variations de concentration et de température peuvent provoquer l'apparition de mouvements convectifs, périodiques ou chaotiques, d'origine volumique (du type Rayleigh-Bénard) et surfacique (effet Marangoni). Ces instabilités convectives affectent la distribution du soluté dans la phase liquide et notamment au voisinage du front de solidification. Les hétérogénéités qu'elles produisent prennent, dans la phase solide, la forme de variations de concentration à l'échelle de la centaine de microns, appelées striations qui détériorent les propriétés conductrices des matériaux produits. L'amélioration des procédés de fabrication requiert la maîtrise de

ces instabilités ce qui nécessite une compréhension fine de l'hydrodynamique sous-jacente à leur apparition.

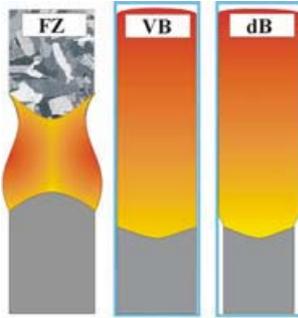


FIG. 1.1 – Exemples de configurations de solidification : Fz : Zone flottante, VB : Bridgman vertical, dB : Bridgman détaché. Dans les configurations de Bridgman, le métal est placé dans un creuset glissé dans un four. On remarque la présence de surfaces libres en haut des configurations Bridgman

formation de gradients de tension de surface provoquée par la convection sans que l'interface ne se déforme, soit la modulation de la tension de surface induite par l'élévation de la surface libre. Les deux mécanismes ont été classés par Goussis et Kelly [14] comme le mode P et le mode S respectivement.

Le mécanisme de base associé au mode S est le suivant : supposons qu'un film horizontal soit déformé de sorte qu'il présente localement une déflexion. Si le substrat sur lequel il repose est chauffé, le fluide au creux de la déflexion est plus chaud que son voisinage (il est plus proche de la partie chaude). La tension de surface qui en général s'affaiblit avec la température y est alors plus petite de sorte que son gradient est orienté vers l'extérieur de la déflexion. Les contraintes interfaciales, proportionnelles au gradient de la tension superficielle, vont alors conduire le fluide vers l'extérieur de la déflexion ce qui contribue à l'accroître. Si la pression hydrostatique et les forces capillaires sont incapables de compenser, le mécanisme peut même conduire le film liquide à se rompre [21]. Dans les films fluides minces, ce mécanisme est dominant devant celui de mode P qui fait l'objet de nos travaux. Ce dernier ne nécessite pas que l'interface se déforme et existe en absence de gravité. Au delà d'une différence de température critique entre la surface libre et la surface rigide à température constante sur laquelle le fluide repose, les effets visqueux et de diffusion thermique sont insuffisants pour enrayer les mouvements induits par les gradients de tension de surface provoqués par d'éventuelles fluctuations de température le long de la surface libre. Le mécanisme induit alors la formation spontanée de structures convectives et est appelé instabilité de Marangoni-Bénard [23, 27, 28]. Les échelles caractéristiques de ces cellules sont de l'ordre de grandeur de la profondeur du film fluide au contraire du mode S pour lequel les échelles caractéristiques de la déformation interfaciale sont de l'ordre de grandeur de l'extension horizontale du film. Dans ce contexte,

La convection d'origine surfacique est bien évidemment présente dans de nombreux autres procédés notamment aux petites échelles de la microfluidique où ces forces deviennent dominantes devant celles d'origine volumique. Par exemple, l'effet Marangoni d'origine solutal est exploité par Morris *et al.* [20] pour élaborer un micro-actionneur de mouvements ne nécessitant pas d'apport énergétique ou de pièces mobiles. La structuration spécifique des écoulements en cellules de convection de formes hexagonales a également été utilisée récemment dans les procédés de fabrication de nanotubes de carbone, la croissance du nano-tube prenant place au centre des cellules où le fluide remonte à la surface libre [17].

Les travaux sur la convection de Marangoni-Bénard présentés dans ce manuscrit concernent les mouvements convectifs induits uniquement par les effets thermo-capillaires. Nous ne considérerons pas ceux induits par les variations de la densité avec la température (convection de Rayleigh-Bénard). On notera cependant que les mouvements d'origine surfacique peuvent avoir deux causes qui sont, soit la

la structuration de l'écoulement peut être fortement affectée par les contraintes de taille finie des géométries. C'est l'un des points que nous étudierons dans ce travail.

Outre leurs implications industrielles, les travaux que nous présentons s'attaquent aussi au problème plus fondamental de la compréhension de la dynamique non-linéaire qui amène cette instabilité à organiser l'écoulement en structures de formes particulières. Dans les systèmes suffisamment spatialement étendus, la transition de l'état stationnaire spatialement homogène vers une structure hétérogène et organisée en motifs convectifs s'effectue de manière non triviale et souvent par propagation d'un front produit par une excitation ou une perturbation locale du système. Pour des systèmes loin de l'équilibre, on peut ainsi observer dans une même gamme de paramètres plusieurs familles distinctes d'états stables. On connaît mal actuellement comment le système choisit l'un ou l'autre de ces états d'équilibre bien que l'on sache que ce choix est guidé par les conditions initiales.

Par exemple, dans la convection de Rayleigh-Bénard les travaux récents [24, 25, 26] indiquent que deux états non-triviaux qui sont respectivement, des arrangements de rouleaux droits et de spirales, sont stables dans une même et large gamme de paramètres. Les spirales qui peuvent également se déplacer, apparaissent ici comme des défauts de l'arrangement en rouleaux et sont appelées *spiral defect chaos*. Elles ont pu être reproduites numériquement dans des géométries rectangulaires et cylindriques suffisamment étendues aussi bien en simulant des problèmes de convection à faible nombre de Prandtl qu'à l'aide d'équations modèles. En général, les motifs produits (figure 1.2) consistent en un certain nombre d'arrangements circulaires, de rouleaux droits et de nombreuses spirales à faible nombre de bras susceptibles de se déplacer, de former de nouveaux bras par dislocations, voire de disparaître. De telles structures en spirale ont été observées dans d'autres systèmes ayant une nature oscillatoire intrinsèque comme des systèmes chimiques de réaction-diffusion, ou les lits de sables soumis à des vibrations. Dans le contexte de l'instabilité de Rayleigh-Bénard, leur découverte est d'autant plus étonnante qu'elles ont été mises en évidence dans une gamme de paramètres où les rouleaux sont connus pour être stables.

Au même titre que la convection de Rayleigh-Bénard, la dynamique non-linéaire de l'instabilité de Marangoni-Bénard offre un champ d'investigation riche dont la compréhension nécessite une forte interaction avec la théorie des systèmes dynamiques. Le travail que nous présentons en présente deux aspects très différents.

Le premier est une étude de la dynamique non-linéaire dans des géométries cylindriques à sections transverses circulaire et faiblement elliptique. Les rapports d'aspect concernés sont modérés de sorte que l'interaction entre la structuration de l'écoulement et la contrainte géométrique est forte. Dans ce travail, nous analysons les mécanismes de

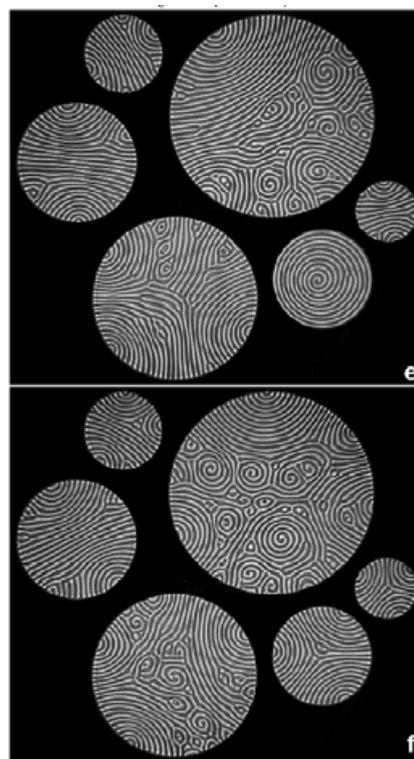


FIG. 1.2 – Arrangements de spirales et de rouleaux (Plapp *et al.*, PhD, 1997)

sélection de structures particulières et les changements produits lorsque la géométrie n'est plus axisymétrique. Les résultats sont interprétés à l'aide de la théorie des bifurcations en présence de symétries. Il faut souligner que les symétries du système d'équations pour une géométrie cylindrique à section circulaire incluent l'invariance par rotation d'un angle quelconque autour de l'axe du cylindre. Cette symétrie continue ne peut plus être partagée par le problème discret ce qui avec le choix de la méthode numérique que nous avons fait, a un impact significatif sur les résultats de l'analyse linéaire et non-linéaire de l'instabilité. Nous élucidons cet impact. Cette étude ne représente pas entièrement l'objectif initial que nous nous étions fixé et qui portait, non sur l'étude des fluides à un composant, mais sur les mélanges binaires sujets à l'effet Soret. Cet effet caractérise le couplage des gradients de concentration et de température dans l'expression du flux de masse. Sous l'effet d'un gradient thermique, il provoque au sein du fluide une séparation des espèces chimiques. Aux forces de surfaces produites par d'éventuelles variations de température le long de la surface libre, peuvent alors s'ajouter celles induites par des variations de concentration. L'effet relatif de ces deux forces sur la stabilité de la solution conductive est caractérisé par le coefficient de Soret-Marangoni  $S_M$ . Lorsque qu'il est (suffisamment) négatif, la solution conductive perd sa stabilité via une bifurcation de Hopf responsable de l'apparition d'un mouvement oscillatoire. Ce n'est pas le cas des fluides à un composant chimique pour lesquels l'analyse linéaire démontre que la perte de stabilité de l'état conductif est une bifurcation vers un état stationnaire. L'objectif initial était aussi d'étudier les différentes solutions instationnaires résultant de cette bifurcation de Hopf et ce qu'elles deviennent lorsque la géométrie cylindrique passe d'une section circulaire à une section elliptique. Le chapitre 4 qui présente l'ensemble de nos résultats sur les géométries cylindriques, présente également les résultats préliminaires que nous avons obtenus dans le cas des mélanges.

Le chapitre 5 concerne les cavités bidimensionnelles de grand rapport d'aspect dans le cas des mélanges fluides binaires sujets à l'effet Soret. Ce travail a été inspiré par des résultats récents obtenus par l'équipe du Professeur Mercader [3, 5, 6]. Ils ont mis en évidence pour ces mélanges, qu'aux rangées périodiques de rouleaux contra-rotatifs, pouvaient se substituer des structures spatialement localisées appelées convectons [10]. Qualitativement, elles se présentent sous la forme d'un ou plusieurs rouleaux de convection localisés en une certaine région, le reste du fluide restant au repos. Il existe de nombreux autres exemples dans lesquels leur formation a pu être observée : c'est le cas des milieux granulaires en présence de vibrations [35], de la convection thermique en présence d'un mélange fluide binaire [16], de la magnétoconvection [10] ou des instabilités de double-diffusion [7, 8, 9]. L'apparition de ces structures est liée à un mécanisme appelé homoclinic snaking à l'origine de l'existence d'une gamme de paramètres dans laquelle existe simultanément un nombre important de solutions. Ce mécanisme a été interprété théoriquement par Burke et Knobloch dans une étude de l'équation de Swift-Hohenberg [11, 12, 13].

Dans ce chapitre 5, nous nous intéressons au problème de Marangoni-Bénard avec effet Soret dans un domaine bidimensionnel rectangulaire de grande extension horizontale. L'un des objectifs de ce travail est, d'une part, de mettre en évidence la formation de structures convectives spatialement localisées liées à ce type d'instabilité et, d'autre part, d'étudier leur impact sur la dynamique spatio-temporelle. Nous y mettons en évidence en particulier l'existence d'une gamme de paramètres dans laquelle coexistent des états spatialement localisés stationnaires entourés par un système d'ondes stationnaires de plus faible amplitude.

## 1.2 Ecoulements entre surfaces texturées

La compréhension de l'hydrodynamique du mélange a fait l'objet d'une abondante littérature motivée par des préoccupations industrielles dans des domaines et à des échelles très diverses. La microfluidique est à l'heure actuelle l'un des champs d'investigation privilégiés que l'objectif soit d'ailleurs de mélanger les espèces chimiques dans le but d'optimiser l'efficacité des chambres de réacteurs micro-chimiques ou qu'il soit de séparer ces espèces comme dans les procédés d'électrophorèse capillaires. On a pu cependant constater que les technologies éprouvées aux échelles habituelles s'avèrent souvent inopérantes à une micro-échelle et le cas du mélange de fluides n'échappe pas à cette règle. La raison est assez simple si l'on considère que l'une des techniques de mélange usuelle consiste à exploiter les propriétés des écoulements turbulents. Or, aux échelles du micron, on ne peut espérer obtenir des écoulements de fluides ayant des nombres de Reynolds suffisants pour qu'une turbulence puisse y prendre place. Il faut alors se tourner vers d'autres méthodes [31].

Loin de faire un compte rendu exhaustif de la littérature, on peut classer assez grossièrement les micro-mélangeurs en deux catégories : les micro-mélangeurs actifs, pour lesquels c'est le déplacement d'une ou de plusieurs pièces mobiles qui met en mouvement le fluide et conduit à mélanger ses constituants, et les mélangeurs dit passifs pour lesquels l'écoulement seul assure sans action extérieure le mélange. La mise au point de mélangeurs actifs requiert des solutions technologiques coûteuses et compliquées à mettre en oeuvre lorsque les contraintes de miniaturisation sont importantes. Le second type de mélangeur semble préférable dans de nombreuses applications, et c'est dans ce domaine que se portent les travaux que nous proposons.

Dans le cas de canaux confinés, deux mécanismes principaux produisent du mélange lorsque le nombre de Péclet est important (la situation la plus commune, même dans des micro-canaux) où le nombre de Péclet caractérise le rapport entre le transport de masse dû à la convection et celui dû à la diffusion. Le premier est la dispersion de Taylor [4, 34] qui résulte de la diffusion moléculaire dans la direction transverse à la direction principale de l'écoulement. Cette dispersion est très efficace en terme de concentration moyenne dans l'épaisseur et notamment pour un écoulement de Poiseuille aux grands nombres de Péclet (les travaux de Taylor ont établis que les effets combinés de l'advection et de la diffusion transverse provoquent un étalement de la concentration moyenne qui est proportionnel au carré du nombre de Péclet [34]), cette propriété ne doit pas masquer qu'en pratique dans la direction transverse, c'est bien la diffusion moléculaire qui assure le mélange des constituants [36]. Le mélange est beaucoup plus efficace dans un écoulement où les lignes de courant favorisent le brassage par un enchevêtrement adéquat. Idéalement, cette structuration peut amener une situation dans laquelle les trajectoires des particules sont extrêmement sensibles à leur position initiale d'injection. On parle alors de chaos lagrangien (*chaotic advection*). Un tel résultat qui ne s'obtient pas facilement a été mis en évidence par Aref [1]. Bien que les conditions d'apparition soient assez restrictives, ce type de mélangeur a connu un certain écho dans le domaine de la microfluidique. En particulier, on montre qu'en terme de système dynamique, l'écoulement doit posséder 3 degrés de liberté (temporel-spatial) ce qui nécessite souvent d'élaborer des géométries de canaux texturés [15, 18, 29, 30, 32]. Une excellente synthèse du domaine fait l'objet du livre de Ottino [22] et l'article de Aref [2].

Dans le cadre de l'approximation de lubrification et pour des écoulements à Reynolds nul entre deux surfaces texturées très proches, il n'existe aucun mécanisme de mélange dans la direction transverse autre que la diffusion moléculaire. Utiliser le confinement transverse pour générer des recirculations dans un canal confiné est une stratégie possible proposée par Strooke *et al.* [?, ?]. Une autre stratégie est de considérer l'impact de faibles effets inertiels. L'impact des termes d'inertie est précisément de provoquer un mélange transversal purement convectif par le brassage des lignes de courant. L'objectif de ce travail est de quantifier son impact sur le transport de traceurs passifs.

Le travail exploite un étude menée en amont sur le calcul des corrections inertielles [19] qui nous permet d'envisager l'effet faiblement inertiel comme l'effet d'une perturbation non-hamiltonienne sur un système hamiltonien (celui à Reynolds nul). Le chapitre 6 présente l'ensemble des résultats obtenus et montre notamment une étude détaillée des recirculations transverses induites par les effets inertiels. Il montre notamment qu'aux temps courts et pour certaines familles de champs d'ouverture, la dynamique de traceurs passifs injectés est contrôlée par un système bidimensionnel autonome qui retarde l'éventualité de l'apparition de régimes chaotiques à des nombres de Reynolds plus élevés.

### 1.3 Plan du manuscrit

Outre ce chapitre, le manuscrit présente une revue bibliographique non-exhaustive sur l'instabilité de Marangoni-Bénard (chapitre 2) qui fait l'objet des chapitres 4 et 5. Le chapitre 3 présente les méthodes numériques utilisées dans ces deux chapitres. Il y présente la méthode de discrétisation des équations par éléments spectraux sur un cylindre ainsi que la méthode de continuation sur laquelle elle se greffe. Le code numérique de discrétisation par éléments spectraux a été élaboré spécifiquement pour ce travail par A. Bergeon et j'ai participé à sa mise au point et à son implémentation dans la méthode de continuation. Sa spécificité pour le présent travail justifie la présentation étendue faite dans le chapitre 3. Enfin, le chapitre 6 présente les résultats de l'étude du transport entre surfaces texturées. Un grande partie des outils numériques exploitent les méthodes spectrales sur lesquelles reposent l'étude de l'instabilité de Marangoni-Bénard.

# Bibliographie

- [1] H. AREF Stirring by chaotic advection. *J. Fluid Mech.* **143**, 1 (1984).
- [2] H. AREF The development of chaotic advection. *Phys. Fluids* **14**(4), 1315 (2002).
- [3] A. ALONSO, O. BATISTE, A. MERSEGUER & I. MERCADER Complex dynamical states in binary mixture convection with weak negative Soret coupling. *Phys. Rev. E* **75**, 026310 (2007).
- [4] R. ARIS On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube. *Proc. Roy. Soc. A* **235**, 67 (1956).
- [5] O. BATISTE & E. KNOBLOCH, Simulations of localized states of stationary convection in  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  mixtures. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 244501 (2005).
- [6] O. BATISTE, E. KNOBLOCH, A. ALONSO & I. MERCADER, Spatially localized binary fluid convection. *J. Fluid Mech.* **560**, 149 (2006).
- [7] A. BERGEON & E. KNOBLOCH Spatially localized states in natural doubly diffusive convection. *Phys. Fluids* **20**, 034102 (2008).
- [8] A. BERGEON & E. KNOBLOCH Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection. *Physica D*, **237**(8), 1139 (2008).
- [9] A. BERGEON, J. BURKE, E. KNOBLOCH & I. MERCADER Eckhaus instability and homoclinic snaking. preprint,(2008).
- [10] S. M. BLANCHFLOWER Magnetohydrodynamic convectons. *Phys. Lett. A* **361**, 74 (1999).
- [11] J. BURKE & E. KNOBLOCH Localized states in the generalized Swift-Hohenberg equation. *Phys. Rev. E* **73**, 056211 (2006).
- [12] J. BURKE & E. KNOBLOCH Snakes and ladders : Localized states in the Swift-Hohenberg equation. *Phys. Lett. A* **360**, 681 (2007).
- [13] J. BURKE & E. KNOBLOCH Homoclinic snaking : Structure and stability. *Chaos* **17**, 037102 (2007).
- [14] D. A. GOUSSIS, & R. E. KELLY On the thermocapillary instabilities in a liquid layer heated from below. *Int. J. Heat Mass Trans.* **33**(10), 2237 (1990).
- [15] S. W. JONES, O. M. THOMAS, & H. AREF Chaotic advection by laminar flow in a twisted pipe. *J. Fluid Mech.* **209**, pp. 335 (1989).
- [16] P. KOLODNER Coexisting traveling waves and steady rolls in binary-fluid convection. *Phys. Rev. E* **48**, R665 (1993).
- [17] F. LAROUCHE, O. SMILJANIC, X. SUN & B. L. STANSFIELD Solutal Bénard-Marangoni instability as a growth mechanism for single-walled carbon nanotubes. *Carbon* **43**, 986 (2005).
- [18] R. H. LIU, M. A. STREMLER, K. V. SHARP, M. G. OLSEN, J. G. SANTIAGO, R. J. ADRIAN, H. AREF & D. J. BEEBE Passive Mixing in a Three-Dimensional Serpentine Microchannel. *J. Membr. Sci.* **9**(2), 190 (2000).

- [19] D. LO JACONO, F. PLOURABOUÉ & A. BERGEON Weak inertial flow between two rough surfaces. *Phys. Fluids* **17**, 63602 (2005).
- [20] C. J. MORRIS & B. A. PARVIZ Self-assembly and characterization of Marangoni microfluidic actuators. *J. Micromech. Microeng.* **16**, 972 (2006).
- [21] A. ORON, S. H. DAVIS & S. G. BANKOFF. Long-scale evolution of thin liquid films. *Rev. Mod. Phys.* **69**, 931 (1997).
- [22] J. M. OTTINO *The kinematics of mixing : stretching, chaos and transport*, Cambridge University Press (1989).
- [23] J. R. A. PEARSON On convective cells induced by surface tension. *J. Fluid Mech.* **4**, 489 (1958).
- [24] B. B. PLAPP, D. A. EGOLF, E. BODENSCHATZ & W. PESCH Dynamics and selection of giant spirals in Rayleigh-Bénard convection *Phys. Rev. Lett.*, **81**(24), 5334 (1988).
- [25] B. B. PLAPP & E. BODENSCHATZ Core dynamics of multiarmed spirals. *Physica Scripta*, **67**, 111 (1996).
- [26] J. L. ROGERS, M. F. SCHATZ, J. L. BOUGIE, & J. B. SWIFT. Rayleigh-Bénard convection in a vertically oscillated fluid layer. *Phys. Rev. Lett.* **84**(1), 87 (2000).
- [27] L. E. SCRIVEN & C. V. STERNLING On cellular convection driven by surface-tension gradients : effects of mean surface tension and surface viscosity. *J. Fluid Mech.* **19**, 321 (1964).
- [28] K. A. SMITH On convective instability induced by surface tension gradients. *J. Fluid Mech.* **24** Part 2, 401 (1966).
- [29] I. J. SOBEY Dispersion caused by separation during oscillatory flow through a furrowed channel *Chem. Eng. Science* **40**, 2129 (1985).
- [30] T-H. HWU, I. J. SOBEY & B. J. BELLHOUSE Observation of concentration dispersion in unsteady unreflected flows. *Chem. Eng. Science* **51**, 3373 (1996).
- [31] H. A. STONE & S. KIM Microfluidics : Basic issues, applications, and challenges. *AIChE* **47**(6), 1250 (2001).
- [32] A. D. STROOCK, S. K. W. DERTINGER, A. AJDARI, I. MEZIC, H. STONE & G. M. WHITESIDES Chaotic mixer for microchannels, *Science* **295**, 647 (2002).
- [33] A. D. STROOCK, S. K. DERTINGER, G. M. WHITESIDES & A. AJDARI, Patterning flows using grooved surfaces, *Anal. Chem.* **74**, 20, 5306 (2002).
- [34] G. TAYLOR Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a tube. *Proc. Roy. Soc. A* **219**, 186 (1953)
- [35] P. B. UMBANHOWAR, F. MELO & H. L. SWINNEY Localized excitations in a vertically vibrated granular layer *Nature* **382**, 793 (1996)
- [36] W. R. YOUNG Shear Dispersion. *Phys. Fluids* **3** (5), 1087 (1991).

# Chapitre 2

## Instabilité de Marangoni Bénard

Nous présentons ici une revue bibliographique sur l'instabilité de Marangoni-Bénard qui est loin d'être exhaustive. Elle a pour objectif de restituer le contexte de nos travaux et pour plus de détails, on pourra par exemple se reporter au récent ouvrage de Colinet *et al.* [13]. A la suite de cette présentation, nous introduisons les équations du problème et leur version adimensionalisée avant de terminer sur une discussion de la stabilité linéaire.

### 2.1 Introduction

La convection de Bénard, appelée aussi convection de Marangoni-Bénard, a été identifiée pour la première fois par Henri Bénard [2] au début du 20-ième siècle. L'expérience était destinée à étudier le comportement d'une couche d'huile de baleine maintenue dans un récipient suspendu au dessus d'un bain d'eau bouillante à une température approximative de 100 degré Celsius. L'extension horizontale du récipient était beaucoup plus grande que sa profondeur et Bénard observa la formation, loin des bords du récipient, de cellules de convection de forme hexagonale. Il remarqua également que le fluide chaud montait au centre des cellules et descendait le long des contours hexagonaux et attribua la formation de ces structures aux variations de densité avec la température (figure 2.1).

Cette interprétation est appuyée en 1916 par l'analyse de stabilité linéaire de Rayleigh [59] conduite pour une couche fluide horizontale infinie placée entre deux surfaces rigides maintenues à des températures différentes et sous l'hypothèse de glissement du fluide le long des deux surfaces horizontales (stress-free). Rayleigh obtient, en fonction du module  $k$  du nombre d'onde  $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$  de l'instabilité (adimensionnalisé par l'inverse de l'épaisseur de la couche fluide), l'expression du nombre de Rayleigh  $Ra(k) = (k^2 + \pi^2)^3 / k^2$  au delà duquel l'état conductif (vitesse du fluide nul, distribution linéaire de température dans la direction transverse) perd sa stabilité pour laisser place à un mouvement de convection permanent. L'examen de la courbe de stabilité marginale montre qu'elle admet un minimum  $Ra_c$  égal à  $Ra_c = 27\pi^4/4 \approx 657.5$  pour  $k = k_c = \pi/\sqrt{2}$ . En présence de conditions aux limites de non-glissement, Pellew et Southwell [55] obtiennent en 1940 les valeurs  $Ra_c = 1708$  et  $k_c = 3.12$ .

L'interprétation de Bénard du phénomène en terme de forces de volume n'a pas été réfutée pendant près de 50 ans jusqu'à ce qu'il soit mis en évidence, expérimentalement par Block [5] puis théoriquement par Pearson [54], que les gradients de tension superficielle produits par des variations de température sur la surface libre étaient majoritairement à

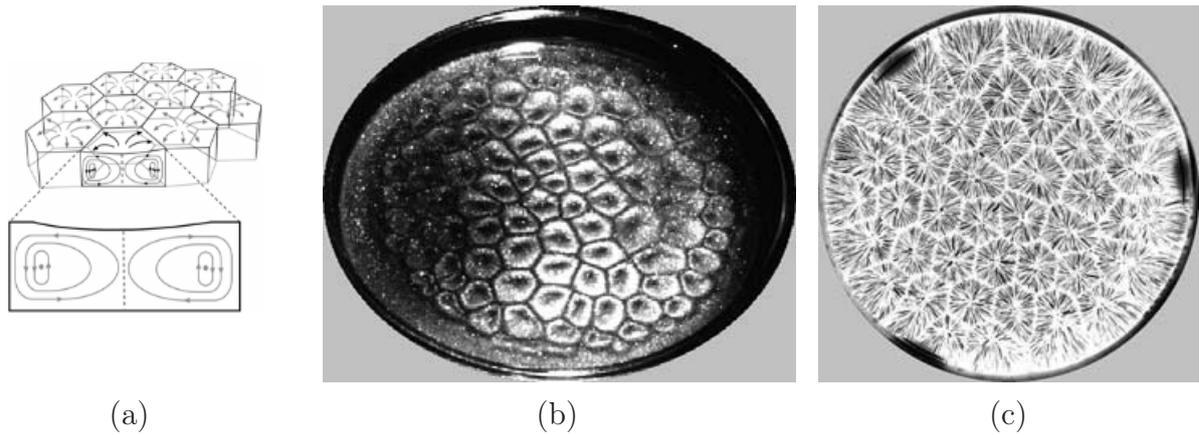


FIG. 2.1 – Convection de Bénard dans un bain d’huile de Silicone. (a) Vue schématique de l’écoulement dans les cellules de convection (b) Vue de la forme de la surface libre (c) trajectoires de traceurs passifs dans une vue de dessus (issue de la page personnelle de C. Jäger).

l’origine de l’apparition de la convection. La persistance de cette confusion dans l’interprétation peut être partiellement attribuée au "relativement" bon accord entre le diamètre  $d$  des cellules<sup>1</sup>  $d = H\pi/k_c$  ( $d \approx H$  en non-glissement et  $1.4H$  en glissement) et les observations de Bénard.

L’effet des forces de surface est appelé effet Marangoni en reconnaissance des travaux du physicien italien Carlo Marangoni publiés en 1865 dans sa thèse [45] mais en dépit que les premiers effets furent identifiés par J. Thompson (le frère de Lord Kelvin) en 1855 dans l’étude des doigts du vin. L’instabilité de Marangoni-Bénard, à l’origine des cellules de convection de Bénard, fait référence à la configuration étudiée par Pearson [54]. Elle concerne une couche fluide infinie placée sur une surface solide maintenue à température constante. Un flux de chaleur  $\mathbf{q}$  constant est appliqué perpendiculairement à la surface libre supérieure. En absence de gravité, les gradients de tension de surface  $\nabla\sigma$  produits par d’éventuelles variations de température le long de la surface libre, provoquent l’apparition de forces de surfaces  $\sigma_T\nabla T$  capables d’entraîner par effet visqueux un mouvement global du fluide. Ici, le coefficient  $\sigma_T = \partial\sigma/\partial T$  est supposé constant. Un mouvement de convection permanent ne peut apparaître que si le temps caractéristique  $\tau_e$  d’entraînement par effet visqueux du fluide sur la profondeur  $H$  de la couche fluide est plus petit que le temps caractéristique de diffusion thermique  $\tau_d$  sur la même distance  $H$ . Le rapport de ces deux temps définit le nombre de Marangoni  $Ma = \tau_d/\tau_e$  égal à :

$$Ma = \frac{\sigma_T H \Delta T}{\rho \nu \kappa}, \quad (2.1)$$

où  $\rho$  est la densité du fluide,  $\nu$  la viscosité cinématique,  $\kappa$  la diffusivité thermique et  $\Delta T$  est la différence de température entre les surfaces libre et rigide produite par l’application du flux de chaleur lorsque le fluide est au repos. On doit à Pearson d’avoir calculé semi-analytiquement le nombre de Marangoni critique et le nombre d’onde critique par une méthode exploitant des développements en série de Fourier. Les valeurs obtenues donnent

<sup>1</sup>Le diamètre est celui du cercle qui contient l’hexagone

$Ma_c = 79.9$  et  $k_c = 1.996$  ce qui amène à un diamètre  $d = 1.5H$  très proche de la valeur observée dans les expériences de Bénard. Bien que le principe d'échange de stabilité ne soit analytiquement démontré, il est admis [79] que celui-ci s'applique dans le cas considéré par Pearson et que l'instabilité n'est pas oscillatoire.

A moins bien sûr que l'expérience ne soit conduite en microgravité, les mécanismes générant la convection par forces de volume et forces de surface coexistent dans ce type de configuration. L'analyse conduite par Nield [48] en 1964 montre pour des écoulements stationnaires, les nombres de Marangoni et de Rayleigh critiques sont liés par la relation :  $Ra_c/Ra_{c0} + Ma_c/Ma_{c0} = 1 + \epsilon$  où  $Ma_{c0}$  et  $Ra_{c0}$  sont les valeurs critiques obtenues respectivement en absence de gravité et en absence de forces de surface. Les expériences montrent que lorsque le nombre de crispation  $Cr = \rho\nu\kappa/(\sigma H)$  est plus petit qu'une valeur de l'ordre de  $10^{-4}$ , la valeur de  $\epsilon$  est voisine de zéro indiquant que la déformation de la surface libre n'a qu'un effet négligeable [75, 21, 22]. L'effet relatif des forces de surface et de volume est plus naturellement mesuré par le rapport  $Ra/Ma$  dont on constate qu'il est proportionnel à  $H^2$ . En d'autres termes, plus la couche fluide est mince, et plus les effets de surface sont dominants.

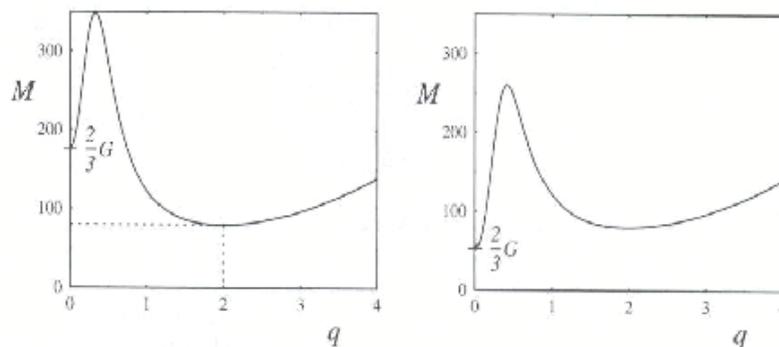


FIG. 2.2 – Courbe de stabilité neutre reportant le nombre de Marangoni  $Ma$  (noté  $M$  ici) en fonction du nombre d'onde  $k$  (noté  $q$  ici). Pour des films d'épaisseur  $H$  de plus en plus petite (de l'image de gauche vers l'image de droite) le seuil d'instabilité associé au minimum de la courbe se déplace de  $(k_c, Ma_c) \approx (2.0, 80)$  (à gauche) à  $(k_c, Ma_c) = (0, 2G/3)$  où  $G$  est le nombre de Galiléo. D'après [64].

L'étude linéaire de l'instabilité de Marangoni-Bénard dans l'hypothèse où la densité n'est pas affectée par les variations de température, permet de distinguer deux configurations physiquement distinctes par les mécanismes mis en jeu dans l'instabilité. La situation étudiée par Pearson que nous avons décrite jusqu'ici correspond à une instabilité de longueur d'onde<sup>2</sup>  $\lambda_c = 2\pi/k_c \approx \mathcal{O}(H)$ . Cette analyse est conduite sous l'hypothèse où la surface libre reste plane. La situation change du tout au tout dans la limite des faibles épaisseurs ( $H \ll 1$ ). Cette fois, la déformation de l'interface ne peut être négligée et la gravité devient le mécanisme majeur s'opposant à la croissance de l'instabilité. La déformation de l'interface provoque la formation d'un gradient de pression  $|\nabla p| \approx \rho g$  qui à l'approximation de lubrification induit l'apparition d'un flux  $Q$  lié au gradient de pression

<sup>2</sup>Ceci n'est vrai que dans le cas où les conditions aux limites thermiques ne sont pas toutes du type Neuman car dans ce cas  $k_c = 0$ . Voir figure 2.3

par l'approximation de lubrification  $\mu Q \approx H^3 \nabla p$ . On en déduit le temps caractéristique  $\tau_v = H^2/Q = \mu/(H\rho g)$ . Pour connaître le mécanisme dominant entre celui induit par la déformation de l'interface et celui d'entraînement des forces de surface sur une profondeur  $H$ , il faut comparer  $\tau_v$  à  $\tau_s = \mu H/(\sigma_T \Delta T)$ . Rapporté au temps de diffusion thermique  $H^2/\kappa$ , nous sommes amenés à comparer le nombre de Marangoni  $Ma$  au nombre de Galiléo  $G = H^3 g/(\kappa \nu)$ . L'analyse de stabilité incluant la combinaison des deux instabilités et donc la déformation de l'interface, montre que la courbe  $Ma(k)$  admet deux minima, l'un pour  $k \approx 2$  avec  $Ma \approx 80$  (les valeurs obtenues par Pearson) et l'autre pour  $k = 0$  associé à  $Ma = 2G/3$  (figure 2.2). En raison de la dépendance en  $H^3$  du nombre de Galiléo, pour  $H$  suffisamment petit, la valeur  $Ma$  en  $k = 0$  est inférieure à celle en  $k \approx 2$  indiquant que le mécanisme dominant de l'instabilité est celui provoqué par le couplage de la gravité et de la déformation de la surface [77, 78].

Notre étude concerne les instabilités à longueur d'onde finie  $\lambda = \mathcal{O}(H)$  dans l'hypothèse où la surface libre est plane et reste indéformée par l'écoulement. L'expérience montre que cette hypothèse est particulièrement pertinente dans le cas des rapports d'aspects modérés [64] (ce qui sera le cas de notre étude des géométries cylindriques) et dans les cas où la tension de surface moyenne  $\sigma_0$  est suffisamment importante pour résister aux déformations de l'interface induite par l'écoulement. Cette limite correspond à celle des petits nombres capillaires  $Ca = \mu\kappa/H\sigma_0$ . [14, 23, 68, 72].

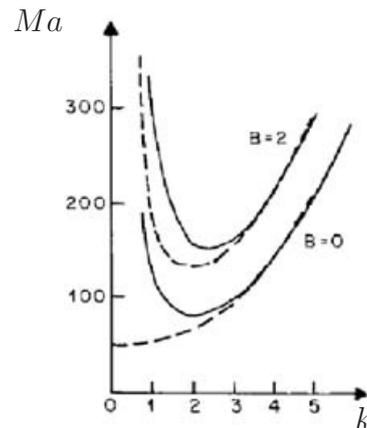


FIG. 2.3 – Variations du nombre de Marangoni avec le nombre d'onde  $k$  pour l'instabilité de Marangoni–Bénard en absence de gravité et en considérant la surface libre plane (modèle de Pearson [54]). La condition à la limite thermique sur la surface libre s'écrit  $Bi\theta = \partial_z \theta$  où  $Bi$  noté  $B$  ici est le nombre de Biot,  $\theta$  est l'écart en température à la solution conductive et  $z$  la direction verticale transverse à la surface libre. Deux valeurs de  $B$  sont représentées dans deux cas : en trait plein celui où la surface inférieure est maintenue à température constante (paroi conductive), en trait pointillé, celui où un flux de chaleur constant est imposé perpendiculairement à cette surface. Figure extraite de [23, 54].

La courbe de stabilité marginale obtenue par Pearson [54] est reproduite sur la figure 2.3. Les courbes présentent, pour différentes conditions aux limites thermiques, les variations de  $Ma$  avec  $k = |\mathbf{k}|$  où  $\mathbf{k} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y$ , les directions  $x, y$  étant les directions horizontales (tangentes à la surface libre). Le nombre de Marangoni critique est associé au minimum de la courbe ce qui donne le module  $k_c$  du vecteur d'onde critique. Le sys-

tème présente une dégénérescence orientationnelle liée à l'isotropie du système dans les directions horizontales. En d'autres termes, il ne permet pas de déterminer de manière univoque les coordonnées  $(k_x, k_y)$  vérifiant  $k_c^2 = k_x^2 + k_y^2$  de sorte que l'orientation de  $\mathbf{k}$  est arbitraire.

Le système présente aussi une dégénérescence liée à l'invariance par translation dans le plan  $(x, y)$ . Ces deux dégénérescences ne résultent pas de l'analyse linéaire et donc subsistent dans l'analyse non-linéaire. Il y a une dégénérescence intrinsèquement liée à l'analyse linéaire induite par le fait que toute combinaison linéaire de modes de vecteurs d'onde de module  $k_c$  est un mode ayant un taux de croissance nul au seuil. Les coefficients de cette combinaison linéaire, qui fixent la forme et l'amplitude des modes, restent indéterminés par l'analyse linéaire. Des structures en rouleaux parallèles, en carrés ou en hexagones formées respectivement d'un vecteur d'onde, d'une combinaison linéaire de deux et de trois vecteurs d'ondes sont dès lors possibles au delà du seuil.

Un autre problème résulte de l'existence d'une bande continue de vecteurs d'onde instables au delà du seuil d'instabilité  $Ma_c$ . L'analyse linéaire ne détermine que le plus instable i.e. celui associé au taux de croissance temporelle le plus élevé, mais les nombres d'ondes sélectionnés dans le régime non-linéaire peuvent correspondre à un autre type de structure. Typiquement, l'interaction de modes dans la bande instable conduit à des modulations spatiales des structures qui sont de grande longueur d'onde comparée à la longueur d'onde critique  $\lambda_c = 2\pi/k_c$ . L'inverse de cette longueur d'onde est d'ordre  $k - k_c$ . Comme  $Ma(k) - Ma_c$  admet un minimum en  $k - k_c = 0$ , un développement limité indique que  $\Delta Ma \equiv Ma - Ma_c \approx (k - k_c)^2$  et la longueur d'onde de la modulation spatiale est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'écart au seuil. Joint au fait que le temps caractéristique de croissance de l'instabilité est inversement proportionnel à l'écart au seuil, ces deux échelles en espace ont conduit dans le cas de l'instabilité de Rayleigh-Bénard à la formulation d'une équation du type Ginzburg-Landau appelée équation de Newell-Whitehead-Segel décrivant les variations d'amplitude des solutions dans la voisinage de  $Ra_c$  [47, 69].

Comparativement à l'instabilité de Marangoni-Bénard, l'état des connaissances sur la dynamique non-linéaire de l'instabilité de Rayleigh-Bénard est plus avancée [6] en tout cas dans le contexte des équations de Boussinesq. Dès 1965, il est établi théoriquement [65] qu'au delà mais à proximité du seuil d'instabilité linéaire de la solution conductive, les structures préférentielles sont des rangées de rouleaux parallèles dont la longueur d'onde est voisine de celle donnée par l'analyse linéaire. Leur stabilité dans l'espace  $(Ra, k, Pr)$  est analysée théoriquement par Busse et ses collaborateurs dans les années 70 [7, 8, 9] ce qui les amène à définir une région de stabilité appelée "ballon de Busse" (figure 2.4a) circonscrite par un nombre de mécanismes bien identifiés par lesquels ces rouleaux perdent leur stabilité [17].

A la différence de l'instabilité de Rayleigh-Bénard, l'instabilité de Marangoni-Bénard induit au voisinage du seuil la formation de cellules de convection hexagonales, un résultat établi théoriquement pour la première fois par Scanlon et Segel [62] pour une couche fluide de profondeur infinie et confirmé par la suite par Cloot & Lebon [12] et Oron & Rosenau [51] pour des configurations plus réalistes. Le sens de rotation du fluide au sein de la cellule dépend du nombre de Prandtl [53] et dans les expériences de Bénard, il remonte par le centre de l'hexagone où la cellule se creuse légèrement (Bénard reporte des écarts à la surface plane de l'ordre de  $10^{-3}H$ ). Cette préférence pour des structures

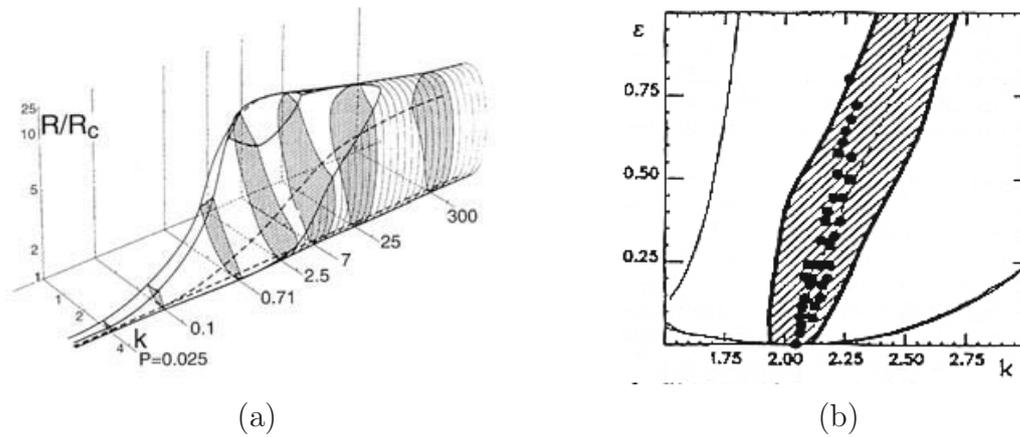


FIG. 2.4 – (a) Ballon de Busse [9] en perspective représentant les régions dans lesquelles les rouleaux parallèles sont stables. Les paramètres  $Ra$  et  $Ra_c$  notés  $R$  et  $R_c$  ici sont respectivement le nombre de Rayleigh et nombre de Rayleigh critique,  $k$  est le module du nombre d’onde et  $P$  est le nombre de Prandtl. (b) Prédiction théorique de la zone de stabilité des structures hexagonales dans le plan  $(\epsilon, k)$  où  $\epsilon = (Ma - Ma_c)/Ma_c$  dans la limite des nombres de Prandtl infinis. Les points noirs sont des solutions stables obtenues expérimentalement. La ligne du bas correspond à la courbe de stabilité neutre  $Ma(k)$ . D’après [4].

hexagonales plutôt que des rouleaux est confirmée théoriquement par Golubitsky *et al.* [36] au moyen d’une approche faiblement non-linéaire où sont comparés le cas de deux surfaces rigides et celui où l’une d’elles présente une surface libre (impact de la symétrie de réflexion par rapport au plan moyen). L’analogie du ballon de Busse pour la convection de Marangoni-Bénard i.e. la région dans laquelle les hexagones sont stables, est calculée par Besthorn [4] dans la limite des grands nombres de Prandtl (figure 2.4b). Mais à la différence des travaux de Busse, les mécanismes par lesquels les hexagones perdent leur stabilité n’y sont pas intégralement identifiés. Des efforts ont été menés dans ce sens à l’aide de modèles d’équation d’amplitudes [30, 35, 82] appuyés par un certain nombre de travaux expérimentaux visant à identifier la largeur de la bande de nombres d’onde stables [70, 71].

Pour ces configurations de films fluides de grande extension horizontale, les travaux expérimentaux qui font référence dans le domaine sont ceux menés par Koschmieder et ses collaborateurs. Dans un travail publié en 1986, Koschmieder et Biggerstaff [41] présentent les résultats expérimentaux de la convection de Marangoni-Bénard dans un bain cylindrique de grand rapport d’aspect rempli d’une huile silicone chauffée par le bas. En augmentant la différence de température, ils observent la formation d’un réseau de cellule de convection de forme hexagonale au delà d’une valeur différence de température critique proche de la valeur prédite par la théorie. Ils mettent également en évidence un mouvement convectif de faible amplitude en dessous du seuil calculé par Nield [48], un phénomène attribué plus tard par Schatz *et al.* [63] au fait que l’amorce du mouvement convectif est produite via une bifurcation sous-critique imparfaite imputable aux imperfections inhérentes à ce type de configuration expérimentale. La dépendance avec le rapport d’aspect de la longueur d’onde de la structure prenant place au delà du seuil est étudiée

expérimentalement par Cerisier *et al.* [10]. Ils montrent qu’au delà d’un rapport d’aspect de l’ordre de 70, cette longueur d’onde correspond exactement à celle prédite par la théorie de Nield [48] permettant d’évaluer un rapport d’aspect seuil au delà duquel l’effet du confinement cesse d’être ressenti et la dynamique du système approche celle d’un film fluide d’extension infini. Ils reportent également l’évolution de la longueur d’onde des structures hexagonales en fonction du rapport d’aspect. Koschmieder & Switzer [43] reprennent la même étude et mettent en évidence un régime au voisinage du seuil dans lequel le nombre d’onde décroît conformément aux observations de Bénard [2] puis croît à nouveau dans un régime plus fortement non-linéaire. Cet effet loin du seuil est attribué aux effets de variations de la densité avec la température (convection de Rayleigh–Bénard).

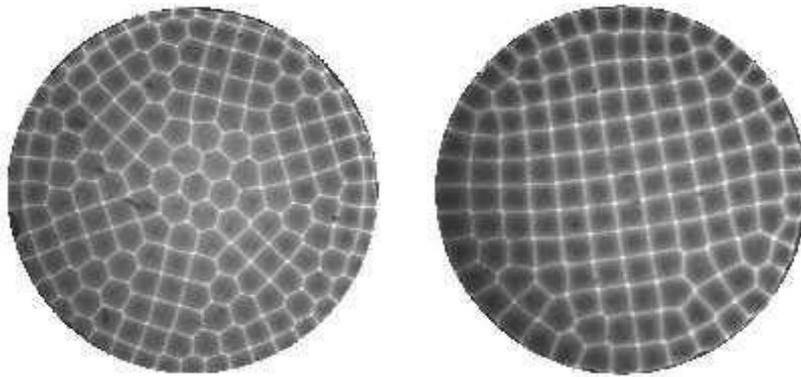


FIG. 2.5 – Transition des structures hexagonales vers des structures en carrés (D’après M. Schatz, page web personnelle).

La comparaison des résultats théoriques et expérimentaux donne un accord généralement qualitatif car la structure des écoulements au delà du seuil dépend considérablement du modèle étudié. La modélisation des conditions aux limites thermiques aux parois et la prise en compte ou non de la déformation de l’interface sont parmi les facteurs affectant les résultats numériques et théoriques de manière significative. Dans la limite des faibles nombres de Biot en présence d’une paroi inférieure isolante, le nombre d’onde critique approche zéro [54] indiquant que l’échelle caractéristique de la convection  $2\pi/k_c$  devient grande devant l’épaisseur  $H$  de la couche fluide (figure 2.3). Une approche multi-échelle peut alors être exploitée pour dériver les équations au voisinage des seuils d’instabilité. Cette limite  $k = 0$  fait l’objet des travaux menés par Sivashinsky [74], Knobloch [44], Shtilman & Sivashinsky [73] et Hadji *et al.* [38] dans l’approximation de surface libre plane. Les résultats montrent en particulier l’existence d’une région de bi-stabilité où coexistent des structures hexagonales et carrées [76]. De telles structurations en cellules carrées ont également pu être observées expérimentalement par Eckert *et al.* [31] et Nitschke & Thess [49] et Schatz (figure 2.5). Comme nous l’avons mentionné, la prise en compte de la déformation de l’interface provoque également la formation de déformations de grandes longueur d’ondes [51, 78, 77]. Les différents couplages entre tous ces mécanismes induisent une dynamique non-linéaire très riche bien documentée dans la littérature (voir par exemple

[11, 33, 34, 80]).

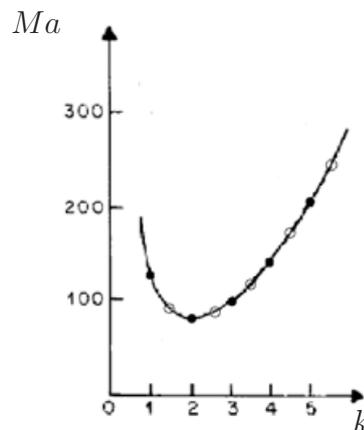


FIG. 2.6 – Courbe de stabilité marginale pour  $B = 0$  représentant le nombre de Marangoni critique en fonction du module du nombre d’onde. La paroi inférieure est conductive. Les cercles pleins représentent les nombres d’onde sélectionnés pour un calcul effectué dans un domaine de dimensions  $L = \lambda_c = 2\pi/k_c$  dans la direction  $x$  avec  $H = 1$  et  $k_c \approx 2$  avec des conditions aux limites périodiques sur les parois latérales. Les cercles vides correspondent aux modes supplémentaires obtenus avec des conditions aux limites de type glissement sur les parois latérales.

A la différence des couches fluides infinies pour lesquelles l’analyse de stabilité linéaire peut être menée semi-analytiquement, les cavités d’extension finie qui font l’objet d’une partie de nos travaux doivent être étudiées numériquement. Les géométries cylindriques et parallélépipédiques sont étudiés par Rosenblat *et al.* [60, 61] sous l’approximation de glissement le long des parois. Dans ces conditions, les contraintes exercées par la taille finie de la géométrie sont moins fortes que dans le cas du non-glissement. Une partie de la dégénérescence présente dans l’analyse linéaire des couches infinie disparaît car les coordonnées cartésiennes  $(k_x, k_y)$  des nombres d’onde admissibles sont discrètes. Les seuils correspondent aux nombres de Marangoni de la courbe neutre  $Ma(k)$  obtenue par Pearson en ne retenant que les couples  $(k_x, k_y)$  susceptibles de produire un nombre entier de cellules de convection dans le domaine i.e. pour le rapport d’aspect choisi (figure 2.6).

L’analyse linéaire menée par Rosenblat *et al.* s’intéresse en particulier à l’évolution des seuils critiques des modes les plus instables en fonction du rapport d’aspect. L’analyse faiblement non-linéaire conduite par ces auteurs considère essentiellement la dynamique pour des géométries au voisinage des point de croisement de deux courbes de stabilité marginale et met en évidence la formation de régimes instationnaires. Pour un cylindre de faible rapport d’aspect, l’action combinée des forces de volume et de surface est étudiée théoriquement par Echebarría *et al.* [29] en présence de conditions aux limites de glissement le long de la paroi latérale du cylindre. Ils mettent en évidence que l’interaction de modes conduit à la formation d’une part d’ondes tournantes éventuellement modulées, créées par suite d’une bifurcation secondaire de Hopf et d’autre part d’un comportement de commutation de modes (mode switching) lié à l’existence d’une orbite hétérocline stable. Ces prédictions sont confirmées par les résultats expérimentaux de Johnson & Narayanan [40] et les simulations numériques de Dauby *et al.* [20]. Dauby

& Lebon [18] complète ces travaux et mènent l'étude linéaire et faiblement non-linéaire de l'action combinée des instabilités de Marangoni–Bénard et Rayleigh–Bénard dans des géométries parallélépipédiques à section horizontale rectangulaire munies de conditions aux limites de non-glissement sur les parois solides. Pour des grands nombre de Prandtl ( $Pr = 10^4$ ) et un nombre de Biot nul, la comparaison avec les résultats de Rosenblat *et al.* [60, 61] met en évidence des structures nouvelles attribuées aux différences induites par les conditions aux limites sur l'interaction des modes instables. Dauby *et al.* [19] étendent cette première étude aux géométries cylindriques de petit rapport d'aspect en calculant les variations du seuil de stabilité linéaire des modes les plus instables en fonction du rapport d'aspect dans les deux cas  $Ra = 0$  et  $Ra \neq 0$ . Ils montrent que la structure du mode le plus instable évolue avec le rapport d'aspect de manière similaire dans les deux situations mais est considérablement affectée par les conditions aux limites thermiques sur les parois latérales.

L'étude numérique des configurations bidimensionnelles dans des domaines rectangulaires en présence de conditions aux limites de non-glissement est menée par Dijkstra [24] par une méthode numérique de continuation exploitant une résolution numérique des équations complètes. Ces résultats se présentent sous la forme de diagrammes de bifurcation pour différents rapports d'aspect, différentes conditions aux limites et nombre de Prandtl. Il montre en particulier que la multiplicité des solutions stables observée en glissement diminue dans le cas du non-glissement, un effet lié à la présence de nombreux noeuds-cols dont l'effet est de déstabiliser les solutions. Il établit par ailleurs que pour des nombres de Prandtl compris entre 0.5 et 50 la structure des diagrammes de bifurcation n'est pas affectée. Son étude est principalement menée en apesanteur ( $g = 0$ ). Dijkstra étend par la suite son étude aux problèmes tridimensionnels dans des cavités parallélépipédiques par une série de trois articles [25, 26, 27]. Il y mène en particulier l'analyse de stabilité pour des cavités parallélépipédiques à section horizontale carrée [25], l'analyse non-linéaire pour un rapport d'aspect modéré [26] et présente les résultats de simulations numériques directes pour de grands rapports d'aspect [27]. L'impact des symétries du cas des cavités à section horizontale carrée est discuté en détail dans le cas de convection de Marangoni–Bénard en présence de non-glissement par Bergeon *et al.* [3]. La dynamique non-linéaire est étudiée numériquement par des méthodes de continuation dans des cavités à section horizontale carrée et presque carrée et les résultats interprétés en terme de prédictions issues de la théorie des bifurcations en présence de symétrie.

Un certain nombre de travaux expérimentaux ont été menés dans des géométries cylindriques ou parallélépipédiques de petits rapports d'aspect pour lesquelles la géométrie exerce une contrainte importante sur la structuration de l'écoulement. Encore une fois, il faut mentionner les travaux remarquables réalisés par Koschmieder & Prahl [42]. Pour les plus petits rapports d'aspects, les structures observées sont semblables aux modes propres déterminés par Rosenblat *et al.* [60, 61] (voir la comparaison de Zaman [83] entre les résultats expérimentaux de Koschmieder *et al.* et les résultats numériques). Les résultats de Koschmieder ont pu être reproduits numériquement par Medale & Cerisier [46] (figure 2.7). Les auteurs observent que pour des rapports d'aspect modérés supérieurs à 10, l'écoulement se structure en un ensemble de cellules hexagonales quelque soit la forme du container (section horizontale carrée, triangle, octogonale). Le travail expérimental de Ondarçuhu *et al.* [50] complètent ces études. Les auteurs y présentent l'évolution avec l'écart au seuil de la structuration de l'écoulement dans le régime non-linéaire. Ils observent à

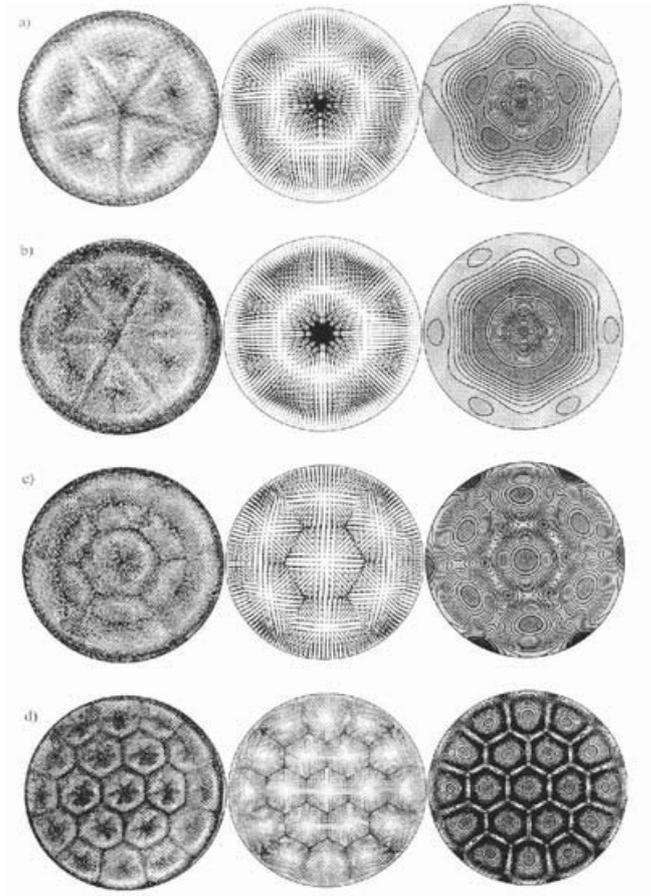


FIG. 2.7 – Comparaison entre les expériences de Koschmieder & Prahl [42] dans la colonne de gauche et dans les deux colonnes de droite, les simulations numériques de Medale et Cerisier [46] pour  $Pr = 890$  et (de haut en bas)  $(Ma, Ra, \Gamma) = (82, 21, 7.64), (85, 21, 7.94), (77, 19, 8.27), (101, 27, 16.23)$  où  $\Gamma = \sqrt{S}/H$  et  $S$  est la surface du cylindre.

la fois des structures en mode simple ainsi que des structures mixtes correspondant à la superposition de plusieurs modes de nombres d'onde azimuthal différents. Enfin une étude récente de Rahal *et al.* [58] expose la dépendance de la structure spatiale dans le régime fortement non-linéaire en fonction des nombres de Marangoni, Prandlt et Biot pour des configurations cylindriques. La déformation de la surface libre y est mesurée en fonction de ces différents paramètres et notamment du rapport entre les nombres de Rayleigh et de Marangoni. Ils montrent que cette déformation s'amplifie dans le régime fortement non linéaire (grand nombre de Marangoni) avant d'atteindre un seuil dépendant des nombres de Prandlt et de Biot.

L'une des difficultés dans l'interprétation quantitative des résultats expérimentaux tout comme dans leur réalisation est le contrôle de la couche d'air au regard de l'interface. Dans la plupart des analyses théoriques et numériques, la modélisation prend en compte

les échanges avec la couche gazeuse en regard de l'interface au travers de la condition à la limite thermique en général par une loi de Newton liant le flux et la température de l'interface de la forme  $\partial_z \theta + h\theta = 0$  où  $\theta$  est la perturbation en température du profil diffusif et  $h$  est un coefficient d'échange constant (le nombre de Biot est lié à  $h$  par  $B = hH$  où  $H$  est l'épaisseur de la couche fluide). Comme le démontre Pérez-García *et al.* [56], dans un modèle à deux fluides, la couche fluide et la couche gazeuse sont expérimentalement confinées entre deux surfaces rigides maintenues à des températures constantes et le coefficient  $h$  n'est alors pas identique en absence et présence de convection dans la phase liquide. Ils proposent alors une expression consistante de  $h$  permettant de prendre en compte la phase gazeuse dans un modèle à une couche. L'effet de cette expression - qui dépend du nombre d'onde - est étudiée en fonction des épaisseurs relatives des couches fluides et gazeuses et montre un effet stabilisant ainsi qu'une légère variation de la valeur critique du nombre d'onde par rapport à celle établie par Pearson. Cet effet corrobore les travaux de Ferm & Wollkind [32].

Il faut mentionner pour finir qu'un certain nombre de travaux ont été menés en microgravité lors de vols spatiaux, éliminant de fait les effets éventuellement résiduels des expériences menées au sol [28, 66, 67]. L'article de Schwabe [66] rapporte les résultats d'une expérience réalisée dans des configurations cylindriques de petits rapports d'aspect et met en évidence la dynamique de commutation de mode établie par Echebarría *et al.* [29]. Le problème de ces expériences en apesanteur réside dans le fait qu'elles sont réalisées dans un temps très court dans lequel la différence de température est imposée. Il devient alors difficile d'identifier le régime transitoire du régime permanent.

La diversité des résultats reflète bien la complexité du régime non-linéaire et combien le choix des paramètres physiques affecte cette dynamique. Le travail que nous présentons est précisément une contribution visant à éclaircir certains des mécanismes mis en jeu dans le régime non-linéaire et conduisant à une dynamique ou au choix d'une structure particulière.

## 2.2 Modélisation et mise en équation

On présente ici la configuration que nous avons utilisée et les hypothèses que nous avons adoptées. Les équations de conservation et les conditions aux limites adimensionalisées terminent le paragraphe.

On étudie un fluide newtonien, visqueux et incompressible contenu dans une cavité cylindrique ouverte placée dans des conditions de microgravité ( $\mathbf{g} = \mathbf{0}$ ). On considère la surface supérieure comme la surface libre. On néglige les effets de mouillage aux parois latérales et l'on suppose que la surface libre reste plane c'est à dire indéformée par l'écoulement (cette hypothèse est consistante avec les expériences les plus récentes menées en apesanteur [28, 67]). On admet de plus que le gaz adjacent à la surface libre est sans effet sur le fluide.

On note dans la suite  $z$  la direction verticale parallèle à l'axe  $x = y = 0$  du cylindre et  $(x, y)$  les directions perpendiculaires. La cavité cylindrique aura dans la suite une base circulaire ou elliptique (figure 2.8). Dans le premier cas, le rapport d'aspect de la géométrie est défini par  $A = R/H$  où  $R$  est le rayon du cercle et  $H$  la hauteur du cylindre. Lorsque la section est elliptique, on introduit un paramètre de déformation  $\epsilon$  égal au rapport des

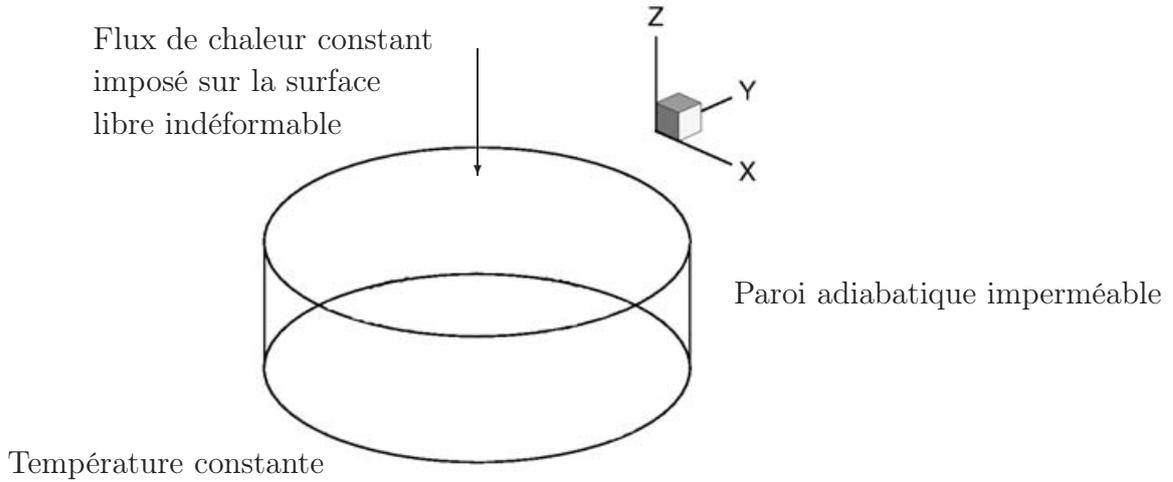


FIG. 2.8 – Configuration de la cavité

axes de l'ellipse. Par convention, la demi-longueur dans la direction  $x$  est  $R$  et celle dans la direction  $y$  est  $\epsilon R$ . Ainsi lorsque  $\epsilon < 1$  le grand axe de l'ellipse est aligné avec la direction  $x$ . Les parois rigides latérales sont adiabatiques et imperméables et s'y appliquent des conditions de non-glissement. La surface rigide inférieure est maintenue à température constante et à la surface libre est appliqué un flux de chaleur  $\mathbf{q} = q\mathbf{e}_z$  constant et normal à la surface de sorte que  $-q = \Delta T\lambda/H > 0$  où  $\lambda$  est la conductivité thermique et  $\Delta T$  la différence de température entre le fond du container et la surface libre produite par application du flux en absence de convection au sein du fluide.

On admet que dans les gammes de températures considérées, les variations de tension de surface avec la température sont correctement décrites par une loi affine de sorte que :

$$\sigma(T) = \sigma_0(1 + \gamma_T(T - T_b)), \quad (2.2)$$

où  $\gamma_T$  est un coefficient constant défini par

$$\gamma_T = \frac{1}{\sigma_0} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_{T_b},$$

et où  $\sigma_0 = \sigma(T_b)$  avec  $T_b$  la température imposée le long de la paroi rigide inférieure<sup>3</sup> Le flux de chaleur dépend linéairement du gradient de température et est donné par la loi de Fourier :

$$\mathbf{J}_q = -\lambda \nabla T, \quad (2.3)$$

avec  $\nabla = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)$ .

Dans la suite, les longueurs, le temps, la température, la vitesse et la pression sont respectivement adimensionnalisés par les grandeurs  $H$ ,  $H^2/\nu$ ,  $\Delta T \equiv -qH/\lambda$ ,  $Ma\nu/H$  et

<sup>3</sup>On peut également utiliser  $\sigma(T) = \sigma_0(1 + \gamma_T(T - T_m))$  où  $T_m$  est la température moyenne  $T_m = T_b + \Delta T/2$  et  $\gamma_T$  est alors la dérivée de  $\sigma$  évaluée en  $T_m$ . Les changements induits dans la suite sont toutefois mineurs.

$Ma\nu^2/H^2$  où le nombre de Marangoni  $Ma$  s'écrit sous la forme suivante :

$$Ma = \frac{-qH^2\sigma_0\gamma_T}{\lambda\rho\nu\kappa}, \quad (2.4)$$

où  $\rho$  est la densité volumique du fluide,  $\nu$  la viscosité cinématique et  $\kappa$  la diffusivité thermique. On notera que compte tenu que  $q = -\Delta T\lambda/H$ , l'expression de  $Ma$  est identique à celle utilisée dans le paragraphe 1. Les équations de conservation de la quantité de mouvement pour un écoulement incompressible et de l'énergie s'écrivent dans leur version adimensionnée :

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbf{u} &= -Ma (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla p + \nabla^2 \mathbf{u}, \\ \partial_t T &= -Ma (\mathbf{u} \cdot \nabla) T + Pr^{-1} \nabla^2 T, \\ 0 &= \nabla \cdot \mathbf{u}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

où  $\mathbf{u} = (u, v, w)$  est le champ de vitesse dont  $u$ ,  $v$  et  $w$  sont les composantes dans les directions  $x$ ,  $y$  et  $z$  respectivement et  $Pr = \nu/\kappa$  est le nombre de Prandtl. Dans la suite, on choisit l'origine du repère au centre de la surface inférieure. Compte tenu des hypothèses, les conditions aux limites sur les parois rigides et s'écrivent :

$$u = v = w = T = 0 \text{ en } z = 0, \quad (2.6)$$

$$u = v = w = \partial_n T = 0 \text{ sur les parois latérales}, \quad (2.7)$$

où  $n$  est la coordonnée normale à la surface latérale du cylindre. La relation d'équilibre des contraintes tangentielles à la surface libre s'écrit :

$$\mu \frac{\partial u}{\partial z} = \sigma_0 \gamma_T \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \mu \frac{\partial v}{\partial z} = \sigma_0 \gamma_T \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (2.8)$$

où  $\mu$  est la viscosité dynamique ( $\mu = \nu\rho$ ). On notera que si l'on considère le milieu gazeux, l'égalité des contraintes à l'interface amène :

$$\mu \frac{\partial u}{\partial z} - \mu_g \frac{\partial u_g}{\partial z} = \sigma_0 \gamma_T \frac{\partial T}{\partial x}, \quad \mu \frac{\partial v}{\partial z} - \mu_g \frac{\partial v_g}{\partial z} = \sigma_0 \gamma_T \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (2.9)$$

où  $\mathbf{u}_g = (u_g, v_g, w_g)$  est le champ de vitesse dans la partie gazeuse et  $\mu_g$  est la viscosité dynamique du gaz. Par continuité, si la vitesse du fluide à l'interface n'est pas nulle, le champ de vitesse dans la partie gazeuse ne l'est pas non plus. Comme  $\mu_g \ll \mu$ , le second terme des relations (2.9) peut être négligé pour retrouver les relations (2.8). En variables adimensionnées, les conditions aux limites le long de la surface libre s'écrivent :

$$\partial_z u - Pr^{-1} \partial_x T = \partial_z v - Pr^{-1} \partial_y T = w = \partial_z T - 1 = 0 \text{ en } z = 1. \quad (2.10)$$

L'adimensionnement sur la vitesse diffère de celui habituellement exploité [60] à l'issue duquel le nombre de Marangoni apparaît dans la condition à la limite à l'interface. Le choix retenu est motivé par les méthodes numériques employées et plus particulièrement la méthode de continuation qui nécessite une dérivation des équations par rapport à  $Ma$  plus facile à évaluer numériquement avec ce choix d'adimensionnement.

En absence de convection  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  et  $p$  est constant, ce qui revient à écrire l'équation de l'énergie sous la forme :

$$\nabla^2 T = 0, \quad T(x, y, z = 0) = \partial_z T(x, y, z)|_{z=1} - 1 = \partial_n T(x, y, z)|_{\partial\Omega_l} = 0, \quad (2.11)$$

où  $\partial\Omega_l$  représente la surface latérale du cylindre et  $n$  la coordonnée qui lui est normale. On obtient facilement  $T = T_0(z) = z$ . Cette solution  $((\mathbf{u}, T) = (\mathbf{0}, z))$  sera appelée solution conductive et l'on observe qu'elle existe quelque soient  $Ma$ ,  $Pr$  et  $A$ . En revanche sa stabilité linéaire est affectée par certains de ces paramètres.

## 2.3 Analyse linéaire de stabilité de la solution conductive

### 2.3.1 Linéarisation des équations

La linéarisation autour de la solution conductive du système d'équations (2.5) et des conditions aux limites (2.6, 2.7, 2.10) amène :

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{\mathbf{u}} &= -\nabla \tilde{p} + \nabla^2 \tilde{\mathbf{u}}, \\ \partial_t \tilde{T} &= -Ma (\tilde{\mathbf{u}} \cdot \nabla) T_0 + Pr^{-1} \nabla^2 \tilde{T}, \\ 0 &= \nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

muni des conditions aux limites :

$$\tilde{u} = \tilde{v} = \tilde{w} = \tilde{T} = 0 \text{ en } z = 0, \quad (2.13)$$

$$\tilde{u} = \tilde{v} = \tilde{w} = \partial_n \tilde{T} = 0 \text{ le long de } \partial\Omega_l, \quad (2.14)$$

$$\partial_z \tilde{u} - Pr^{-1} \partial_x \tilde{T} = \partial_z \tilde{v} - Pr^{-1} \partial_y \tilde{T} = \tilde{w} = \partial_z \tilde{T} = 0 \text{ en } z = 1, \quad (2.15)$$

où  $\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{T}, \tilde{p}$  représentent respectivement une perturbation des champs de vitesse, de température et de pression de la solution conductive. En développant la perturbation sous la forme  $(\tilde{\mathbf{u}}, \tilde{T}, \tilde{p}) = (\hat{\mathbf{u}}, \hat{T}, \hat{p}) \exp(st)$  où  $\mathbf{X} = (\hat{\mathbf{u}}, \hat{T}, \hat{p})$  ne dépend plus du temps, le système et ses conditions aux limites s'écrivent formellement :

$$s\mathbf{X} = \mathcal{L}_0 \mathbf{X}, \quad (2.16)$$

où  $\mathcal{L}_0$  est l'opérateur issu de la linéarisation autour de la solution conductive. La solution conductive est donc linéairement instable lorsque la partie réelle de la valeur propre  $s = s(Ma, Pr)$  est positive et linéairement stable lorsqu'elle est négative. Le seuil critique correspond à la transition. Un point de bifurcation de Hopf correspond à une valeur propre purement imaginaire et un point de bifurcation stationnaire à une valeur propre nulle. En un point de bifurcation stationnaire, il existe  $\tilde{\mathbf{u}}_s, \tilde{T}, \tilde{p}$  vérifiant les équations stationnaires  $\partial_t \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0}$  et  $\partial_t \tilde{T} = 0$ . Il est aisé de remarquer que le changement de variable :

$$\tilde{T} \rightarrow Pr \tilde{T}, \quad (2.17)$$

fait disparaître le nombre de Prandtl des équations stationnaires. Les points de bifurcation stationnaires de la solution conductive, appelés points de bifurcation primaires, ne dépendent donc pas du nombre de Prandtl ( $s = s(Ma)$ ).

### 2.3.2 Effet du confinement

Dans le cas d'un domaine confiné, la détermination du mode au seuil d'instabilité dépend du rapport d'aspect comme des conditions aux limites sur les parois latérales. Les conditions aux limites de type glissement ou périodiques sur les parois latérales sont abordées simultanément car les modes propres sont bien définis par un nombre d'onde. Dans la suite, on notera  $\Gamma$  le rapport d'aspect<sup>4</sup> et  $Ma_i$  le nombre de Marangoni critique associé à un mode de longueur d'onde  $\lambda_i = 2\pi/k_i$  où  $k_i$  est le nombre d'onde. Pour tous les couples,  $(k_i, Ma_i)$ , on a  $\Re(s(k_i, Ma_i)) = 0$ . On note enfin  $(k_c, Ma_c)$  le nombre d'onde et le nombre de Marangoni critique correspondant au couple  $(k_i, Ma_i)$  ayant la plus petite valeur  $Ma_i$ . Dans la suite, on se place dans le cas où  $\lambda_c = \mathcal{O}(H)$ . L'interaction de modes dans le régime non-linéaire dépend de la proximité des seuils successifs lorsque le nombre de Marangoni augmente. Aux grands rapports d'aspect, cette proximité se mesure par l'écart entre deux seuils successifs  $\Delta k/k_c \approx \lambda_c/\Gamma$  où  $\Delta k = k_{i+1} - k_i = 2\pi/\Gamma$  pour des conditions aux limites périodiques.

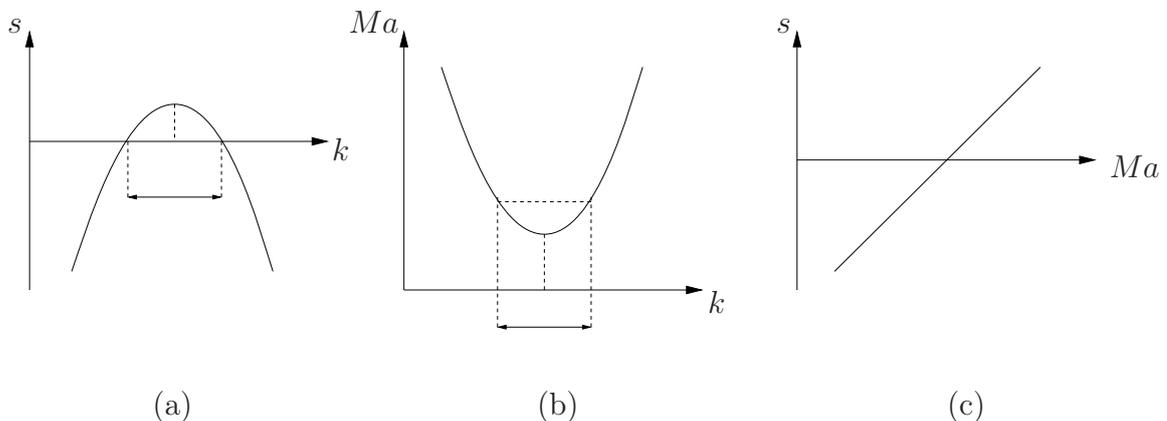


FIG. 2.9 – (a) Evolution schématique de  $s$  en fonction de  $k$ . Pour  $Ma > Ma_c$ , il existe une bande instable de nombre d'onde  $k$  liée dans le voisinage de  $Ma_c$  pour lesquels  $s(k) \approx (1/2)(\partial_k^2 s)(k - k_c)^2$ . (b) Evolution schématique du nombre de Marangoni critique en fonction de  $k$  montrant à nouveau la bande de nombre d'onde instables. Pour ces valeurs de  $k$ , on  $Ma(k) \approx Ma(k_c) + (1/2)(\partial_k^2 Ma)(k - k_c)^2$  soit  $\Delta Ma = Ma - Ma_c = \mathcal{O}(\Delta k^2)$ . (c) Evolution schématique de  $s$  en fonction de  $Ma$  au voisinage de  $Ma_c$ . On a  $s(Ma) \approx \beta(Ma - Ma_c)$ .

Si  $\Gamma \gg \lambda_c$ , les nombres d'onde les plus instables sont très voisins de  $k_c$  et l'écart relatif entre deux seuils successifs est de l'ordre de  $\Delta Ma/Ma_c \approx (\lambda_c/\Gamma)^2 \ll 1$  (figure 2.9). Il en résulte que les modes successifs sont quasi-dégénérés et les interactions entre modes, nombreuses dans le régime faiblement non-linéaire. Une approximation régulièrement utilisée est alors de considérer le système comme infini. L'étude expérimentale de Cerisier *et al.* [10] dans un domaine hexagonal montre qu'à partir d'un rapport d'aspect suffisamment grand du container, la longueur d'onde obtenue pour un réseau d'hexagones près du seuil de stabilité linéaire est proche de celle obtenue dans le cas du domaine infini

<sup>4</sup>La discussion ne reposant pas spécifiquement sur des géométries tridimensionnelles, l'utilisation d'un seul rapport d'aspect est suffisante.

( $\lambda_c(\infty) \approx 3.1$ ). Dans une configuration bidimensionnelle, lorsque le rapport d'aspect tend vers l'infini, la valeur du premier seuil d'instabilité tend vers la valeur critique  $Ma_c(\infty)$  obtenue par Pearson [54] dans l'étude d'une couche fluide infinie. En présence de conditions aux limites périodiques et pour une cavité dont le rapport d'aspect est un nombre entier de fois  $\lambda_c$ , ce seuil est exactement  $Ma_c(\infty)$ . Pour d'autres conditions limites, une correction doit être ajoutée (elle évolue en  $\Gamma^{-2}$  pour le problème de Rayleigh-Bénard [69]). Si dans la limite  $\Gamma \gg \lambda_c$ , les effets de taille finie n'ont pas un impact important sur l'analyse linéaire, il n'en est pas de même de la dynamique non-linéaire. Ils sont discutés théoriquement par Cross *et al.* [16] dans l'étude de l'instabilité de Rayleigh-Bénard. Dans le régime faiblement non-linéaire, la présence de parois latérales réduit la bande de vecteurs d'onde sélectionnés par rapport au cas infini ce qui a pour conséquence de restreindre la gamme de solutions stables possibles. On notera également que le type des conditions aux limites (périodique, Neuman, non-glissement) influence également la dynamique faiblement non-linéaire. Dans la limite des grands rapports d'aspect, Hirschberg & Knobloch [39] montrent notamment par des arguments de symétrie qu'en présence de conditions aux limites de glissement, les grands rapports d'aspect n'approxime pas le problème posé pour une couche infinie.

Si  $\Gamma \approx \lambda_c$ , les seuils sont bien séparés les uns des autres ( $\Delta Ma/Ma_c \approx (\lambda_c/\Gamma)^2 \approx 1$ ) et la dynamique non linéaire est pilotée par l'interaction de quelques modes seulement. C'est dans cette situation que se situe notre travail.

La situation intermédiaire est plus problématique car la proximité des seuils de bifurcations primaires entraîne de nombreuses interactions fortes de modes dans le régime faiblement non-linéaire. Une des manifestations de cet effet est visible dans les travaux de Koeschmieder [43] menées dans un cylindre. Au delà d'un rapport d'aspect suffisamment grand ( $\Gamma \approx 10$ ), une cellule hexagonale apparaît au centre du domaine. Cette configuration obtenue près du seuil ne correspond pas à la structure d'un mode propre ou à la superposition de modes propres du système. La compréhension des mécanismes qui dans le régime non-linéaire conduisent à ce type de solutions complexes reste un sujet très peu abordé dans la littérature et c'est dans ce contexte que se situe notre contribution à la dynamique non-linéaire dans des cylindres de rapports d'aspect modérés.

### 2.3.3 Symétries et conditions aux limites

Ce paragraphe discute de l'effet des conditions aux limites dans les cavités confinées sur la stabilité linéaire de la solution conductive pour le problème de Marangoni-Bénard

#### Equivariance

L'application de la théorie des groupes aux bifurcations en présence de symétrie est appelée *equivariant bifurcation theory*. Elle permet de comprendre comment les symétries que présente une structure d'écoulement particulière sont déterminées par les symétries du système d'équation qui la produit. Soit une équation de la forme :

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x}, \mu), \quad (2.18)$$

où  $t$  est le temps,  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  une position dans l'espace des phases et  $\mu \in \mathbb{R}$  le paramètre de bifurcation. Supposons qu'il existe un groupe de symétries spatiales noté  $\Sigma$  dont chaque

élément a une représentation linéaire (ici, matricielle). Alors, si  $\sigma \in \Sigma$  est une symétrie du système,  $\mathbf{x}$  et  $\sigma\mathbf{x}$  solutions impose la condition d'équivariance :

$$f(\sigma\mathbf{x}, \mu) = \sigma f(\mathbf{x}, \mu). \quad (2.19)$$

L'ensemble des  $\sigma\mathbf{x}$  définit l'orbite de l'action de  $\Sigma$ .

### Stabilité linéaire et conditions aux limites en deux dimensions

Pour le problème de Marangoni–Bénard, l'état conductif reste une solution des équations quelque soit la différence de température produite par le flux de chaleur, c'est à dire quelque soit le nombre de Marangoni. Cette solution devient en revanche linéairement instable au delà d'une valeur critique notée  $Ma_c$ . Dans le cas d'un fluide pur et à la différence d'un mélange, cette perte de stabilité est toujours associée à une bifurcation stationnaire. Le seuil ne dépend pas du nombre de Prandtl mais est affecté par le rapport d'aspect de la cavité ainsi que par les conditions aux limites sur les différents champs, vitesse et température, le long des parois. Les variations du nombre de Marangoni critique  $Ma_c$  avec le rapport d'aspect sont présentées sur la figure 2.11 pour des conditions aux limites de glissement le long des parois latérales (les autres conditions aux limites thermiques restent celles que nous avons déjà formulées). A chaque courbe correspond à un mode caractérisé par un nombre d'onde  $k_n = 2\pi/\lambda_n$  où la longueur d'onde  $\lambda_n$  vérifie  $\lambda_n = \Gamma/n$  avec  $n \in \mathbb{N}$  et  $\Gamma$  le rapport d'aspect du domaine d'étude. A chaque longueur d'onde correspond un couple de rouleaux de convection contra-rotatifs.

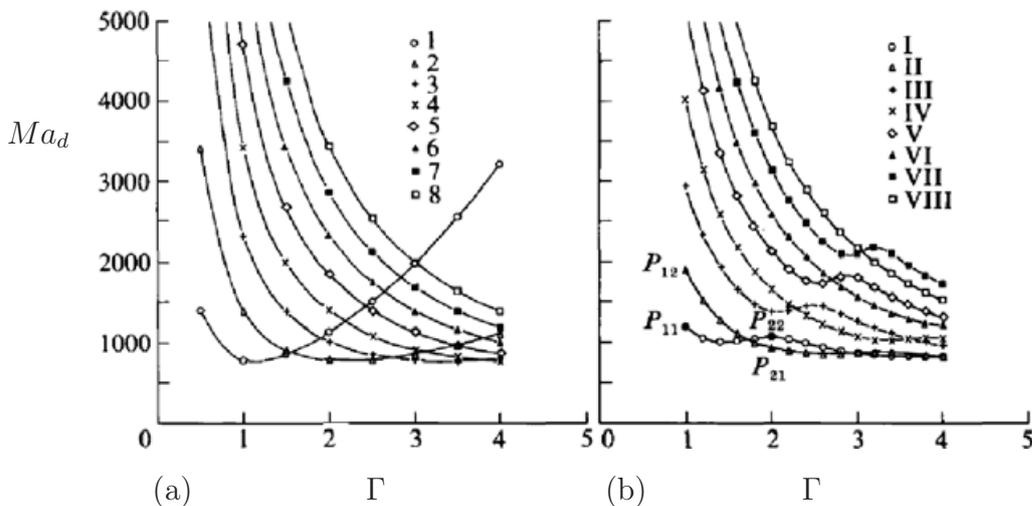


FIG. 2.10 – Evolution du nombre de Marangoni critique en fonction du rapport d'aspect  $\Gamma$ , chaque courbe correspond à un mode différent issu de l'étude de stabilité linéaire. (a) conditions au limites de glissement, (b) conditions aux limites de non-glissement. La numérotation des structures diffère de celle que nous avons adoptée. Pour être en conformité, il faut lire  $1/2, 1, 2, 5/2, \dots$  au lieu de  $1, 2, 3, 4, \dots$  (Issu de [24]).

En présence de conditions aux limites de Neumann dites de glissement ou de réflexion,

$$\partial_x u = \partial_x w = \partial_x T = 0 \text{ en } x = 0, \Gamma, \quad (2.20)$$

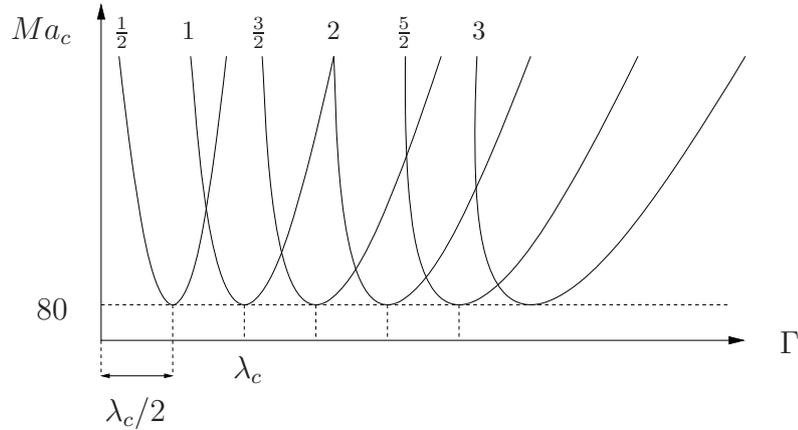


FIG. 2.11 – Dans le cas de condition aux limites latérales de glissement, vue schématique de l'évolution avec le rapport d'aspect  $\Gamma$ , des seuils d'instabilité associés à chaque mode  $n$  où  $n$  représente le nombre de pair de rouleaux dans le domaine. Dans le cas de conditions aux limites périodiques,  $n$  ne peut être qu'entier. Ici,  $\lambda_c$  est la longueur d'onde critique obtenue pour une couche fluide infinie et  $Ma_c = 80$  est le nombre de Marangoni critique associé [54].

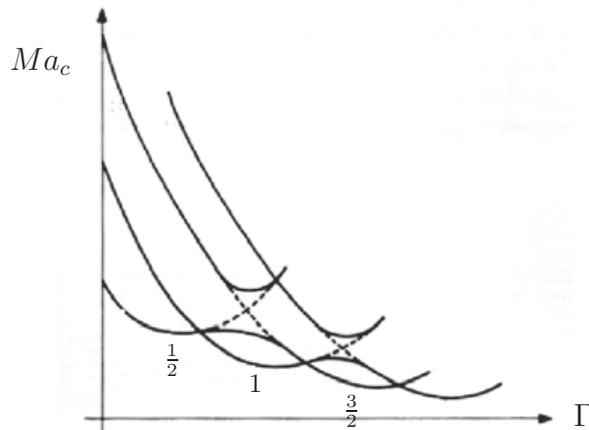


FIG. 2.12 – Dans le cas de condition aux limites latérales de non-glissement, vue schématique de l'évolution avec le rapport d'aspect  $\Gamma$ , des seuils d'instabilité. Le rationnel  $n$  représente le nombre de pair de rouleaux dans le domaine au voisinage des minima de chaque courbe. A la différence du cas du glissement, à  $n$  n'est pas associé un vecteur d'onde bien défini. D'après [81].

$n$  peut être un demi-entier et le nombre de rouleaux être impair (figure 2.11 et 2.10a). Le minimum de chacune des courbes de stabilité marginale correspond aux valeurs critiques  $(k_c, Ma_c) = (2.0, 79.9)$  obtenues analytiquement par Pearson [54] dans l'étude d'une couche fluide infinie. La valeur  $Ma_c$  est également la limite des courbes marginales du cas

non-glissement lorsque le rapport d'aspect  $\Gamma$  tend vers l'infini. On notera que les conditions aux limites de type non-glissement ont tendance à stabiliser la solution conductive pour les petits rapports d'aspect. Ce phénomène s'interprète physiquement par le fait que la friction visqueuse à l'origine de la tendance à l'uniformisation des gradients de vitesse est plus importante dans la situation où les conditions aux limites des parois latérales sont de type non-glissement que glissement.

A la différence du cas du glissement, la structure du mode spatial dans le cas du non-glissement change continuellement le long de chacune des courbes marginales. L'examen du mode marginal du cas non-glissement révèle qu'entre deux minima successifs le long d'une même courbe marginale, le nombre de rouleaux augmente d'une paire de sorte que les propriétés de symétrie du mode marginal restent inchangées (voir figure 2.12 et 2.10b). On note également que pour des cavités suffisamment étendues,  $\Gamma \gg 1$ , la différence entre les deux rapports d'aspects associés à deux minima successifs égale la longueur d'onde critique  $\lambda_c$ .

Le groupe d'invariance par symétrie des équations et des conditions aux limites du cas non-glissement est  $Z_2 = \{I, \kappa_x\}$  formé de la réflexion  $\kappa_x : x \rightarrow \Gamma - x$  par rapport à l'axe vertical  $x = \Gamma/2$  et de l'identité  $I$ . En notant  $\theta = T - T_0(z)$ , l'action de  $\kappa_x$  sur les champs  $(u, w, \theta)$  s'écrit :

$$\kappa_x : (u, w, \theta)(x, z, t) \longrightarrow (-u, w, \theta)(\Gamma - x, z, t). \quad (2.21)$$

La solution conductive est invariante sous l'action de  $\kappa_x$ . La propriété d'équivariance implique alors que la Jacobienne associée à la linéarisation des équations autour de la solution conductive commute avec l'opérateur  $\kappa_x$ . Compte tenu que  $\kappa_x^2 = I$ , les vecteurs propres  $\mathbf{h} = (u, w, \theta)$  associés à une valeur propre réelle simple vérifient donc  $\kappa_x \mathbf{h} = \pm \mathbf{h}$  et sont associés à des structures possédant un nombre pair de rouleaux (+, bifurcation transcritique) ou un nombre impair de rouleaux (−, bifurcation fourche).

De manière contre-intuitive, les bifurcations primaires dans le cas de conditions aux limites de glissement sont toutes fourches en dépit du fait qu'en apparence, les propriétés de symétrie du système d'équations sont les mêmes. Les conditions aux limites de glissement sont en fait à l'origine de symétries supplémentaires dites cachées. La relation entre ces conditions aux limites et les symétries cachées a été étudiée dans le contexte des équations de réaction-diffusion par Crawford *et al.* [15] et Gomes *et al.* [37]. A l'origine du phénomène se trouve le fait que toute solution du système d'équations munie des conditions aux limites de glissement (2.20) peut être étendue par réflexion par rapport à l'axe  $x = 0$ ,

$$(u, w, \theta)(-x, z, t) = (u, w, \theta)(x, z, t), \text{ pour } x \in [0, \Gamma], z \in [0, 1], \quad (2.22)$$

à une solution des mêmes équations sur le domaine  $[-\Gamma, \Gamma]$  munies des conditions aux limites de périodicité :

$$(u, w, \theta)(-\Gamma, z, t) = (u, w, \theta)(\Gamma, z, t). \quad (2.23)$$

Réciproquement, toute solution périodique sur le domaine  $[-\Gamma, \Gamma]$  satisfaisant également la condition de réflexion (2.22) satisfait les conditions aux limites (2.20) (ce que l'on démontre en différenciant (2.22) par rapport à  $x$ ). Les symétries du problème périodique sur  $[-\Gamma, \Gamma]$  sont la réflexion  $\kappa_x$  par rapport à la droite  $x = 0$  (ici, la position de la

droite est arbitraire) ainsi que les translations dans la direction  $x$ . Ensemble, ces deux opérations génèrent le groupe  $O(2)$  des rotations et des réflexions du cercle. Les symétries du problème restreint sur  $[0, \Gamma]$  sont celles du groupe  $Z_2$ . De fait, les symétries cachées sont celles qui sont présentes dans le groupe  $O(2)$  mais pas dans le groupe  $Z_2$  autrement dit les translations. Pour apprécier l'effet de ces translations cachées, considérons un problème monodimensionnel sur un domaine  $[0, \pi]$  muni de conditions aux limites de Neumann :

$$\partial_t u(x, t) = f(u(x, t), \mu), \quad x \in [0, \pi] \quad \text{avec} \quad \partial_x u(0, t) = \partial_x u(\pi, t) = 0, \quad (2.24)$$

où  $u \in \mathbb{R}$  et  $\mu \in \mathbb{R}$  est un paramètre réel (symboliquement, le nombre de Marangoni). Notons  $u(x, t) = a(t) \cos(nx)$  une solution du problème sur le domaine  $[0, \pi]$  résultant d'une bifurcation de la solution  $u = 0$  pour  $\mu = 0$ . Si  $n > 1$ , la translation  $x \rightarrow x + \pi/n$  est une symétrie du groupe de symétrie du problème étendu à  $[-\pi, \pi]$  qui transforme  $u \rightarrow -u$ . L'équivariance sous la translation implique que l'équation d'amplitude s'écrit :

$$\frac{da}{dt} = \mu a + ca^3 + \dots \quad (2.25)$$

ce qui correspond à une bifurcation fourche. Ce résultat n'est pas une surprise si  $n$  est impair puisque l'équivariance sous la réflexion  $\kappa_x$  qui transforme également  $u \rightarrow -u$  aurait conduit à cette équation. Ce n'est une surprise que lorsque  $n$  est pair puisque qu'alors la solution est invariante par  $\kappa_x$ .

Outre le régime non-linéaire, les conditions aux limites et par induction les symétries du problème permettent d'expliquer certaines différences entre les deux études de stabilité linéaire en glissement et non-glissement (figures 2.11 et 2.12). La comparaison montre que dans le cas du non-glissement, les courbes marginales associées à des nombres de rouleaux de même parité ne se croisent pas, semblant même s'éviter, au contraire du cas glissement (les courbes en pointillés sur la figure 2.12 illustrent ce phénomène). Cet effet a été étudié en détail par Hirschberg et Knobloch [39] dans le cas de la convection de Rayleigh-Bénard. Les équations possèdent une symétrie additionnelle de réflexion  $\kappa_z$  par rapport à l'axe horizontal  $z = 0.5$ . Par conséquent, à la différence de notre étude, les bifurcations associées à une valeur propre réelle nulle simple et un mode marginal n'ayant qu'un rouleau dans la direction verticale sont toutes fourches i.e. l'invariance par la symétrie  $\kappa_z$  est brisée. Cette symétrie supplémentaire n'a cependant pas d'effet direct sur le phénomène observé sur la stabilité marginale ce que montre la comparaison des figures 2.10 et de la figure 1 de leur article. Les auteurs analysent en fait une situation intermédiaire en imposant sur les parois latérales une condition aux limites mixte liant le flux et la valeur du champ de vitesse :

$$(1 - \beta) \partial_x w + \beta w = u = 0, \quad \text{en } x = 0, \Gamma, \quad (2.26)$$

où  $\beta$  est un paramètre homotopique liant le cas non-glissement ( $\beta = 1$ ) au cas Neumann ( $\beta = 0$ ). Dès que  $\beta \neq 0$ , les modes marginaux ne correspondent plus à des nombres d'ondes entiers ou demi-entiers et cette différence est responsable de la forme différente des équations d'amplitude décrivant la dynamique au voisinage des seuils. Ces formes sont présentées par Hirschberg et Knobloch [39] dans les trois cas des conditions aux limites périodiques, de Neumann et de non-glissement sur les surfaces latérales dans la limite de rapports d'aspect modérés ou grands. La conclusion de leur analyse montre en particulier

qu'en présence de conditions aux limites de type Neumann et dans la limite des grands rapports d'aspect, la dynamique ne peut être considérée comme approchant celle d'un domaine infini à la différence des conditions aux limites de non-glissement ou du type Robin (2.26) avec  $\beta \neq 0$ .

L'analyse de la partie linéaire des équations d'amplitude permet également d'interpréter les changements produits lors du passage de conditions aux limites de type Neumann ( $\beta = 0$ ) à des conditions mixtes ( $\beta \neq 0$ ) et en particulier l'instabilité structurelle des croisements de modes de même parité. Si  $a(t)$  et  $b(t)$  représentent respectivement l'amplitude d'un mode pair et d'un mode impair du cas glissement, la partie linéaire de l'équation d'amplitude s'écrit :

$$\begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu & 0 \\ 0 & \mu' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad (2.27)$$

où  $\mu$  et  $\mu'$  représente respectivement les écarts au seuil  $\mu = Ma - Ma_c^{(p)}$  et  $\mu' = Ma - Ma_c^{(i)}$  où  $Ma_c^{(p)}$  et  $Ma_c^{(i)}$  sont les seuils d'instabilités des modes pairs et impairs respectivement. Pour un rapport d'aspect associé au point de croisement de deux courbes marginales de parité différentes, on a bien sur  $\mu = \mu'$ , la différence  $\mu - \mu'$  étant proportionnelle à l'écart  $\gamma$  en rapport d'aspect au point de croisement. Lorsque  $\beta \neq 0$ , la forme diagonale de cette matrice reste inchangée car dans les deux cas  $\beta = 0$  et  $\beta \neq 0$ , l'équivariance par rapport à  $\kappa_x$  qui transforme  $(a, b) \rightarrow (a, -b)$  exclut la présence de termes non-diagonaux. Ceci indique la persistance du point de croisement ou en d'autres termes sa stabilité structurelle. En revanche, si  $a$  et  $b$  représentent les amplitudes de deux modes de même parité, disons pairs, l'équivariance par rapport à  $\kappa_x$  transforme  $(a, b) \rightarrow (a, b)$  et n'impose donc aucune contrainte sur les termes non-diagonaux. Le coefficient  $\beta$  couple donc les modes de même parité de sorte que la partie linéaire s'écrit [39] :

$$\begin{pmatrix} \dot{a} \\ \dot{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu & \nu \\ \nu' & \mu' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

où  $\nu$  et  $\nu'$  sont tout deux dépendants à  $\beta$ . L'examen des valeurs propres montre que le point de croisement n'existe plus. A l'intersection des droites  $\mu(\gamma)$  et  $\mu'(\gamma)$  en  $\gamma = 0$  lorsque  $\beta = 0$ , se sont substituées lorsque  $\beta \neq 0$  deux branches d'hyperboles indiquant la disparition du point de croisement c'est à dire l'instabilité structurelle du point de croisement. Dans le cas de l'instabilité de Rayleigh-Bénard, le gap séparant deux couples de courbes marginales de parité opposée décroît en  $\Gamma^{-2}$  [39] pourvu que  $\beta \neq 0$  et  $\beta\Gamma \gg 1$ .

On notera pour conclure que la règle selon laquelle en présence de conditions aux limites de non-glissement, deux courbes de stabilité marginale ne se croisent que lorsque la parité des modes diffère, ne s'applique pas aux bifurcations de Hopf [1].

### Géométries cylindriques

Dans les travaux que nous avons conduits, nous nous sommes intéressés aux géométries cylindriques à section horizontale circulaire ou elliptique. Dans le cas des sections circulaires, la représentation naturelle des champs repose sur une décomposition en modes de Fourier dans la direction azimutale :

$$\{u, v, w, T\}(x, y, z) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \{\hat{u}, \hat{v}, \hat{w}, \hat{T}\}(r, z) e^{im\theta}, \quad (2.29)$$

où  $(r, \theta, z)$  sont les coordonnées polaires et  $\hat{\cdot}$  indique le coefficient complexe de la transformée de Fourier discrète. Habituellement, les modes sont identifiés relativement à  $m$ ; par exemple les modes  $m = 0$  représentent des solutions axisymétriques. Suivant les cas, on peut également référencer les solutions relativement à un nombre d'onde radial. Cette approche est rigoureuse dans le cas de conditions aux limites de glissement le long de la paroi verticale. Les fonctions  $\{\hat{u}, \hat{v}, \hat{w}, \hat{T}\}$  sont développées sous forme d'un produit d'une fonction de  $z$  et d'une fonction de Bessel  $J_{m'}(k'R)$  où  $R$  est le rayon du cylindre et  $k'$  est le nombre d'onde radial. Par compatibilité avec la taille finie du domaine,  $k'$  ne peut prendre que des valeurs discrètes définissant par induction un mode azimuthal indicé  $m'$ . Cette approche est celle utilisée par Rosenblat *et al.* [60]. L'identification d'un pseudo nombre d'onde radial dans le cas de non-glissement peut être délicate notamment aux grands rapports d'aspect. L'étude de stabilité linéaire dans ce cas est conduite par Dauby *et al.* [19]. Les résultats sont reportés sur la figure 2.13.

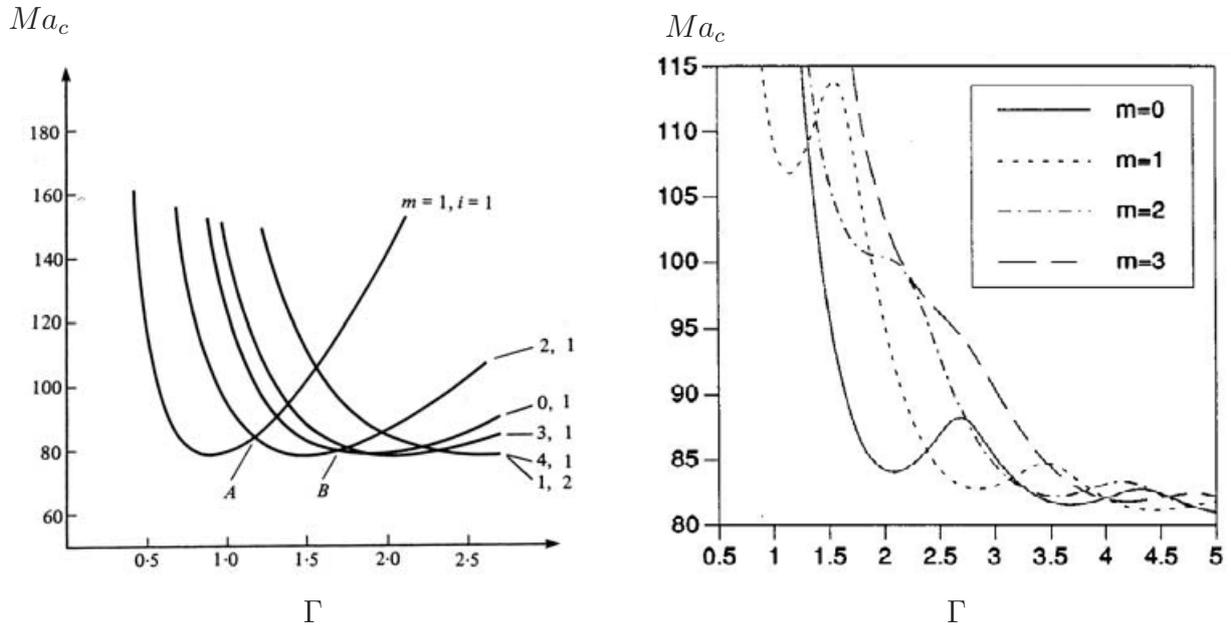


FIG. 2.13 – Marangoni critique en fonction du rapport d'aspect  $\Gamma = R/H$  pour différents modes. (a) Conditions aux limites de glissement sur les surfaces latérales  $\beta = 0$ . Les deux couples représentent respectivement les nombres d'ondes radial et azimuthal (Issu de [60], figure 1). (b) Conditions aux limites de non-glissement sur les surfaces latérales  $\beta = 1$ . L'indice représente le nombre d'onde azimuthal (Issu de [19], figure 1)

Du point de vue des symétries, le groupe de symétrie est  $O(2)$  généré par la réflexion  $\kappa_x$  par rapport à  $x = 0$  et  $R_\phi$  la rotation d'un angle quelconque  $\phi$  autour de l'axe des  $z$ .

L'analyse des changements produits par la présence de conditions est présenté sur la figure 2.13 pour les cas aux limites de non-glissement et de glissement sur les surfaces latérales. La comparaison des deux courbes est difficile car elles ne couvrent pas les mêmes gammes de rapport d'aspect. On remarque néanmoins que dans le cas du glissement, on retrouve la présence de points de croisements entre les courbes marginales associées à des modes radiaux et azimuthaux différents. Leurs minimas respectifs sont par ailleurs tous égaux.

# Bibliographie

- [1] O. BATISTE, I. MERCADER, M. NET & E. KNOBLOCH Onset of oscillatory binary fluid convection in finite containers, *Phys. Rev. E* **59**(6), 6730, (1999).
- [2] H. BÉNARD Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide. *Rev. Gén. Sci. Pures Appl.* **11**, 1261 (1900).
- [3] A. BERGEON, D. HENRY & E. KNOBLOCH Three-dimensional Marangoni-Bénard flow in square and nearly square containers. *Phys. Fluids* **13**, 92 (2001).
- [4] M. BESTEHORN Phase and amplitude instabilities for Bénard-Marangoni convection in fluid layers with large aspect ratio. *Phys. Rev. E.* **48**, 3622 (1993).
- [5] M. J. BLOCK Surface tension as the cause of Bénard cells and surface deformation in a liquid. *Nature* **178**, 650 (1956).
- [6] E. BODENSCHATZ, W. PESCH & G. AHLERS Recent developments in Rayleigh-Bénard convection. *Ann. Rev. Fluid. Mech.* **32**, 709, (2000).
- [7] F. H. BUSSE The stability of finite amplitude cellular convection and its relation to an extremum principle. *J. Fluid Mech* **30**, 635 (1967).
- [8] F. H. BUSSE The oscillatory instability of convection rolls in a low Prandtl number fluid. *J. Fluid Mech* **52**, 97 (1972).
- [9] F. H. BUSSE Non-linear properties of thermal convection. *Rep. Prog. Phys.* **41**, 1929 (1978).
- [10] P. CERISIER, C. PEREZ-GARCIA, C. JAMOND & J. PANTALONI Wavelength selection in Bénard-Marangoni convection. *Phys. Rev. A* **35**, 1949 (1987).
- [11] X. L. CHU & M.G. VELARDE Korteweg-de Vries soliton excitation in Bénard-Marangoni convection, *Phys. Rev. A* **43**, 1094, (1991).
- [12] A. CLOOT & G. LEBON A nonlinear stability analysis of the Bénard-Marangoni problem. *J. Fluid Mech.* **145**, 447 (1984).
- [13] P. COLINET, J.-C. LEGROS & M. G. VELARDE Nonlinear Dynamics of Surface-Tension-Driven Instabilities. Wiley-VCH, Verlag Berlin GmbH, Berlin (2005)
- [14] S. J. COWLEY & S. H. DAVIS Viscous thermocapillary convection at high Marangoni numbers. *J. Fluid Mech.* **135**, 175 (1983).
- [15] J. D. CRAWFORD, M. GOLUBITSKY, M. G. M. GOMES, E. KNOBLOCH & I. N. STEWART, Boundary conditions as symmetry constraints. Dans Singularity Theory and Its Applications, Warwick 1989, *Lecture Notes in Mathematics* **2**, ed. R. M. Roberts and I. N. Stewart, Heidelberg : Springer (1991).
- [16] M. C. CROSS, P. G. DANIELS, P. C. HOHENBERG & E. D. SIGGIA, Phase-winding solutions in a finite container above the convective threshold. *J. Fluid Mech.* **127**, 155 (1983).
- [17] M. C. CROSS & P. C. HOHENBERG Pattern formation outside of equilibrium. *Rev. Mod. Phys.* **65**, 851 (1993).

- [18] P. C. DAUBY & G. LEBON Bénard-Marangoni instability in rigid rectangular containers. *J. Fluid Mech.* **329**, 25 (1996).
- [19] P. C. DAUBY, G. LEBON & E. BOUHY Linear Bénard-Marangoni instability in rigid circular containers. *Phys. Rev. E* **56**, 520 (1997).
- [20] P. C. DAUBY, P. COLINET & D. JOHNSON Theoretical analysis of a dynamic thermoconvective pattern in a circular container. *Phys. Rev. E* **61**, 2663 (2000).
- [21] S. H. DAVIS Buoyancy-surface tension instability by the method of energy. *J. Fluid Mech.* **39**, 347 (1969).
- [22] S. H. DAVIS & G. M. HOMS Energy stability theory for free surface problem : buoyancy-thermo-capillary layers *J. Fluid Mech.* **98**, 527 (1980).
- [23] S. H. DAVIS Thermocapillary instabilities. *Ann. Rev. Fluid Mech.* **19**, 403 (1987).
- [24] H. A. DIJKSTRA On the structure of cellular solutions in Rayleigh-Bénard-Marangoni flows of small aspect ratio containers. *J. Fluid Mech.* **243**, 73 (1992).
- [25] H. A. DIJKSTRA Surface tension driven cellular patterns in three-dimensional boxes - Part I : Linear stability. *Microgravity Sci. Technol.* VII(4), 307 (1995).
- [26] H. A. DIJKSTRA Surface tension driven cellular patterns in three-dimensional boxes - Part II : A bifurcation study. *Microgravity Sci. Technol.* VIII(1), 70 (1995).
- [27] H. A. DIJKSTRA Surface tension driven cellular patterns in three-dimensional boxes - Part III : The formation of hexagonal patterns. *Microgravity Sci. Technol.* VIII(3), 155 (1995).
- [28] O. DUPONT, M. HENNENBERG & J. C. LEGROS Marangoni-Bénard instabilities under non-steady conditions. Experimental and theoretical results. *Int. J. Heat Mass Transf.* **35**, 3237 (1992).
- [29] B. ECHEBARRÍA, D. KRMPOTIĆ & C. PÉREZ-GARCÍA Resonant interactions in Bénard-Marangoni convection in cylindrical containers. *Physica D* **99**, 487 (1997).
- [30] B. ECHEBARRÍA & C. PÉREZ-GARCÍA Phase instability in hexagonal patterns. *Eur. Phys. Lett.* **43**, 35 (1998).
- [31] K. ECKERT, M. BESTEHORN & A. E. TRESS Square cells in surface-tension-driven Bénard convection : experiment and theory. *J. Fluid Mech.* **356**, 156 (1998).
- [32] E. N. FERM & D. J. WOLLKIND Onset on Rayleigh-Bénard-Marangoni instability : Comparison between theory and experiment. *J. Non-equilib. Thermodyn.* **23**, 169 (1982).
- [33] P. L. GARCIA-YBARRA, J.L. CASTILLO & M.G. VELARDE Bénard-Marangoni convection with a deformable interface and poorly conducting boundaries. *Phys. Fluids* **30**, 2655 (1987).
- [34] A. A. GOLOVIN, A. A. NEPOMNYASHCHY & L. M. PISMEN Pattern formation in large scale Marangoni convection with deformable interface. *Physica D* **81**, 117 (1995).
- [35] A. A. GOLOVIN, A. A. NEPOMNYASHCHY & L. M. PISMEN Nonlinear evolution and secondary instabilities of Marangoni convection in a liquid-gas system with deformable interface. *J. Fluid Mech.* **341**, 317 (1997).
- [36] M. GOLUBITSKY, J. W. SWIFT & E. KNOBLOCH Symmetries and pattern selection in Rayleigh-Bénard convection. *Physica D* **10**, 249 (1984).
- [37] M. G. M. GOMES & I. N. STEWART Steady PDEs on generalized rectangles : a change of genericity in mode interactions. *Nonlinearity* **7**, 253 (1994).
- [38] L. HADJI, J. SAFAR & M. SCHELL Analytical results on the coupled Benard-Marangoni problem consistent with experiment, *J. Non-Equil. Thermodyn.* **16**, 343 (1991).

- [39] P. HIRSCHBERG & E. KNOBLOCH Mode interactions in large aspect ratio convection. *J. Nonlinear Sci.* **7**, 537 (1997).
- [40] D. JOHNSON & R. NARAYANAN Experimental observation of dynamic mode switching in interfacial-tension-driven convection near a codimension-two point. *Phys. Rev. E* **54**, 3102 (1996).
- [41] E. L. KOSCHMIEDER & M. I. BIGGERSTAFF Onset of surface-tension-driven Bénard convection. *J. Fluid Mech.* **167**, 49 (1986).
- [42] E. L. KOSCHMIEDER & S. A. PRAHL Surface-tension-driven Bénard convection in small containers. *J. Fluid Mech.* **215**, 571 (1990).
- [43] E. L. KOSCHMIEDER & D. W. SWITZER The wave number of supercritical surface-tension-driven Bénard convection. *J. Fluid Mech.* **240**, 533 (1992).
- [44] E. KNOBLOCH Pattern selection in long-wavelength convection. *Physica D* **41**, 450, (1990).
- [45] C. G. M. MARANGONI Ueber die Ausbreitung der tropfen einer flüssigkeit auf der auerfläche einer anderen. *Ann. Phys. Chem.* (Poggendorf) **143**, 337 (1871).
- [46] M. MEDALE & P. CERISIER Numerical simulation of Bénard-Marangoni convection in small aspect ratio containers. *Num. Heat Transfer A* **42**, 55 (2002).
- [47] A. C. NEWELL & J. A. WHITEHEAD Finite bandwidth, finite amplitude convection. *J. Fluid Mech.* **38**, 279 (1969).
- [48] D. A. NIELD Surface tension and buoyancy effects in cellular convection. *J. Fluid Mech.* **19**, 341 (1964).
- [49] K. NITSCHKE & A. TCESS Evolution of the coupled Bénard-Marangoni convection *Phys. Rev. E* **52**, R5772 (1995).
- [50] T. ONDARCUHU, G. B. MILLÁN-RODRÍGUEZ, H. L. MANCINI, A. GARCIMARTÍN & C. PÉREZ GARCÍA Bénard-Marangoni convective patterns in small cylindrical layers. *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3892 (1993).
- [51] A. ORON & P. ROSENAU Evolution of the coupled Benard-Marangoni convection. *Phys. Rev. A* **39**, 2063 (1989).
- [52] A. ORON, S. H. DAVIS & S. G. BANKOFF Long-scale evolution of thin liquid films. *Rev. Mod. Phys.* **69**(3), 931 (1997).
- [53] P. M. PARMENTIER, V. C. REGNIER, G. LEBON & J. C. LEGROS Nonlinear analysis of coupled gravitational and capillary thermoconvection in thin fluid layers. *Phys. Rev. E* **54**, 2063 (1989).
- [54] J. R. A. PEARSON On convective cells induced by surface tension. *J. Fluid Mech.* **4**, 489 (1958).
- [55] A. PELLEW & R. V. SOUTHWELL On maintained convection in a fluid heated from bellow. *Proc. Roy. Soc.* **176**, pp. 312–343, 1940.
- [56] C. PÉREZ-GARCÍA, B. ECHEBARRIA & M. BESTEHORN Thermal properties in surface-tension-driven convection. *Phys. Rev. E* **57**, 475 (1998).
- [57] S. RAHAL, & P. CERISIER Bifurcation to chaos in the Bénard-Marangoni instability in a confined geometry *J. of Physics : Conf. Series* **64**, Second International Symposium on Instability and Bifurcations in Fluid Dynamics, 12005 (2007).
- [58] S. RAHAL, P. CERISIER & H. AZUMA Bénard-Marangoni convection in a small circular container : influence of the Biot and Prandtl numbers on pattern dynamics and free surface deformation. *Exp. Fluids* **43**, 547 (2007).

- [59] L. RAYLEIGH On convective currents in a horizontal layer of fluid when the higher temperature is on the under side. *Philos. Mag.* **32**, 529 (1916).
- [60] S. ROSENBLAT, S. H. DAVIS & G. M. HOMSY Nonlinear Marangoni convection in bounded layers. Part 1. Circular cylindrical containers. *J. Fluid Mech.* **120**, 91 (1982).
- [61] S. ROSENBLAT, S. H. DAVIS & G. M. HOMSY Nonlinear Marangoni convection in bounded layers. Part 2. Rectangular cylindrical containers. *J. Fluid Mech.* **120**, 123 (1982).
- [62] J. W. SCANLON & L. A. SEGEL Finite amplitude cellular convection induced by surface tension. *J. Fluid Mech.* **30**, 149 (1967).
- [63] M. F. SCHATZ, S. J. VANHOOK, W. D. MCCORMICK, J. B. SWIFT & H. L. SWINNEY Onset of surface-tension-driven Bénard convection. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 1938 (1995).
- [64] M. F. SCHATZ & G. P. NEITZEL Experiments on thermocapillary instabilities. *Ann. Rev. Fluid Mech.* **33**, 93 (2001).
- [65] A. SCHLUTER, D. LORTZ & F. BUSSE On the stability of steady finite amplitude convection. *J. Fluid Mech.* **23**, 129 (1965).
- [66] D. SCHWABE The Bénard-Marangoni instability in small circular containers under microgravity : Experimental results. *Adv. Space Res.* **24**, 1347 (1999).
- [67] D. SCHWABE Marangoni instabilities in small circular containers under microgravity. *Exp. Fluids* **40**, 942 (2006).
- [68] L. E. SCRIVEN & C. V. STERNLING On cellular convection driven by surface-tension gradients : effect on mean surface tension and surface viscosity. *J. Fluid Mech.* **19**, 321 (1964).
- [69] L. A. SEGEL Distant side-walls cause slow amplitude modulation of cellular convection. *J. Fluid Mech.* **38**, 203 (1969).
- [70] D. SEMWOGERERE & M.F. SCHATZ Evolution of Hexagonal Patterns from Controlled Initial Conditions in a Bénard-Marangoni Convection Experiment. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 054501 (2002).
- [71] D. SEMWOGERERE & M. F. SCHATZ Secondary Instabilities of Hexagonal Patterns in a Bénard-Marangoni Convection Experiment. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 124502 (2004).
- [72] A. K. SEN & S. H. DAVIS Steady thermocapillary flows in two-dimensional slots. *J. Fluid Mech.* **121**, 163 (1982).
- [73] L. SHTILMAN ET G. SIVASHINSKY Hexagonal structure of large-scale Marangoni convection. *Physica D* **52**, 477 (1991).
- [74] G. I SIVASHINSKY Large cells in nonlinear Marangoni convection. *Physica D* **4**, 227 (1982)
- [75] K. A. SMITH On convective instability induced by surface tension gradients. *J. Fluid Mech.* **24**, 401 (1966).
- [76] O. TESCHKE, M.U. KLEINKE & M.A. TENAN Surface tension-induced convection as a particle aggregation mechanism. *J. Coll. Int. Sci.* **151**, 477 (1992).
- [77] S. VANHOOK, M. SCHATZ, W. MCCORMICK, J. SWIFT & H. L. SWINNEY Long-wavelength instability in surface-tension-driven Bénard convection. *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4397 (1995).
- [78] S. VANHOOK, M. SCHATZ, J. SWIFT, W. MCCORMICK & H. L. SWINNEY Long-wavelength surface-tension-driven Benard convection : experiment and theory. *J. Fluid Mech.* **345**, 45 (1997).

- [79] A. Vidal, & A. Acrivos Nature of neutral state in surface tension driven Bénard convection. *Phys. Fluids* **9**, 123, No 3, 615 (1966).
- [80] P. WEIDMAN, H. LINDE & M.G. VELARDE Evidence for solitary wave behavior in Marangoni-Benard convection. *Phys. Fluids* **4**, 921 (1992).
- [81] K. H. WINTERS, T. PLESSER & K. A. CLIFFE, The onset of convection in a finite container due to surface tension and buoyancy. *Physica D* **29**, 387 (1988).
- [82] Y. N. Young & H. Riecke Mean flow in hexagonal convection : stability and non-linear dynamics. *Physica D* **163**, 166 (2002).
- [83] A. A. ZAMAN & R. NARAYANAN Interfacial and buoyancy-driven convection. The effect of geometry and comparison with experiments. *J. Colloid Interf. Sci.* **179**, 151 (1996).



# Chapitre 3

## Méthodes numériques

Le choix d'une méthode numérique de discrétisation des équations est dépendant d'un certains nombres de contraintes liées au problème physique que l'on souhaite approximer et à la méthodologie par laquelle on se propose de l'étudier. Cette dernière contrainte est la plus forte dans notre cas.

L'approche que nous avons retenue pour étudier l'instabilité de Marangoni-Bénard repose sur l'établissement de diagrammes de bifurcation par une méthode de continuation. On peut comparer ces diagrammes à des cartes d'évolution des solutions avec l'un des paramètres du système. Ces diagrammes mettent en évidence les mécanismes non-linéaires par lesquels une solution est stable ou instable et permettent, dans une certaine mesure, d'identifier les gammes de paramètres dans lesquelles apparaît une multiplicité de solutions. La méthode de calcul des solutions est une méthode de point fixe et dans notre cas une méthode de Newton. Elle requiert en particulier d'inverser de grands systèmes linéaires mettant en jeu en terme d'inconnus, l'ensemble des champs discrétisés. Du fait de leur taille, leur inversion est l'un des points les plus difficiles ce qui nous a conduit à choisir des méthodes spectrales de discrétisation. Celles-ci offrent, à nombre égal de noeuds et dans des domaines réguliers, une précision bien supérieure aux méthodes aux différences finies, volumes finis ou éléments finis ce qui nous permet de travailler avec un nombre modéré d'inconnues, un point capital dans notre approche. En contrepartie, les matrices mises en jeu dans la discrétisation des opérateurs de dérivation sont pleines et l'évaluation de l'action de la Jacobienne peut conduire, outre à des systèmes mal conditionnés, à des systèmes dont l'évaluation de l'action sur un vecteur est coûteuse.

Dans ce contexte, nous avons choisi une méthode de discrétisation aux éléments spectraux. Flexibles, ces méthodes permettent d'aborder l'étude de géométries complexes et dans notre cas, d'étudier des problèmes dans des cylindres à base circulaire ou elliptique.

Le chapitre expose dans un premier temps la discrétisation temporelle des équations de conservation. Elle est suivie d'un exposé de la discrétisation spatiale du problème où l'accent est mis sur l'inversion de l'opérateur de Helmholtz, principale source de temps de calcul. L'exposé de la méthode de continuation termine la présentation.

## 3.1 Discrétisation en temps des équations de conservation

### 3.1.1 Introduction

Le système d'équation a été présenté au chapitre précédent et est formé des équations de Navier-stokes incompressibles tridimensionnelles et l'équation de conservation de l'énergie.

Une des principales difficultés dans l'approximation numérique des écoulements incompressibles est liée au couplage de la vitesse et de la pression au travers de l'équation traduisant l'incompressibilité. Pour approximer numériquement ces écoulements, on distingue usuellement deux approches conduisant chacune à un découplage de ces deux champs. Dans la première, les équations sont d'abord discrétisées en temps et en espace préalablement à un découplage approximatif ou exact. Cette approche dite algébrique ne nécessite pas d'introduire de conditions aux limites pour la pression, le découplage s'effectuant par manipulations et substitutions sur le système algébrique (méthode d'Uzawa). Par opposition, dans la seconde approche dite continue, les discrétisations spatiales et éventuellement temporelles sont menées une fois le découplage accompli. On obtient deux équations liées, l'une sur la pression l'autre sur la vitesse, mais que l'on peut résoudre successivement. L'équation sur la pression est en général un problème de type Poisson mal posé car comme le système initial, il n'est pas muni de conditions aux limites *naturelles*. L'ordre dans lequel sont traitées les équations sur la pression et sur la vitesse et la manière dont sont construites les conditions aux limites sur la pression permettent de distinguer deux approches : (i) les méthodes de correction de pression parmi lesquelles les méthodes de Chorin [8], de Goda [13, 39] et de Timmermans [25, 35] pour lesquelles l'équation sur la pression est traitée postérieurement à celle sur la vitesse, (ii) les méthodes de correction de vitesse parmi lesquelles la méthode dite KIO due à Karniadakis, Israeli et Orszag [22] et pour lesquelles la pression est évaluée avant la vitesse.

Au coeur des différences significatives qu'il existe entre les méthodes de correction de vitesse et de correction de pression, on retrouve le compromis, qui est le prix du découplage, entre vérifier les conditions aux limites sur la vitesse et vérifier la contrainte d'incompressibilité [17]. Avec les méthodes de correction de pression, la vitesse ne satisfait pas toutes les conditions aux limites du problème initial (le système n'aboutit qu'à vérifier une condition sur la vitesse normale) mais elle vérifie numériquement la condition d'incompressibilité ( $\text{div } \mathbf{u} = 0$ ). En revanche, avec les méthodes de correction en vitesse, les conditions aux limites sur la vitesse sont numériquement bien vérifiées mais pas la condition d'incompressibilité. Pour une analyse plus approfondie de ces méthodes, on pourra se reporter aux références [3, 16, 17, 18, 23, 29]. La méthode que nous avons utilisée est la méthode de correction de vitesse KIO. Il s'agit d'une famille de méthode qui peut être utilisée aux ordres 1, 2 ou 3 en vitesse et pression, une différence significative avec les méthodes correction de pression pour lesquelles l'ordre en pression est en général plus faible que celui en vitesse [34].

Pour approximer les solutions de notre système, une itération en temps est organisée en trois étapes avec dans un premier temps le calcul du champ de température  $T$ , celui du champ de concentration  $C$  (dans le cas des problèmes avec effet Soret) et pour finir, celui des champs de vitesse et de pression  $(\mathbf{u}, p)$ .

Dans la suite, pour une quantité  $a(x, y, z, t)$  on notera  $a^{(n)} \equiv a^{(n)}(x, y, z)$  son approxi-

mation à l'instant  $t_n = n\Delta t$ . La discrétisation du terme instationnaire sera effectuée par un schéma d'Euler retardé d'ordre  $r$  que l'on notera :

$$\left(\frac{\partial a}{\partial t}\right)^{(n)} \approx \frac{1}{\Delta t} \sum_{i=0}^r \alpha_i a^{(n-i)}. \quad (3.1)$$

D'autres termes et notamment les termes non-linéaires seront extrapolés à l'instant  $t_n$  par un schéma d'ordre  $q$  ce que l'on notera :

$$a^{(n)} \approx [a]_q^{(n)} = \sum_{i=1}^q \beta_i a^{(n-i)}. \quad (3.2)$$

Les coefficients  $\alpha_i$  et  $\beta_i$  s'obtiennent facilement par développements en série de Taylor. Ils sont consignés dans la référence [22].

### 3.1.2 Discrétisation temporelle des équations de conservation de l'énergie et de la fraction massique

Les équations de conservation l'énergie et de conservation des espèces chimiques sont résolues en deux étapes imbriquées par une méthode à pas fractionnaires. La discrétisation de l'équation de conservation de l'énergie s'écrit :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial t}\right)^{(n)} = -Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) T]_q^{(n)} + \frac{1}{Pr} \nabla^2 T^{(n)}, \quad (3.3)$$

équation à laquelle il faut adjoindre les conditions aux limites qui sont imposées lors de l'inversion du problème d'Helmholtz. L'équation se réécrit :

$$T^{(n)} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\alpha_0 Pr} \nabla^2\right)^{-1} \left(-\sum_{i=1}^r \frac{\alpha_i}{\alpha_0} T^{(n-i)} + Ma \frac{\Delta t}{\alpha_0} [(\mathbf{u} \cdot \nabla) T]_q^{(n)}\right). \quad (3.4)$$

Pour l'étude de l'instabilité de Marangoni-Bénard avec effet Soret, il faut résoudre une équation supplémentaire portant sur la concentration qui s'approxime de manière similaire à celle sur  $T$  :

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)^{(n)} = -Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) C]_q^{(n)} + \frac{1}{Sc} (\nabla^2 C^{(n)} - \nabla^2 T^{(n)}). \quad (3.5)$$

Cette équation étant évaluée après celle sur  $T$ , la quantité  $T^{(n)}$  est connue. De la même manière, les conditions aux limites sont imposées lors de l'inversion du problème de Helmholtz :

$$C^{(n)} = \left(1 - \frac{\Delta t}{\alpha_0 Sc} \nabla^2\right)^{-1} \left(-\sum_{i=1}^r \frac{\alpha_i}{\alpha_0} C^{(n-i)} + Ma \frac{\Delta t}{\alpha_0} [(\mathbf{u} \cdot \nabla) C]_q^{(n)} - \frac{\Delta t}{\alpha_0 Sc} \nabla^2 T^{(n)}\right). \quad (3.6)$$

### 3.1.3 Schéma de discrétisation de KIO

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode de splitting proposée par Karniadakis *et al.* [22] pour résoudre les équations de Navier-Stokes incompressibles. De la même manière que pour les équations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques, la partie diffusive est traitée de manière implicite :

$$\frac{1}{\Delta t} \sum_{i=0}^q \alpha_i \mathbf{u}^{(n-i)} = -Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_q^{(n)} - \nabla p^{(n)} + \nabla^2 \mathbf{u}^{(n)}. \quad (3.7)$$

Un pas de temps se décompose en deux sous-étapes correspondant respectivement à une étape de projection et une étape de correction dans laquelle sont pris en compte les effets visqueux. La première étape permet de calculer une prédiction du champ de vitesse  $\mathbf{u}^*$  et du champ de pression  $p^{(n)}$  telle que :

$$\frac{\alpha_0}{\Delta t} \mathbf{u}^* + \nabla p^{(n)} = -\frac{1}{\Delta t} \sum_{i=1}^q \alpha_i \mathbf{u}^{(n-i)} - Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_q^{(n)} + \nabla^2 [\mathbf{u}]_s^{(n)}, \quad (3.8)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u}^* = 0. \quad (3.9)$$

La seconde étape corrige la vitesse  $\mathbf{u}^*$  en prenant en compte les termes visqueux suivant :

$$\frac{\alpha_0}{\Delta t} \mathbf{u}^{(n)} - \nabla^2 \mathbf{u}^{(n)} = \frac{\alpha_0}{\Delta t} \mathbf{u}^* - \nabla^2 [\mathbf{u}]_s^{(n)}. \quad (3.10)$$

Dans la pratique, l'étape de projection est résolue en prenant la divergence de l'équation (3.8) à laquelle on adjoint la condition aux limites issue de  $\mathbf{u}^* \cdot \mathbf{n} = 0$  (dans notre problème). L'équation à résoudre permettant d'obtenir  $p^{(n)}$  s'écrit :

$$\nabla^2 p^{(n)} = \nabla \cdot \left( -\frac{1}{\Delta t} \sum_{i=1}^q \alpha_i \mathbf{u}^{(n-i)} - Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_q^{(n)} + \nabla^2 [\mathbf{u}]_s^{(n)} \right), \quad (3.11)$$

avec la condition à la limite de Neuman :

$$\frac{\partial p^{(n)}}{\partial n} = \left( -Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_q^{(n)} + \nabla^2 [\mathbf{u}]_s^{(n)} \right) \cdot \mathbf{n}, \quad (3.12)$$

où l'on a tenu compte de l'hypothèse  $\partial_t(\mathbf{u}^{(n-i)} \cdot \mathbf{n}) = 0$ . Dans la forme proposée par Karniadakis *et al.*, la condition à la limite sur la pression prend implicitement en compte l'incompressibilité (théorique) du champ de vitesse et s'écrit sous la forme rotationnelle :

$$\frac{\partial p^{(n)}}{\partial n} = \left( -Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_q^{(n)} - [\nabla \times \nabla \times \mathbf{u}]_s^{(n)} \right) \cdot \mathbf{n}. \quad (3.13)$$

On peut faire disparaître le terme  $\nabla^2 [\mathbf{u}]_s^{(n)}$  en sommant les équations des deux étapes (3.8) et (3.10). Conformément à l'écriture proposée dans la référence [22], un pas en temps se scinde alors en trois étapes :

- la première étape donne une prédiction de la vitesse  $\hat{\mathbf{u}}$  :

$$\frac{1}{\Delta t} \left( \hat{\mathbf{u}} + \sum_{i=1}^q \alpha_i \mathbf{u}^{(n-i)} \right) = -Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_q^{(n)}. \quad (3.14)$$

- la deuxième étape permet le calcul de la pression  $p^{(n)}$  :

$$\frac{1}{\Delta t} \left( \hat{\mathbf{u}} - \hat{\mathbf{u}} \right) = -\nabla p^{(n)}, \quad (3.15)$$

avec la contrainte :

$$\nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} = 0. \quad (3.16)$$

Ceci amène à inverser le problème de Poisson :

$$\nabla^2 p^{(n)} = \nabla \cdot \left( \frac{\hat{\mathbf{u}}}{\Delta t} \right), \quad (3.17)$$

muni des conditions aux limites de type Neuman pour la pression [22] :

$$\frac{\partial p^{(n)}}{\partial n} = \left( -Ma [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_q^{(n)} - [\nabla \times \nabla \times \mathbf{u}]_s^{(n)} \right) \cdot \mathbf{n}. \quad (3.18)$$

- La dernière étape conduit à un problème d'Helmholtz sur  $\mathbf{u}^{(n)}$  :

$$\frac{\alpha_0}{\Delta t} \left( \mathbf{u}^{(n)} - \hat{\mathbf{u}} \right) = \nabla^2 \mathbf{u}^{(n)}, \quad (3.19)$$

muni des conditions aux limites physiques sur la vitesse.

On notera qu'à l'issue du découplage et contrairement aux méthodes de correction de pression, la vitesse ne vérifie pas la condition d'incompressibilité mais vérifie toutes les conditions aux limites du problème posé. Avec ces méthodes, les problèmes sont bien posés dans des espaces d'approximation de degré égal pour la pression et la vitesse (pas de modes parasites [21]) ce qui facilite considérablement leur mise en oeuvre.

Cette méthode peut être mise en oeuvre avec  $q = r = 1, 2$  ou  $3$  des ordres effectivement observés par Karniadakis *et al.* [22]. Dans la suite, les solutions stationnaires seront calculées par un schéma d'ordre 1 alors que pour le calcul des solutions instationnaires un schéma d'ordre 2 ou 3, sera préféré. Cette discrétisation temporelle entraîne que les problèmes à résoudre à chaque pas de temps sont elliptiques, de type Poisson ou Helmholtz.

## 3.2 Discrétisation spatiale et inversion de l'opérateur de Helmholtz

La discrétisation spatiale du problème repose sur une méthode spectrale d'ordre élevé. Comparées aux méthodes éléments finis, différences finies ou volumes finis, ces méthodes offrent certains avantages décisifs dans les problèmes que nous allons étudier et la manière dont nous allons le faire. Le premier avantage est leur précision qui à nombre de noeuds égal, est supérieure aux autres méthodes (leur caractéristique majeure est d'ailleurs la convergence exponentielle avec le nombre de noeud de la représentation spectrale vers la fonction qu'elle représente). Il s'agit d'un avantage capital dans les méthodes de continuation que nous allons exploiter par la suite qui amènent à inverser des systèmes linéaires dont les dimensions caractéristiques sont égales au nombre de champs que multiplie le

nombre de degré de liberté. Le second avantage est que ces méthodes souffrent peu d'effets de diffusion numérique, un effet déplaisant particulièrement dans l'étude des instabilités. Sur la discrétisation à proprement parler, on pourra se référer aux ouvrages de Canuto *et al.* [7], Funaro [12], Bernardi et Maday [5], Gottlieb & Orszag [15] et Azaiez *et al.* [2].

Les méthodes spectrales sont assez "récentes" tout du moins leur usage en mécanique des fluides numérique. Elles sont bien documentées en particulier dans les ouvrages de Canuto *et al.* [6] et Deville *et al.* [10]. Dans ce contexte, la méthode utilisée dans ce travail est une méthode aux éléments spectraux développée spécifiquement pour cette étude. Elle est similaire à celle exploitée par Touihri *et al.* [36] dans l'étude de l'instabilité de Rayleigh-Bénard bien que la mise en place soit différente. Cette approche consiste à fractionner le domaine d'étude en macro-éléments sur lesquels est conduite une approximation spectrale de la solution. Introduite par Patera [30] et Ronquist [31], elle bénéficie à la fois de la flexibilité des méthodes aux éléments finis pour aborder des géométries compliquées et de la précision des méthodes spectrales.

Dans la suite on présentera dans un premier temps ces méthodes sur un élément cubique, puis sur un domaine déformé et pour finir sur un domaine multi-éléments formant la géométrie cylindrique de notre étude.

### 3.2.1 Inversion du laplacien sur un cube

Pour introduire ces méthodes, nous nous intéressons au problème de Poisson défini dans un élément cubique  $\Omega_r = [-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$  et muni de conditions aux limites de Dirichlet homogène ( $u = 0$  sur le bord  $\partial\Omega_r$  du domaine). Le problème s'écrit :

$$\begin{cases} -\nabla^2 u = f & \text{dans } \Omega_r, \\ u \in H_0^1(\Omega_r), \end{cases} \quad (3.20)$$

où  $H_0^1(\Omega_r)$  est un espace de Sobolev d'ordre 1 sur  $\Omega_r$  dont les éléments sont nuls sur la frontière. La formulation variationnelle ou faible du problème consiste à trouver  $u \in H_0^1(\Omega_r)$  tel que pour tout  $v \in H_0^1(\Omega_r)$  soit vérifiée :

$$\int_{\Omega_r} \nabla u \cdot \nabla v \, d\Omega_r = \int_{\Omega_r} f v \, d\Omega_r. \quad (3.21)$$

Dans la suite de ce chapitre, nous utiliserons cette géométrie comme élément de référence, le domaine physique pouvant être différent. Le problème du laplacien sera ramené à cet élément de référence dans lequel il sera résolu. Pour cela, deux systèmes de coordonnées seront utilisés, l'un noté  $(x, y, z)$  et associé au domaine physique noté  $\Omega$  et l'autre noté  $(\eta, \zeta, \gamma)$  associé au domaine de référence  $\Omega_r = [-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$ . Dans ce paragraphe, nous présentons le problème sur un domaine  $\Omega_r = \Omega$  et cette distinction n'est pas nécessaire. Nous utiliserons les coordonnées  $(\eta, \zeta, \gamma)$ .

On introduit les ensembles  $X = Y \cap H_0^1(\Omega_r)$  où  $Y$  est l'ensemble des fonctions  $w$  telles que  $w$  soit dans l'espace  $\mathbb{P}_{N_x, N_y, N_z}(\Omega_r)$  des fonctions polynômiales de degré inférieur ou égal à respectivement  $N_x$ ,  $N_y$  et  $N_z$  dans les directions  $\eta$ ,  $\zeta$  et  $\gamma$ . Le problème discret consiste à chercher une approximation  $u_N$  de  $u$  dans  $X$  telle que quelque soit  $v_N$  dans  $X$  on ait :

$$\int_{\Omega_r} \nabla u_N \cdot \nabla v_N \, d\Omega_r = \int_{\Omega_r} f v_N \, d\Omega_r. \quad (3.22)$$

L'inconnue  $u_N$  est cherché sous la forme de produits tensoriels de fonctions polynômiales :

$$u_N(\eta, \zeta, \gamma) = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} u_{ijk} h_i^\eta(\eta) h_j^\zeta(\zeta) h_k^\gamma(\gamma), \quad (3.23)$$

où  $h_i^\eta(\eta)$  est le  $i$ -ème interpolant de Lagrange dans la direction  $\eta$  i.e.  $h_i^\eta$  est un polynôme de degré  $N_x$  vérifiant  $h_i^\eta(\eta_l) = \delta_{il}$  où  $\eta_l$  est un point de Gauss-Lobatto-Legendre. Les polynômes  $h_j^\zeta(\zeta)$  et  $h_k^\gamma(\gamma)$  sont définis de manière identique. On omettra dans la suite l'indice  $N$  pour alléger la notation étant entendu que l'on s'intéresse maintenant au problème discret. Les intégrales de la relation (3.22) sont approchées par une formule d'intégration discrète dont la forme générale pour une fonction quelconque  $\phi(\eta, \zeta, \gamma)$  de  $\Omega_r$  est :

$$\int_{\Omega_r} \phi(\eta, \zeta, \gamma) d\Omega_r = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} \phi(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) \rho_i^\eta \rho_j^\zeta \rho_k^\gamma + e, \quad (3.24)$$

où  $e$  est l'erreur d'approximation de l'intégrale par le premier terme du membre de droite et  $\rho_i^\eta$ ,  $\rho_j^\zeta$  et  $\rho_k^\gamma$  sont les poids de Gauss-Lobatto-Legendre. Cette formule est exacte ( $e = 0$ ) si  $\phi(\eta, \zeta, \gamma)$  est un polynôme en  $\eta$ ,  $\zeta$ ,  $\gamma$  de degré inférieur ou égal à  $2N_x + 1$ ,  $2N_y + 1$  et  $2N_z + 1$  respectivement dans les directions  $\eta$ ,  $\zeta$  et  $\gamma$ .

En accord avec la méthode de Galerkin, les fonctions tests  $v$  sont choisies de la forme  $h_i^\eta(\eta) h_j^\zeta(\zeta) h_k^\gamma(\gamma)$ . Le membre de gauche de la relation (3.22) noté  $(\nabla u, \nabla v)$  est approximé par :

$$(\nabla u, \nabla v) \approx (\nabla u, \nabla v)_h \equiv \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} \nabla u(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) \cdot \nabla v(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) \rho_i^\eta \rho_j^\zeta \rho_k^\gamma. \quad (3.25)$$

La notation  $(\nabla u, \nabla v)$  fait référence au produit scalaire dans l'espace  $H_0^1(\Omega_r)$ . L'indice  $h$  fait référence au choix de  $(N_x, N_y, N_z)$ . L'évaluation des gradients est obtenue par dérivation des polynômes de Lagrange et amène à définir des matrices de dérivation  $D^\eta$ ,  $D^\zeta$  et  $D^\gamma$  dans les directions  $\eta$ ,  $\zeta$  et  $\gamma$  dont le terme général est par exemple pour la matrice  $D^\eta$  de dimension  $N_x + 1 \times N_x + 1$  :

$$D_{ij}^\eta = \frac{dh_j^\eta}{d\eta}(\eta_i) \quad \text{pour } 0 \leq i, j \leq N_x. \quad (3.26)$$

Le membre de droite de la relation (3.22) est approximé par :

$$(f, v) \approx (f, v)_h \equiv \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} f(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) v(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) \rho_i^\eta \rho_j^\zeta \rho_k^\gamma. \quad (3.27)$$

Dans le cas présent de la géométrie cubique, il n'y a pas d'erreur numérique commise sur l'évaluation du membre de gauche de (3.22), le produit  $\nabla u \cdot \nabla v$  étant de degré  $2N_x - 2$ ,  $2N_y - 2$  et  $2N_z - 2$  dans les directions  $\eta$ ,  $\zeta$  et  $\gamma$ . En revanche, la fonction  $f$  n'étant pas nécessairement polynomiale, l'évaluation du membre de droite est approchée ( $e \neq 0$ ).

A cette étape, le problème est posé sous la forme algébrique suivante :

$$AU = F,$$

où  $U$  est le vecteur associé aux inconnues  $u_{ijk}$  avec  $(i = 0, \dots, N_x)$ ,  $(j = 0, \dots, N_y)$ ,  $(k = 0, \dots, N_z)$  et de dimension  $N_{Tot}$  avec  $N_{Tot} = (N_x + 1)(N_y + 1)(N_z + 1)$ . Il est clair que compte tenu des conditions aux limites de Dirichlet, le nombre d'inconnues peut être diminué des points du bord  $\partial\Omega_r$  du domaine  $\Omega_r$ . Cependant, et parce que cette réduction alourdit les écritures, nous garderons les sommes en incluant ces points du bord. La matrice  $A$  est de dimensions  $N_{Tot} \times N_{Tot}$  et le vecteur  $F$  de dimension  $N_{Tot}$ . Leur formes sont détaillées dans le livre de Deville *et al.* [10]. On notera que la résolution peut être conduite par diagonalisation successive, le problème étant entièrement tensorisable [27].

### 3.2.2 Formulation du problème discret sur un élément courbe

De la même manière que pour le cas d'un domaine cubique, on présente ici la discrétisation du problème de Poisson muni de conditions aux limites de Dirichlet homogènes sur un élément courbe. Le domaine  $\Omega$  est formé d'un morceau du cylindre (figure 3.1). Le problème ( $P$ ) est donné par le système (3.20) et sa formulation variationnelle consiste à trouver  $u \in H_0^1(\Omega)$  tel que pour tout  $v \in H_0^1(\Omega)$  soit vérifiée la relation (3.21).

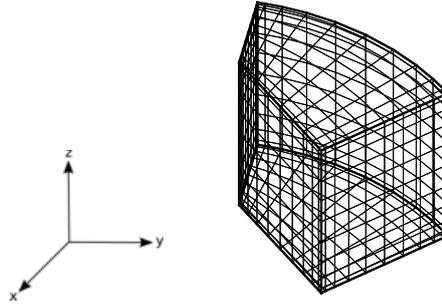


FIG. 3.1 – Domaine déformé  $\Omega$  correspondant à un élément spectral du cylindre. La côte  $z$  varie entre 0 et 1.

On définit un élément de référence noté  $\Omega_r = [-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$  et on note  $\eta, \zeta, \gamma$  les coordonnées d'un point dans cet élément. Dans le cas général d'un élément courbe, la transformation  $\mathcal{F}$  de l'élément de référence  $\Omega_r$  vers l'élément courbe  $\Omega$  est un difféomorphisme. Pour construire  $\mathcal{F}$ , nous avons suivi la méthode proposée par Gordon et Hall [14]. Cette méthode, présentée par les auteurs dans le cas bidimensionnel, permet de construire l'application  $\mathcal{F}$  à partir des paramétrisations des 4 côtés courbes formant la frontière  $\partial\Omega$  de  $\Omega$ . Bien que décrite pour un problème bidimensionnel, cette méthode est bien adaptée aux éléments que nous avons à traiter (figure 3.1) car la côte  $z$  des éléments du cylindre ( $z \in [0, 1]$  si  $z$  est la coordonnée cartésienne d'un point du cylindre dans la direction verticale) et celle  $\gamma$  de l'élément de référence ( $\gamma \in [-1, 1]$ ) ne diffèrent que d'un facteur multiplicatif : si  $(x, y, z)$  est un point de l'élément  $\Omega$  et  $(\eta, \zeta, \gamma) \in \Omega_r$  alors :

$$\begin{cases} x = g_1(\eta, \zeta) \\ y = g_2(\eta, \zeta) \\ z = 0.5 + \gamma/2 \end{cases}, \quad (3.28)$$

où  $g_1$  et  $g_2$  sont deux fonctions injectives suffisamment régulières. Les fonctions  $g_1$  et  $g_2$  sont obtenues à partir de 4 fonctions  $\mathbf{f}_i$  ( $i = 1, \dots, 4$ ) de  $[-1, 1]$  dans  $\mathbb{R}^2$  garantissant que les 4 angles successifs du contour du domaine  $\Omega$  dans le plan  $(x, y)$  se transforment bien en les 4 angles successifs du contour du domaine  $\Omega_r$  dans le plan  $(\eta, \zeta)$ . En notant  $\mathbf{p}_i \in \mathbb{R}^2$  ( $i = 1, \dots, 4$ ) les coordonnées  $(x, y)$  des angles du contour du domaine  $\Omega$  dans le plan  $(x, y)$ , cette propriété se traduit par les contraintes :

$$\mathbf{f}_1(-1) = \mathbf{f}_2(1) = \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{f}_2(-1) = \mathbf{f}_3(1) = \mathbf{p}_3, \quad \mathbf{f}_3(-1) = \mathbf{f}_4(1) = \mathbf{p}_4, \quad \mathbf{f}_4(-1) = \mathbf{f}_1(1) = \mathbf{p}_1.$$

La transformation  $\mathcal{F}(r, s)$  de  $\mathbb{R}^2$  dans  $\mathbb{R}^2$  s'écrit [14] :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(r, s) = & \frac{1+s}{2}\mathbf{f}_3(r) + \frac{1-s}{2}\mathbf{f}_1(r) + \frac{1+r}{2} \left( \mathbf{f}_4(s) - \frac{1+s}{2}\mathbf{f}_4(1) - \frac{1-s}{2}\mathbf{f}_4(-1) \right) + \\ & \frac{1-r}{2} \left( \mathbf{f}_2(s) - \frac{1+s}{2}\mathbf{f}_2(1) - \frac{1-s}{2}\mathbf{f}_2(-1) \right), \end{aligned} \quad (3.29)$$

où  $(r, s) = (\eta, \zeta)$  ou  $(r, s) = (\zeta, \eta)$ .

On notera que dans les cas qui nous intéressent, l'expression analytique des côtés courbes du domaine  $\Omega$  dans le plan  $(x, y)$  est connue. Il s'agit suivant les côtés de segments de droite ou d'une fraction du contour d'un cercle ou d'une ellipse. Les fonctions  $\mathbf{f}_i$  ( $i = 1, \dots, 4$ ) sont donc analytiquement connues ainsi que la matrice  $J_{\mathcal{F}}$  et son déterminant. Il n'y a pas d'erreur numérique liée à l'évaluation de ces fonctions ; En d'autres termes, la géométrie du domaine n'est pas interpolée par des fonctions polynomiales. On introduit les ensembles  $X = Y \cap H_0^1(\Omega)$  où  $Y$  est l'ensemble des fonctions  $w$  telles que  $w \circ \mathcal{F}$  soit dans l'espace  $\mathbb{P}_{N_x, N_y, N_z}(\Omega_r)$  des fonctions polynomiales de degré inférieur ou égal à respectivement  $N_x$ ,  $N_y$  et  $N_z$  dans les directions  $\eta$ ,  $\zeta$  et  $\gamma$ . Le problème discret consiste à chercher une approximation  $u_N$  de  $u$  dans  $X$  telle que quelque soit  $v_N$  dans  $X$  on ait :

$$\int_{\Omega} \nabla u_N \cdot \nabla v_N \, d\Omega = \int_{\Omega} f v_N \, d\Omega. \quad (3.30)$$

On omettra par la suite l'indice  $N$  pour alléger les notations étant entendu que l'on ne discute ici que le problème discret. Chacune des intégrales de (3.30) peut être réécrite dans l'élément de référence à l'aide de l'application  $\mathcal{F}$ . Le membre de gauche devient :

$$(\nabla u, \nabla v) \equiv \int_{\Omega} \nabla u(x, y, z) \cdot \nabla v(x, y, z) \, d\Omega = \int_{\Omega_r} \tilde{\nabla} u(\eta, \zeta, \gamma) \cdot \tilde{\nabla} v(\eta, \zeta, \gamma) |J_{\mathcal{F}}(\eta, \zeta, \gamma)| \, d\Omega_r, \quad (3.31)$$

où  $|J_{\mathcal{F}}|$  est le déterminant de la Jacobienne associée à la transformation  $\mathcal{F}$  donnée par :

$$J_{\mathcal{F}}(\eta, \zeta, \gamma) = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial x}{\partial \gamma} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \gamma} \\ \frac{\partial z}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \gamma} \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

L'opérateur  $\tilde{\nabla}$  est obtenu par différentiations partielles de l'opérateur  $\nabla$  ce qui donne :

$$\tilde{\nabla} = \left( \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial \gamma}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) \mathbf{e}_1 + \left( \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial \zeta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial \gamma}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) \mathbf{e}_2 + \left( \frac{\partial \eta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial \zeta}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial \gamma}{\partial z} \frac{\partial}{\partial \gamma} \right) \mathbf{e}_3,$$

où  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$  forment une base orthonormée de  $\Omega_r$ . Dans la pratique, les termes mettant en jeu les dérivées de  $(\eta, \zeta, \gamma)$  par rapport aux variables  $(x, y, z)$  sont évalués par le calcul de l'inverse de la matrice  $J_{\mathcal{F}}$ . La même transformation appliquée au membre de droite donne :

$$(f, v) \equiv \int_{\Omega} f(x, y, z)v(x, y, z) d\Omega = \int_{\Omega_r} f(\eta, \zeta, \gamma)v(\eta, \zeta, \gamma)|J_{\mathcal{F}}(\eta, \zeta, \gamma)|d\Omega_r. \quad (3.33)$$

Comme précédemment dans le cas du domaine carré, l'inconnue  $u$  est développée en produits tensoriels de fonctions polynomiales :

$$u_N(\eta, \zeta, \gamma) = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} u_{ijk} h_i^\eta(\eta) h_j^\zeta(\zeta) h_k^\gamma(\gamma), \quad (3.34)$$

où  $h_i^\eta(\eta)$  est le  $i$ -ème interpolant de Lagrange dans la direction  $\eta$  i.e.  $h_i^\eta$  est un polynôme de degré  $N_x$  et  $h_i^\eta(\eta_l) = \delta_{il}$  où  $\eta_l$  est un point de Gauss-Lobatto-Legendre. Les fonctions tests  $v$  sont choisies sous la forme  $h_i^\eta(\eta) h_j^\zeta(\zeta) h_k^\gamma(\gamma)$ . Par la suite, chacune des intégrales de (3.30) est approchée par une formule d'intégration discrète de la forme :

$$(\tilde{\nabla} u, \tilde{\nabla} v) \approx (\tilde{\nabla} u, \tilde{\nabla} v)_h \equiv \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} \tilde{\nabla} u(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) \cdot \tilde{\nabla} v(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) |J_{\mathcal{F}}(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k)| \rho_i^\eta \rho_j^\zeta \rho_k^\gamma, \quad (3.35)$$

et l'approximation du membre de droite par :

$$(f, v) \approx (f, v)_h \equiv \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} f(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) v(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) |J_{\mathcal{F}}(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k)| \rho_i^\eta \rho_j^\zeta \rho_k^\gamma, \quad (3.36)$$

où  $\rho_i^\eta, \rho_j^\zeta, \rho_k^\gamma$  sont les poids de Gauss-Lobatto-Legendre. On note que dans le cas général d'un élément courbe, la transformation  $\mathcal{F}$  n'est pas une fonction affine comme c'est le cas dans la transformation d'un carré en rectangle. De fait, le déterminant de la Jacobienne n'est pas constant et l'on n'aura pas une formule d'intégration exacte. On notera également que les contraintes imposées sur les fonctions  $\mathbf{f}_i (i = 1, \dots, 4)$  ne rendent pas le choix de  $\mathcal{F}$  univoque. On choisit plutôt des transformations  $\mathcal{F}$  telles que les termes de la matrice  $J_{\mathcal{F}}$  soient de plus bas degré polynomial afin de minimiser la perte de précision produite par la présence de son déterminant dans les relations (3.35) et (3.36).

### 3.2.3 Résolution par diagonalisation partielle

Le problème discret consiste donc à trouver  $u$  dans  $X$  telle que quelque soit  $v$  dans  $X$  on ait :

$$(\tilde{\nabla} u, \tilde{\nabla} v)_h = (f, v)_h. \quad (3.37)$$

Afin de mettre en évidence la tensorisation dans la direction  $z$ , on introduit l'opérateur  $\nabla_p$  restriction de l'opérateur  $\tilde{\nabla}$  au plan  $(x, y)$ . Compte tenu de (3.28), cet opérateur vérifie :

$$\tilde{\nabla} = \nabla_p + c \frac{\partial}{\partial \gamma} \mathbf{e}_3,$$

avec  $c = 2$  et :

$$\nabla_p = \left( \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial \zeta}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \zeta} \right) \mathbf{e}_1 + \left( \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\partial \zeta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial \zeta} \right) \mathbf{e}_2.$$

On remarquera également que compte tenu de (3.28) :

$$|J_{\mathcal{F}}| = c \left| \begin{array}{cc} \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} \end{array} \right| \equiv c |J_p|, \quad (3.38)$$

où  $|J_p|$  est une fonction de  $(\eta, \zeta)$ . Posons pour simplifier  $v(\eta, \zeta, \gamma) = H_I(\eta, \zeta) h_k^\gamma(\gamma)$  avec  $H_I(\eta, \zeta) = h_i^\eta(\eta) h_j^\zeta(\zeta)$  où l'entier  $I$  exprime la renumérotation des produits  $h_i^\eta(\eta) h_j^\zeta(\zeta)$  selon  $I = 1 + i + j(N_x + 1)$ , avec  $i \in \{0, \dots, N_x\}$  et  $j \in \{0, \dots, N_y\}$ . De la même manière, on notera les approximations de  $u(\eta, \zeta, \gamma)$  et  $f(\eta, \zeta, \gamma)$  sous les formes :

$$u(\eta, \zeta, \gamma) = \sum_{M=1}^{N_p} \sum_{n=0}^{N_z} u_{Mn} H_M(\eta, \zeta) h_n^\gamma(\gamma), \quad f(\eta, \zeta, \gamma) = \sum_{M=1}^{N_p} \sum_{n=0}^{N_z} f_{Mn} H_M(\eta, \zeta) h_n^\gamma(\gamma),$$

où  $N_p = (N_x + 1)(N_y + 1)$ . L'égalité des intégrales (3.31) et (3.33) amène alors :

$$\begin{aligned} & \sum_{M=1}^{N_p} \sum_{n=0}^{N_z} u_{Mn} (\nabla_p H_M, \nabla_p H_I)_p (h_n^\gamma, h_k^\gamma)_\gamma + c^2 \sum_{M=1}^{N_p} \sum_{n=0}^{N_z} u_{Mn} (H_M, H_I)_p (\partial_\gamma h_n^\gamma, \partial_\gamma h_k^\gamma)_\gamma = \\ & \sum_{M=1}^{N_p} \sum_{n=0}^{N_z} f_{Mn} (H_M, H_I)_p (h_n^\gamma, h_k^\gamma)_\gamma \end{aligned} \quad (3.39)$$

où pour deux fonctions  $g_1, g_2$  de  $(\eta, \zeta)$  on a noté :

$$(g_1, g_2)_p = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} g_1(\eta_i, \zeta_j) g_2(\eta_i, \zeta_j) |J_p(\eta_i, \zeta_j)| \rho_i^\eta \rho_j^\zeta, \quad (3.40)$$

et pour deux fonctions  $g_1, g_2$  de  $\gamma$  :

$$(g_1, g_2)_\gamma = \sum_{l=0}^{N_z} g_1(\gamma_l) g_2(\gamma_l) \rho_l^\gamma. \quad (3.41)$$

En notant  $R_{IM}^p$  et  $M_{IM}^p$  les termes généraux des matrices de rigidité et de masse  $R_p$  et  $M_p$  de dimension  $N_p \times N_p$ , et  $R_{kn}^\gamma$  et  $M_{kn}^\gamma$  les termes généraux des matrices de rigidité et de masse  $R_\gamma$  et  $M_\gamma$  de dimension  $(N_z + 1) \times (N_z + 1)$  définis respectivement par :

$$R_{IM}^p = (\nabla_p H_M, \nabla_p H_I)_p, \quad M_{IM}^p = (H_M, H_I)_p, \quad (3.42)$$

et :

$$R_{kn}^\gamma = (\partial_\gamma h_n^\gamma, \partial_\gamma h_k^\gamma)_\gamma, \quad M_{kn}^\gamma = (h_n^\gamma, h_k^\gamma)_\gamma, \quad (3.43)$$

la relation (3.39) s'écrit sous la forme matricielle :

$$R_p U M_\gamma^t + M_p U R_\gamma^t = M_p F M_\gamma^t, \quad (3.44)$$

où  $U_{Ik} = u_{ijk}$  et  $F_{Ik} = f_{ijk}$ .

La résolution de ce système linéaire peut se faire par une méthode de diagonalisation successive. Cependant, pour des raisons qui deviendront claires dans la formulation du même problème en éléments spectraux, nous ne procéderons qu'à une diagonalisation partielle dans la direction  $\gamma$ . En multipliant à gauche et à droite par  $M_p^{-1}$  et  $(M_\gamma^{-1})^t$  respectivement, le système se réécrit sous la forme :

$$A_p U + U A_\gamma^t = F, \quad (3.45)$$

où  $A_p = M_p^{-1} R_p$  et  $A_\gamma = M_\gamma^{-1} R_\gamma$ . On note  $\Gamma$  la matrice diagonale formée des valeurs propres de la matrice symétrique  $A_\gamma$  de sorte que  $\Gamma = P^{-1} A_\gamma P$  où  $P$  est la matrice de passage dont les colonnes sont les vecteurs propres de  $A_\gamma$ . En introduisant cette expression dans la relation (3.45) il vient :

$$A_p U (P^t)^{-1} + U \Gamma (P^t)^{-1} = F (P^t)^{-1}. \quad (3.46)$$

Fixons  $k$  dans  $\{0, \dots, N_z\}$  et introduisons  $V_k = (U (P^t)^{-1})_k$  avec  $V_k \in \mathbb{R}^{N_p}$ . La relation ci-dessus signifie que  $V_k$  est solution du système linéaire :

$$(A_p + \lambda_k I) V_k = (F (P^t)^{-1})_k, \quad (3.47)$$

où  $\lambda_k$  est la  $k$ -ième valeur propre de  $A_\gamma$  et  $I$  est la matrice identité. Cette relation indique que la méthode de résolution procède plan par plan. Préalablement à l'inversion éventuellement répétitive du système, on calcule  $P$ ,  $P^{-1}$  et les  $N_z - 1$  matrices  $(A_p - \lambda_k I)^{-1}$ . La résolution procède en trois étapes :

1. Le membre de droite  $F$  est amené dans l'espace spectral dans la direction  $\gamma$  par  $\hat{F} = F (P^t)^{-1}$ .
2. Le système est ensuite inversé plan par plan par la relation  $V_k = (A_p + \lambda_k I)^{-1} \hat{F}_k$ .
3. L'expression de  $U$  est ensuite obtenue en revenant dans l'espace physique par  $U = V P^t$  où  $V$ .

On retiendra qu'à la différence d'un élément parallélépipédique, la diagonalisation dans les trois directions n'est pas possible dans ce cas car la jacobienne n'est pas constante, ses termes étant des fonctions de  $(\eta, \zeta)$ . L'extension de la méthode présentée ici à un problème de Helmholtz est immédiate. Si celui-ci s'écrit  $-\Delta u + \alpha u = f$  dans  $\Omega$ , l'expression (3.47) devient :

$$(A_p + (\lambda_k + \alpha) I) V_k = (F (P^t)^{-1})_k. \quad (3.48)$$

Enfin, dans le cas d'un problème de Helmholtz muni de conditions aux limites de Neuman, il apparaît dans le membre de droite une intégrale de frontière qu'il convient d'évaluer et de retrancher à  $F$ .

### 3.2.4 Application au cas des éléments spectraux

On considère ici le même problème de Poisson mais appliqué au cas d'un domaine  $\Omega$  formé de la réunion de deux sous-domaines courbes  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  (figure 3.2). On note  $\partial\Omega$

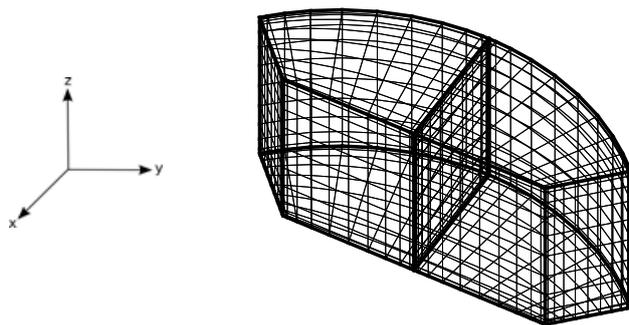


FIG. 3.2 – Domaine  $\Omega$  formé de la réunion de deux éléments spectraux issue du cylindre. La côte  $z$  varie entre 0 et 1.

la frontière extérieure au domaine  $\Omega$  le long de laquelle s'appliquent les conditions aux limites du problème. On introduit également  $\partial\Omega_{12}$  la section du plan vertical formant l'interface entre les deux éléments.

On suppose dans la suite que les points de l'interface  $\partial\Omega_{12}$  entre les éléments  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$  vérifient :

$$(x^{(1)}(\eta_{N_x}, \zeta_j), y^{(1)}(\eta_{N_x}, \zeta_j), z^{(1)}(\gamma_k)) = (x^{(2)}(\eta_0, \zeta_j), y^{(2)}(\eta_0, \zeta_j), z^{(2)}(\gamma_k)), \quad (3.49)$$

où  $(x^{(e)}(\eta, \zeta), y^{(e)}(\eta, \zeta), z^{(e)}(\gamma))$  avec  $e = 1, 2$  représentent les coordonnées d'un point de  $\Omega_e$  obtenu par la transformation  $\mathcal{F}_e$  d'un point de coordonnées  $(\eta, \zeta, \gamma)$  dans l'élément de référence  $\Omega_r$ . Dans ce cas, l'espace d'approximation conduisant au problème discret est l'ensemble des fonctions  $\{w \in Y \mid w = 0 \text{ sur } \partial\Omega \text{ et } w_1|_{\partial\Omega_{12}} = w_2|_{\partial\Omega_{12}}\}$  où  $w_k$  est la restriction de  $w$  à  $\Omega_k$ . Parce que l'intégrale sur le domaine  $\Omega$  est la somme des intégrales sur les domaines  $\Omega_1$  et  $\Omega_2$ , on obtient directement la réécriture du problème discret (3.37) :

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^2 \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} \tilde{\nabla} u_e(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) \cdot \tilde{\nabla} v_e(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) |J_e(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k)| \rho_i^\eta \rho_j^\zeta \rho_k^\gamma = \\ & \sum_{e=1}^2 \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} f_e(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) v_e(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k) |J_e(\eta_i, \zeta_j, \gamma_k)| \rho_i^\eta \rho_j^\zeta \rho_k^\gamma. \end{aligned} \quad (3.50)$$

La procédure conduite dans la section précédente est applicable ici. Parce que les coordonnées  $z^{(e)}(\gamma_k)$  ne dépendent pas de l'élément  $e$  considéré on obtient pour chaque plan d'indice  $k$  fixé :

$$V_k = L_k^{-1} (F(P^t)^{-1})_k \quad \text{avec} \quad L_k = \sum_{e=1}^2 (A_{e,p} + \lambda_k I), \quad (3.51)$$

où  $A_{e,p}$  est la matrice  $A_p$  associée à l'élément  $e$ . La somme écrite ci-dessus est une facilité de notation car les matrices  $A_{e,p}$  ne touchent pas les mêmes points à l'exception toutefois des points de l'interface où la somme est effective. C'est pour cette raison que les dimensions de la matrice  $L_k$  ne permettent pas directement le calcul de son inverse. Dans le cas général de plusieurs éléments spectraux, parce que les points de l'interface appartiennent

simultanément à au moins deux éléments spectraux, ses dimensions dépendent du découpage. Elles sont toutefois en ordre de grandeur égales à  $N_e N_x N_y \times N_e N_x N_y$  où  $N_e$  est le nombre d'éléments choisis. Dans l'exemple présenté ici de 2 éléments spectraux, ses dimensions sont  $n_L \times n_L$  avec  $n_L = 2(N_x + 1)(N_y + 1) - (N_y - 1)$  où  $2(N_x + 1)(N_y + 1)$  est le nombre de points dans chaque plan de côte  $\gamma_k$  et  $N_y - 1$  est le nombre de points précisément sur la frontière  $\partial\Omega_{12}$  en y excluant les points du bord où s'appliquent des conditions de Dirichlet (comme nous l'avions annoncé, par soucis de clarté, tous les points du bord sont inclus dans les inconnues en dépit que leur valeur soit connue).

L'inversion du système mettant en jeu  $L_k$  est conduite ici par une méthode de Schur que nous allons d'abord présenter dans le cas simple de 2 éléments. On note dans la suite  $n_I$  le nombre de points sur l'interface, le bord  $\partial\Omega$  étant exclu puisque s'y appliquent les conditions aux limites. On note respectivement  $n_1$  et  $n_2$  le nombre de points sur chaque plan de côte  $\gamma_k$  des éléments 1 et 2 en excluant les points de l'interface  $\partial\Omega_{12}$  mais en incluant ceux de  $\partial\Omega$ . Dans l'exemple traité il est clair que  $n_1 = n_2$  et  $n_I + n_1 + n_2 = n_L$ . Pour simplifier les notations, on omet l'indice  $k$  et on réécrit le système (3.51) à résoudre dans chaque plan  $k$  sous la forme :

$$L\mathbf{v} = \mathbf{b}, \quad (3.52)$$

où  $\mathbf{v} \equiv V_k$  et  $\mathbf{b} \equiv (F(P^t)^{-1})_k$ . Dans cette écriture,  $\mathbf{v}$  et  $\mathbf{b}$  sont des vecteurs de dimension  $n_L$  dont on a réordonné les indices pour isoler 3 sous-vecteurs :

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_I \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_I \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

où :

- $\mathbf{v}_e, \mathbf{b}_e \in \mathbb{R}^{n_e}$  ( $e = 1, 2$ ) représentent respectivement les restrictions de  $\mathbf{v}$  et  $\mathbf{b}$  aux indices des points de l'élément  $\Omega_e$  ( $e = 1, 2$ ) en excluant les indices associés aux points de l'interface,
- $\mathbf{v}_I, \mathbf{b}_I \in \mathbb{R}^{n_I}$  représentent respectivement les restrictions de  $\mathbf{v}$  et  $\mathbf{b}$  aux indices des points de l'interface  $\partial\Omega_{12}$ .

Dans l'écriture du système (3.52), les indices de la matrice  $L_k$  représentée par  $L$  ont également changé en accord avec le réordonnement des indices des vecteurs  $\mathbf{v}$  et  $\mathbf{b}$  représentant respectivement  $V_k$  et  $(F(P^t)^{-1})_k$ . Ce réordonnement fait apparaître une structure par blocs qui amène le système à s'écrire sous la forme :

$$\begin{pmatrix} L_{11} & 0 & L_{1I} \\ 0 & L_{22} & L_{2I} \\ L_{I1} & L_{I2} & L_{II} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \mathbf{v}_2 \\ \mathbf{v}_I \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \mathbf{b}_I \end{pmatrix}. \quad (3.54)$$

Cette structure et notamment la présence des blocs nuls vient de ce que l'évaluation de  $L\mathbf{v}$  en un point intérieur à un élément n'est couplée aux valeurs de l'élément adjacent qu'au travers de la valeur à l'interface. L'inversion du système par la méthode de Schur procède de la manière suivante : des deux premières lignes de la structure par bloc, on exprime  $\mathbf{v}_1$  et  $\mathbf{v}_2$  :

$$\mathbf{v}_1 = L_{11}^{-1} (\mathbf{b}_1 - L_{1I}\mathbf{v}_I), \quad \mathbf{v}_2 = L_{22}^{-1} (\mathbf{b}_2 - L_{2I}\mathbf{v}_I). \quad (3.55)$$

Introduites dans la dernière ligne, on obtient directement :

$$S \mathbf{v}_I = \mathbf{b}_S, \quad (3.56)$$

avec  $S$  la matrice de Schur définie par :

$$S \equiv (L_{II} - L_{I1}L_{11}^{-1}L_{1I} - L_{I2}L_{22}^{-1}L_{2I}), \quad \mathbf{b}_S = \mathbf{b}_I - L_{I1}L_{11}^{-1}\mathbf{b}_1 - L_{I2}L_{22}^{-1}\mathbf{b}_2. \quad (3.57)$$

Une fois  $\mathbf{v}_I$  calculé, on obtient  $\mathbf{v}_1$  et  $\mathbf{v}_2$  à l'aide de (3.55). Le calcul des matrices  $S$  associées à chaque plan  $k$  et de leur inverse est effectué préalablement à l'inversion éventuellement répétitive du laplacien. De la même manière, on calculera préalablement les matrices  $L_{11}^{-1}$ ,  $L_{22}^{-1}$  ainsi que  $L_{I1}L_{11}^{-1}$  et  $L_{I2}L_{22}^{-1}$ . L'inversion de ces matrices se fait par une méthode directe.

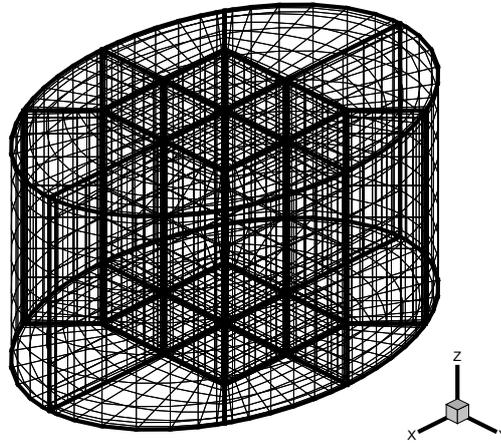


FIG. 3.3 – Exemple de maillage d'un cylindre à 12 éléments spectraux et à section transverse elliptique avec  $N_x = N_y = N_z = 8$ .

La méthode de résolution présentée ici pour deux éléments se généralise aisément au cas de  $N_e > 2$  éléments. Un exemple de maillage est présenté sur la figure 3.3 pour un cylindre à section transverse elliptique. Moyennant un découpage du domaine en éléments, les difficultés de mise en oeuvre relèvent essentiellement dans l'identification des points des interfaces et des contributions de chacun des éléments à ces points. Dans les géométries que nous avons utilisées, de 2 à 4 éléments contribuent à certains termes de la matrice  $L_{II}$  (figure 3.4). Sur cette figure les cercles pleins représentent un point appartenant à 3 éléments et les carrés un point appartenant à 4 éléments. En omettant les précalculs, le coût principal de l'inversion par cette méthode réside dans l'évaluation du produit  $S^{-1}\mathbf{b}_I$ . Pour les géométries cylindriques que nous avons discrétisées, nous avons maintenu  $N_x = N_y = N$ . Avec des conditions aux limites de Dirichlet sur les parois latérales, pour une discrétisation en 5 éléments spectraux (figure 3.4(a)), on obtient  $n_I = 8N - 4$  et pour 12 éléments spectraux (figure 3.4(b)) :  $n_I = 20N - 3$ . Le coût des évaluations de  $\mathbf{v}_e$  ( $e = 1, \dots, N_e$ ) est proportionnel à  $N_e N^4$  (car les matrices  $L_{ee}^{-1}$  sont de dimensions en ordre de grandeur égales à  $N^2 \times N^2$ ) et celui de l'évaluation de  $\mathbf{v}_I$  de l'ordre de  $n_I^2$ . Nous

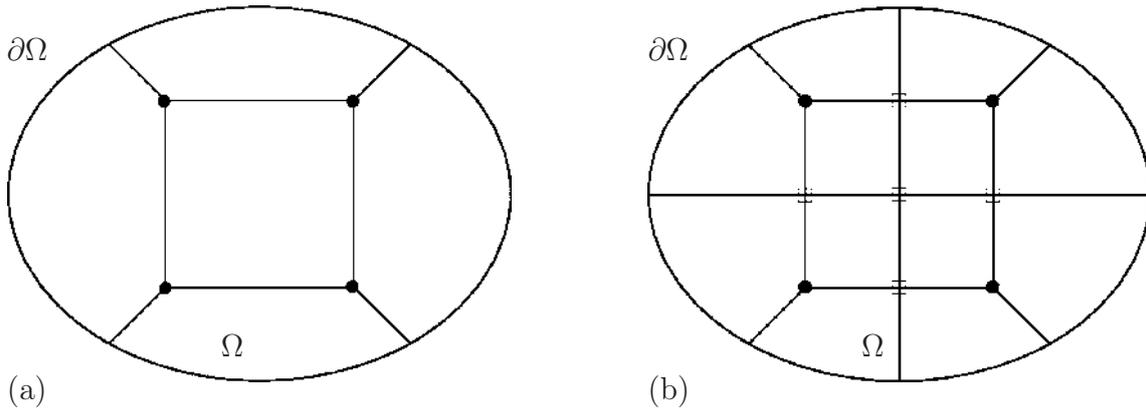


FIG. 3.4 – Discrétisation d’une section transverse d’un cylindre à base elliptique (a) 5 éléments, (b) 12 éléments. Les cercles pleins correspondent à la contribution de 3 éléments à ce point, les carrés de 4.

nous sommes limités à  $N$  de l’ordre de 10. On voit donc que dans le cas de 5 éléments spectraux, le coût des évaluations de  $\mathbf{v}_I$  et  $\mathbf{v}_e$  est du même ordre tandis que pour 12 éléments, c’est le coût de l’évaluation de  $\mathbf{v}_I$  qui domine.

### 3.3 Domaine rectangulaire avec des conditions aux limites périodiques

Le problème de Marangoni-Bénard avec effet Soret sera étudié dans une cavité rectangulaire contenue dans le plan  $(x, z)$  munie de conditions aux limites périodiques dans la direction  $x$ . De la même manière que pour la géométrie cylindrique, la solution du système d’équation est approximée par une méthode aux éléments spectraux et l’intégration en temps conduite par la méthode KIO [22].

Les rapports d’aspect  $\Gamma$  que nous étudierons sont des multiples entiers de la longueur d’onde critique du cas thermique pur i.e.  $\Gamma = n\lambda_c$  avec  $\lambda_c = 3.1$  et  $n \in \mathbb{N}$ . La discrétisation utilisée pour un rapport d’aspect  $\Gamma = 18.6$  est représentée figure 3.5. Une discrétisation en

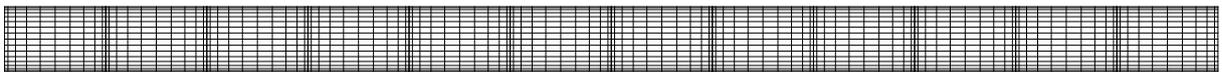


FIG. 3.5 – Discrétisation d’une cavité rectangulaire, les paramètres sont  $n = 6$ ,  $N_e = 12$ ,  $N_x = 10$  et  $N_z = 16$ .

$N_e > 1$  éléments spectraux à été préférée à une discrétisation réalisée sur un seul élément car le coût algorithmique y est plus faible. Une raison supplémentaire est que la méthode de Newton que nous exposons dans la section suivante y converge plus facilement. Nous reviendrons sur cette question par la suite.

La discrétisation des équations ne diffère pas de celle décrite dans le cas 3D précédent à ceci près que les éléments du domaine physique sont des rectangles que nous avons choisis tous de même taille. Nous garderons donc les mêmes conventions de notation :  $z = z(\gamma)$  représente l'extension verticale ( $z \in [0, 1]$ ) et  $x^{(e)} = x^{(e)}(\eta)$  l'extension horizontale ( $x \in [0, \Gamma]$ ) où  $e$  représente le numéro de l'élément. Avec cette structure en rectangle, le déterminant de la Jacobienne de la transformation  $\mathcal{F}$  est constant et le problème est tensorisé de sorte que l'opérateur  $\tilde{\nabla}$  de dérivation dans l'espace spectral s'écrit :

$$\tilde{\nabla} = \mathbf{e}_x a \frac{\partial}{\partial \eta} + \mathbf{e}_z c \frac{\partial}{\partial \gamma},$$

où  $a, c \in \mathbb{R}$  et  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z$  sont les vecteurs unitaires associés respectivement aux directions  $x$  et  $z$ . Le nombre de points sur le squelette pour chaque ligne horizontale ( $z$  fixé) est de  $n_I = N_e$ , et le nombre de points intérieurs à un élément est  $N_x - 1$ . En posant  $N = N_x - 1$ , le coût des évaluations de  $\mathbf{v}_e$  est proportionnel à  $N_e N^2$  (car les matrices  $L_{ee}^{-1}$  sont de dimensions en ordre de grandeur égales à  $N \times N$ ) et celui de l'évaluation de  $\mathbf{v}_I$  de l'ordre de  $(N_e)^2$ . Pour améliorer la précision des approximations numériques avec une discrétisation du type de celle représentée sur la figure 3.5, il est plus intéressant d'augmenter le nombre d'éléments que le nombre de points par élément. Dans la pratique, cela évite la détérioration du conditionnement de la matrice de Schur  $S$ . Contrairement au cas cylindrique le nombre de points du squelette varie linéairement avec le nombre d'éléments et le coût total de l'inversion du laplacien  $N_e N^2 + N_e^2$  est du même ordre de grandeur que l'on augmente  $N_e$  ou  $N_x$ . La figure 3.6 représente l'évolution du conditionnement de la matrice  $S$  pour différentes discrétisations. Le conditionnement est calculé en norme infinie. Les figures 3.6(a-b) indiquent que ce conditionnement évolue linéairement avec  $N_e$  et quadratiquement avec  $N_x$ . La figure 3.6(c) représente l'évolution du conditionnement de  $S$  avec le nombre total de points de discrétisation  $N_t \approx N_e N_x N_z$ . La courbe en pointillés correspond à l'augmentation de  $N_x$  alors que la courbe solide représente l'augmentation de  $N_e$ . Les résultats montrent qu'à rapport d'aspect et  $N_t$  fixés (ici  $\Gamma = 10\lambda_c$ ), il est plus intéressant d'augmenter le nombre d'éléments que le nombre de points par élément.

On notera pour finir qu'en aucun cas la discrétisation adoptée ici ne vérifie exactement l'invariance par translation dans la direction  $x$  induite par les conditions aux limites périodiques. Celles-ci sont en fait vérifiées de la même manière que l'invariance par rotation dans le cas de la géométrie cylindrique à section horizontale circulaire : les limites  $x = 0$  et  $x = \Gamma$  sont considérées comme une interface entre le premier et le dernier élément. En conséquence, ne sont assurées que les égalités de l'inconnue et de sa dérivée dans la direction  $x$  alors que le problème périodique requiert la continuité de la dérivée à tous les ordres. D'autre part, le maillage n'est pas invariant par une translation quelconque dans la direction  $x$ . Ce phénomène est identique pour la géométrie cylindrique à section circulaire dans laquelle le maillage n'est pas invariant par rotation quelconque autour de  $z$ . En d'autres termes, les symétries du problème discret sont différentes de celles du problème continu et cet effet aura des conséquences non-négligeables que nous discuterons dans la suite de ce manuscrit.

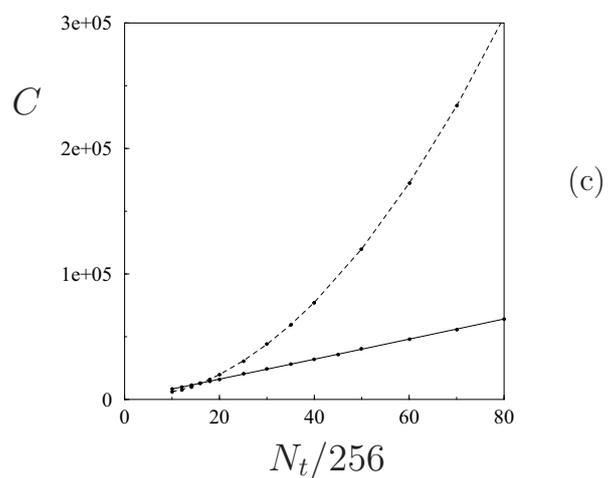
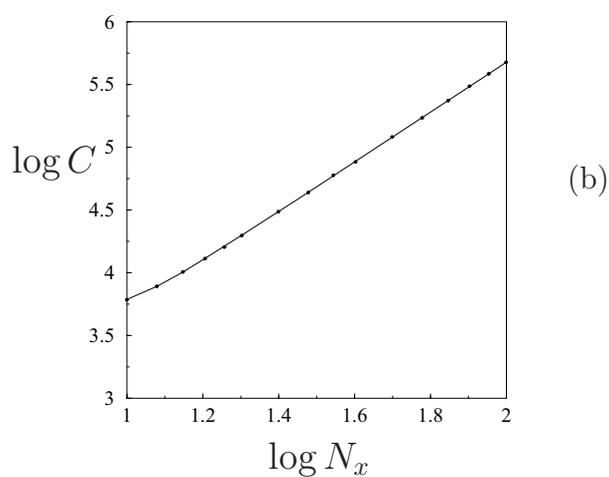
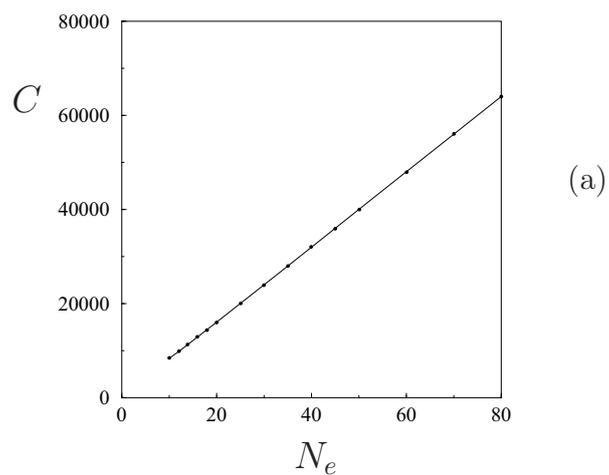


FIG. 3.6 – (a)  $C$  représente le conditionnement de la matrice de Schur  $S$  évalué en norme  $\infty$ ,  $N_z = 16$ ,  $N_t \approx N_e N_x N_z$  est le nombre de points total de discrétisation du domaine,  $\Gamma = 10\lambda_c$  (a) Evolution de  $C$  en fonction du nombre d'éléments  $N_e$  avec  $N_x = 16$ , (b) Evolution de  $\log C$  en fonction du logarithme du nombre de point par éléments  $\log N_x$  avec  $N_e = 16$ , (c) Evolution de  $C$  en fonction du nombre de points total  $N_t$  avec en pointillés  $N_e = 16$  et en traits continus  $N_x = 16$

## 3.4 Méthode de continuation

Les méthodes de continuation réfèrent à une classe particulière de techniques de calcul des racines d'une équation éventuellement différentielle et typiquement non-linéaire. Elles reposent sur une paramétrisation qui peut être artificielle du problème et qui conduit à une famille continue de problèmes liant un problème simple à celui, plus difficile, que l'on veut résoudre. A la résolution directe du problème, la technique substitue une succession de problèmes plus simples à résoudre permettant de parcourir une courbe liant la solution du problème simple à celle (difficile) du problème à résoudre [33].

Lorsque le paramètre existe dans l'équation de manière naturelle, la méthode permet alors de suivre une branche de solutions. Pour le problème de Marangoni-Bénard, le paramètre naturel peut être le nombre de Marangoni. La méthode permet alors, par exemple, de calculer la branche de solutions stationnaires liant la solution conductive (solution simple) à une solution stationnaire pleinement non-linéaire si tant est, bien sûr, qu'une telle branche existe. Si tel est le cas, la solution n'est pas nécessairement une fonction du paramètre. Par exemple, la branche peut passer un noeud-col de sorte qu'à un même nombre de Marangoni, correspondent plusieurs solutions. Pour contourner cette difficulté, les méthodes de continuation utilisées dans l'étude des systèmes dynamiques adoptent un point de vue original qui inclut les paramètres adimensionnels du problème - concrètement le nombre de Marangoni - dans l'ensemble noté  $\underline{x}$  des inconnues que sont les champs  $u, v, w, T, C$  évalués aux points de discrétisation. Ce point de vue, originellement proposé par Keller [24], amène à une paramétrisation de type arc dans laquelle est introduite une coordonnée curviligne  $s$  mesurant un déplacement le long de la branche et avec lequel la solution étendue  $\underline{X} = (\underline{x}, Ma)$  reste une fonction de  $s$ .

Dans l'esprit de l'homotopie de laquelle s'inspirent les méthodes de continuation, le parcours de la branche de solutions doit amener à une succession de problèmes simples à résoudre. Concrètement, si  $\{\underline{X}(s_i)\}$  avec  $i < j$  est l'ensemble des solutions obtenues successivement dans le parcours de la branche, le calcul de  $\underline{X}(s_j)$  pour  $j = i + 1$  à partir de cet ensemble doit être "simple". Cela implique une stratégie dans la définition de  $s$  et dans l'évaluation d'une nouvelle valeur  $s_j$ . Génériquement, cette stratégie vise à réduire le temps de calcul, un problème simple signifiant que le coût de sa résolution est faible.

Le calcul d'une solution (stationnaire) est réalisé par une méthode itérative de type point fixe à partir d'une condition initiale appelée prédiction. La correction représente l'écart entre la prédiction et la solution le long de la branche. L'avantage majeur d'une méthode de point fixe réside dans le fait que les solutions stationnaires (et certaines solutions périodiques en temps) sont accessibles qu'elles soient linéairement stables ou instables. A l'opposé et à l'exception de quelques cas spécifiques, les schémas numériques d'intégration en temps ne permettent pas d'obtenir les solutions linéairement instables, l'écart à la solution représentant une perturbation qui ne peut décroître dans le temps.

Les méthodes de continuation ont été développées au milieu des années 70 par Keller [24]. Outil mathématiques par essence, leur utilisation en mécanique des fluides numériques a vu le jour dans les années 80. Les proceedings du congrès d'Aussois [19] montrent un exemple de l'étendue d'application de ces méthodes dans le contexte de la mécanique des fluides. Typiquement, elles amènent à construire des diagrammes de bifurcation permettant d'analyser et d'interpréter par le biais de la théorie des systèmes dynamiques, les mécanismes de formation de structures particulières, leur stabilité et les régions où

existe une multiplicité de solutions. Elles ne se réduisent pas à l'étude des solutions stationnaires comme dans notre étude et permettent également de suivre des solutions périodiques [26, 32] ou des points de bifurcation. L'outil de référence est le logiciel Auto [11] spécifiquement conçu pour les systèmes d'équations différentielles ordinaires de dimensions de l'ordre de 100, c'est à dire beaucoup plus petits que ceux des cas que nous considérons dans ce travail. D'ailleurs, l'une des principales difficultés rencontrée dans notre étude réside dans la taille des systèmes linéaires mis en jeu dans le calcul de la correction. L'évaluation de la Jacobienne, son inversion ou le calcul d'une partie de son spectre soulèvent des difficultés qui sont toujours au coeur d'une recherche actuelle active sur les grands systèmes linéaires.

### 3.4.1 Formulation des méthodes de continuation et algorithme

Une fois discrétisées, les équations aux dérivées partielles contrôlant la dynamique de l'instabilité de Marangoni-Bénard se ramènent à un système d'équations algébriques non-linéaires que l'on note symboliquement :

$$\frac{d\underline{x}}{dt} = \underline{f}(\underline{x}, \lambda), \quad (3.58)$$

où  $\underline{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$  est le paramètre de continuation (concrètement dans notre cas, le nombre de Marangoni) et  $\underline{f} : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^n$  est une fonction non-linéaire.

#### La prédiction

L'étape de prédiction consiste à construire une évaluation  $\tilde{\underline{X}}(s_j)$  la plus proche possible de la solution  $\underline{X}(s_j)$  en exploitant une ou éventuellement plusieurs des solutions déjà connues  $\{\underline{X}(s_k)\}_{k < j}$ . La longueur d'arc élémentaire  $ds$  le long de la branche  $\underline{X}(s)$  vérifie :

$$(ds)^2 = d\lambda^2 + \sum_{i=1}^n dx_i^2, \quad (3.59)$$

où  $\underline{x} = (x_1, \dots, x_n)^t$ . D'autre part, en différenciant par rapport à  $s$  l'équation (3.58) pour une solution stationnaire, on obtient :

$$\underline{f}_{\underline{x}} \frac{d\underline{x}}{ds} + \frac{d\lambda}{ds} \underline{f}_{\lambda} = \underline{0}. \quad (3.60)$$

La résolution des équations couplées (3.59,3.60) permet de déterminer les coefficients de la tangente à la courbe  $\underline{X}(s)$  qui, une fois normalisés, permettent de construire une extrapolation  $\tilde{\underline{X}}(s_j) = \tilde{\underline{X}}(s_{j-1}) + \alpha(d\underline{x}/ds, d\lambda/ds)$  où  $\alpha$  est un paramètre réel ajusté par une stratégie d'avancement le long de la courbe. Cette approche requiert d'inverser un système linéaire, une opération qui peut être coûteuse dans les cas qui nous concernent où  $n \gg 1$ . L'autre méthode, et c'est celle que nous avons adoptée, consiste à extrapoler une prédiction à partir des solutions déjà connues. Cette extrapolation est linéaire ou quadratique suivant l'avancement le long de la courbe.

### La paramétrisation

La paramétrisation est le choix de la mesure  $s$  de parcours de la branche de solutions  $\tilde{X}(s)$ . Compte tenu que le système à résoudre,  $\underline{f}(\underline{X}) = \underline{0}$ , est un système de  $n$  équations à  $n + 1$  inconnues ( $\underline{X} = (\underline{x}, \lambda)$ ), il faut ajouter une équation, c'est à dire une contrainte, qui lie  $\underline{x}$  et  $\lambda$ . Les méthodes de type arc ou pseudo-arc lient le paramètre  $s$  d'avancement le long de la branche à la contrainte. Elles consistent par exemple à rechercher la solution située à une distance  $\Delta s$  de la dernière solution calculée  $\underline{X}(s_{j-1})$ . Dans ce cas, compte tenu de (3.59), la contrainte s'écrit :

$$(\lambda(s) - \lambda(s_{j-1}))^2 + \sum_{i=1}^n (x_i(s) - x_i(s_{j-1}))^2 = \Delta s^2, \quad (3.61)$$

où  $(\underline{x}(s), \lambda(s))$  est la solution cherchée pour  $s_j \equiv s$  et  $\Delta s$  est fixé par la stratégie d'avancement. Les méthodes dites pseudo-arc modulent le poids relatif des deux termes du membre de gauche de (3.61) afin, essentiellement, de tenir compte des ordres de grandeur relatifs des variables  $\underline{x}$  et  $\lambda$ .

La méthode que nous avons utilisée est une méthode de paramétrisation locale en ce sens qu'elle est susceptible de changer à chaque nouvelle évaluation d'une solution. La contrainte est soit  $\lambda(s) = \lambda(s_j) + \Delta\lambda$  soit  $x_k(s) = x_k(s_{j-1}) + \Delta x_k$  où  $\Delta\lambda$ ,  $\Delta x_k$  et l'indice  $k$  sont fixés par la stratégie d'avancement. Le choix de l'une ou l'autre des méthodes est lié à la détection de la proximité d'un point de rebroussement ce qui a préalablement déterminé la manière dont a été prédite par extrapolation l'évaluation  $\tilde{X}(s_j)$  de  $\underline{X}(s_j)$ . Il y a deux cas de figures :

- L'algorithme n'a pas détecté la proximité d'un point de rebroussement et dans ce cas  $s = \lambda$ . En notant  $\lambda^{(j)} = s_j$ , une extrapolation  $\tilde{x}$  est évaluée pour une valeur  $\tilde{\lambda} = \lambda^{(j-1)} + \Delta\lambda$  par extrapolation des valeurs  $\{\underline{x}(\lambda^{(j-1)}), \underline{x}(\lambda^{(j-2)}), \underline{x}(\lambda^{(j-3)})\}$ . La contrainte est alors  $\lambda = \tilde{\lambda}$ .
- L'algorithme a détecté la proximité d'un point de rebroussement et dans ce cas  $s = x_k$  où  $k$  est déterminé par le critère d'évaluation de la présence du point de rebroussement. En notant  $x_k^{(j)} = s_j$ , deux prédictions  $\tilde{x}$  et  $\tilde{\lambda}$  sont évaluées pour une valeur  $\tilde{x}_k = x_k^{(j-1)} + \Delta x_k$  par extrapolation des valeurs  $\{\underline{x}(x_k^{(j-1)}), \underline{x}(x_k^{(j-2)}), \underline{x}(x_k^{(j-3)})\}$  et  $\{\lambda(x_k^{(j-1)}), \lambda(x_k^{(j-2)}), \lambda(x_k^{(j-3)})\}$ . La contrainte est alors  $x_k = \tilde{x}_k$ .

### La correction

Avec la méthode que nous avons choisie pour la paramétrisation, le calcul de la correction s'effectue soit à  $\lambda$  fixé c'est à dire à nombre de Marangoni fixé, soit en fixant l'une des composantes du champ  $\underline{x}$  i.e. par exemple l'une des composantes de la vitesse en un point. Dans les deux cas, la simplicité de la contrainte permet d'éviter d'ajouter une équation au système à résoudre. En fait plutôt d'en retirer une. Dans la section suivante, nous décrivons comment ces contraintes sont intégrées au solveur par point fixe que nous avons utilisé.

### 3.4.2 Implémentation d'un solveur par méthode de point fixe

L'étape de correction de la méthode de continuation est réalisée par une méthode de Newton exploitant une adaptation du code d'intégration en temps proposée initialement par Tuckerman [37, 38] et appliquée à l'écoulement de Couette par Mamun & Tuckerman [28]. Pour expliquer la méthode, on se propose de réécrire de manière condensée le schéma d'intégration en temps des équations de conservation.

On considère tout d'abord celui utilisé pour l'intégration des équations de Navier-Stokes incompressibles. Le schéma de KIO à l'ordre 1 en temps peut être écrit synthétiquement sous la forme :

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = (I - \Delta t L_{u,T})^{-1} \hat{\mathbf{u}}, \quad (3.62)$$

où  $I$  est l'opérateur identité et  $L_{u,T}$  représente le laplacien. On le note ainsi pour souligner que l'inversion de l'opérateur  $I - \Delta t \nabla^2$  pour chaque composante  $u, v, w$  du champ de vitesse inclut les conditions aux limites sur les parois latérales et notamment celles sur la surface libre qui couplent les champs de vitesse  $\mathbf{u}^{(n+1)}$ , de température  $T^{(n+1)}$  (et éventuellement de concentration  $C^{(n+1)}$ ). La vitesse  $\hat{\mathbf{u}}$  est une vitesse incompressible obtenue dans l'étape de projection de la méthode :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{u}} &= \mathbf{u} - \Delta t \nabla p^{(n)}, \\ &= \mathbf{u}^{(n)} + \Delta t ([\mathbf{u}^{(n)} \cdot \nabla] \mathbf{u}^{(n)} - \nabla p^{(n)}), \\ &= \mathbf{u}^{(n)} + \Delta t \mathbf{N}_u(\mathbf{u}^{(n)}), \end{aligned} \quad (3.63)$$

où l'opérateur  $\mathbf{N}_u$  inclut de manière implicite le calcul de la pression par inversion d'un problème de Poisson muni des conditions aux limites proposées dans [22]. Cette partie est non linéaire relativement à la variable  $\mathbf{u}$  car les conditions aux limites sur la pression exploitent la projection de  $[\mathbf{u} \cdot \nabla] \mathbf{u}$  sur la normale au domaine. De manière moins évidente, on notera que le terme  $Ma$  n'apparaît que dans la partie  $\mathbf{N}_u$  ce que l'on met en évidence en écrivant :

$$\mathbf{u}^{(n+1)} = (I_u - \Delta t L_{u,T})^{-1} (\mathbf{u}^{(n)} + \Delta t \mathbf{N}_u(\mathbf{u}^{(n)}, Ma)). \quad (3.64)$$

L'équation de conservation de l'énergie thermique procède de la même manière et le schéma d'intégration décrit dans §1.1.2 permet d'écrire directement :

$$T^{(n+1)} = (I_T - \Delta t L_T)^{-1} (T^{(n)} + \Delta t N_T(T^{(n)}, \mathbf{u}^{(n)}, Ma)), \quad (3.65)$$

où  $N_T(T, \mathbf{u}, Ma) = -Ma [\mathbf{u} \cdot \nabla] T$ . Si l'on se restreint au cas d'un fluide pur, les versions spatialement discrétisées des équations (3.64,3.65) peuvent se réécrire sous la forme condensée :

$$\underline{\underline{x}}^{(n+1)} = (\underline{\underline{I}} - \Delta t \underline{\underline{L}})^{-1} (\underline{\underline{x}}^{(n)} + \Delta t \underline{\underline{N}}(\underline{\underline{x}}^{(n)}, Ma)), \quad (3.66)$$

où  $\underline{\underline{L}}$  représente la version discrète des termes diffusifs couplés  $L_{u,T}$  et  $L_T$ ,  $\underline{\underline{N}}(\underline{\underline{x}}^{(n)}, Ma)$  la version discrète des parties non-linéaire  $N_T$  et  $\mathbf{N}_u$  et enfin  $\underline{\underline{x}}^{(n)} = (\underline{\mathbf{u}}^{(n)}, \underline{T}^{(n)})$  les valeurs aux points du maillage et à l'instant  $t_n$  des champs  $\mathbf{u}$  et  $T$ . On notera que la relation (3.66) peut encore s'écrire :

$$\underline{\underline{x}}^{(n+1)} - \underline{\underline{x}}^{(n)} = \Delta t (\underline{\underline{I}} - \Delta t \underline{\underline{L}})^{-1} (\underline{\underline{L}} \underline{\underline{x}}^{(n)} + \underline{\underline{N}}(\underline{\underline{x}}^{(n)}, Ma)). \quad (3.67)$$

Supposons désormais que l'on souhaite calculer par une méthode de Newton une solution stationnaire des équations de conservation pour une valeur de  $Ma$  fixé. On souhaite donc déterminer  $\underline{x}$  tel que  $\partial_t \underline{x} = \underline{0}$  c'est à dire :

$$\underline{L} \underline{x} + \underline{N}(\underline{x}, Ma) = \underline{0}. \quad (3.68)$$

Une méthode de Newton écrite sur ce système d'équations amène à résoudre à chaque itération de Newton :

$$\underline{L} \underline{x} + \underline{N}(\underline{x}, Ma) = \left( \underline{L} + \underline{D_x N}(\underline{x}, Ma) \right) \delta \underline{x}, \quad (3.69)$$

avec  $\underline{x} \rightarrow \underline{x} - \delta \underline{x}$ . Il est extrêmement difficile d'exprimer et de résoudre ce type de système linéaire. Outre le fait qu'il est difficile d'évaluer le membre de gauche, le calcul de la matrice Jacobienne mise en jeu dans le membre de droite et son inversion sont particulièrement coûteux en raison de la dimension du système égal à  $4 \times N_e(N_x + 1)(N_y + 1)(N_z + 1) \approx 10^4 - 10^5$ . L'idée proposée par Tuckerman<sup>1</sup> [37] est d'appliquer un préconditionneur au système préalablement à son inversion et celui proposé, à savoir  $\underline{P} = (\underline{I} - \Delta t \underline{L})$ , va faire d'une pierre deux coups en permettant l'évaluation simple de chacun des deux membres de l'égalité (un point essentiel dans l'inversion du système par une méthode itérative). En multipliant les deux membres de l'égalité par l'inverse de  $\underline{P}$  puis par  $\Delta t$  :

$$\Delta t (\underline{I} - \Delta t \underline{L})^{-1} (\underline{L} \underline{x} + \underline{N}(\underline{x}, Ma)) = \Delta t (\underline{I} - \Delta t \underline{L})^{-1} \left( \underline{L} + \underline{D_x N}(\underline{x}, Ma) \right) \delta \underline{x}. \quad (3.70)$$

La comparaison de cette expression avec la relation (3.67) montre que le membre de gauche de (3.70) peut être évalué directement avec le schéma d'intégration en temps en posant  $\underline{x}^{(n)} = \underline{x}$ , la différence  $\underline{x}^{(n+1)} - \underline{x}^{(n)}$  donnant directement le membre de gauche. Cette observation permet également d'évaluer le membre de droite en utilisant le schéma de discrétisation dans lequel les termes non-linéaires sont substitués par leur version linéarisée. Par suite, le système linéaire peut être inversé par une méthode itérative et c'est un gradient biconjugué carré issu de la bibliothèque NSPCG que nous avons utilisé (une méthode "gmres" issue de la même librairie n'a pas donné de meilleurs résultats quant à la vitesse de convergence).

En pratique, dans l'inversion du système linéaire, nous avons utilisé  $\Delta t = 10^5$ . Ici,  $\Delta t$  ne représente pas le pas de temps puisque la technique est une méthode de point fixe. Il représente le poids relatif entre l'identité et l'opérateur  $L$ . Pour avoir un effet sur l'inversion du système, il faut que  $\Delta t \gg 1$  de sorte que  $P \approx \Delta t L$ . Dans cette limite on constate naturellement que les deux membres de l'égalité ne dépendent plus de  $\Delta t$ . L'opérateur  $P$  est un bon préconditionneur si le terme dominant de l'opérateur  $\underline{L} + \underline{D_x N}(\underline{x}, Ma)$  est effectivement le terme  $\underline{L}$  ce qui physiquement correspond à des cas dans les quels les termes convectifs et d'advection sont faibles devant les termes diffusifs.

On notera enfin qu'il a été observé numériquement que le coût de l'inversion du système linéaire à chaque itération de Newton augmente significativement avec le nombre de points du maillage. C'est cette observation qui nous a conduit à préférer une discrétisation multi-éléments spectraux pour étudier des problèmes dans de grands rapports d'aspect

---

<sup>1</sup>Ce préconditionneur est dit de Stokes. Ceci n'est pas le cas dans la formulation en variables primitives utilisée ici où il s'agit plutôt d'un préconditionneur diffusif.

du chapitre 5. Lorsque le rapport d'aspect est petit, une discrétisation sur un seul élément suffit.

Comme nous l'avons mentionnée, la recherche d'un point fixe peut être menée en incluant le nombre de Marangoni dans les inconnues et en fixant l'une des composantes de  $\underline{x}$  à une valeur prescrite. Dans ce cas, la différentiation du système amène à chaque itération de Newton à l'inversion de :

$$\begin{aligned} \Delta t (\underline{I} - \Delta t \underline{L})^{-1} \left( \underline{L} + \underline{D_x N}(\underline{x}, Ma) \right) \delta \underline{x} + \delta Ma \Delta t (\underline{I} - \Delta t \underline{L})^{-1} \underline{D_{Ma} N}(\underline{x}, Ma) \\ = \Delta t (\underline{I} - \Delta t \underline{L})^{-1} (\underline{L} \underline{x} + \underline{N}(\underline{x}, Ma)), \end{aligned} \quad (3.71)$$

avec  $\underline{x}_l = c$  où la constante  $c$  et l'indice  $l$  sont prescrits lors de l'étape de prédiction. La nouvelle évaluation de la solution est obtenue par la méthode de Newton suivant  $\underline{x} \rightarrow \underline{x} - \delta \underline{x}$  et  $Ma \rightarrow Ma - \delta Ma$ . Le vecteur formant le second terme du membre de gauche de l'égalité peut également être obtenu en modifiant le schéma d'intégration en temps des équations. Le détail de cette implémentation est présentée pour le schéma KIO dans la référence [4].

### 3.4.3 Analyse de stabilité linéaire

L'analyse de stabilité linéaire des solutions stationnaires complète la méthode de continuation que nous venons d'exposer. Il s'agit d'une étape capitale puisque, outre de renseigner sur la stabilité linéaire d'une solution, elle permet également de déterminer l'éventuelle présence le long de la branche d'une bifurcation secondaire et, le cas échéant, de construire un prédicteur qui permettra par la suite de suivre cette branche. La construction du prédicteur est à ce jour relativement sommaire. Il est égal à la solution la plus proche du point où la stabilité linéaire a changé, ajoutée du vecteur propre associé à la valeur propre purement réelle qui a changé de signe. L'algorithme construit en fait plusieurs prédicteurs en modulant le poids relatif donné à la solution et au vecteur propre. Ces prédicteurs sont utilisés comme condition initiale d'un calcul mené à nombre de Marangoni variable (i.e. dans les inconnues) jusqu'à ce qu'un d'eux amène la méthode de point fixe à converger. La branche de solution qui émerge du point de bifurcation peut alors être suivie à partir de cette solution.

Le calcul complet du spectre de la jacobienne est pratiquement impossible à réaliser dans notre cas, en raison de la taille prohibitive des systèmes linéaires mis en jeu. On va donc se restreindre en n'en calculer que la partie correspondant aux valeurs propres les plus instables i.e. celles dont la partie réelle est la plus proche ou supérieure à zéro. La méthode retenue est la méthode d'Arnoldi [1] et la manière de l'implémenter suit encore celle proposée par Mamun & Tuckerman [28].

A l'aide de la relation (3.66), en linéarisant l'équation autour de  $\underline{x}$  et en notant  $\delta \underline{x}$  un accroissement, dans l'approximation où  $\Delta t \ll 1$  cette relation permet d'écrire :

$$\delta \underline{x}^{(n+1)} = (\underline{I} - \Delta t \underline{L})^{-1} \left( \underline{I} + \Delta t \underline{D_x N}(\underline{x}, Ma) \right) \delta \underline{x}^{(n)}, \quad (3.72)$$

$$= \left( \underline{I} + \Delta t \left( \underline{L} + \underline{D_x N}(\underline{x}, Ma) \right) \right) \delta \underline{x}^{(n)} + \mathcal{O}(\Delta t^2), \quad (3.73)$$

$$\approx \exp(\Delta t \underline{J}) \delta \underline{x}^{(n)}, \quad (3.74)$$

avec :

$$\underline{\underline{J}} \equiv \underline{\underline{L}} + \underline{\underline{D_x N}}(\underline{x}, Ma), \quad (3.75)$$

où  $\underline{\underline{J}}$  est précisément la jacobienne dont on cherche à extraire une partie du spectre. Une méthode d'Arnoldi ne nécessite que de fournir une manière de calculer l'image d'un vecteur par la matrice dont on cherche à extraire une partie du spectre. La relation (3.72) permet de calculer l'image d'un vecteur par l'application  $\exp(\Delta t \underline{\underline{J}})$  et par suite de déterminer une partie du spectre de la matrice  $\exp(\Delta t \underline{\underline{J}})$  à l'aide du schéma d'intégration linéarisé pour en déduire celle de la Jacobienne  $\underline{\underline{J}}$ . De manière naturelle, les méthodes d'Arnoldi permettent de calculer la partie du spectre associée aux valeurs propres les plus élevées en module. Ce sont précisément celles qui nous intéressent car les valeurs propres de  $\underline{\underline{J}}$  les plus proches de zéro sont bien associées aux valeurs propres de  $\exp(\Delta t \underline{\underline{J}})$  les plus grandes en modules. Construite sur une approximation d'ordre 1 de la Jacobienne, la méthode est d'autant plus précise que  $\Delta t$  est proche de zéro. Nous avons utilisé  $\Delta t \approx 10^{-3}$  et calculé entre 20 et 30 valeurs propres.

On notera pour finir que l'analyse de stabilité linéaire est une partie extrêmement coûteuse de la méthode. Nous nous sommes restreints à ne la mener que toutes les 10 solutions le long d'une branche de solutions, ce calcul prenant déjà de l'ordre de 30% du temps total de calcul d'une branche de solutions.

### 3.4.4 Calcul direct des points fixes de bifurcation primaire

La détermination des valeurs critiques  $Ma_c$  associées à un point de bifurcation primaire peut être menée par dichotomie en évaluant les valeurs propres par la méthode d'Arnoldi et en identifiant celle qui croise l'axe réel. Cette valeur peut être comparée à celle obtenue en évaluant graphiquement le point d'intersection d'une branche de bifurcation avec la solution conductive. Ces deux méthodes sont coûteuses notamment si l'on s'intéresse, et c'est notre cas, à l'évolution du seuil d'instabilité avec l'un des paramètres du problème comme le rapport d'aspect  $A$  de la géométrie ou l'ellipticité  $\epsilon$  de la section transverse.

Il est cependant possible de calculer directement un point de bifurcation primaire en exploitant une méthode de Newton et par suite d'élaborer une méthode de suivi des points de bifurcation primaire dans l'espace des paramètres  $(Ma, A)$  ou  $(Ma, \epsilon)$  [4]. La prédiction est faite par extrapolation quadratique ou linéaire à partir de couples  $(Ma_c, \text{mode marginal associé})$  déjà connus et l'étape de correction est réalisée par une méthode Newton.

Compte tenu que la solution conductive est connue analytiquement, un point de bifurcation stationnaire vérifie :

$$\left( \underline{\underline{L}} + \underline{\underline{D_x N}}(\underline{x}_0, Ma_c) \right) \underline{h} = \underline{0}, \quad (3.76)$$

où  $\underline{x}_0$  représente la solution conductive,  $\underline{h} \neq \underline{0}$  le vecteur propre associé à la valeur propre nulle et  $Ma_c$  le nombre de Marangoni critique. Les inconnues sont  $\underline{h}$  et  $Ma_c$  et au regard de celles-ci, le système (3.76) est non-linéaire (en raison des produits croisés dans les termes advectifs). Le système de Newton s'écrit :

$$\Delta t \left( \underline{\underline{I}} - \Delta t \underline{\underline{L}} \right)^{-1} \left( \underline{\underline{L}} + \underline{\underline{D_x N}}(\underline{x}_0, Ma) \right) \underline{\delta h} + \delta Ma \Delta t \left( \underline{\underline{I}} - \Delta t \underline{\underline{L}} \right)^{-1} \underline{\underline{D_{Ma} D_x N}}(\underline{x}_0, Ma) \underline{h}$$

$$= \Delta t (\underline{\underline{I}} - \Delta t \underline{\underline{L}})^{-1} \left( \underline{\underline{L}} + \underline{\underline{D_x N}}(\underline{x_0}, Ma) \right) \underline{h}, \quad (3.77)$$

avec  $\underline{h}_l = c$  où la constante  $c$  et l'indice  $l$  sont prescrits lors de l'étape de prédiction. La nouvelle évaluation de la solution est obtenue par la méthode de Newton suivant  $\underline{h} \rightarrow \underline{h} - \delta \underline{h}$  et  $Ma \rightarrow Ma - \delta Ma$ .

Pour valider notre code nous avons comparé les résultats obtenus dans le cylindre pour l'évolution de  $Ma_c = f(A)$  où  $A$  est le rapport d'aspect, avec ceux de Dauby *et al.* [9] et Herrero *et al.* [20]. Nous avons mené une étude identique dans des configurations à section transverse elliptique où cette fois-ci l'on étudie  $Ma_c = f(\epsilon)$ ,  $\epsilon$  représentant une mesure de l'ellipticité. Les résultats sont reportés dans le chapitre suivant.

# Bibliographie

- [1] W. E. ARNOLDI The principle of minimized iteration in the solution of the matrix eigenvalue problem. *Quart. Appl. Math.* **9** pp. 17-29, 1951.
- [2] M. AZAIEZ, M. DAUGE & Y. MADAY Methodes spectrales et des éléments spectraux. *Prépublication* (1994).
- [3] A. BATOUL, H. KHALLOUF & G. LABROSSE Une méthode de résolution directe du problème de Stokes 2D/3D instationnaire. Application à la cavité entraînée. *CRAS Série II*, **319**, 1455 (1994).
- [4] A. BERGEON Intabilités de Marangoni-Bénard en présence d'effet Soret. *Thèse de doctorat*, Ecole Centrale Lyon (1995).
- [5] C. BERNARDI & Y. MADAY Approximations spectrales de problèmes aux limites elliptiques. Collection : Mathématiques et Applications , Vol. 10 ISBN Springer-Verlag France (1992).
- [6] C. CANUTO, M.Y. HUSSAINI, A. QUARTERONI & T. A. ZANG Spectral methods in fluid dynamics. Collection : Springer series in computational physics, New York - Berlin - London : Springer (1988).
- [7] C. CANUTO, M.Y. HUSSAINI, A. QUARTERONI & T. A. ZANG Spectral methods. Fundamentals in single domains. Springer Berlin - Heidelberg - New-York (2006).
- [8] A. J. CHORIN Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comput.* **22**, 745 (1968).
- [9] P. C. DAUBY, G. LEBON & E. BOUHY Linear Bénard-Marangoni instability in rigid circular containers. *Phys. Rev. E* **56**, 520 (1997).
- [10] M. O. DEVILLE, P. F. FISCHER & E. H. MUND High-order methods for incompressible fluid flow. Cambridge University Press, New York (2002).
- [11] E. DOEDEL, R. C. PAFFENROTH, A. R. CHAMPNEYS, T. F. FAIRGRIEVE, Y. A. KUZNETSOV, B. E. OLDEMAN, B. SANDSTEDE & X. WANG. AUTO97 : Continuation and bifurcation software for ordinary differential equations. Concordia University (2002).
- [12] D. FUNARO *Polynomial Approximation of Differential Equations*. Springer-Verlag, New York (1991).
- [13] K. GODA A multistep technique with implicit difference scheme for calculating two- or three-dimensional cavity flows. *J. Comput. Phys.* **3**, 76 (1979).
- [14] W. GORDON & C. HALL Construction of curvilinear coordinates systems for non-linear problems in fluid dynamics. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng* **7**, 461 (1973)
- [15] D. O. GOTTLIEB & S. A. ORZAG Numerical analysis of spectral methods : Theory and applications. *NFS-CBMS Monograph*, No 26 , Philadelphia (1977).
- [16] J.L. GUERMOND & J. SHEN A new class of truly consistent schemes for incompressible flows. *J. Comp. Phys.* **192**, 262 (2003).

- [17] J.L. GUERMOND & J. SHEN Velocity-correction projection methods for incompressible flows. *SIAM J. Numer. Anal.* **41**, 112 (2003).
- [18] J.L. GUERMOND, P. MINEV & J. SHEN An overview of projection methods for incompressible flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **195**, 6011 (2006).
- [19] D. HENRY & A. BERGEON eds. Continuation methods in fluid dynamics. Notes on Numerical fluid mechanics, vol. 74, Vieweg (2000).
- [20] H. HERRERO & A. M. MANCHO On pressure boundary conditions for thermoconvective problems. *Int. J. Numer. Meth. Fluids* **39**, 391 (2002).
- [21] H. JOHNSTON & J.G. LIU A finite difference method for incompressible flow based on local pressure boundary conditions. *J. Comput. Phys.* **180**, 120 (2002).
- [22] G. EM. KARNIADAKIS, M. ISRAELI, & S. A. ORSZAG High-order splitting method for the incompressible Navier-Stokes equations. *J. Comput. Phys.* **97**, 414 (1991).
- [23] H. KHALLOUF Simulation numérique de la convection thermo-vibrationnelle par une méthode spectrale. *Thèse de Doctorat*, Toulouse III (1995).
- [24] H. B. KELLER Numerical solutions of bifurcation and non linear eigenvalue problem. *Application of bifurcation theory* Academic Press New York, 359-384 (1977).
- [25] J. KIM & P. MOIN Application of a fractional-step method to incompressible Navier-stokes equations. *J. Comput. Phys.* **59**, 308 (1985).
- [26] K. LUST, D. ROOSE, A. SPENCE & A. R. & CHAMPNEYS An adaptive Newton-Picard algorithm with subspace iteration for computing periodic solutions. *SIAM Journal on Scientific Computing*, **19**(4), 1188 (1998).
- [27] R. E. LYNCH, J. R. RICE & D. H. THOMAS Direct solution of partial differential equations by tensor product methods. *Numer. Math.*, **6**, 185 (1964).
- [28] C. K. MAMUN & L. S. TUCKERMAN Asymmetry and Hopf bifurcation in spherical Couette flow. *Phys. Fluids* **7**, 80 (1995).
- [29] A. ORZAG, M. ISRAELI & M. O. DEVILLE Boundary condition for incompressible flows. *J. Sci. Comput.* **1**, 75 (1986).
- [30] A. T. PATERA A spectral element method for fluid dynamics : Laminar flow in channel expansion. *J. Comput. Phys.* **375**, 143 (1998).
- [31] E. M. RONQUIST Optimal spectral element methods for the unsteady three dimensional incompressible Navier-Stokes equation. PhD Thesis (1989).
- [32] D. ROOSE, K. LUST, A. R. CHAMPNEYS & A. SPENCE A Newton-Picard shooting method for computing periodic solutions of large-scale dynamical systems. *Chaos, Solitons and Fractals*, **5**(10), 1913 (1995).
- [33] R. SEYDEL Practical bifurcation and stability analysis. From equilibrium to chaos (Second edition). IAM 5 Interdisciplinary Applied Mathematics, Springer Verlag (1994).
- [34] J. SHEN On error estimates of projection method for Navier-Stokes equations : First-order schemes. *SIAM, J. Numer. Anal.* **29**, 57 (1992).
- [35] L. TIMMERMANS, P. MINEV & F. VAN DE VOSSE An approximate projection scheme for incompressible flows using spectral elements. *Numer. Meth. Fluids* **22**, 673 (1996).
- [36] R. TOUIHRI, H. BEN HADID & D. HENRY On the onset of convective instabilities in cylindrical cavities heated from below. I. Pure thermal case. *Phys. Fluids* **11**, 2078 (1999).
- [37] L. S. TUCKERMAN Steady-state solving via Stokes preconditioning; recursion relations for elliptic operators. *Lecture Notes in Physics : Proceedings of the 11 th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, Springer, New York, p. 573 (1989).

- [38] L. S. TUCKERMAN & D. BARKLEY Bifurcation analysis for timesteppers. *Institute for Mathematics and Its Applications* **119**, 453 (2000).
- [39] J. VAN KAN A second order accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flows. *Math. Comp.* **7**, 870 (1986).



# Chapitre 4

## Instabilité de Marangoni-Bénard en géométrie cylindrique

### 4.1 Introduction

Cette partie du travail présente une étude de l'instabilité de Marangoni-Bénard dans une géométrie cylindrique à base circulaire ou elliptique et dans laquelle la surface libre est la section supérieure transverse du cylindre. Elle est centrée sur l'étude des fluides à un composant chimique et en ce sens, diffère de nos objectifs initiaux qui portaient sur l'étude du cas où le fluide est un mélange binaire sujet à l'effet Soret. Cet effet caractérise le couplage des gradients de concentration et de température dans l'expression du flux de masse. Sous l'effet d'un gradient thermique, il provoque au sein du fluide une séparation des espèces chimiques. Aux forces de surfaces produites par d'éventuelles variations de température le long de la surface libre, peuvent alors s'ajouter celles induites par des variations de concentration. L'effet relatif de ces deux forces sur la stabilité de la solution conductive est caractérisé par le coefficient de Soret-Marangoni noté  $S_M$  dans la suite. Nous reviendrons plus en détail sur cet effet dans le chapitre suivant. Nous noterons simplement ici que lorsque  $S_M$  est (suffisamment) négatif, la solution conductive perd sa stabilité via une bifurcation de Hopf responsable de l'apparition d'un mouvement oscillatoire. Dans un cylindre muni de conditions aux limites homogènes, cette instabilité peut prendre différentes formes suivant la structure spatiale du mode neutre comme des ondes stationnaires (figure 4.1) ou des ondes tournantes (figure 4.2) [3].

La modulation spatiale de la géométrie provoquée par le passage de la section circulaire à la section elliptique, transforme ces ondes tournantes en solutions secondaires de sorte qu'elles ne sont plus issues d'une bifurcation primaire. Si la déformation spatiale est suffisamment forte, elle peut même piéger ces ondes, le dépiégeage s'effectuant aux nombres de Marangoni plus élevés par le biais d'une bifurcation globale [5, 13]. Ce passage des symétries  $O(2)$  du cylindre vers les symétries  $D_2$  de l'ellipse est bien compris [4, 7]. Mais son effet sur la dynamique non-linéaire est très riche incluant notamment la possibilité de régimes chaotiques [14]. Malgré tout, la littérature ne reportait pas à notre connaissance de systèmes physiques expérimentalement réalisables dans lesquels cette dynamique avait été étudiée et une partie du projet était centrée sur cet objectif. Nous n'avons pu mener entièrement ce projet à terme en partie parce que les simulations que nous avons conduites dans ce sens n'ont pas permis d'observer de tels régimes. Les scénarii que nous avons mis

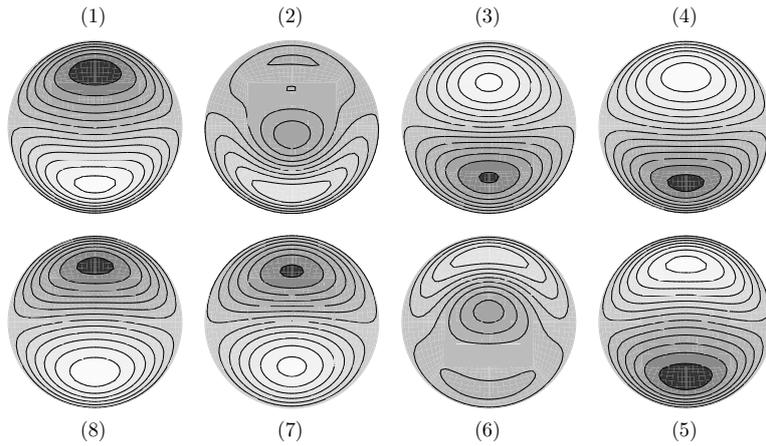


FIG. 4.1 – Représentation des isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan moyen en 8 instants équirépartis le long d’une période. La géométrie est un cylindre à section circulaire de rapport d’aspect  $R/H$  unité. Le fluide est un mélange binaire sujet à l’effet Soret. Les paramètres sont  $Ma=105.52$ ,  $Sc = 100$ ,  $Pr = 1$  et  $S_M=-0.15$ .

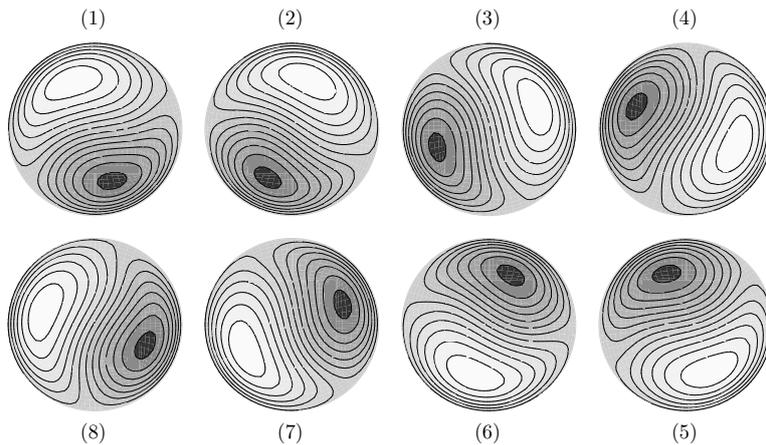


FIG. 4.2 – Représentation des isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan moyen en 8 instants équirépartis le long d’une période. La géométrie est un cylindre à section circulaire de rapport d’aspect  $R/H$  unité. Le fluide est un mélange binaire sujet à l’effet Soret. Les paramètres sont  $Ma=105.72$ ,  $Sc = 100$ ,  $Pr = 1$  et  $S_M=-0.15$ .

en évidence se sont trouvés être similaires à ceux reportés dans un travail analogue mené par Bergeon & Knobloch [2] sur des géométries tridimensionnelles à section horizontale carrée ou légèrement rectangle - tout du moins dans la gamme de paramètres que nous avons étudiée.

Plus exactement, lorsque le domaine a une section horizontale carrée, les symétries sont le groupe  $D_4$  des symétries du carré et la théorie prédit la formation de trois types d’oscillations notées SW, DW et RW pour *standing wave*, *diagonal wave* et *rotating wave* (figure 4.3). Lorsque la section horizontale est presque carrée, les prédictions théoriques indiquent que seules les oscillations du type SW orientées selon les directions des cotés du

rectangle bifurquant de la solution conductive. Ce que deviennent les ondes du type RW est élucidé dans ce papier. Les auteurs montrent que la branche RW est déconnectée des branches SW. Pour des nombres de Marangoni au delà du seuil linéaire d'instabilité, l'une des deux branches SW, la branche stable, perd sa stabilité par une bifurcation secondaire qui produit une onde quasi-périodique. Celle-ci disparaît pour des nombres de Marangoni plus élevés par suite d'une bifurcation globale conduisant à une transition hystérétique vers la branche du type RW. Dans cette région, des comportements chaotiques peuvent apparaître mais aucun n'est reporté par les auteurs.

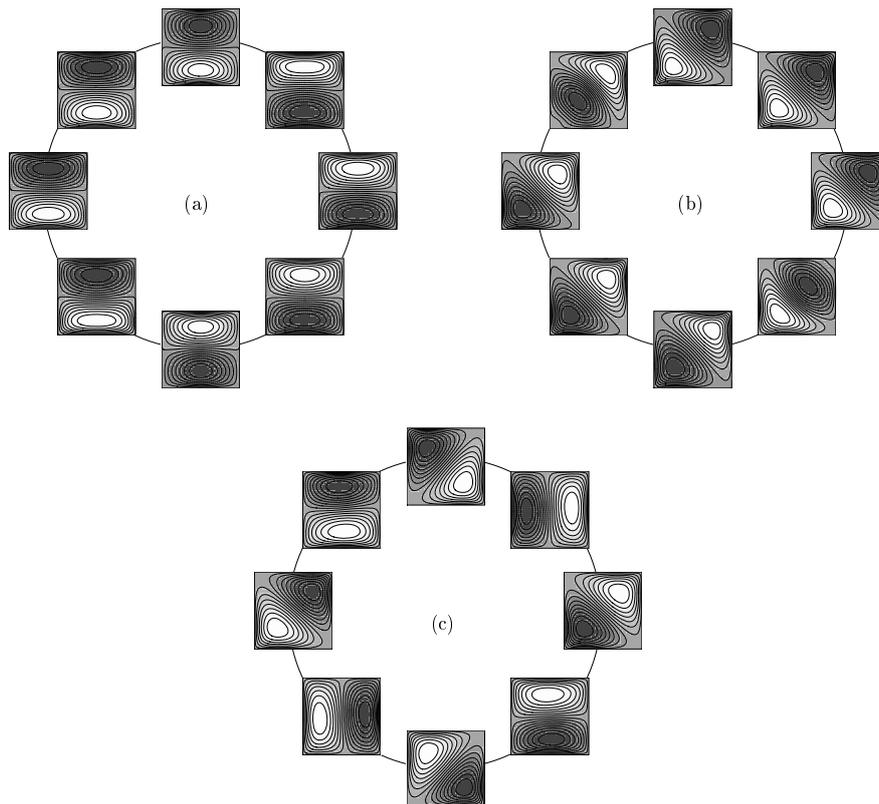


FIG. 4.3 – Illustration des différentes structures d'écoulement obtenues près du seuil d'instabilité dans le cas de géométries parallélépipédiques à section horizontale carrée. Sont représentées les isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan milieu à différents instants équirépartis sur une période. Les différentes oscillations sont notées (a) SW , (b) DW et (c) RW. D'après [2].

Le scénario est voisin dans notre cas et dans la gamme de paramètres que nous avons étudiée. La figure 4.4 représente schématiquement les diagrammes de bifurcation obtenus dans les cas d'une section circulaire et d'une section légèrement elliptique. Dans le premier cas, deux branches de solutions bifurquent simultanément et correspondent respectivement à des ondes stationnaires (SW) représentées sur la figure 4.1 et à des ondes tournantes (RW) représentées sur la figure 4.2. Initialement, les ondes tournantes sont instables mais par suite d'une bifurcation secondaire vers des ondes "mixtes", elles recouvrent leur sta-

bilité. L'intervalle de nombres de Marangoni dans lequel les deux solutions sont stables est difficile à évaluer car il est très réduit. Toutefois, les simulations numériques mettent clairement en évidence une brusque variation de l'amplitude des oscillations confirmant le caractère hystérétique de la transition et par la même, l'instabilité de la branche mixte joignant les branches RW et SW.

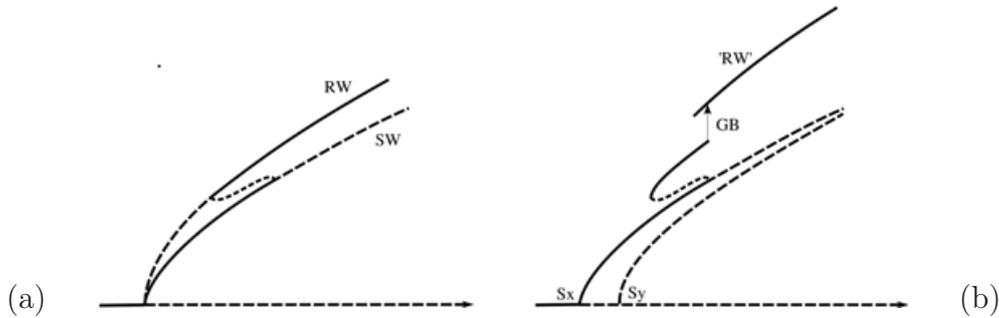


FIG. 4.4 – Vue schématique du diagramme de bifurcation dans le cas (a) d'une section circulaire et (b) d'une section faiblement elliptique. Le label GB indique une bifurcation globale. Les lignes continues représentent les solutions stables, les lignes pointillées les solutions instables. En ordonnée est reportée une quantité représentative de l'amplitude des oscillations. Le fluide est un mélange binaire sujet à l'effet Soret. Les paramètres sont  $A = 1$ ,  $Sc = 100$ ,  $Pr = 1$  et  $S_M = -0.15$ .

Lorsque la section transverse passe du cercle à l'ellipse, la branche associée aux ondes tournantes ne peut rester produite par une bifurcation primaire et devient donc une branche secondaire. La bifurcation primaire se scinde en deux branches de solutions SW associées respectivement à des solutions oscillatoires  $S_x$  et  $S_y$  invariantes, i.e. symétriques par rapport aux axes  $x = 0$  et  $y = 0$  respectivement. Les deux bifurcations sont supercritiques, la première donnant naissance à des solutions stables. La branche SW  $S_x$ -invariante perd ensuite sa stabilité par une bifurcation secondaire de Hopf sous-critique à  $Ma \approx 105.9$ . Après le passage d'un noeud-col en  $Ma \approx 105.8$ , la branche créée se restabilise. Encore une fois, la région de bistabilité est très réduite mais l'hystérésis est important, ce qui appuie le scénario. Les solutions obtenues sur cette branche sont des oscillations à deux fréquences (un tore dans l'espace des phases) ce qui correspond physiquement à un piègeage des ondes tournantes par la géométrie (figure 4.5). Le dépiégeage s'effectue pour  $Ma \approx 106.05$ , valeur au delà de laquelle la branche disparaît vraisemblablement par une bifurcation globale (les résultats montrent que la période "lente" augmente à l'approche de cette valeur, en accord avec [2]). Au delà de cette valeur, la solution ressemble en tout point à une onde tournante à une seule fréquence. Elle est noté 'RW' en raison du fait que bien qu'elle corresponde à une fréquence de rotation, il ne s'agit pas, à la différence de la branche RW, d'une rotation solide de la structure. La figure 4.6 montre la modulation du champ au cours de la rotation. L'intervalle de nombres de Marangoni dans lequel ces ondes tournantes et les ondes à deux fréquences coexistent de manière stable est très réduit et difficile à évaluer numériquement. Nos simulations numériques dans le voisinage de la bifurcation globale n'ont révélé aucune dynamique complexe, les solutions restant périodiques au passage de ce point (la même conclusion que dans le cas des sections transverses presque carrées [2]).

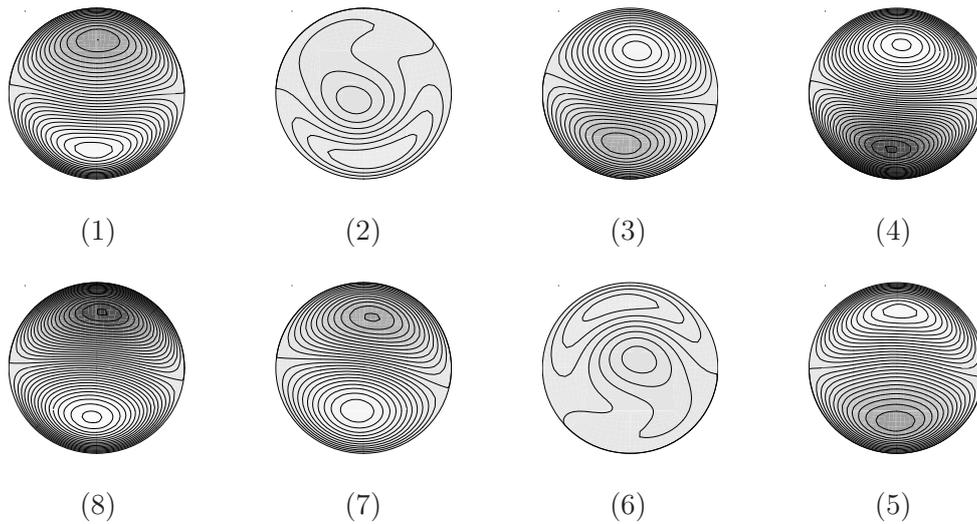


FIG. 4.5 – Représentation des isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan moyen en 8 instants équirépartis au cours d’une période courte pour une oscillation le long de la branche à deux périodes. La géométrie est un cylindre à section elliptique de rapport d’aspect unité avec  $\epsilon = 0.98$  correspondant à un grand axe dans la direction  $x$  (horizontal sur la figure) compris entre  $[-1,1]$  et un petit axe  $y$  (vertical sur la figure) compris entre  $[-0.98,0.98]$ . Le fluide est un mélange binaire sujet à l’effet Soret. Les paramètres sont  $Ma = 105.97$ ,  $Sc = 100$ ,  $Pr = 1$  et  $S_M = -0.15$ .

Nous avons mené l’étude des fluides à un composant en parallèle de ce travail comme une étape préalable mais inédite dans le contexte d’évaluer l’impact du passage à des cylindres de section transverse faiblement elliptique. Les résultats font l’objet du travail présenté dans ce chapitre. Nous y considérons essentiellement des géométries de petits rapports d’aspect dans une gamme de nombres de Marangoni voisine du seuil linéaire d’instabilité de la solution conductive et pour laquelle le nombre de solutions (stationnaires) du système reste faible. L’évolution de ces solutions en fonction du nombre de Marangoni est interprétée par la théorie des bifurcations, ces solutions étant associées, en première approximation, à l’interaction d’un faible nombre de modes. Les hypothèses utilisées pour le modèle ont été présentées dans le chapitre d’introduction.

L’objectif est de comprendre l’impact sur la structure des écoulements convectifs des imperfections que peut présenter une expérience [11, 16]. Le cas retenu est académique dans le sens où nous ne considérons que celles induites par la transformation de la section transverse circulaire à la section elliptique. Dans les deux cas, la configuration présente des symétries ( $O(2)$  dans le cas circulaire et  $D_2$  dans le cas elliptique) mais on pourrait facilement imaginer des imperfections rompant toutes les symétries du système. Notre choix nous permet, et c’est un avantage, d’exploiter les résultats de la théorie des bifurcations en présence de symétrie pour interpréter les changements produits. Les résultats principaux de cette étude sont reportés dans l’article "Nonlinear Marangoni convection in circular and elliptical cylinders" (*Phys. Fluids*, **19**, 2007) présenté dans la suite de ce chapitre.

Outre l’étude du régime non-linéaire et des mécanismes de sélection de structures par-

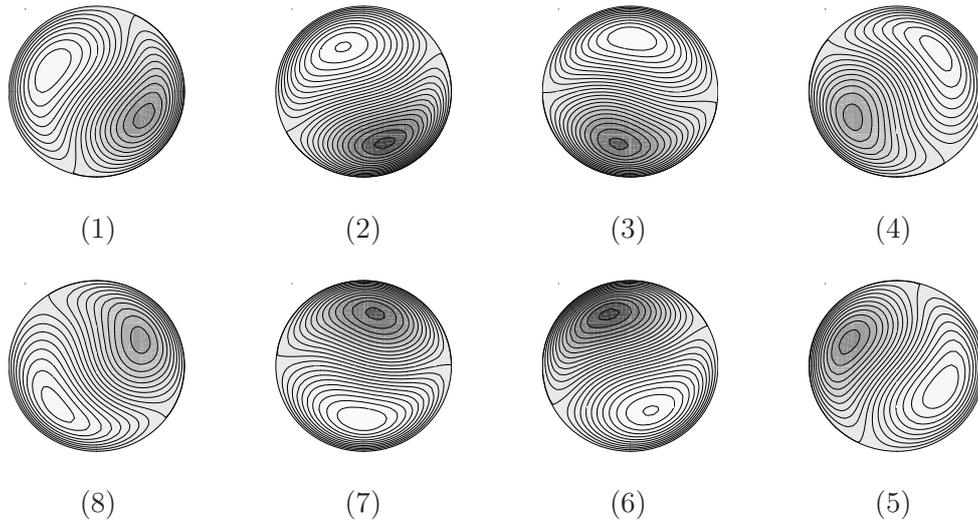


FIG. 4.6 – Représentation des isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan moyen en 8 instants équirépartis au cours d’une période pour une oscillation le long de la branche ‘RW’. La géométrie est un cylindre à section elliptique de rapport d’aspect unité avec  $\epsilon = 0.98$  correspondant à un grand axe dans la direction  $x$  (horizontal sur la figure) compris entre  $[-1,1]$  et un petit axe  $y$  (vertical sur la figure) compris entre  $[-0.98,0.98]$ . Le fluide est un mélange binaire sujet à l’effet Soret. Les paramètres sont  $Ma = 106.22$ ,  $Sc = 100$ ,  $Pr = 1$  et  $S_M = -0.15$ .

ticulières d’écoulement, ce travail met à jour l’impact des différences qu’il existe entre les symétries du système discret (résolu numériquement) et les symétries du système continu. Ces différences, inhérentes au choix de la méthode numérique, ont un effet non-négligeable tant sur la stabilité des solutions que sur la nature des bifurcations. La compréhension de ces effets et leur quantification sont des éléments indispensables à qui souhaite transposer les résultats numériques au système (continu) original.

Le travail réalisé ici est dans une certaine mesure voisin de l’étude conduite par Bergeon *et al.* [1] dans des cavités à section horizontale carrée ou faiblement rectangulaire. Avant d’introduire nos résultats, nous revenons brièvement sur ce travail.

## 4.2 Influence des déformations géométriques : du carré au rectangle

Dans un travail publié en 2001, Bergeon *et al.* [1] présentent une étude de l’instabilité de Marangoni-Bénard dans des cavités parallélépipédiques à section horizontale carrée en se focalisant sur les changements produits par le passage à une section horizontale faiblement rectangulaire. Les équations et hypothèses sous-jacentes sont celles que nous avons formulées dans le cas de la géométrie cylindrique. Les symétries sont en revanche essentiellement différentes.

L’adimensionnement des longueurs étant construit sur la hauteur  $H$  de la géométrie, en variable adimensionnée, la profondeur est égale à l’unité et la section horizontale est

un rectangle de dimension  $A_x \times A_y$  où  $A_y$  et  $A_x = A_y \epsilon$  définissent les deux rapports d'aspect de la cavité. Dans le cas d'une section horizontale carrée, on a  $\epsilon = 1$ . L'étude porte essentiellement sur le cas de petits rapports d'aspect avec  $A_y = 1.5$  et de faibles variations autour de la section carrée ( $|1 - \epsilon| \ll 1$ ). Pour simplifier la discussion, l'origine du domaine est par la suite choisie au centre de la surface  $z = 0$  du container, les axes  $(x, y)$  sont parallèles aux bords du domaine et la surface libre a pour cote  $z = 1$ .

Le principe d'échange de stabilité étant acquis dans ce problème, la solution conductive ( $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ ,  $T = T_0(z)$ ) perd sa stabilité par une bifurcation stationnaire associée à une valeur propre nulle dont la multiplicité dépend des symétries du mode marginal qui lui sont associées. Dans le cas de la géométrie à section horizontale carrée, le système est  $D_4$ -équivariant où  $D_4$  est le groupe des symétries du carré généré par  $S_x$ , la symétrie de réflexion par rapport au plan  $x = 0$ , et  $\Pi_{xy}$ , la symétrie de réflexion par rapport au plan  $x = y$ . Les symétries  $S_y$  et  $\Pi_{yx}$  correspondent quant à elles respectivement aux symétries par rapport aux plans  $y = 0$  et  $x = -y$ .

Les diagrammes de bifurcations correspondant aux cas  $(A_y, \epsilon) = (1.5, 1)$  et  $(1.5, 1.0006)$  sont représentés sur la figure 4.7. La bifurcation qui nous intéresse le plus pour appuyer notre discussion de la géométrie cylindrique à venir est la bifurcation qui déstabilise la solution conductive en  $Ma = Ma_{P_1}$ . La multiplicité de la valeur propre nulle en ce point de bifurcation est deux. Les deux modes linéairement indépendants sont des modes dont la structure prend la forme d'un rouleau de convection coaxial à l'une des deux directions  $x$  ou  $y$  (figure 4.8). Le premier mode propre est  $S_x$ -invariant et on le note  $f_1(x, y, z)$ . Le second  $f_2(x, y, z)$ , est  $S_y$ -invariant. Ces deux modes marginaux sont liés par l'opération de symétrie  $\Pi_{xy}$  :

$$f_2(x, y, z) = \Pi_{xy} f_1(x, y, z) = f_1(y, x, z). \quad (4.1)$$

Lorsque  $Ma = Ma_{P_1}$ , toute combinaison linéaire des modes  $f_1$  et  $f_2$  est donc un mode marginal. Au voisinage du seuil, une solution stationnaire est cherchée sous la forme :

$$w(x, y, z, t) = a_1(t) f_1(x, y, z) + a_2(t) f_2(x, y, z). \quad (4.2)$$

La théorie des bifurcations en présence des symétries  $D_4$  impose des règles de construction des équations d'évolution de  $a_1$  et  $a_2$ . En particulier, l'équivariance impose que ces équations doivent commuter avec les générateurs du groupe  $D_4$  qui dans l'écriture (4.2) et avec la convention d'affectation des modes de la figure 4.8, prennent la forme :  $S_x : (a_1, a_2) \rightarrow (a_1, -a_2)$  et  $\Pi_{xy} : (a_1, a_2) \rightarrow (a_2, a_1)$ . Moyennant ces contraintes, l'équation d'amplitude sur  $a_1$  (resp.  $a_2$ ) ne contiendra aux premiers ordres que des termes de la forme  $a_1$ ,  $a_2^2 a_1$  et  $a_1^3$  (resp.  $a_2$ ,  $a_1^2 a_2$  et  $a_2^3$ ). En notation complexe, en posant  $z = a_1 + ia_2$ , on a  $S_x : z \rightarrow \bar{z}$  et  $\Pi_{xy} : z \rightarrow i\bar{z}$ . Il en résulte que l'équation décrivant la dynamique de  $z$  ne peut contenir à l'ordre 3 que des termes de la forme  $z$ ,  $|z|^2 z$  et  $\bar{z}^3$ . En accord avec Crawford et Knobloch [3] et Golubitsky *et al.* [7, 8, 9], la forme normale de la bifurcation stationnaire en présence des symétries  $D_4$  s'écrit à l'ordre 3 :

$$\dot{a}_1 = (\lambda + \alpha a_2^2 + \beta(a_1^2 + a_2^2)) a_1, \quad \dot{a}_2 = (\lambda + \alpha a_1^2 + \beta(a_1^2 + a_2^2)) a_2, \quad (4.3)$$

où  $\lambda$  mesure l'écart au seuil,  $\lambda = (Ma - Ma_c)/Ma_c$ , et  $\alpha, \beta$  sont des coefficients réels. Il n'est pas difficile d'observer que deux familles de branches de points fixes non-triviaux ( $\dot{a}_1 = \dot{a}_2 = 0$  avec  $a_1, a_2 \neq 0$ ) émergent du point de bifurcation  $\lambda = 0$ . La première famille

est associée aux solutions pour lesquelles  $a_1 = 0$  ou  $a_2 = 0$  et, au regard de la structure du mode  $f_1$ , correspond à un rouleau coaxial aux directions  $x$  ou  $y$ . La deuxième famille est associée aux écoulements traversant dans la diagonale pour lesquels  $a_1 = a_2 \neq 0$ . De plus, une étude rapide indique que lorsque les deux bifurcations sont supercritiques si l'une des familles est stable au voisinage du seuil, l'autre est instable. Savoir laquelle des deux familles est stable requiert l'évaluation des coefficients  $\alpha$  et  $\beta$ . Les différents scénari sur la forme générale du diagramme de bifurcation sont discutés par Golubitsky *et al.* [7, 9].

Les résultats numériques de la figure 4.7(a) confirment ces prédictions théoriques et indiquent de plus que les structures stables sont de la forme  $(a, 0)$  et  $(0, a)$ . La théorie indique également la présence, au voisinage du seuil, d'une branche de solutions *mixtes* pour laquelle  $a_1, a_2$  sont simultanément non-nuls et non-égaux [12]. La figure 4.7(a) confirme encore la théorie au travers des bifurcations secondaires  $S_2, S'_2$  et  $S_1$  donnant naissance à une branche liant les solutions  $\Pi$ -invariantes aux solutions  $S$ -invariantes.

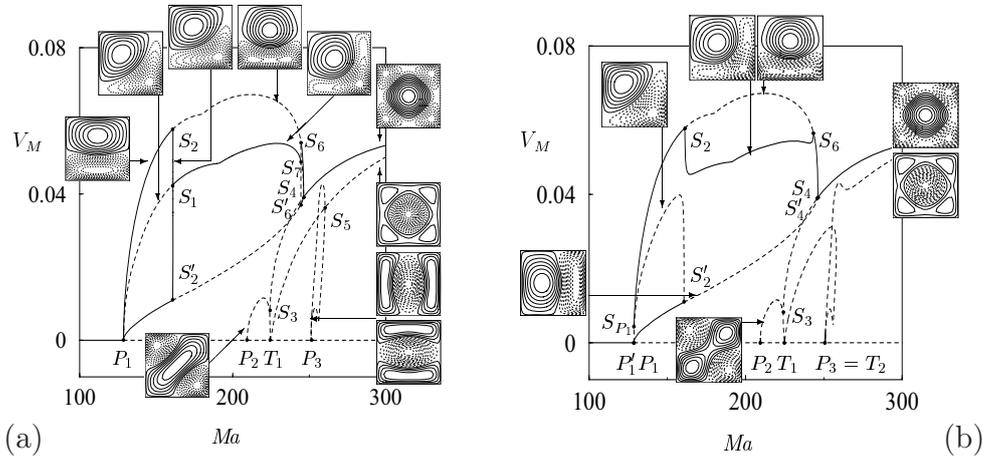


FIG. 4.7 – Diagramme de bifurcation donnant la valeur absolue maximale  $V_m$  de la vitesse dans la direction  $y$  (ici la direction verticale sur les snapshots) en fonction du nombre de Marangoni  $Ma$ . Les lignes continues indiquent la portion des branches où les solutions sont linéairement stables. Les calculs sont réalisés dans une configuration parallélépipédique  $\Omega = [-A_x/2, A_x/2] \times [-A_y/2, A_y/2] \times [0, 1]$  avec  $A_y = 1.5$  et (a)  $A_x = 1.5$  (b)  $A_x = 1.501$  ( $\epsilon = 1.0006$ ). Le nombre de Prandtl est  $Pr = 1$  et les snapshots représentent les isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan moyen  $z = 1/2$ . D'après [1].

FIG. 4.8 – Représentation de la combinaison linéaire des deux modes associés au point de bifurcation  $P_1$  de la figure 4.7(a). D'après [1].

Lorsque la géométrie est déformée vers des géométries à section horizontale rectangulaire, le système devient  $D_2$ -équivariant. La bifurcation  $P_1$  se scinde en deux bifurcations  $P_1$  et  $P'_1$  (figure 4.7(b)) associées chacune à une valeur propre nulle de multiplicité 1 et à un mode neutre respectivement  $S_y$  et  $S_x$  invariant. Compte tenu des symétries, il ne peut y avoir de modes  $\Pi_{xy}$  et  $\Pi_{yx}$  invariants. On retrouve l'effet de la disparition de la

branche de solutions  $\Pi$ -symétriques dans le régime non-linéaire au travers des branches issues des bifurcations secondaires  $S_{P_1}$ ,  $S_2$ ,  $S'_2$  et  $S_6$ . Clairement, la bifurcation secondaire  $S_1$  du cas à section carrée est devenue une bifurcation imparfaite facilement identifiable si l'on compare les deux figures 4.7(a) et (b) (on notera également des transformations similaires de la bifurcation fourche  $S_5$ ). De même, la branche associée aux écoulements  $\Pi$ -invariants dans le cas à section carrée et qui apparaissait via la bifurcation primaire  $P_1$  est désormais une bifurcation secondaire le long de la branche issue de  $P'_1$  donnant naissance à des écoulements asymétriques.

La nature des bifurcations peut elle aussi être affectée et certaines bifurcations primaires fourches dans la situation de la section carrée deviennent des bifurcations transcritiques dans le cas de la section rectangle. C'est par exemple le cas pour  $P_3$  (figure 4.7 (a)) qui devient la bifurcation transcritique  $T_2$  (figure 4.7 (b)), une conséquence du fait que le mode marginal est  $D_2$  symétrique dans les deux cas.

La comparaison des diagrammes met en évidence d'autres différences également interprétables par la théorie des bifurcations. Beaucoup des comportements relevés ici sont également présents dans notre étude des géométries cylindriques que nous présentons maintenant.

### 4.3 Instabilité de Marangoni-Bénard en géométrie cylindrique

Dans ce paragraphe, nous considérons les cas d'un cylindre à section transverse elliptique ou circulaire. On rappelle que  $\epsilon$  est le paramètre qui caractérise l'écart à la section circulaire,  $\epsilon = 1$  correspondant au cas circulaire et  $\epsilon \neq 1$  au cas elliptique. Les conditions aux limites dans la direction  $z$  étant pour la vitesse et la température d'un type différent en  $z = 0$  et  $z = 1$ , les symétries de la géométrie sont celles de la section transverse. Dans le cas circulaire, il s'agit du groupe  $O(2)$  des symétries du cercle générées par la rotation autour de l'axe du cylindre d'un angle quelconque et la réflexion par rapport à un plan vertical contenant un diamètre. La discrétisation spatiale ne possède quant à elle pas les mêmes symétries. Le découpage du domaine en éléments spectraux (figure 4.9) montre que le maillage, et par suite les équations discrétisées, ne possèdent que le groupe d'invariance  $D_4$  des symétries du carré (que nous avons déjà commenté) généré par les réflexions  $\Pi_{xy}$  et  $S_x$  par rapport aux plans  $x = y$  et  $x = 0$  du cylindre. Lorsque la section transverse est une ellipse, les équations continues et les équations discrètes possèdent toutes deux le même groupe d'invariance  $D_2$  des symétries du rectangle généré par  $S_x$  et  $S_y$ , qui sont les réflexions par rapport à  $x = 0$  et  $y = 0$ . La figure 4.9 résume les propriétés de symétrie à la fois des équations continues et des équations discrétisées. Il apparaît que si le cas de la section transverse elliptique posera peu de problèmes majeurs (tout du moins au regard des symétries), celui de la section transverse circulaire est plus délicat car même si la perte des propriétés de symétrie dans le passage au système discret est faible, son effet sur la stabilité et la nature des bifurcations peut s'avérer important.

Dans notre étude, les géométries considérées ont un rapport d'aspect modéré de  $A = 1$  ou  $A = 1.5$  et les gammes de nombre de Marangoni étudiées sont voisines du premier seuil d'instabilité. Le nombre de Prandtl est fixé à  $Pr = 1$ . Ce choix est essentiellement motivé par le fait que les seuils de stabilité linéaire ne sont pas affectés par le nombre de Prandtl.

Physiquement, cette valeur est voisine de certains sels fondus [10].

Afin d'introduire l'article qui synthétise l'ensemble de nos résultats, nous commentons la démarche adoptée. Elle consiste à interpréter les résultats numériques à l'aide de la théorie des bifurcations en présence de symétries.

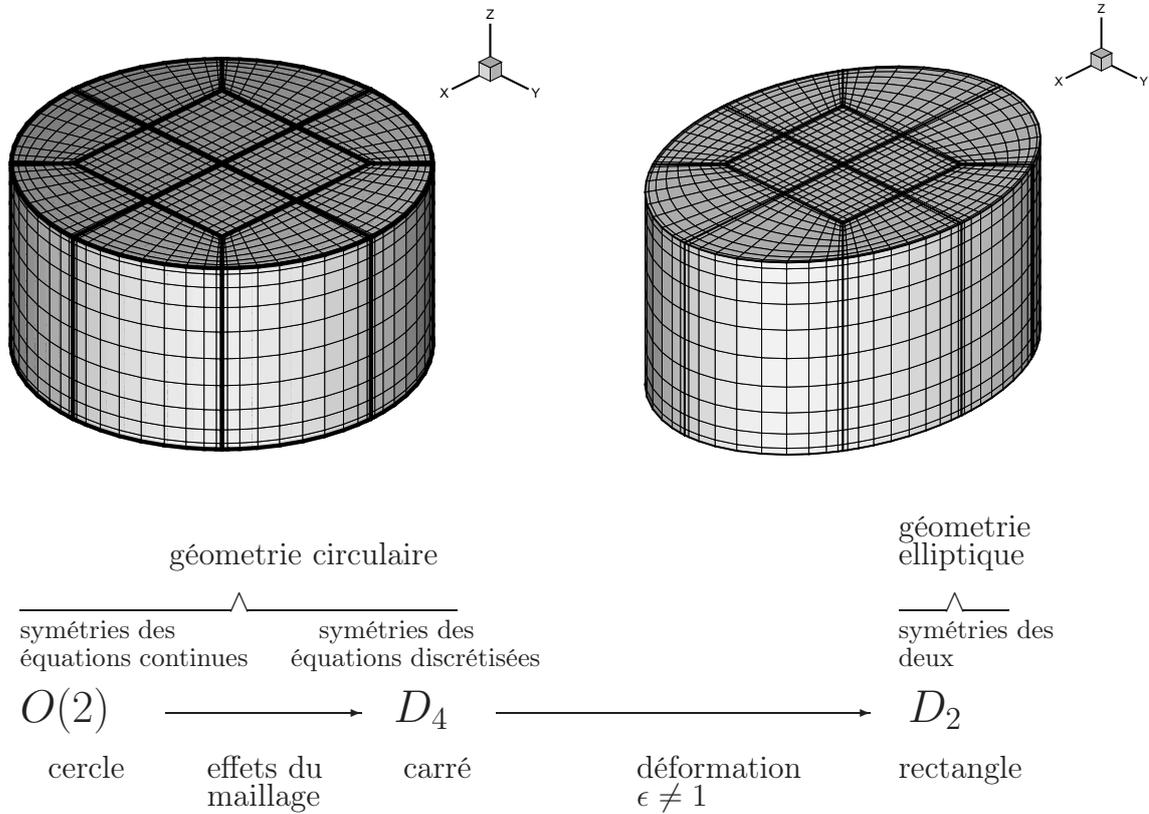


FIG. 4.9 – Vue schématique des symétries du problème. Le maillage est représenté pour une configuration cylindrique à base (a) circulaire ( $\epsilon = 1$ ) (b) elliptique ( $\epsilon = 0.9$ ). Le rapport d'aspect est  $A = 1$  et les paramètres numériques sont  $N_x = N_y = N_z = 10$ ,  $N_e = 12$ .

### 4.3.1 Cylindres à section circulaire

#### Analyse théorique et résultats numériques

Il est établi que les changements de stabilité de la solution conductive sont associés à des bifurcations (primaires) stationnaires [15, 17, 18] et nous considérons dans un premier temps la stabilité linéaire de la solution conductive. Pour des cylindres à section transverse circulaire, les équations sont invariantes par la rotation  $R_\phi$  d'un angle quelconque  $\phi$  autour de l'axe du cylindre et par la réflexion  $\kappa_{\phi_0}$  par rapport à un plan vertical (arbitraire) contenant l'axe du cylindre et d'angle azimutal  $\phi_0$  (angle mesuré par rapport au demi axe  $y = 0$  et  $x > 0$ ). Ensemble, ces deux opérations génèrent le groupe  $O(2)$  des symétries du cercle.

L'étude du problème montre que pour les rapports d'aspect que nous avons considérés, les modes propres associés aux premières bifurcations primaires sont du type  $m = 0$ ,

$m = 1$  et  $m = 2$  où  $m$  est le nombre d'onde azimutal [6]. Le mode  $m = 0$  correspond à une structure convective axisymétrique, les modes  $m \geq 1$  à des structures invariantes par les rotations discrètes  $r_{nm}$  :

$$r_{nm} : \varphi \rightarrow \varphi + \frac{2\pi n}{m} \pmod{2\pi}, \quad (4.4)$$

où  $\varphi$  est l'angle azimutal (l'angle polaire) et  $n \in \{1, \dots, m\}$ . Ainsi par exemple, un mode  $m = 1$  est invariant sous  $r_{11}$  qui est aussi l'identité  $I$  et un mode  $m = 2$  est invariant sous  $r_{22} = I$  et  $r_{21}$  qui correspond à une rotation d'un angle  $\pi$  autour de l'axe du cylindre.

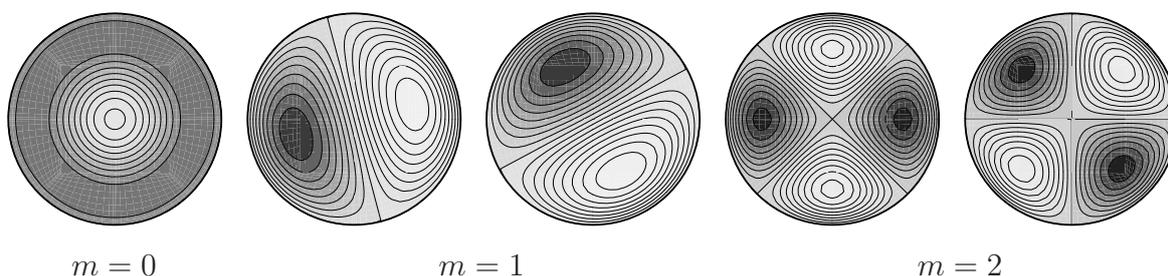


FIG. 4.10 – Modes propres évalués au voisinage des points de bifurcation primaire pour une cavité à section transverse circulaire de rapport d'aspect  $A = 1$  avec  $Pr = 1$ . La résolution est  $N_x = N_y = N_z = 10$  et  $N_e = 12$ . Sont représentées les isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan moyen  $z = 0.5$ .

Les modes propres sont représentés sur la figure 4.10. Ils ont été évalués au voisinage des points de bifurcation primaire pour un cylindre à section circulaire de rapport d'aspect  $A = 1$ . Le mode  $m = 0$  est invariant par toutes les symétries du groupe  $O(2)$  et est associé à une valeur propre nulle simple. Pour le mode  $m = 1$ , comme toutes les rotations du mode forment un mode différent associé à la même valeur propre, le sous espace associé à la valeur propre est de dimension 2. Deux vecteurs propres associés à la même valeur propre sont représentés sur la figure 4.10. La même remarque s'applique en fait pour tous les modes  $m > 0$  (voir les modes  $m = 2$  représentés sur la figure 4.10). L'examen des modes  $m = 1$  et  $m = 2$  révèle cependant une différence significative entre  $m = 1$  et  $m = 2$  : les deux modes propres  $m = 2$  ont des axes de symétrie qui épousent le maillage ce qui n'est pas le cas des modes  $m = 1$ . Nous reviendrons sur cette distinction induite par la manière différente dont les symétries du maillage affectent les bifurcations en fonction des symétries des modes propres auxquels elles sont associées.

On notera que les symétries  $O(2)$  sont également celles du même problème de Marangoni-Bénard dans un domaine bidimensionnel  $[0, \Gamma] \times [0, 1]$  présentant une surface libre en  $z = 1$  et muni de conditions aux limites périodiques dans la direction  $x$ . Ce problème que nous étudierons dans le chapitre suivant a les symétries de réflexion  $\kappa : x \rightarrow x_0 - x$  ( $x_0$  est arbitraire) et de translation  $T : x \rightarrow x + l \pmod{\Gamma}$  ce qui génère le groupe  $O(2)$ . De même que dans le cas du cylindre, l'état conductif est invariant par les symétries de  $O(2)$ .

Afin de clarifier la suite de l'exposé, on restreint la solution du problème à la vitesse verticale  $w(r, \varphi, z, t)$  où  $(r, \varphi, z)$  sont les coordonnées polaires associées au cylindre,  $\varphi$

représentant l'angle azimutal. Au voisinage d'un point de bifurcation, la solution s'écrit sous la forme  $w(r, \varphi, z, t) = a(t)f(r, \varphi, z)$  à laquelle s'ajoutent des termes supplémentaires associés à des modes stables de part et d'autre du seuil. Ici,  $f$  est le mode propre associé à la valeur propre nulle au point de bifurcation. En raison de la périodicité spatiale ( $f(r, \varphi, z) = f(r, \varphi + 2\pi, z)$ ), au point de bifurcation, il existe lorsque  $m \neq 0$  deux modes propres linéairement indépendants :  $f_1(r, \varphi, z) = g(r, z) \cos(m\varphi)$  et  $f_2(r, \varphi, z) = g(r, z) \sin(m\varphi)$ . Le sous-espace  $E_m$  associé à la valeur propre nulle est donc de dimension 2 et est décrit par toutes les combinaisons linéaires de ces deux modes. La décomposition de  $w$  s'écrit alors plutôt  $w(r, \varphi, z, t) = \frac{1}{2}(a(t)e^{im\varphi} + \bar{a}(t)e^{-im\varphi})g(r, z)$  à laquelle s'ajoutent des termes supplémentaires associés à des modes stables de part et d'autre du seuil. Dans cette expression, l'équation d'évolution de  $a$  est de la forme  $\dot{a} = F(a, \mu)$  où  $\mu$  mesure l'écart au seuil  $\mu = 0$  et  $F$  est une fonction non-linéaire représentant les équations d'évolution et les conditions aux limites réduites à la variable  $w$  écrite sous la forme précédente (la dépendance spatiale est incluse dans l'action des opérateurs différentiels des équations d'évolution sur les fonctions  $f$ ,  $f_1$  et  $f_2$  de sorte que l'équation sur  $a$  est une équation différentielle ordinaire). La solution conductive correspond à  $a = 0$  et on a bien sûr  $F(0, \mu) = 0$  quelque soit  $\mu$ . Au point de bifurcation  $\mu = 0$ , on a également  $\partial_a F(0, 0) = 0$  traduisant l'existence d'un sous espace associé à une ou plusieurs valeurs propres nulles.

Les symétries du problème sont la rotation  $R_\phi : \varphi \rightarrow \varphi + \phi \pmod{2\pi}$  et la réflexion  $\kappa_{\phi_0} : \varphi \rightarrow \phi_0 - \varphi$  définissant le groupe  $O(2)$  des symétries du cercle. Comme  $\phi_0$  est arbitraire, on le fixera à  $\phi_0 = 0$  et l'on notera  $\kappa = \kappa_{\phi_0=0}$ . L'opérateur  $\kappa$  représente la réflexion par rapport au plan  $y = 0$  et pourra être identifié à  $S_y$  dans la suite. Le groupe  $O(2)$  peut être représenté dans  $\mathbb{C}$  par les opérateurs  $R_\phi : a \rightarrow ae^{i\phi}$  et  $\kappa : a \rightarrow \bar{a}$ . Le complexe  $a = a_r + ia_i$  peut être transformé par un isomorphisme de  $\mathbb{C} \rightarrow \mathbb{R}^2$  en un vecteur  $(a_r, a_i)^t$  et les générateurs du groupe être également représentés dans  $\mathbb{R}^2$  par les opérateurs matriciels :

$$R_\phi = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi \\ \sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}, \quad \kappa = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.5)$$

Bien sûr, les deux représentations du groupe sont mathématiquement équivalentes. Elles sont également absolument irréductibles dans  $E_m$  lorsque  $m > 0$ . En d'autres termes, les seuls opérateurs linéaires qui commutent avec l'action des opérateurs de la représentation du groupe (4.5) dans  $E_m$  sont des scalaires fois l'identité [9]. Dans ce cas, si la dimension de la représentation du groupe liée au problème est supérieure à 1, la valeur propre au seuil a une multiplicité égale à la dimension de la représentation i.e. à son nombre d'éléments [3]. Dans le cas présent, ce résultat indique que les bifurcations associées à des modes propres  $m > 0$  sont toutes associées à une valeur propre nulle de multiplicité 2. Quant au mode  $m = 0$ , étant donné qu'il est  $O(2)$ -invariant, les éléments du groupe n'ont pas d'effet sur lui et il est associé à une valeur propre simple.

Les bifurcations stationnaires associées à des modes propres  $m > 0$  sont des fourches de révolution. En effet compte tenu que les symétries sont spatiales, l'équivariance s'obtient :

$$\frac{d\gamma a}{dt} = F(\gamma a, \mu) = \gamma \frac{da}{dt} = \gamma F(a, \mu) \quad \Rightarrow \quad F(\gamma a, \mu) = \gamma F(a, \mu), \quad (4.6)$$

quelque soit  $\gamma$  un élément du groupe. Donc, si  $a$  est associé à une solution stationnaire,  $\gamma a$  l'est aussi ce qui conduit par l'invariance par rotation, à un "cercle" de solutions

i.e. des solutions liées entre elles par une rotation solide autour de l'axe du cylindre. Ces solutions sont dynamiquement équivalentes. En effet, en différentiant l'équation autour d'une solution  $a$ , on obtient :

$$\gamma DF_{(a,\mu)} = DF_{(\gamma a,\mu)} \gamma, \quad (4.7)$$

où  $DF_{(a,\mu)}$  représente la dérivée de  $F$  par rapport à  $a$  évaluée en  $(a, \mu)$ . Donc si  $a \neq 0$  représente une solution non-triviale et  $(\lambda, h)$  un couple valeur propre - vecteur propre, alors on obtient facilement que :

$$DF_{(a,\mu)} h = \lambda h \quad \Rightarrow \quad DF_{(\gamma a,\mu)} \gamma h = \lambda \gamma h, \quad (4.8)$$

signifiant que toutes les solutions le long de la fourche de révolution ont les mêmes valeurs propres. On notera toutefois qu'à chaque solution est associée une valeur propre nulle additionnelle. En effet, la rotation  $R_\phi$  est une symétrie continue qui dépend continûment de l'angle de rotation  $\phi$ . On a bien sûr  $R_0 = I$  où  $I$  est l'identité. Si  $a$  est une solution stationnaire,  $R_\phi a$  est aussi solution et  $F(R_\phi a, \mu) = 0$  quelque soit  $\phi$ . En différentiant cette relation par rapport à  $\phi$  et en l'évaluant en  $\phi = 0$  :

$$DF_{(a,\mu)} \left. \frac{dR_\phi}{d\phi} \right|_{\phi=0} a = 0. \quad (4.9)$$

Cette relation indique qu'à la solution  $a$  est associé un vecteur propre  $ia$  associé à une valeur propre nulle. Il représente la dérivée de  $w$  par rapport à  $\varphi$  et n'a bien sûr d'existence que pour les solutions stationnaires associées à des modes  $m \neq 0$ . Une autre manière d'obtenir le même résultat est d'écrire que  $w(r, \varphi, z)$  est une solution quelque soit  $\varphi$ . En d'autres termes, si  $w$  est solution de  $g(w) = 0$ , alors :

$$\frac{\partial g}{\partial \varphi} = (D_w g) \frac{\partial w}{\partial \varphi} = 0, \quad (4.10)$$

où  $(D_w g)$  représente la Jacobienne du système non-linéaire (dont  $w$  est un point fixe) évaluée en  $w(r, \varphi, z)$ . Cette relation signifie que  $\partial w / \partial \varphi$  est un vecteur propre associé à une valeur propre nulle.

L'équivariance (4.6) impose des règles de construction de l'équation  $\dot{a} = F(a, \mu)$  qui contrôle l'évolution de  $a$  dans le régime faiblement non-linéaire. Dans notre étude, nous allons interpréter un certain nombre de résultats numériques obtenus en résolvant les équations complètes, à l'aide de modèles simples (équations d'amplitude) construits sur des arguments de symétrie exploitant largement l'équivariance. Nous serons particulièrement intéressés par des situations mettant en jeu des interactions de modes.

#### BIFURCATION ASSOCIÉE À UN MODE $m = 0$

Comme point de départ, on illustre la démarche en considérant par exemple l'équation d'amplitude associée à une bifurcation vers un mode  $m = 0$ . Au voisinage d'un point de bifurcation primaire associé à un mode propre  $m = 0$ , la solution peut s'écrire  $w(r, \varphi, z, t) = b(t) f_0(r, z)$  à laquelle s'ajoutent des termes supplémentaires associés à des modes stables de part et d'autre du point de bifurcation. Le sous-espace associé étant de

dimension 1, les grandeurs  $b$  et  $f_0$  sont réelles. L'équation d'amplitude contrôlant l'évolution de  $b$  est cherchée sous la forme :

$$\dot{b} = \alpha_0 + \alpha_1 b + \alpha_2 b^2 + \alpha_3 b^3 + \dots \quad (4.11)$$

où  $\alpha_i \in \mathbb{R}$  pour  $i \in \mathbb{N}$ . La solution  $b = 0$  est un point fixe quelque soit  $\mu$  et la stabilité linéaire de cette solution doit changer au passage de  $\mu = 0$ . En conséquence,  $\alpha_0 = 0$  et  $\alpha_1 = \mu$ . Compte tenu que les symétries du groupe n'affectent pas  $b$  (c'est à dire  $\gamma b = b$  pour tout  $\gamma$  dans le groupe de symétrie<sup>1</sup>), aucun des termes restant du développement n'est à priori à exclure. Dans la suite on ne retiendra que le premier terme non-linéaire :

$$\dot{b} = \mu b + \gamma b^2 + \dots, \quad (4.12)$$

où pour simplifier et en conformité avec l'article joint à ce chapitre, on a noté  $\gamma \equiv \alpha_2$ . Cette équation représente une bifurcation transcritique, l'amplitude des solutions stationnaires croissant proportionnellement à l'écart au seuil  $|\mu|$ .

#### BIFURCATION ASSOCIÉE À UN MODE $m = 1$ OU $m = 2$

Considérons maintenant une bifurcation primaire associée à un mode  $m = 2$ . Dans ce cas, l'amplitude  $a$  mise en jeu est complexe car le sous-espace associé est de dimension 2. De la même manière, on peut chercher l'équation d'amplitude sous la forme :

$$\dot{a} = \mu a + \alpha_{20} a^2 + \alpha_{11} |a|^2 + \alpha_{02} \bar{a}^2 + \alpha_{30} a^3 + \alpha_{21} |a|^2 a + \alpha_{12} |a|^2 \bar{a} + \alpha_{03} \bar{a}^3 + \dots$$

où les  $\alpha_{ij}$  sont à priori complexes et où l'on a déjà tenu compte des remarques précédentes permettant d'éliminer le terme  $\alpha_{00}$  et conduisant à  $\alpha_{10} = \mu$ . L'opérateur  $\kappa$  transforme  $a$  en  $\bar{a}$  et l'équivariance pour cette opérateur implique que les coefficients  $\alpha_{ij}$  sont réels. L'opérateur  $R_\phi$  transforme  $a$  en  $a e^{i\phi}$  et l'équivariance impose que cette opération transforme le membre de droite en lui même multiplié par  $e^{i\phi}$ . Ceci exclut les termes  $a^2, \bar{a}^2, a^3, |a|^2 \bar{a}, |a|^2$  et  $\bar{a}^3$ . Il ne reste alors que :

$$\dot{a} = \mu a + \alpha_{21} |a|^2 a + \dots \quad (4.13)$$

Bien entendu, une équation identique est obtenue pour le mode  $m = 1$ . Cette équation indique que la bifurcation est bien du type fourche, l'amplitude  $a$  des solutions stationnaires croissant en racine carré de l'écart au seuil  $|\mu|$ .

#### INTERACTION DES MODES $m = 0$ OU $m = 2$

L'interaction des modes  $m = 0$  et  $m = 2$  est étudiée en introduisant un couplage entre les deux équations précédentes. Cette interaction apparaît lorsque deux points de bifurcation primaire sont proches l'un de l'autre. La solution au voisinage de chacun des points de bifurcation s'écrit sous la forme générale :  $w(r, \varphi, z, t) = b(t) f_0(r, z) + \Re(a(t) e^{2i\varphi} f_1(r, z))$  à laquelle s'ajoutent des termes supplémentaires associés à des modes stables de part et d'autre des points de bifurcation. Ici,  $a$  est complexe et  $f_0, f_1$  et  $b$  sont réels. La représentation complexe du groupe  $O(2)$  s'écrit<sup>2</sup> :

$$R_\phi : (a, b) \rightarrow (a e^{i\phi}, b), \quad \kappa : (a, b) \rightarrow (\bar{a}, b). \quad (4.14)$$

<sup>1</sup>On ne confondra pas l'utilisation ponctuelle de  $\gamma$  comme élément du groupe de symétrie et de  $\gamma \in \mathbb{R}$  comme un paramètre de l'équation d'amplitude.

<sup>2</sup>L'angle  $\phi$  étant arbitraire, on peut par facilité aussi bien écrire pour l'étude de l'interaction des modes  $m = 0, 2$  :  $R_\phi : (a, b) \rightarrow (a e^{2i\phi}, b)$ . C'est ce choix qui est retenu dans l'article joint à ce chapitre mais il n'a aucune incidence.

L'amplitude  $b$  étant réelle, le terme de couplage en  $a$  de plus bas degré compatible avec l'équivariance pouvant être introduit dans l'expression de  $\dot{b}$  est  $|a|^2$ . De la même manière, les termes de plus bas degré en  $b$  compatibles avec l'équivariance et pouvant être introduits dans l'expression de  $\dot{a}$  sont  $ab$  et  $ab^2$  (bien entendu également  $ab^3$ , etc... mais on s'arrête à l'ordre 3). Les équations couplées s'écrivent alors :

$$\dot{a} = \mu a + \alpha_{21}|a|^2 a + \alpha_1 ab + \alpha_2 ab^2 + \dots \quad (4.15)$$

$$\dot{b} = \nu b + \gamma b^2 + \beta |a|^2 + \dots \quad (4.16)$$

où l'on a volontairement distingué les paramètres de bifurcation  $\mu$  et  $\nu$  de chacune des équations pour souligner que les deux bifurcations ne sont pas simultanées. Les symétries ne fixent pas les constantes réelles apparaissant dans ces deux équations qui sont déterminées par les équations complètes d'évolution au travers de l'expression des fonctions  $f_0$  et  $f_1$ . Néanmoins, l'étude des résultats numériques des diagrammes de bifurcations permet de déterminer le signe de certaines. Par exemple, si la bifurcation associée au mode  $m \neq 0$  est supercritique, en renormalisant les variables, on peut toujours écrire :

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \alpha_1 ab + \alpha_2 ab^2 + \dots \quad (4.17)$$

$$\dot{b} = \nu b + \gamma b^2 + \beta |a|^2 + \dots \quad (4.18)$$

Cette approche est exploitée dans la suite pour interpréter les résultats obtenus pour par exemple le rapport d'aspect  $A = 1$  dans le cas du cylindre à section transverse circulaire en particulier en raison de la proximité des bifurcations primaires associées aux modes  $m = 0$  et  $m = 2$ . Ces deux équations d'amplitude ne sont bien sûr pertinentes qu'au voisinage des seuils d'instabilité. Elles indiquent qu'il existe deux solutions qui sont d'une part  $(a, b) = (0, b)$  correspondant à une branche de solutions axisymétriques et  $(a, b)$  avec  $a, b \neq 0$  correspondant à la branche ayant le mode propre  $m = 2$  au seuil. Elles permettent de montrer que la branche  $m = 2$  termine effectivement sur la branche de solutions axisymétriques lorsque  $\mu + \alpha_1 b + \alpha_2 b^2 = 0$ .

#### COMPARAISON AVEC LES RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Le diagramme de bifurcation obtenu pour  $A = 1$  est présenté sur la figure 4.11 où est reporté le maximum  $w_m$  de la valeur absolue de la vitesse verticale  $w$  sur le domaine en fonction du nombre de Marangoni. La solution conductive correspond à  $w_m = 0$  et les lignes continues (resp. pointillées) aux solutions stables (resp. instables). Ne sont représentées que les solutions stationnaires. La stabilité des branches est indiquée par un couple d'entier  $p - q$  où  $p$  est le nombre de valeurs propres réelles positives et  $q$  le nombre de paires de valeurs propres complexes conjuguées à partie réelle positive.

La solution conductive est stable jusqu'en  $Ma_{P_1} = 109.03$  où elle subit une bifurcation stationnaire associée à un mode  $m = 1$  à l'issue de quoi elle devient deux fois instable. Le nombre de valeurs propres instables est lié à la multiplicité de la valeur propre nulle qui, comme nous l'avons mentionné, est égale à 2. La bifurcation est une fourche de révolution supercritique qui produit des solutions stables (moyennant une valeur propre nulle liée à l'invariance par rotation et associée à un vecteur propre proportionnel à la dérivée de la solution par rapport à l'angle azimutal). Une seconde bifurcation primaire apparaît en  $Ma_{P_2} = 161.1$  et est associée à un mode propre  $m = 2$ . De la même manière, la solution conductive initialement deux fois instable devient quatre fois instable au passage

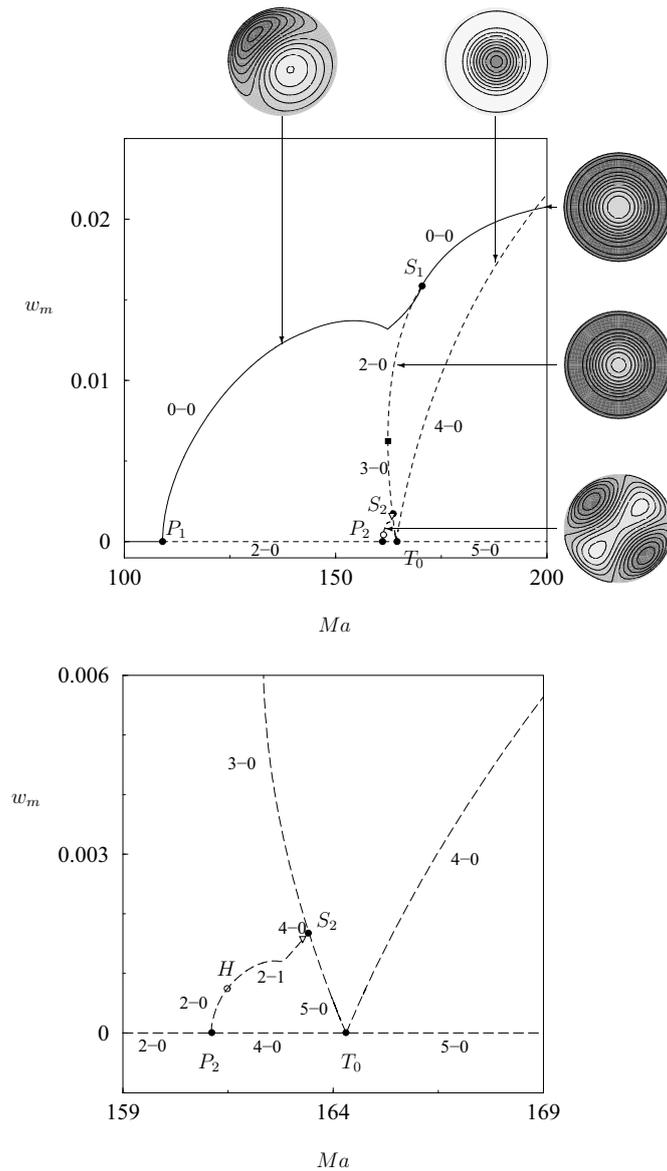


FIG. 4.11 – En haut : Diagramme de bifurcation représentant les variations du maximum absolu  $w_m$  de la vitesse verticale en fonction du nombre de Marangoni. En bas : Vue rapprochée au voisinage de l'interaction des branches issues de  $P_2$  et  $T_0$ . Les snapshots représentent les isovaleurs de la vitesse verticale  $w$  dans le plan milieu  $z = 1/2$  avec en clair (foncé) les régions  $w > 0$  ( $w < 0$ ). Les paramètres sont  $A = 1$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $Pr = 1$  et la résolution est  $N_x = N_y = N_z = 10$ .

de ce point. Enfin, apparaît en  $Ma_{T_0} = 162.34$  une troisième bifurcation primaire associée cette fois à un mode  $m = 0$ , au passage de laquelle la solution conductive devient cinq fois instable (le sous espace propre étant de dimension 1). Cette dernière bifurcation est transcritique, la partie sous-critique étant au voisinage du seuil cinq fois instable, la partie supercritique quatre fois instable. La figure 4.11 montre comment la branche  $m = 0$  et les branches  $m = 1$  et  $m = 2$  interagissent. La partie sous-critique de la branche issue de  $T_0$

traverse le point de bifurcation  $S_2$  auquel les branches de solutions issues de  $P_2$  terminent. Cette bifurcation secondaire est mathématiquement identique à celle apparaissant en  $P_2$  car la solution conductive et les solutions axisymétriques partagent les mêmes propriétés de symétrie (elles sont  $O(2)$  invariantes). Les branches de solutions issues de la fourche de révolution en  $P_2$  sont donc des courbes fermées. Elles traversent un point de bifurcation de Hopf à l'issue duquel elles possèdent deux valeurs propres réelles positives et deux complexes conjuguées à partie réelle positive. Ces dernières collisionnent par la suite pour former 4 valeurs propres réelles. L'une d'elle décroît à mesure que  $Ma$  croît pour devenir nulle en  $Ma_{S_2}$ . Après le passage du point  $S_2$  la branche sous-critique issue de  $T_0$  traverse un noeud-col pour devenir 2 fois instable avant de traverser le point de bifurcation  $S_1$  au delà duquel elle est stable. La bifurcation en  $S_1$  est mathématiquement équivalente à celle en  $P_1$  et est associée au point où les branches issues de  $P_1$  se terminent.

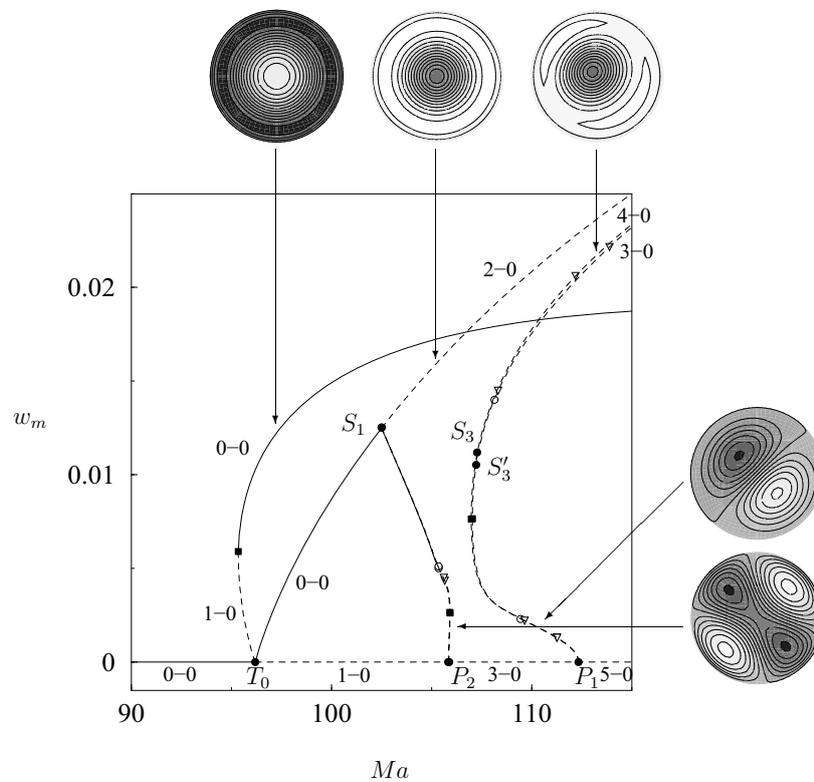


FIG. 4.12 – Diagramme de bifurcation représentant les variations du maximum absolu  $w_m$  de la vitesse verticale en fonction du nombre de Marangoni. Les snapshots représentent les isovalues de la vitesse verticale  $w$  dans le plan milieu  $z = 1/2$  avec en clair (foncé) les régions  $w > 0$  ( $w < 0$ ). Les paramètres sont  $A = 1.5$ ,  $\epsilon = 1$ ,  $Pr = 1$  et la résolution est  $N_x = N_y = N_z = 10$ .

On le voit, les résultats numériques sont en accord avec les prédictions théoriques. Ils indiquent également que pour ce rapport d'aspect et ce choix de paramètres, les solutions stables évoluent continûment d'un mode  $m = 1$  vers un mode axisymétrique pour lequel le fluide remonte vers la surface libre par l'axe principal du cylindre. Il n'y a pas de régions de bistabilité.

Le diagramme de bifurcation obtenu pour  $A = 1.5$  est présenté sur la figure 4.12 où est reporté le maximum  $w_m$  de la valeur absolue de la vitesse verticale  $w$  sur le domaine en fonction du nombre de Marangoni. En  $Ma = 96.19$ , la solution conductive perd sa stabilité en une bifurcation transcritique notée  $T_0$  associée à des solutions axisymétriques ( $m = 0$ ). La partie supercritique (stable) correspond à des écoulements où le fluide remonte le long des parois latérales et descend au centre du domaine. La branche sous-critique, initialement une fois instable passe par un noeud-col à l'issue duquel elle recouvre sa stabilité. La solution conductive subit une seconde bifurcation en  $Ma_{P_2} = 105.87$ . C'est une bifurcation supercritique associée à un mode propre  $m = 2$ . Le sous-espace propre étant de dimension 2, après cette bifurcation la solution conductive initialement 1 fois instable est 3 fois instable. La bifurcation  $P_2$  est une fourche de révolution de sorte que les solutions qui en émergent sont une fois instable modulo une valeur propre nulle. Cette branche passe un noeud-col (représenté par un carré noir) à l'issue duquel elle est deux fois instable. Elle se restabilise par une bifurcation de Hopf sous-critique avant de terminer en  $S_1$  le long de la branche super-critique de solutions axisymétriques qu'elle déstabilise. Cette dernière est alors 2 fois instable pour  $Ma > Ma_{S_1}$ . Finalement, en  $Ma_{P_1} = 112.35$ , la solution conductive traverse une bifurcation  $P_1$  au delà de laquelle elle est 5 fois instable. Les modes propres associés sont du type  $m = 1$  et la bifurcation est sous-critique. La figure montre en fait que deux branches émergent de  $P_1$  et que ces deux branches correspondent à des solutions dynamiquement différentes. En particulier, elles passent chacune un noeud-col pour une valeur différente de  $Ma$  et sont liées l'une à l'autre par une branche joignant les bifurcations secondaires  $S_3$  et  $S'_3$ . Ceci est en contradiction avec les prédictions théoriques et est typiquement induit par le maillage. Nous l'analysons dans la suite.

### Effet de la grille sur le domaine circulaire

Comme nous l'avons mentionné, le découpage en élément spectraux ne possède pas les symétries  $O(2)$  mais plutôt les symétries  $D_4$  du carré. L'impact sur les résultats numériques est ressenti au niveau des bifurcations primaires, des bifurcations secondaires et de la stabilité linéaire des solutions et ceci de manière différente suivant les modes associés aux branches de bifurcation. On se propose de regarder l'impact sur l'interaction des modes  $m = 0$  avec  $m = 1$  et  $m = 2$ .

Dans la suite, on rappelle que, comme dans l'étude des géométries parallélépipédiques à section horizontale carrée, on note  $S_x$  et  $S_y$  les réflexions par rapport aux plans  $x = 0$  et  $y = 0$  respectivement, ainsi que  $\Pi_{xy}$  et  $\Pi_{yx}$  les réflexions par rapport aux plans  $x = y$  et  $x = -y$ , respectivement (figure 4.13). Il faut remarquer que cette notation diffère de celle utilisée dans l'article que nous joignons à ce chapitre. Enfin, on rappelle que l'azimut  $\varphi = 0$  correspond à l'axe des  $x > 0$  (figure 4.13).

#### INTERACTION DES MODES $m = 0$ ET $m = 2$

Le groupe  $D_4$  est généré par exemple par la réflexion  $S_y$  par rapport au plan vertical d'équation  $y = 0$  et par la rotation  $R_{\frac{\pi}{2}}$ . Il comprend 8 éléments dont l'action sur un mode propre associé à une valeur propre simple est représenté sur la figure 4.14. On considère dans un premier temps l'équation d'amplitude d'une bifurcation associée à un mode  $m = 2$  sans introduire l'interaction avec le mode  $m = 0$ . Dans l'écriture de  $w$  sous la forme  $w(r, \varphi, z, t) = \Re(a(t)e^{2i\varphi} f_2(r, z)) + \dots$  le terme  $a_r \cos(2\varphi)$  est associé aux modes

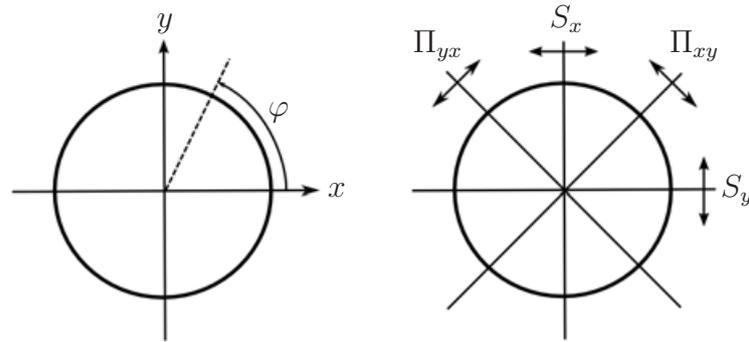


FIG. 4.13 – Vue de la section transverse circulaire d’un cylindre indiquant les opérateurs utilisés dans la suite

$I$	$R_{\frac{\pi}{2}}$	$R_{\pi}$	$R_{\frac{3\pi}{2}}$	$\Pi_{xy}$	$S_x$	$\Pi_{yx}$	$S_y$

FIG. 4.14 – Tableau des transformations par les 8 éléments du groupe  $D_4$  des vecteurs propres associés à des valeurs propres de multiplicité 1.

$S_x$  et  $S_y$  invariants (seconde ligne du tableau de la figure 4.14) tandis le terme  $a_i \sin(2\varphi)$  est associée aux modes  $\Pi_{xy}$  et  $\Pi_{yx}$  invariants (troisième ligne du tableau de la figure 4.14). Pour chacun des termes, le tableau indique que l’action des opérateurs du groupe se réduit à une multiplication du mode propre par  $\pm 1$ , la multiplication par  $+1$  n’imposant aucune contrainte par le biais de l’équivariance sur l’équation d’amplitude. Pour le mode en  $a_r \cos(2\varphi)$ , l’équivariance implique donc l’invariance de l’équation par les symétries  $\Pi_{xy}$ ,  $\Pi_{yx}$ ,  $R_{\frac{\pi}{2}}$  et  $R_{\frac{3\pi}{2}}$ , c’est à dire simplement par la transformation  $(a_r, a_i) \rightarrow (-a_r, a_i)$  soit  $a \rightarrow -\bar{a}$ . De même, pour le mode en  $-a_i \sin(2\varphi)$ , l’équivariance implique l’invariance de l’équation par les symétries  $S_x$ ,  $S_y$ ,  $R_{\frac{\pi}{2}}$  et  $R_{\frac{3\pi}{2}}$  c’est à dire simplement par la transformation  $(a_r, a_i) \rightarrow (a_r, -a_i)$  soit  $a \rightarrow \bar{a}$ . Comme  $D_4$  est inclus dans  $O(2)$ , les termes déjà présents dans l’équation (4.13) vérifient ces contraintes. Les termes de plus bas degré que l’on peut

ajouter en restant compatible avec ces contraintes sont proportionnels à  $a$  et à  $\bar{a}$ . Mais les termes proportionnels à  $a$  ne modifient pas l'équation. Celle-ci s'écrira donc en absence d'interaction avec le mode  $m = 0$  i.e. en posant  $b = 0$  :

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \varepsilon \bar{a} + \dots \quad (4.19)$$

où  $\varepsilon$  est un terme petit mesurant l'impact du maillage. Elle est semblable à l'équation que nous aurions exploitée dans le cas d'un problème ayant les symétries  $D_4$  pour modéliser l'interaction des branches issues de bifurcations associées aux modes (b) et (d) de la figure 4.15 et obtenus par Bergeon *et al.* [1] dans l'étude du problème de Marangoni-Bénard dans des cavités à section transversale carrée. En décomposant les parties réelles et imaginaires, ce couplage prend ici la forme :

$$\dot{a}_r = (\mu + \varepsilon)a_r - |a|^2 a_r + \dots \quad (4.20)$$

$$\dot{a}_i = (\mu - \varepsilon)a_i - |a|^2 a_i + \dots \quad (4.21)$$

Dans le cas d'une géométrie à section horizontale carrée,  $a_r$  et  $a_i$  seraient respectivement les amplitudes des modes (d) et (b) de la figure 4.15.

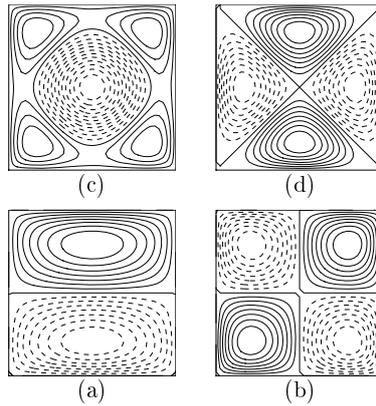


FIG. 4.15 – Modes propres associés aux points de bifurcation primaires obtenus dans l'étude de l'instabilité de Marangoni-Bénard dans une cavité tridimensionnelle à section horizontale carrée. Les champs représentent les isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan moyen avec en pointillés les valeurs négatives et en traits continus les valeurs positives. On notera que pour le mode (a), le sous espace propre de dimension 2 est décrit par ce mode et sa rotation de  $\pi/2$ . Les autres modes sont associés à des espaces propres de dimension 1. D'après [1]

La conséquence importante est que le maillage affecte la multiplicité des valeurs propres associées à la stabilité linéaire de la solution conductive car l'équation révèle que la bifurcation vers des modes  $m = 2$  (par exemple la bifurcation  $P_2$  de la figure 4.11) s'est scindée en deux bifurcations primaires. Cette séparation du seuil traduit l'instabilité structurelle de cette bifurcation aux perturbations ramenant les symétries de  $O(2)$  à  $D_4$ . Le mode  $m = 0$  n'est en principe pas affecté puisqu'il est invariant dans  $O(2)$  et donc dans  $D_4$ . Mais un terme petit peut être ajouté modélisant le déplacement du seuil lié au maillage.

Nous l'incluons dans l'expression de  $\nu$ . Le couplage  $m = 0$  avec  $m = 2$  s'écrit donc :

$$\dot{a} = \mu a + \varepsilon \bar{a} - |a|^2 a + \alpha_1 a b + \alpha_2 a b^2 + \dots \quad (4.22)$$

$$\dot{b} = \nu b + \gamma b^2 + \beta |a|^2 + \dots \quad (4.23)$$

#### INTERACTION DES MODES $m = 0$ ET $m = 1$

Un raisonnement analogue peut être conduit pour la bifurcation associée à un mode propre  $m = 1$ . Au voisinage d'un point de bifurcation associé à un mode propre  $m = 1$ ,  $w$  s'écrit sous la forme  $w(r, \varphi, z, t) = \Re(a(t)e^{i\varphi} f_1(r, z)) + \dots$ . Le premier terme  $a_r \cos(\varphi) f_1(r, z)$  de la partie réelle correspond à un mode  $S_y$ -invariant et le second terme  $-a_i \sin(\varphi) f_1(r, z)$  à un mode  $S_x$ -invariant. Ils sont associés à une valeur propre nulle de multiplicité 2 dans  $O(2)$ . Pour savoir ce qu'il en est dans  $D_4$ , on cherche les termes susceptibles d'être ajoutés à l'équation qui soient compatibles avec l'équivariance pour deux générateurs du groupe  $D_4$  :

$$S_y : (a_r, a_i) \rightarrow (a_r, -a_i), \quad R_{\frac{\pi}{2}} : (a_r, a_i) \rightarrow (-a_i, a_r), \quad (4.24)$$

dont la représentation complexe s'écrit :  $S_y : a \rightarrow \bar{a}$  et  $R_{\frac{\pi}{2}} : a \rightarrow ia$  (figure 4.16).

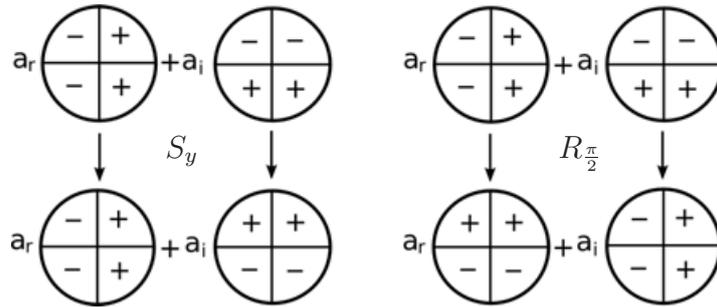


FIG. 4.16 – Représentation complexe de l'action des opérateurs  $S_y$  et  $R_{\frac{\pi}{2}}$  sur l'approximation de  $\Re(a(t)e^{i\varphi} f_1(r, z)) = [a_r \cos(\varphi) - a_i \sin(\varphi)] f_1(r, z)$  de la solution au voisinage d'un point de bifurcation associé à un mode  $m = 1$ .

Il est tout de suite clair qu'outre un terme proportionnel à  $a$ , il n'est pas possible d'ajouter un terme qui modifie structurellement la partie linéaire des équations. Un terme de la forme  $\varepsilon \bar{a}$  est exclu par l'invariance par rotation i.e. par l'équivariance de l'équation pour  $R_{\frac{\pi}{2}}$ . Ceci signifie que la multiplicité de la valeur propre associée au mode  $m = 1$  n'est pas affectée. En fait, il est aisé de s'apercevoir que le seul terme susceptible d'être ajouté jusqu'à l'ordre 3 est un terme proportionnel à  $\bar{a}^3$ . L'équation s'écrit alors :

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \varepsilon \bar{a}^3 + \dots \quad (4.25)$$

où  $\varepsilon$  est un petit paramètre mesurant l'effet de la discrétisation. Cette équation est similaire à l'équation (4.3) exploitée dans l'étude des cavités à section horizontale carrée [1] et conforme à l'expression de la forme normale de la bifurcation stationnaire en présence

des symétries  $D_4$  étudiée par Crawford et Knobloch [3] et Golubitsky *et al.* [7, 8, 9]. En effet, en identifiant partie réelle et partie imaginaire, l'équation se réécrit :

$$\dot{a}_r = (\mu + \beta' (a_r^2 + a_i^2) + \alpha' a_i^2) a_r + \dots, \quad (4.26)$$

$$\dot{a}_i = (\mu + \beta' (a_r^2 + a_i^2) + \alpha' a_r^2) a_i + \dots, \quad (4.27)$$

avec  $\beta' = \varepsilon - 1$  et  $\alpha' = 1 - 4\varepsilon$ . Cette expression est bien identique à l'équation (4.3). Au final, l'interaction des modes  $m = 0$  et  $m = 1$  s'écrit donc :

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \alpha_1 ab + \alpha_2 ab^2 + \varepsilon \bar{a}^3 + \dots \quad (4.28)$$

$$\dot{b} = \nu b + \gamma b^2 + \beta |a|^2 + \dots \quad (4.29)$$

#### COMPARAISON AVEC LES RÉSULTATS NUMÉRIQUES

Pour vérifier ces prédictions théoriques, nous avons calculé le diagramme de bifurcation pour le cylindre de rapport d'aspect  $A = 1$  à section circulaire avec une grille faible dans la direction horizontale ( $N_x = N_y = 6$ ). Les résultats sont reportés sur la figure 4.17 sous la forme de l'énergie cinétique en fonction du nombre de Marangoni. L'utilisation de cette quantité plutôt que du maximum absolu de la vitesse verticale permet d'éviter une séparation des branches de bifurcation induite par le fait que la valeur du maximum est mesurée sur la grille : deux solutions ne différant que d'une rotation solide pourraient avoir des valeurs différentes.

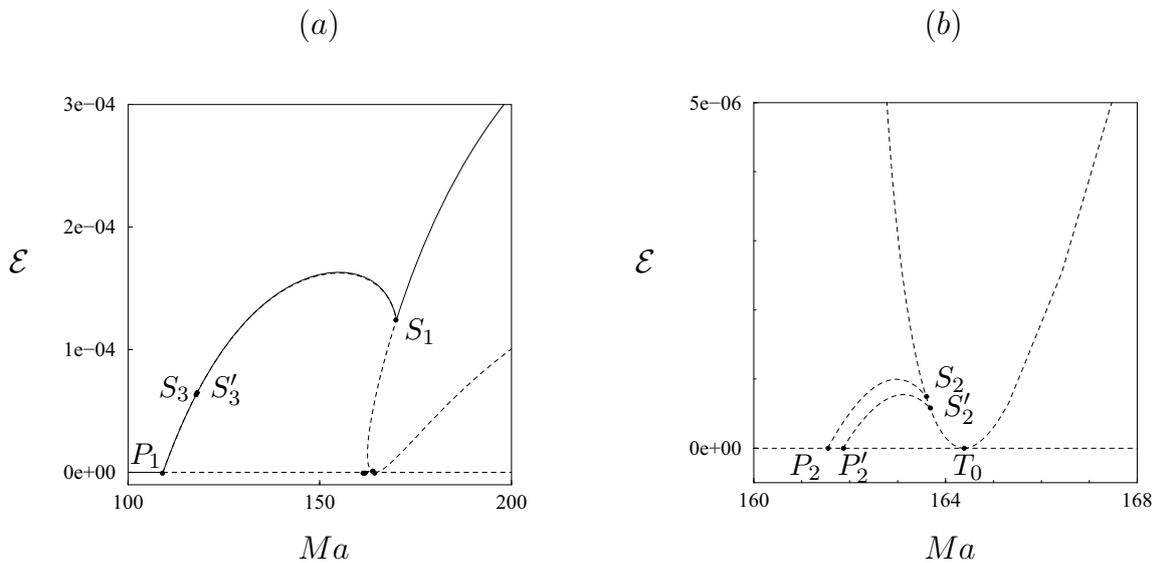


FIG. 4.17 – (a) Diagramme de bifurcation représentant les variations de l'énergie cinétique  $\mathcal{E} = \int_{\Omega} (u^2 + v^2 + w^2) d\Omega$  en fonction du nombre de Marangoni pour  $A = 1$ ,  $\varepsilon = 1$ ,  $Pr = 1$ . La résolution est  $N_x = N_y = 6$  et  $N_z = 10$ . (b) Vue rapprochée de (a).

La figure 4.17 montre nettement que le point de bifurcation  $P_1$  associé à un mode propre  $m = 1$  sur une grille fine (figure 4.11) reste associé à une valeur propre double. Quatre branches de solutions en émergent simultanément qui correspondent à des solutions  $S_x$ ,  $S_y$ ,  $\Pi_{xy}$  et  $\Pi_{yx}$  invariantes. Un examen attentif révèle qu'elles ne se superposent

pas dans le régime non-linéaire : plus exactement les branches de solutions  $\Pi$ -invariantes se superposent et les branches de solutions  $S$ -invariantes aussi mais pas les deux familles. Ceci est en accord avec la prédiction théorique et provient directement du terme  $\varepsilon \bar{a}^3$ . Le point de bifurcation primaire  $P_2$  sur une grille fine (figure 4.11) s'est dissocié en deux points de bifurcation  $P_2$  et  $P'_2$  associés respectivement à des solutions  $S$ -invariantes et  $\Pi$ -invariantes. La même remarque s'applique aux points de jonction  $S_2$  et  $S'_2$  entre ces branches et la partie sous-critique de la branche issue de la bifurcation transcritique  $T_0$  associée à un mode propre axisymétrique ( $m = 0$ ). Compte tenu que ces solutions partagent les mêmes symétries que la solution conductive (à savoir elles sont invariantes sous toutes les symétries de  $D_4$ ), la prédiction théorique s'applique le long de cette branche de la même manière que pour la solution conductive : le point de bifurcation secondaire  $S_2$  s'est scindé en deux points de bifurcation tandis que  $S_1$  est resté une bifurcation associée à une valeur propre nulle de multiplicité 2. On notera toutefois que les branches  $S$ -invariantes et  $\Pi$ -invariantes émergeant simultanément en  $P_1$  correspondent ici à des solutions dynamiquement différentes. La théorie permet également d'interpréter la formation des branches de bifurcation secondaires liant entre  $S_3$  et  $S'_3$  les branches de solutions  $S$ -invariantes et  $\Pi$  invariantes. Ce type de jonction est aussi observée dans l'étude des cavités à section horizontale carrée que nous avons présentée précédemment [1]. L'article reporté dans la suite de ce chapitre donne plus d'informations sur l'évolution des valeurs propres le long des branches du diagramme.

### 4.3.2 Cylindre à section transverse elliptique

L'étude des cylindres à section transverse elliptique change les symétries du problème. Pour les équations discrètes, le groupe de symétrie passe de  $D_4$  au groupe  $D_2$  des symétries du rectangle. Pour les équations continues, on passe de  $O(2)$  au groupe  $D_2$ . Le groupe  $D_2$  est généré par les deux réflexions  $S_x$  et  $S_y$  par rapport aux plans  $x = 0$  et  $y = 0$  respectivement. On va procéder de la même manière que pour l'étude du passage des symétries  $O(2)$  à  $D_4$  en regardant l'effet de ce changement sur l'interaction du mode  $m = 0$  avec  $m = 1$  puis  $m = 2$  dans le passage des symétries  $D_4$  des équations discrètes en géométrie circulaire aux symétries  $D_2$  des équations discrètes en géométrie elliptique.

Pour une bifurcation vers un mode  $m = 1$ , les deux symétries  $x \rightarrow -x$  et  $y \rightarrow -y$  transforment l'amplitude  $a$  en respectivement  $-\bar{a}$  et  $\bar{a}$ . Les termes susceptibles d'être introduits dans les équations (4.28,4.29) sont imposés par l'équivariance sous ces deux opérations. Il est aisé de voir que les termes de plus bas degré sont de la forme  $a$  et  $\bar{a}$ . Le terme en  $a$  ne changeant pas la forme de l'équation d'amplitude, on ne l'inclut pas. La partie linéaire de l'équation sur  $a$  se réduit alors à  $\dot{a} = \mu a + \delta \bar{a}$  où  $|\delta| \ll 1$  est proportionnel à l'ellipticité de la section. Cette relation indique que la bifurcation vers les modes  $m = 1$  associés à une valeur propre double dans le cas de la section circulaire s'est scindée en deux bifurcations apparaissant respectivement en  $\mu = -\delta$  (pour les modes  $S_y$ -invariants) et en  $\mu = \delta$  (pour les modes  $S_x$ -invariants). Le signe de  $\delta$  dépend de la manière dont est déformé le cylindre. Pour le rapport d'aspect  $A = 1$  avec  $\epsilon = 0.9$ , on a  $\delta > 0$  indiquant que la première bifurcation primaire est associée à un mode marginal  $S_x$ -invariant (figure 4.18) De la même manière, la bifurcation secondaire  $S_1$  dans le cas d'une section circulaire (figure 4.11) est scindée en deux bifurcations  $S_1$  et  $S'_1$  en raison

du fait que les solutions des branches issues de  $T_2$  (bifurcation transcritique) partagent exactement les mêmes symétries que la solution conductive.

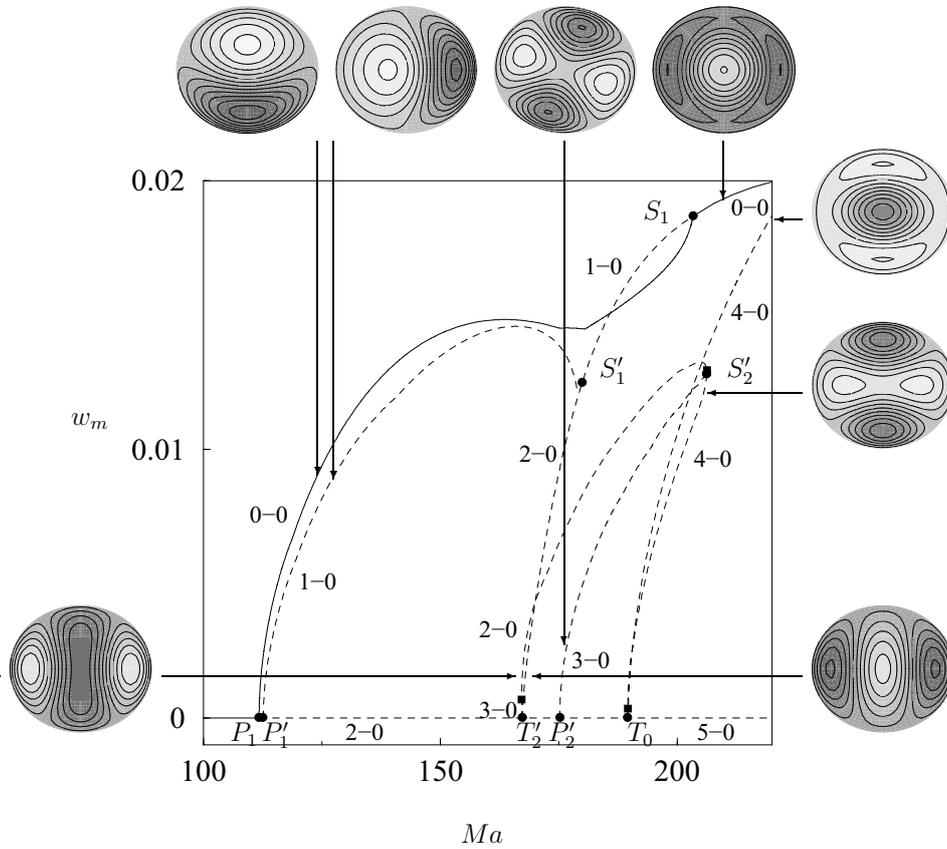


FIG. 4.18 – Diagramme de bifurcation représentant les variations du maximum absolu  $w_m$  de la vitesse verticale en fonction du nombre de Marangoni. Les snapshots représentent les isocontours de la vitesse verticale  $w$  dans le plan milieu  $z = 1/2$  avec en clair (foncé) les régions  $w > 0$  ( $w < 0$ ). Les paramètres sont  $A = 1$ ,  $\epsilon = 0.9$ ,  $Pr = 1$  et la résolution est  $N_x = N_y = N_z = 10$ .

La comparaison de ce diagramme avec le cas circulaire (figure 4.11) révèle que l'interaction des branches associées aux modes  $m = 2$  et  $m = 0$  a subi d'importants changements. Les actions des symétries  $S_x$  et  $S_y$  sur un mode  $m = 2$  sont les mêmes : elles laissent invariant  $a_r$  (le préfacteur de  $\cos(2\varphi)$ ) et change le signe de  $a_i$  (le préfacteur de  $-\sin(2\varphi)$ ). Donc elles s'écrivent  $a \rightarrow \bar{a}$ . De la même manière que précédemment, la recherche de termes compatibles avec l'équivariance sous l'opérateur  $(a, b) \rightarrow (\bar{a}, b)$  montre que les termes de plus bas degré pouvant être introduits dans les équations (4.22,4.23) de la section circulaire, amènent au système :

$$\dot{a} = \mu a + (\epsilon + \delta_0)\bar{a} + \delta_1 b - |a|^2 a + \alpha_1 ab + \alpha_2 ab^2 + \dots \quad (4.30)$$

$$\dot{b} = \nu b + \gamma b^2 + \beta |a|^2 + \frac{\delta_2}{2}(a + \bar{a}) + \dots \quad (4.31)$$

où  $\epsilon$  représente l'effet de la grille et  $\delta_0, \delta_1, \delta_2$  l'effet de l'ellipticité. Il est clair que l'effet de

l'ellipticité domine l'effet de la grille sur les symétries du système. On pose dans la suite  $\varepsilon' = \varepsilon + \delta_0$ . On s'intéresse aux solutions stationnaires de ces deux équations couplées. Pour ce faire, on pose  $a = \rho e^{i\psi}$ . La phase  $\psi$  représente le déphasage de la solution non-linéaire avec le mode propre : au voisinage de la bifurcation, la solution est de la forme  $w = \rho(\mu) \cos(2\varphi + \psi) f_2(r, z) + b(t) f_0(r, z) + \dots$ . On insère l'expression de  $a$  dans l'équation (4.30) et l'on identifie partie réelle et imaginaire. On obtient :

$$\mu\rho - \rho^3 + \alpha_1\rho b + \alpha_2\rho b^2 + \varepsilon'\rho \cos(2\psi) + \delta_1 b \cos \psi = 0, \quad (4.32)$$

$$(2\varepsilon'\rho \cos \psi + \delta_1 b) \sin \psi = 0, \quad (4.33)$$

$$\nu b + \beta\rho^2 + \gamma b^2 + \delta_2\rho \cos \psi = 0. \quad (4.34)$$

La deuxième équation indique qu'il existe des solutions vérifiant  $\sin \psi = 0$  pour lesquels  $a = \pm\rho \in \mathbb{R}$  est solution de :

$$\mu a + \varepsilon'\bar{a} + \delta_1 b - a^3 + \alpha_1 a b + \alpha_2 a b^2 = 0, \quad (4.35)$$

$$\nu b + \gamma b^2 + \beta a^2 + a = 0. \quad (4.36)$$

Ces solutions sont de la forme  $w = a f_2(r, z) \cos(2\varphi) + b f_0(r, z) + \dots$  et correspondent aux modes  $D_2$  symétriques que nous avons identifiés. Elles sont donc produites par une bifurcation transcritique (le détail de la démonstration est mené dans l'article joint à ce chapitre).

L'autre solution correspond à  $2\varepsilon'\rho \cos \psi + \delta_1 b = 0$  ce qui indique qu'à la différence de la solution précédente, la phase évolue avec les amplitudes  $b$  et  $\rho$ . En remplaçant dans la relation (4.32) l'expression de  $\rho$  par son expression donnée par la relation (4.34), on obtient :

$$\mu = \varepsilon' + \left(-\nu - \beta\alpha_1 + \frac{\delta_1\delta_2}{2\varepsilon'}\right) \frac{b}{\beta} + O(b^2), \quad (4.37)$$

$$\rho^2 = \left(-\nu + \frac{\delta_1\delta_2}{2\varepsilon'}\right) \frac{b}{\beta} + O(b^2) \quad . \quad (4.38)$$

Ces deux relations indiquent que la bifurcation qui prend place en  $\mu = \varepsilon'$  est une bifurcation fourche car l'amplitude croît comme la racine de l'écart au seuil  $\mu = \varepsilon'$  i.e.  $\rho \approx \sqrt{\mu - \varepsilon'}$ . Du fait que  $2\varepsilon'\rho \cos \psi + \delta_1 b = 0$ , la phase  $\psi$  tend vers  $\pi/2$  lorsque  $\mu$  tend vers  $\varepsilon'$  et tend vers 0 ou  $\pi$  lorsque  $\mu$  augmente. Cette solution va donc "tourner" le long de la branche à mesure que l'on s'écarte du seuil. Les résultats numériques montrent que la phase devient nulle au point de bifurcation secondaire  $S'_2$  où cette branche rencontre la première branche de bifurcation.

Ces prédictions théoriques sont en accord avec les résultats obtenus pour  $\epsilon = 0.9$  (figure 4.18) et  $\epsilon = 0.98$  (figures 4.19-4.20) avec  $A = 1$ . On remarque en particulier que les deux bifurcations  $T'_2, P'_2$  correspondent aux deux bifurcations que nous avons identifiées dans l'interaction des modes  $m = 0$  et  $m = 2$ . La bifurcation  $T'_2$  correspond aux solutions de la forme  $\rho f_2(r, z) \cos(2\varphi) + b f_0(r, z) + \dots$  et la bifurcation  $P'_2$  aux solutions de la forme  $\rho f_2(r, z) (\cos(2\varphi + \psi)) + b f_0(r, z) + \dots$  pour lesquelles la phase  $\psi$  évolue de  $\pi/2$  au voisinage du seuil à 0. D'autre part, on remarque que les prédictions sur l'interaction des modes  $m = 0$  et  $m = 2$  sont également en bon accord avec les résultats numériques. La bifurcation  $P_1$  associée à un mode  $m = 1$  et une valeur propre double dans le cas d'une section transverse circulaire s'est effectivement scindée en deux bifurcations primaires notées  $P_1$  et  $P'_1$ . La branche stable correspond aux solutions  $S_x$  invariantes mais l'analyse de stabilité

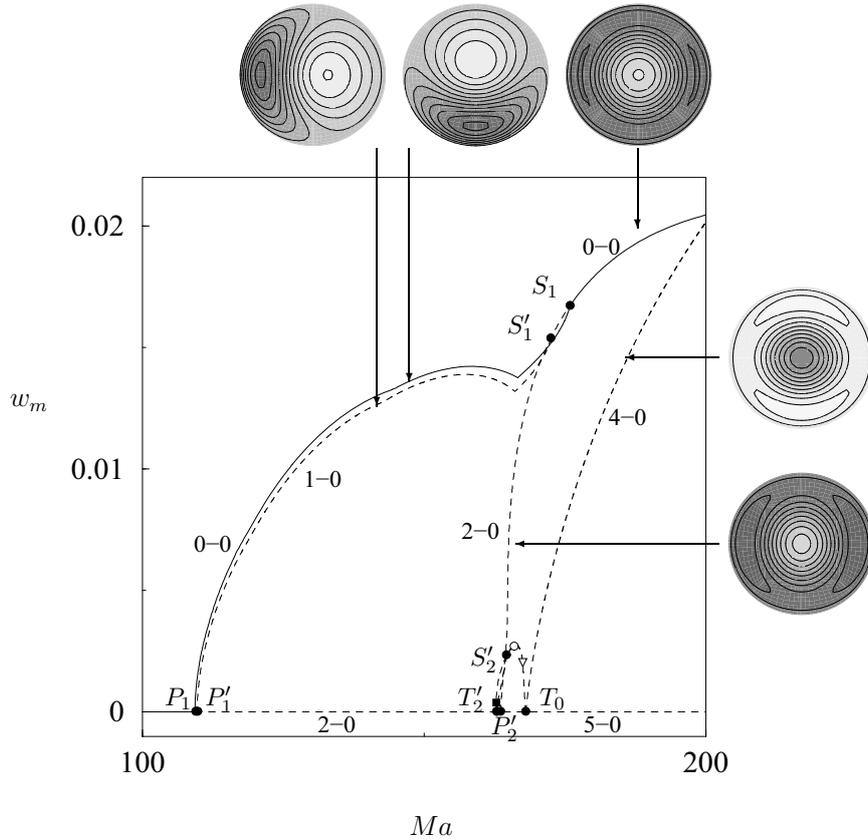


FIG. 4.19 – Diagramme de bifurcation représentant les variations du maximum absolu  $w_m$  de la vitesse verticale en fonction du nombre de Marangoni. Les snapshots représentent les isovalues de la vitesse verticale  $w$  dans le plan milieu  $z = 1/2$  avec en clair (foncé) les régions  $w > 0$  ( $w < 0$ ). Les paramètres sont  $A = 1$ ,  $\epsilon = 0.98$ ,  $Pr = 1$  et la résolution est  $N_x = N_y = N_z = 10$ .

linéaire montre que cette préférence dépend du facteur d'ellipticité  $\epsilon$  (voir l'article joint à ce chapitre). Le même mécanisme est responsable de la formation des deux points de bifurcation  $S_1$  et  $S_1'$ .

Nous avons décrit ici l'essentiel de la démarche adoptée dans l'article que nous présentons maintenant. Dans celui-ci on trouvera d'autres résultats complémentaires avec notamment les variations des seuils linéaires d'instabilité avec le facteur d'ellipticité  $\epsilon$  pour les rapports d'aspect  $A = 1$  et  $A = 1.5$  ainsi que des diagrammes de bifurcation supplémentaires pour différentes valeurs de  $\epsilon$  dans les cas  $A = 1$  et  $A = 1.5$ .

### 4.3.3 Ensemble des résultats publiés

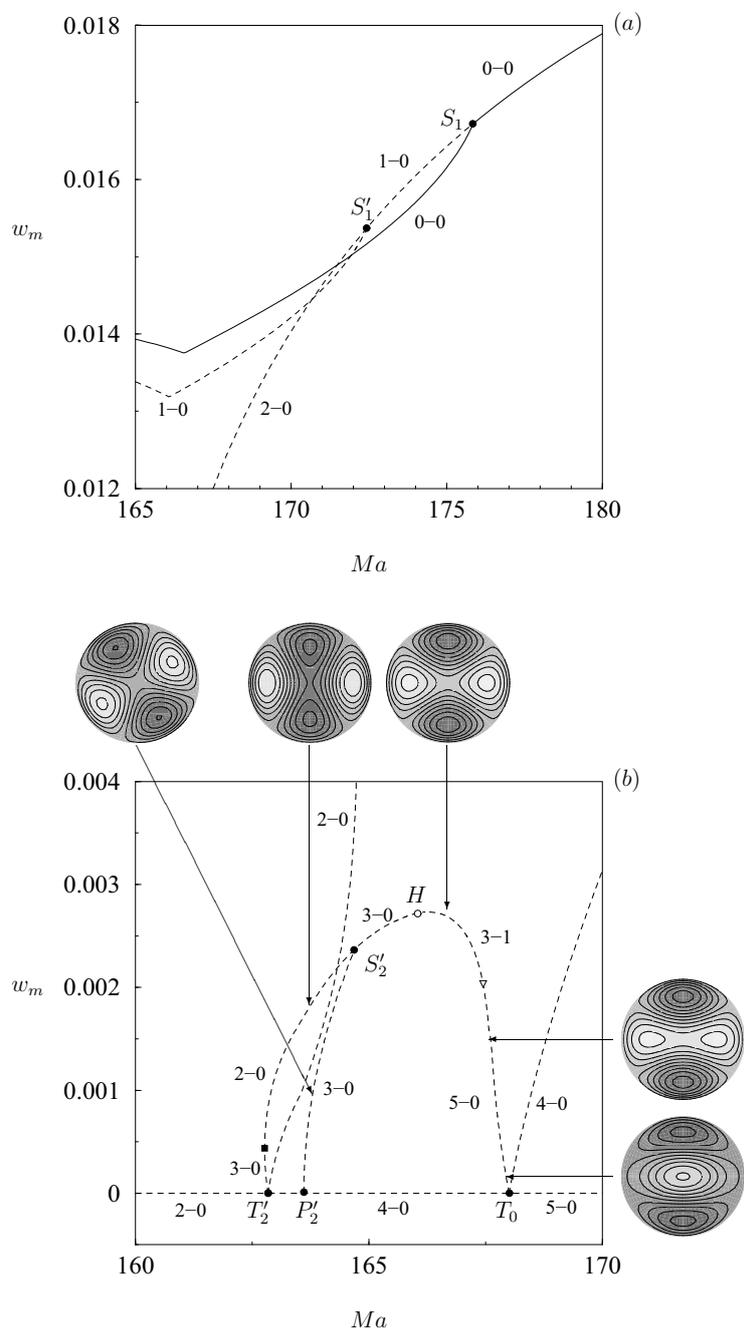


FIG. 4.20 – Grossissement de la figure 4.19



## Nonlinear Marangoni convection in circular and elliptical cylinders

P. Assemat and A. Bergeon

*IMFT UMR CNRS 5502—UPS UFR MIG, 31062 Toulouse Cedex, France*

E. Knobloch

*Department of Physics, University of California, Berkeley, California 94720, USA*

(Received 17 November 2006; accepted 24 July 2007; published online 10 October 2007)

The spatial organization of single-fluid Marangoni convection in vertical cylinders with circular or elliptical horizontal cross section is described. The convection is driven by an imposed heat flux from above through Marangoni stresses at a free but undeformed surface due to temperature-dependent surface tension. The solutions and their stability characteristics are obtained using branch-following techniques together with direct numerical simulations. The changes in the observed patterns with increasing ellipticity are emphasized. In some cases, the deformation of the cylinder results in the presence of oscillations. © 2007 American Institute of Physics.

[DOI: [10.1063/1.2771566](https://doi.org/10.1063/1.2771566)]

### I. INTRODUCTION

Surface tension-driven flows are of importance in a variety of applications, and are a consequence of surface tension inhomogeneities that are either imposed externally or develop spontaneously as a result of an instability. Typical of these is the Marangoni instability that sets in in liquids with a temperature-dependent surface tension once the temperature difference, measured by the Marangoni number, exceeds a critical value. Such flows occur even in the absence of gravity.

Flows of this type are strongly influenced by the absence of reflection symmetry in the midplane of the vessel, a fact responsible for the prevalence of hexagonal structures in large domains. Indeed, the hexagons observed in the original experiment of Bénard are now known to be due to this effect.<sup>1</sup> In smaller domains, the nature of the observed patterns is influenced by the shape of the domain. Experiments by Koschmieder and Prahl<sup>2</sup> and Ondarçuhu *et al.*<sup>3</sup> have focused on Marangoni-driven convection in small aspect ratio square domains, while others have investigated patterns in circular domains;<sup>2,4–7</sup> to the authors' knowledge, other types of domains have not been investigated. A recent overview of the experimental situation can be found in Ref. 8. In the so-called Rayleigh-Bénard geometry, the multiplicity of states in circular and elliptical domains has been studied by Hof *et al.*<sup>9</sup> and Meevasana and Ahlers,<sup>10</sup> respectively, and one may expect a similar richness in problems without midplane symmetry of which Marangoni convection is typical.

In the present paper, we use numerical techniques to study large-amplitude convection in circular and nearly circular domains in order to ascertain the effects of the geometry on the transition to steady convection. At first glance this appears straightforward. However, in the process of performing our study we identified a number of unexpected transitions whose origin is of some interest. In addition, we have elucidated some subtle numerical effects that have a surprisingly robust influence on the predicted pattern but are nonetheless artefacts of the grid. These observations may be use-

ful to others attempting Navier-Stokes simulations in containers of circular or nearly circular cross section. Throughout, we use the techniques and language of bifurcation theory to interpret our results.

The paper is organized as follows. In Sec. II, we introduce the basic equations of the study, and review the numerical techniques used to compute the solutions. These include numerical branch following techniques as well as direct numerical simulation. Our results are presented in Sec. III, and interpreted theoretically in Sec. IV. The paper concludes with a summary and a comparison of the results with available experiments.

### II. MARANGONI CONVECTION

#### A. Equations and dimensionless parameters

We study Marangoni convection in a vertical cylinder of elliptical cross section with semimajor axis  $R$  and semiminor axis  $\epsilon R$ . Thus when  $\epsilon < 1$ , the cross section is elongated in the  $x$  direction, while for  $\epsilon > 1$  it is elongated in the  $y$  direction. The case  $\epsilon = 1$  corresponds to a circle. In contrast to Ref. 11, a constant normal heat flux  $-q > 0$  is applied (in the downward direction) at the free upper surface; finite Biot number effects are neglected. In the following,  $A \equiv R/H$  denotes the aspect ratio of the container, where  $H$  is its depth. The velocity vanishes along the walls, assumed to be no-slip, and the lateral walls are considered to be adiabatic. The surface tension along the free upper surface varies linearly with the surface temperature:  $\sigma(T) = \sigma_0(1 + \gamma_T T)$ , where  $T$  is the temperature relative to the temperature at the bottom and  $\sigma_0$  is a constant. We assume that to leading order the free surface remains undeformed by the flow ( $\sigma$  is large) and that the gas in contact with the free surface has no influence. The conditions for stress equilibrium along the free surface are

$$\rho\nu\frac{\partial u}{\partial z} = \sigma_0\gamma_T\frac{\partial T}{\partial x}, \quad \rho\nu\frac{\partial v}{\partial z} = \sigma_0\gamma_T\frac{\partial T}{\partial y}, \quad (1)$$

where  $\mathbf{u} \equiv (u, v, w)$  is the velocity in  $(x, y, z)$  coordinates with the origin in the middle of the lower boundary,  $\rho$  is the

density of the fluid, and  $\nu$  is its kinematic viscosity. This condition is responsible for the onset of convection. The conduction state  $\mathbf{u}=\mathbf{0}$ ,  $T=T_c(z)\equiv -qz/\lambda$  is destabilized by temperature fluctuations along the upper surface when the imposed heat flux  $-q$  exceeds a critical value as measured by the flux Marangoni number  $\text{Ma}\equiv -qH^2\sigma_0\gamma_T/\lambda\rho\nu\kappa$ , cf. Ref. 11. Here  $\kappa$  is the thermal diffusivity and  $\lambda\equiv C_V\rho\kappa$  is the thermal conductivity. For fluids with  $\gamma_T<0$ , the above formulation remains valid provided the sign of  $q$  is reversed, i.e., provided the surface is cooled instead of being heated.

In the following, distance, time, temperature, and velocity are nondimensionalized using  $H$ ,  $H^2/\nu$ ,  $\Delta T\equiv -qH/\lambda$ , and  $\text{Ma}\nu/H$ , respectively. In zero gravity, the dimensionless equations for  $\mathbf{u}$ ,  $p$ , and  $T$  are

$$\partial_t\mathbf{u} = -\text{Ma}(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} - \nabla p + \nabla^2\mathbf{u}, \quad \nabla\cdot\mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

$$\partial_t T = -\text{Ma}(\mathbf{u}\cdot\nabla)T + \text{Pr}^{-1}\nabla^2 T, \quad (3)$$

where  $\mathbf{u}$ ,  $p$ ,  $T$ ,  $x$ ,  $y$ ,  $z$ , and  $t$  now refer to dimensionless variables, and  $\text{Pr}\equiv\nu/\kappa$  is the Prandtl number. The boundary conditions along the free surface ( $z=1$ ) are

$$\partial_z u - \text{Pr}^{-1}\partial_x T = \partial_z v - \text{Pr}^{-1}\partial_y T = w = \partial_z T - 1 = 0, \quad (4)$$

while those along the bottom ( $z=0$ ) are  $u=v=w=T=0$ . Along the lateral walls we have  $u=v=w=\partial_n T=0$ , where  $n$  is the coordinate normal to the wall. Consequently, the pure conduction state  $[\mathbf{u}=\mathbf{0}, T(z)=z]$  is a solution of the problem for any Marangoni number  $\text{Ma}$ . In this paper, we focus on containers with a relatively small aspect ratio ( $A\approx 1$ ) and examine the transitions that take place with increasing elliptical deformation of the container.

**B. Numerical method**

Our primary purpose is to apply numerical branch-following algorithms in three spatial dimensions in order to elucidate the complete bifurcation structure of Marangoni convection for aspect ratios for which the solution multiplicity is still relatively small. This is the case for the aspect ratios we use in this paper. The branch-following method used in our case can be implemented by combining an existing first-order time-stepping code employing projection methods for time integration<sup>12</sup> with an iterative (Newton method) wraparound to compute the fixed points of the system, as suggested by Mamun and Tuckerman.<sup>13</sup> This technique is used here to calculate both linear and nonlinear solutions of the problem as described in Ref. 14.

We use a spectral element method for the space discretization of the equations in conservation form. The computational domain is partitioned into  $N_e$  nonoverlapping elements  $\Omega_l$  ( $1\leq l\leq N_e$ ) (Fig. 1). The reference coordinate system  $\hat{\mathbf{x}}\equiv(\hat{x},\hat{y},\hat{z})$  defines a cubic domain  $\hat{\Omega}=[-1,1]^3$ . Data are expressed as tensor products of Lagrange polynomials based on the Gauss-Lobatto-Legendre (GLL) quadrature points. Functions in the system coordinates  $\mathbf{x}\equiv(x,y,z)$  are of the form

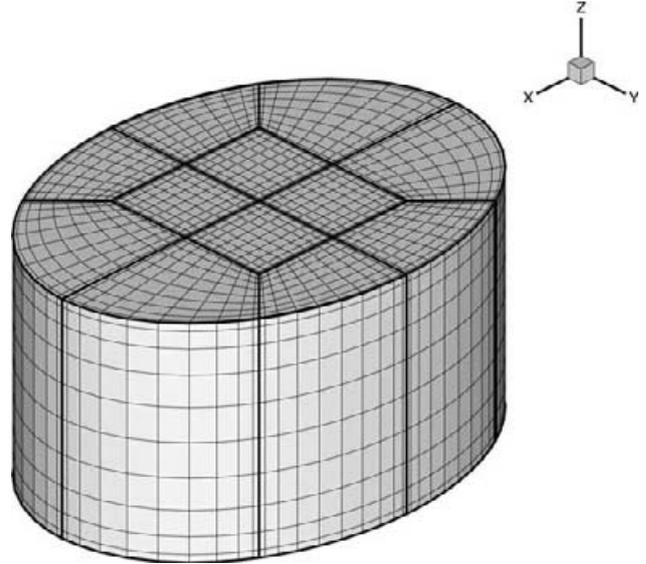


FIG. 1. View of the grid in an elliptical geometry. The grid has  $N_e=12$  macro-elements. Spatial resolution in each element is  $n_x=n_y=n_z=10$ , where  $n_x$ ,  $n_y$ , and  $n_z$  are, respectively, the polynomial degrees of the interpolant in the  $x$ ,  $y$ , and  $z$  directions.

$$u[\mathbf{x}^l(\hat{\mathbf{x}})] = \sum_{i=0}^{n_x} \sum_{j=0}^{n_y} \sum_{k=0}^{n_z} u_{ijk}^l h_i^{n_x}(\hat{x}) h_j^{n_y}(\hat{y}) h_k^{n_z}(\hat{z}), \quad (5)$$

where  $u_{ijk}^l$  are the nodal basis coefficients,  $h_i^{n_x}(\hat{x})$  [respectively,  $h_j^{n_y}(\hat{y})$  and  $h_k^{n_z}(\hat{z})$ ] are Lagrange polynomials of degree  $n_x$  (respectively,  $n_y$  and  $n_z$ ) based on the GLL quadrature points, and  $\mathbf{x}^l(\hat{\mathbf{x}})=(x^l(\hat{\mathbf{x}}),y^l(\hat{\mathbf{x}}),z^l(\hat{\mathbf{x}}))$  is the coordinate mapping from the reference domain  $\hat{\Omega}$  to  $\Omega_l$ .

In the projection scheme used for the momentum equation, the linear terms are integrated implicitly and the nonlinear terms explicitly. The first-order version of the scheme reads

$$\Delta\bar{t}^{-1}(\mathbf{u}^{(n+1)} - \mathbf{u}^{(n)}) = -\text{Ma}(\mathbf{u}^{(n)}\cdot\nabla)\mathbf{u}^{(n)} - \nabla p^{(n+1)} + \nabla^2\mathbf{u}^{(n+1)}, \quad (6)$$

where  $\mathbf{u}^{(n)}$  refers to the velocity field at time  $t_n\equiv n\Delta t$ . Each time step is subdivided into three substeps. After the computation of the nonlinear terms (the first substep), a Poisson problem is formulated for the pressure using the boundary conditions proposed in Ref. 12. This Poisson problem (second substep) as well as the Helmholtz problems for the velocity components that constitute the final implicit substep of the scheme are solved using a variational formulation. Since a similar treatment is done for the heat equation, each time step involves the inversion of four Helmholtz problems (one for the temperature  $T$  and one for each velocity component) and one Poisson problem (for the pressure). The inversions are performed using a Schur method taking full advantage of the tensorization in the  $z$  direction. Throughout the paper, we use  $N_e=12$  spectral elements.

To check the accuracy of the method, we compare our results with Refs. 15 and 16. A direct comparison is difficult as the results of Refs. 15 and 16 are presented graphically. To check the accuracy of the critical Marangoni number, i.e., the

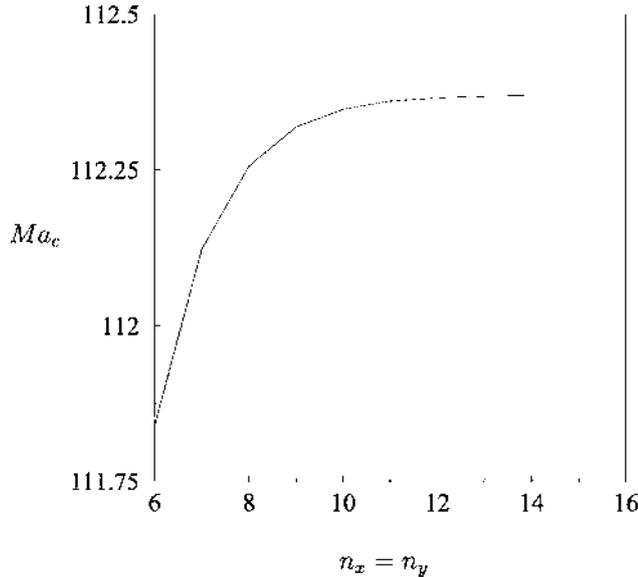


FIG. 2. Evolution of the critical Marangoni number for the  $m=1$  mode with the grid spacing  $n_x=n_y$  when  $Pr=1$ ,  $A=1.5$ , and  $n_z=10$  (cf. Fig. 11).

primary bifurcation point for different aspect ratios, we have therefore employed three methods. The first uses Arnoldi’s method<sup>13</sup> to calculate the largest eigenvalues of large linear systems. For the linear stability problem of the conduction state, this method yields the largest eigenvalues at discrete values of  $Ma$ . The critical Marangoni number corresponds to a zero maximum eigenvalue. In an  $A=1$  container with  $n_x \times n_y \times n_z = 10 \times 10 \times 10$  interpolation yields  $Ma_c = 109.035$ .

The second method solves the system  $\mathbf{DF}(Ma)\mathbf{h} = \mathbf{0}$ , where  $\mathbf{DF}$  denotes the linearized version of the discretized equations around the conduction state, and  $\mathbf{h} \equiv (u'_{ijk}, v'_{ijk}, w'_{ijk}, T'_{ijk})$ ,  $0 \leq i \leq n_x$ ,  $0 \leq j \leq n_y$ ,  $0 \leq k \leq n_z$ ,  $1 \leq l \leq N_e$ , are the values of the three velocity components and temperature at the grid points. This is a nonlinear system as both  $\mathbf{h}$  and  $Ma$  are unknowns. This problem is solved using a Newton method as described in Ref. 14. Consequently, no eigenvalue computation is involved. The method converges well as the number of grid points (Fig. 2 and Table I) is increased. The third method uses an extrapolation of fully nonlinear solutions to zero amplitude (Fig. 3). For  $A=1$  with  $n_x \times n_y \times n_z = 10 \times 10 \times 10$ , the extrapolation yields  $Ma_c = 109.029$ . Thus all three methods are in excellent agreement with each other and with the values obtained in the previously cited papers.

Our numerical method keeps track of the unstable eigenvalues along each solution branch. For bifurcations that break the circular symmetry of the container, these eigenval-

TABLE I. Critical Marangoni number  $Ma_c$  for different grids and aspect ratios.

$n_x \times n_y \times n_z$	$6 \times 6 \times 10$	$10 \times 10 \times 10$	$14 \times 14 \times 10$	$10 \times 10 \times 14$
$m=1, A=1$	109.0726	109.0286	109.0283	108.9071
$m=0, A=2.1$	84.1408	84.0812	84.0810	84.0818
$m=1, A=2.8$	82.9163	82.7896	82.7832	82.7871

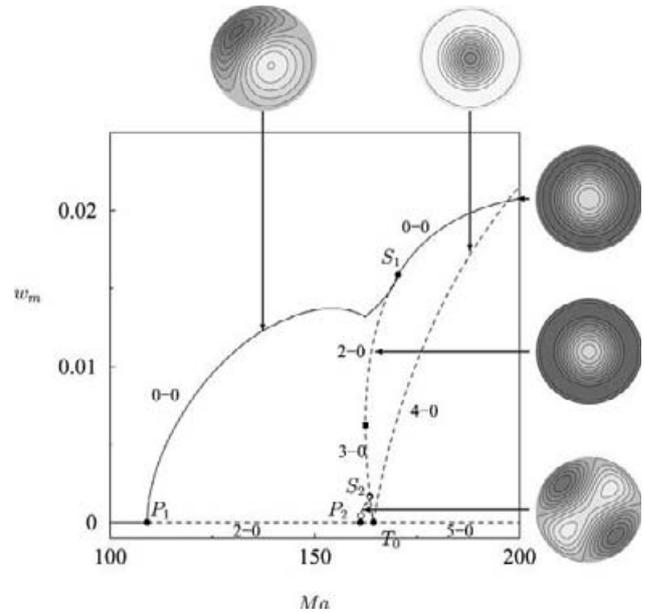


FIG. 3. Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Snapshots show isovals of the vertical velocity in the midplane of the cylinder. The orientation of the  $m \neq 0$  states is nominally arbitrary. Parameters are  $\epsilon=1$ ,  $A=1$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

ues are doubled. Thus it is important to characterize all solutions by their symmetry; this symmetry typically reflects the symmetry of the unstable eigenfunction responsible for the instability, although, as we shall see, this is not always the case.

In the following section, we will see how the multiplicity of the eigenvalues is reduced as the cylinder cross section becomes elliptical. We compute numerically the bifurcation diagrams for both  $O(2)$ -symmetric (circular) and  $D_2$ -symmetric (elliptical) cross sections with our continuation method. All primary bifurcations are steady-state bifurcations since the eigenvalues of the linear stability problem are necessarily real.<sup>11,17</sup> Periodically we calculate the leading eigenvalues of the linearized system (around the nonlinear state) using an adaptation of Arnoldi’s method described in Ref. 13. When the number of positive eigenvalues changes, indicating a bifurcation, the method determines the parameter interval in which the bifurcation occurs together with the associated eigenvector. The latter is used to initiate branch switching. Secondary bifurcation points are located from the intersection of pairs of nonlinear branches with different numbers of unstable eigenvalues, and for the aspect ratios used the results using a  $10 \times 10 \times 10$  grid agree well with the results of direct numerical integration. All calculations use  $Pr=1$  since the value of  $Pr$  has no effect on the primary bifurcations.

### III. RESULTS

In this section, we describe the results for containers of both circular and elliptical cross section and different aspect ratios. The results are presented in the form of bifurcation diagrams, and use solid circles to indicate primary bifurca-

tions and secondary pitchfork bifurcations, while solid squares indicate saddle-node bifurcations, open circles indicate (secondary) Hopf bifurcations, and open triangles indicate collisions of a pair of complex eigenvalues on the positive real axis; the latter, of course, does not correspond to a bifurcation. Primary bifurcations are labeled using the notation  $P_m$ ,  $T_m$  to indicate pitchfork ( $P$ ) and transcritical ( $T$ ) bifurcations to modes with azimuthal wavenumber  $m$ . In the following, we refer to eigenvalues with a negative (positive) real part as stable (unstable) eigenvalues. Stability of each branch is indicated using the notation  $n-p$ , where  $n$  is the number of unstable real eigenvalues and  $p$  is the number of pairs of unstable complex eigenvalues. Thus the number of unstable eigenvalues is  $n+2p$ . In the figures, we use solid (dashed) lines to indicate linearly stable (unstable) solutions. We do not follow branches of time-periodic states. In many of the bifurcation diagrams, we include snapshots of the flow showing the vertical velocity  $w$  at midheight, with dark (light) shading indicating  $w < 0$  ( $w > 0$ ).

Throughout the description that follows, we refer to states that are reflection-symmetric about  $x=0$  ( $y=0$ ) as  $\kappa_y$ -symmetric ( $\kappa_x$ -symmetric).

### A. Aspect ratio $A=1$

We begin with aspect ratio  $A=1$  and describe the changes that occur in the solutions of the nonlinear problem as the ellipticity  $\epsilon$  is reduced from  $\epsilon=1$ . The diameter in the  $x$  direction is kept equal to 1 throughout. We refer to Ref. 18 for a similar study of square and nearly square containers. Figure 3 shows the bifurcation diagram for the circular container. The figure displays the evolution with the Marangoni number of the maximum  $w_m$  of the absolute value of the vertical component of the velocity at the Gauss-Lobatto-Legendre nodes.<sup>19</sup> The value  $w_m=0$  corresponds to the conduction state. Branches with  $w_m \neq 0$  are characterized by the azimuthal wavenumber  $m$  of the state, indicated in the label of the corresponding primary bifurcation.

Figure 3 shows that the conduction state is stable up to  $\text{Ma}_{P_1}=109.03$ . At this value of the Marangoni number the conduction state undergoes a symmetry-breaking bifurcation that produces a branch of states with azimuthal wavenumber  $m=1$ . As a result, the eigenvalue that passes through zero at  $\text{Ma}_{P_1}$  is doubled, and the resulting bifurcation is a pitchfork of revolution. The figure reveals that this bifurcation is supercritical, and the resulting solutions are therefore stable (modulo a zero eigenvalue associated with spatial rotations of the pattern). We note, however, that the solutions are not invariant under a change in sign of  $w_m$ . This is a consequence of the different boundary conditions applied at the top and bottom of the container.

The second primary bifurcation occurs at  $\text{Ma}_{P_2}=161.1$  and is also a supercritical pitchfork of revolution, this time producing a branch of  $m=2$  solutions (Fig. 4). These solutions inherit the instability of the conduction state in  $\text{Ma}_{P_1} < \text{Ma} < \text{Ma}_{P_2}$  and hence are doubly unstable. Moreover, like the  $m=1$  solutions, the  $m=2$  solutions are not invariant under change of sign.

The final primary bifurcation we discuss occurs at

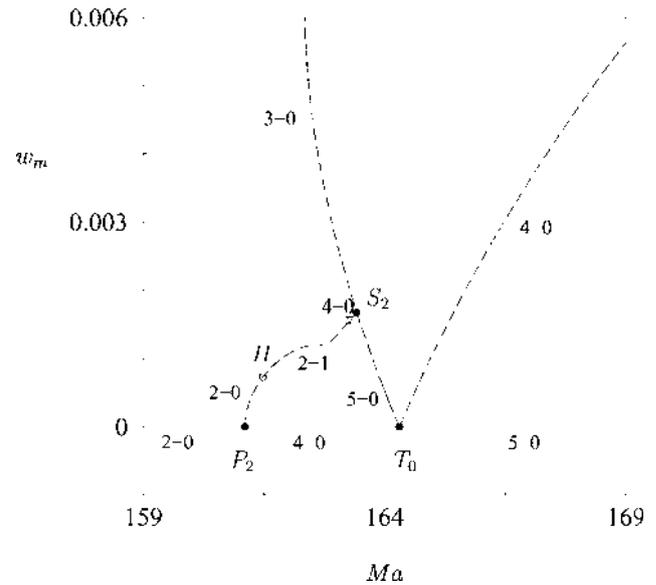


FIG. 4. Detail of Fig. 3.

$\text{Ma}_{T_0}=164.2$ , and corresponds to a transcritical bifurcation to an  $m=0$  state, i.e., to an axisymmetric state. Since this bifurcation is unaffected by the  $O(2)$  symmetry of the system, only one eigenvalue passes through zero at  $\text{Ma}_{T_0}$ , with the supercritical branch inheriting the four unstable eigenvalues of the conduction state, while the subcritical part is five times unstable.

Figure 3 shows how these branches interact in the nonlinear regime. The  $m=1$  branch terminates on the  $m=0$  branch above a saddle-node bifurcation ( $\text{Ma}=162.34$ , indicated by a solid square) at a point labeled  $S_1$  characterized by a double zero eigenvalue. The bifurcation at  $S_1$  is mathematically identical to that at  $P_1$ : the  $m=0$  state loses stability with decreasing  $\text{Ma}$  at a pitchfork of revolution at  $S_1$ , and is therefore doubly unstable below  $S_1$  (and above the saddle node). The prominent kink in the  $m=1$  branch just prior to  $S_1$  is a consequence of increasing importance of the  $m=0$  contribution, which shifts the local maximum in  $w$  to a new location, and is not the result of a bifurcation. The figure shows that the  $m=2$  branch also terminates on the  $m=0$  branch, but this time below the saddle node, at a point labeled  $S_2$ . Once again, at this point there is a double zero eigenvalue. We find that above  $S_2$  (and below the saddle node) the  $m=0$  branch is three times unstable; it follows that the  $m=2$  branch near  $S_2$  must be four times unstable, and hence that the  $m=2$  branch must undergo a Hopf bifurcation between  $P_2$  and  $S_2$ , a conclusion that has been verified numerically (Fig. 4). Indeed, the complex unstable eigenvalues created at the Hopf bifurcation collide on the positive real axis with increasing  $\text{Ma}$ , before one of them reaches zero at  $S_2$ ; the other zero eigenvalue at  $S_2$  comes from rotations of the  $m=2$  states. The number of unstable eigenvalues along each solution branch is indicated in the figure, and is consistent with the above theoretical expectation. Since the Hopf bifurcation preserves the symmetry of the  $m=2$  state, the resulting (unstable) oscillations are standing waves, and likely disappear in a global bifurcation involving the  $m=0$  state.

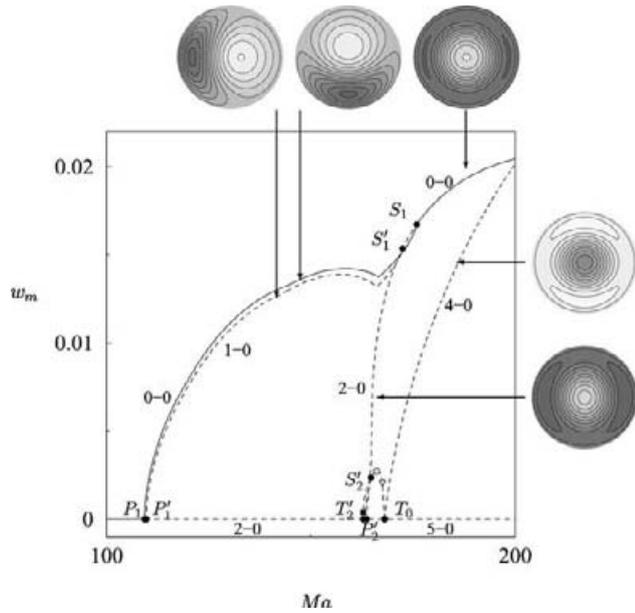


FIG. 5. Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Snapshots show isovals of the vertical velocity in the midplane of the cylinder. Parameters are  $\epsilon=0.98$ ,  $A=1$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

It will have been noticed that the  $m=1$  and  $m=2$  states are both oriented at  $45^\circ$  to the  $x$  axis. This is a consequence of the structure of the numerical grid used to compute the solutions (Fig. 1). The grid used is not rotationally invariant but has in fact residual  $D_4$  symmetry. This symmetry group, the symmetry of a square, is generated by two reflections,  $\kappa_x$  in the  $x$  axis and  $\Pi_{xy}$  in the line  $x=y$ . As discussed below, the small perturbations due to the structure of the grid split each of the  $m=1$  and  $m=2$  branches into a pair of branches, one consisting of states with  $\kappa_x$  symmetry and the other of  $\Pi$ -symmetric states; each branch is produced in a standard pitchfork bifurcation that come in in close succession. It turns out that in each case the grid selects the  $\Pi$ -symmetric state as the first state that sets in. A similar observation applies to the termination point  $S_2$ , which is also split by the grid. Both  $m=2$  branches undergo the Hopf bifurcation to standing oscillations prior to their termination on the  $m=0$  branch.

We now turn to a discussion of the corresponding results for a slightly elliptical container, characterized by  $\epsilon=0.98$ . Although the resulting ellipticity is small, this value is still sufficiently far from  $\epsilon=1$  that the ellipticity effects ought to dominate the symmetry-breaking effects due to the grid. It should be mentioned that the elliptical deformation of the container cross section changes the symmetry of the problem to  $D_2$ , the symmetry group of a rectangle, a smaller symmetry group than  $D_4$ . The former is generated by the two reflections  $\kappa_x$  and  $\kappa_y$ , and in contrast to  $\kappa_x$  and  $\Pi$  these commute. Figure 5 shows that this change in the symmetry of the problem results in a substantial change in the bifurcation diagram. Since the primary bifurcations can only lead to  $\kappa_x$ - and  $\kappa_y$ -symmetric states, the multiple bifurcations at  $P_1$  and  $P_2$  are strongly affected. Figure 5 shows that  $P_1$  is split, with the

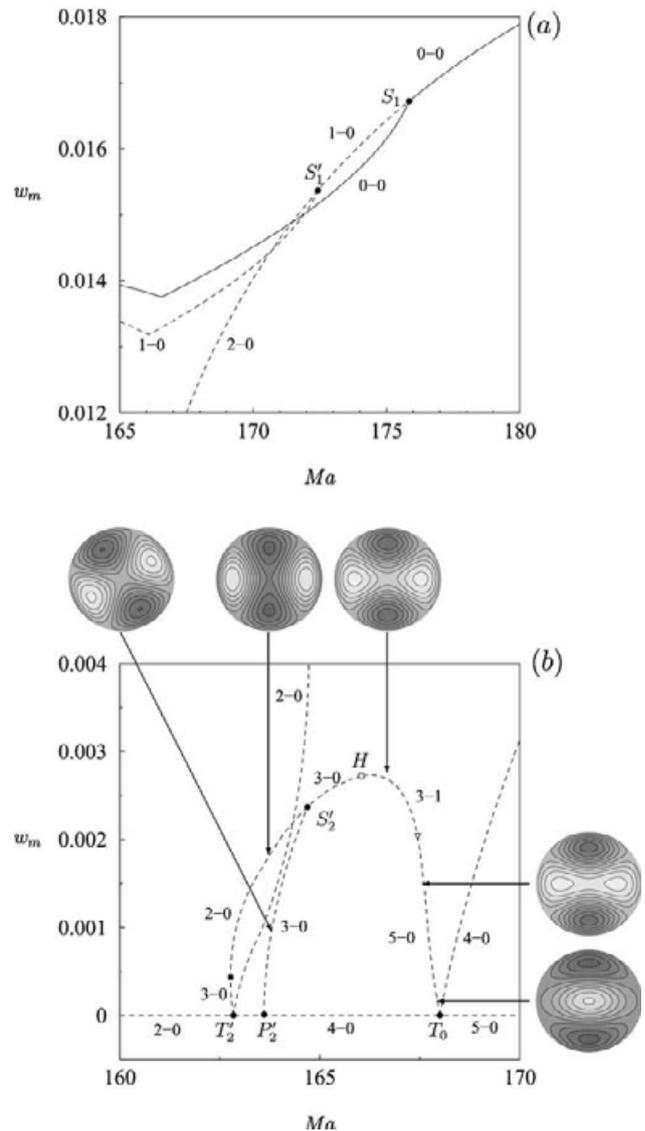


FIG. 6. (a),(b) Detail of Fig. 5.

$\kappa_y$ -symmetric states coming in first, followed by the  $\kappa_x$ -symmetric states; the former are stable, while the latter are once unstable. The bifurcation at  $P_2$  is also split, resulting in a transcritical bifurcation to  $D_2$ -symmetric states and a pitchfork to  $\Pi$ -like states [Fig. 6(b)]. In fact, these states, which come in at the point labeled  $P'_2$ , have exact  $\Pi$  symmetry at zero amplitude, but with increasing amplitude their plane of symmetry rotates monotonically, reaching  $45^\circ$  by the time the branch terminates at  $S'_2$ . The reason for this unexpected behavior will be explained below. Figure 6(b) also shows that one of the transcritical branches created in the breakup of  $P_2$  connects to the large-amplitude axisymmetric states at  $S'_1$ , while the other undergoes a saddle-node bifurcation before connecting to the second transcritical bifurcation  $T_0$ ; the latter is merely the (slightly perturbed) transcritical bifurcation  $T_0$  present in the  $O(2)$ -symmetric case; the same notation is therefore used to refer to it. This connection contains a Hopf bifurcation to standing oscillations

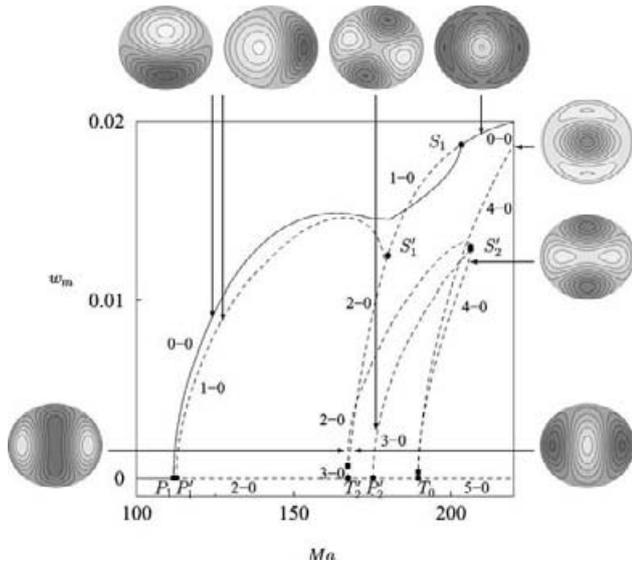


FIG. 7. Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Snapshots show isovalues of the vertical velocity in the midplane of the cylinder. Parameters are  $\epsilon=0.90$ ,  $A=1$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

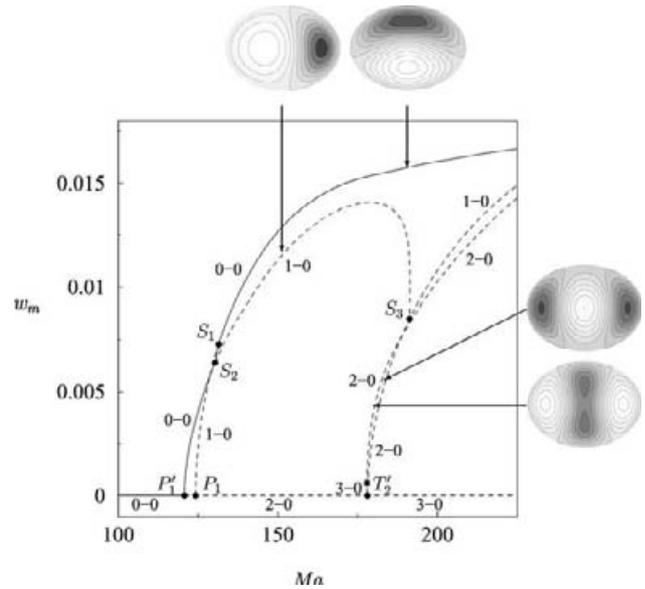


FIG. 8. Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Snapshots show isovalues of the vertical velocity in the midplane of the cylinder. Parameters are  $\epsilon=0.75$ ,  $A=1$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

with  $D_2$  symmetry, but the resulting oscillations are necessarily unstable. It should be noted that this bifurcation is present *after*  $S'_2$ ; for  $\epsilon$  closer to  $\epsilon=1$ , the order of these bifurcations is reversed, while a second Hopf bifurcation is present on the branch of  $\Pi$ -like states connecting  $P'_2$  to  $S'_2$ . Finally, the forced symmetry breaking to  $D_2$  also splits the termination point  $S_1$  (Fig. 3), with the result that the  $\kappa_y$ -symmetric states transfer stability to the  $D_2$ -symmetric states arising from the axisymmetric states [at  $S_1$  in Fig. 6(a)], while the unstable branch of  $\kappa_x$ -symmetric states terminates on the  $D_2$ -symmetric states just below [at  $S'_1$  in Fig. 6(a)]. Once again the number of unstable eigenvalues along each branch is indicated in the figure.

Figure 7 shows the corresponding results for  $\epsilon=0.90$ , i.e., for larger ellipticity. The broad features of the bifurcation diagram are similar. The main difference involves the branch of  $D_2$ -symmetric states connecting the two primary transcritical bifurcations. Figure 7 shows that this branch now undergoes an additional saddle-node bifurcation on the right; the termination point  $S'_2$  of the  $\Pi$ -like states falls on the part of the  $D_2$  branch just below this saddle node. Moreover, the secondary Hopf bifurcation is now absent; this bifurcation collides with the saddle-node bifurcation with increasing ellipticity, and disappears via the so-called Takens-Bogdanov bifurcation. This bifurcation is then followed by a second (and different) codimension-2 bifurcation at which  $S'_2$  passes through the saddle node.

Figure 8 shows the corresponding results for  $\epsilon=0.75$ . For this value of  $\epsilon$  the order of the primary bifurcations is reversed. The reason for this is indicated in Fig. 9, which shows the linear stability thresholds for  $m=1$  modes in the  $(\epsilon, Ma)$  plane. The figure shows that outside the region  $0.8 < \epsilon \leq 1$ , the mode that first sets in is the mode with  $\kappa_x$  symmetry; the first unstable mode is  $\kappa_y$ -symmetric only in the range  $0.8 < \epsilon \leq 1$ . Because of the mode exchange that

takes place near  $\epsilon=0.8$ , the  $\kappa_x$ -symmetric states must transfer their stability to the  $\kappa_y$ -symmetric states in the nonlinear regime. Figure 10 shows that this transfer of stability occurs via a stable branch of mixed states, i.e., a branch of states with no symmetry. As a result, the stable large-amplitude states, away from the primary bifurcation, continue to be the  $\kappa_y$ -symmetric states.

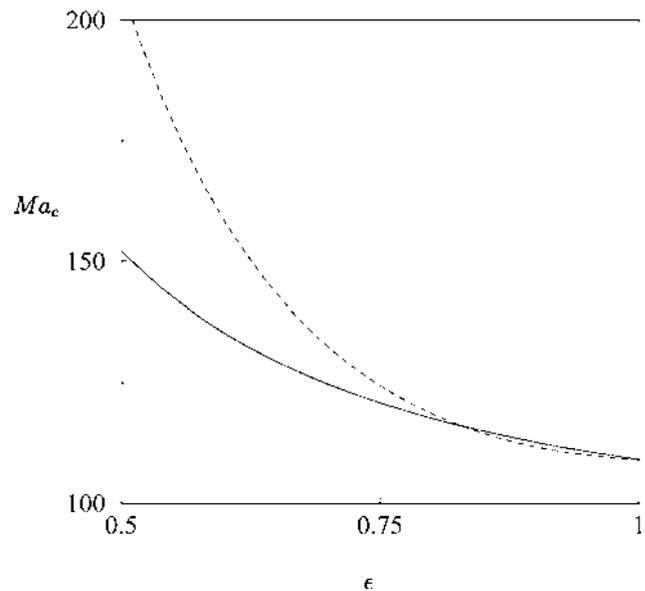


FIG. 9. Critical Marangoni number  $Ma_c$  as a function of the ellipticity  $\epsilon$ . The azimuthal wavenumber is  $m=1$ . Parameters are  $A=1$  and  $Pr=1$ . The primary bifurcation with  $\epsilon=1$  is split into two successive bifurcations: solid line indicates  $\kappa_x$ -symmetric states, dashed line  $\kappa_y$ -symmetric states. Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

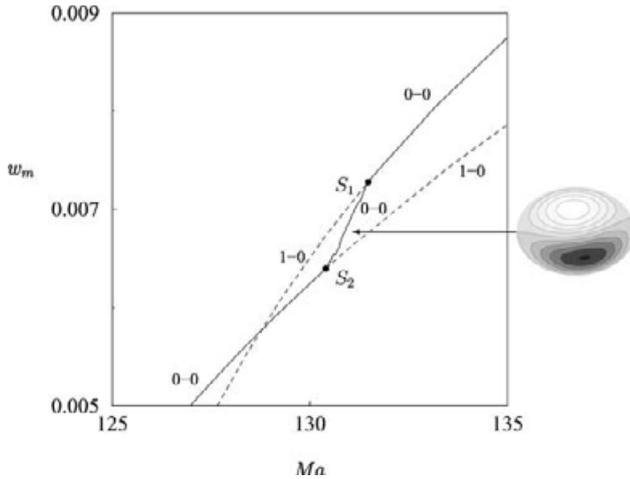


FIG. 10. Closer view of Fig. 8 showing exchange of stability between  $\kappa_x$ - and  $\kappa_y$ -symmetric states via a stable branch of nonsymmetric states.

**B. Aspect ratio  $A=1.5$**

Figure 11 shows the linear stability thresholds for  $A=1.5$ , again as a function of  $\epsilon$ . The primary instability is always to  $m=0$ -like states, followed for  $\epsilon \neq 1$  by a transition at larger  $Ma$  to a succession of  $m=2$  states. At yet larger values of  $Ma$  (not shown), one finds a pair of transitions to  $m=1$  states as well.

In the next set of figures, we examine the resulting behavior in the nonlinear regime. Figure 12 shows the bifurcation diagram for  $\epsilon=1$  with high resolution to minimize the effects of the computational grid. The primary bifurcation at  $T_0$  ( $Ma_{T_0}=96.19$ ) is transcritical and produces a stable  $m=0$  branch of states with fluid descending in the center and

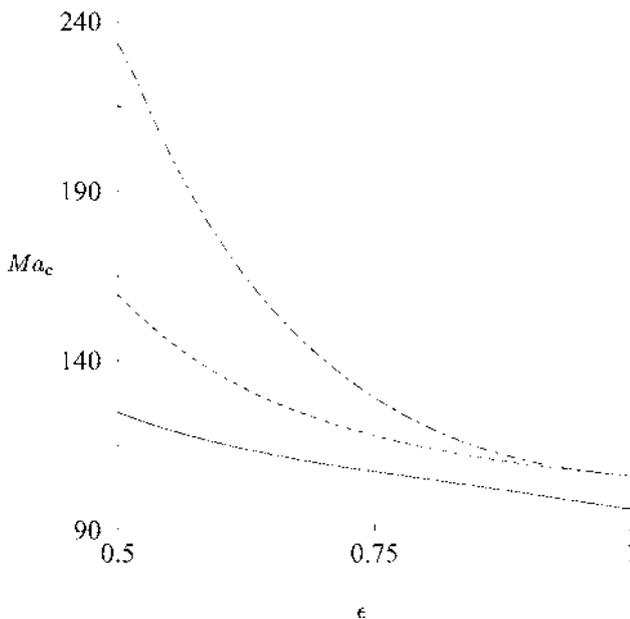


FIG. 11. Critical Marangoni number  $Ma_c$  as a function of the ellipticity  $\epsilon$ . The continuous line refers to  $Ma_c(T_0)$ , the dashed line to  $Ma_c(P'_2)$ , and the dot-dashed line to  $Ma_c(T'_2)$ . Parameters are  $A=1.5$  and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

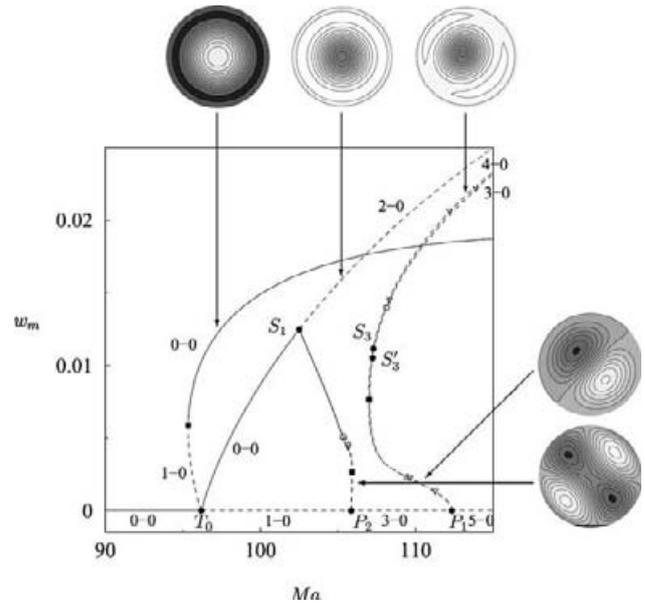


FIG. 12. Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Snapshots show isovalues of the vertical velocity in the midplane of the cylinder. The orientation of the  $m \neq 0$  states is nominally arbitrary. Parameters are  $\epsilon=1$ ,  $A=1.5$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

an unstable branch of states with ascending fluid in the center. The latter turns around at a saddle-node bifurcation (indicated by a solid square) and acquires stability, remaining stable at larger values of  $Ma$ . In addition, a branch of  $m=2$  states bifurcates from the conduction state in a pitchfork of revolution at  $P_2$  ( $Ma_{P_2}=105.87$ ) and does so supercritically. The resulting states are once unstable near onset, but become twice unstable above a saddle-node bifurcation (indicated by a solid square), before stabilizing via a (subcritical) Hopf bifurcation. As a result, the  $m=2$  branch acquires stability before its termination on the (supercritical)  $m=0$  branch at  $S_1$ . This bifurcation is again a pitchfork of revolution and destabilizes the  $m=0$  states at larger values of  $Ma$ ; for future reference, we emphasize that these states have a pair of unstable eigenvalues and are hyperbolic, i.e., none of the eigenvalues along this branch are close to zero and hence subject to qualitative change under small perturbation, such as the introduction of nonzero ellipticity. It follows that at large  $Ma$ , the only stable states are the axisymmetric states with ascending fluid in the center, as expected on physical grounds. Finally, at  $Ma_{P_1}=112.35$  the conduction state loses stability to solutions with  $m=1$ . The resulting pitchfork of revolution is subcritical, implying that the  $m=1$  states are initially four times unstable. Figure 12 shows, however, that despite the high resolution used, some effects of the computational grid remain. These are most noticeable in the splitting of the  $m=1$  branch emanating from  $P_1$ , and in the presence of the bifurcation points  $S_3$  and  $S'_3$ . These effects will be discussed in greater detail in the following section.

Figure 13 shows the corresponding bifurcation diagram for  $\epsilon=0.98$ . We see a dramatic effect: the primary pitchforks of revolution are both split,  $P_2$  into a pitchfork  $P'_2$  to  $\Pi$ -like states and a transcritical bifurcation  $T'_2$  to  $\kappa_x$ -symmetric

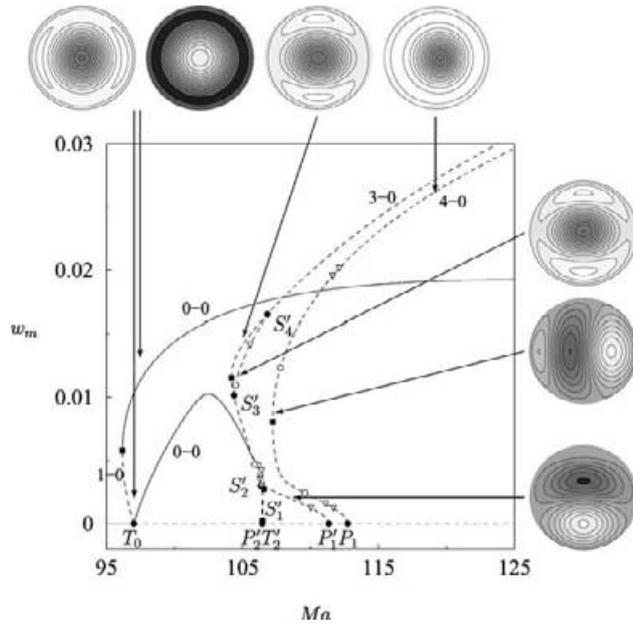


FIG. 13. Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Snapshots show isovalues of the vertical velocity in the midplane of the cylinder. Parameters are  $\epsilon=0.98$ ,  $A=1.5$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

states [Fig. 14(a)], and  $P_1$  into a pair of pitchfork bifurcations producing  $\kappa_y$ -symmetric states ( $P'_1$ ) and  $\kappa_x$ -symmetric states ( $P_1$ ), respectively [Fig. 14(d)]. At the same time, the primary bifurcation (labeled  $T_0$ ) remains transcritical, although the states that are produced are now  $D_2$ -symmetric and not axisymmetric. In addition, the secondary bifurcation at  $S_1$  is “unfolded” with the result that the supercritical branch originating at  $T_0$  now connects to the supercritical branch emanating from  $T'_2$ , while the subcritical branch at  $T'_2$  connects to the large-amplitude unstable  $m=0$ -like state.

As in the  $A=1$  case, the unstable  $\Pi$ -like states rotate through  $45^\circ$  [Fig. 14(a)] along the branch before the branch terminates on the doubly unstable supercritical part of the transcritical branch at a point labeled  $S'_1$ , below a saddle-node bifurcation at which the branch turns around toward smaller values of  $Ma$  [Fig. 14(c)]. At the termination, the number of unstable eigenvalues on the transcritical branch decreases to one, but at the saddle node it increases back to two, before a Hopf bifurcation stabilizes the branch. Alternatively, viewed from the perspective of the supercritical branch produced at  $T_0$ , the solutions with descending fluid in the center lose stability with increasing  $Ma$  at a Hopf bifurcation [Fig. 14(c)]. However, no stable oscillations have been found in the vicinity of this bifurcation, suggesting that this bifurcation remains subcritical. In contrast, the subcritical part of the transcritical branch  $T'_2$  remains unstable throughout, and is *three times* unstable at large values of  $Ma$  [Fig. 14(b)]. The branch of  $\kappa_y$ -symmetric states emerging from  $P'_1$  now terminates at  $S'_2$  on the subcritical branch created at  $T'_2$ . In addition, there is a second segment of  $\kappa_y$ -symmetric states that extends from  $S'_3$  to  $S'_4$  and brackets the saddle node on the branch of subcritical  $D_2$ -symmetric states emerging from  $T'_2$ . In contrast, the branch of  $\kappa_x$ -symmetric states emerging

from  $P_1$  turns around at a saddle node and extends to larger values of  $Ma$ , where it is ultimately four times unstable [Fig. 14(d)]. A pair of Hopf bifurcations brackets the saddle node but the associated oscillations are necessarily unstable. Despite this, *stable* periodic oscillations are found near the saddle node in the interval  $107.24 < Ma < 107.26$ , between the saddle-node bifurcation and the Hopf bifurcations. These oscillations grow in amplitude with increasing  $Ma$  (Fig. 15) and are  $\kappa_x$ -symmetric (Fig. 16), i.e., they share the symmetry of the steady states on the branch emanating from  $P_1$ , but their relation to this branch remains unclear.

The bifurcation diagram shown in Fig. 13 possesses two unexpected features. First, the stability assignments indicate that the two large-amplitude branches have three and four unstable eigenvalues, respectively. In contrast, the  $m=0$  branch in Fig. 12 is only twice unstable, and for small perturbations of the domain this stability assignment should be inherited by the corresponding  $D_2$  branch in Fig. 13. In addition, we expect the presence of a third branch at large  $Ma$ , since the deformation of the domain is expected to split the  $m=1$  branch into two distinct branches. To reconcile Fig. 13 with Fig. 12, we have therefore recomputed the bifurcation diagram for  $\epsilon=0.995$  (Fig. 17). The figure confirms that our expectation is correct, and indicates that  $\epsilon=0.98$  is in fact a *large* perturbation. Indeed, as  $\epsilon$  decreases, the branch of  $\kappa_y$ -symmetric states collides with the branch of  $D_2$ -symmetric states, and breaks into two segments. The first of these terminates at  $S'_2$  [Fig. 14(c)] while the second extends between  $S'_3$  and  $S'_4$  [Fig. 14(b)]. Evidently, as  $\epsilon$  decreases, the bifurcation point  $S'_4$  moves in from large amplitudes and is responsible for the unexpected stability properties of the  $D_2$ -symmetric states at these amplitudes, as well as for the absence of the third large-amplitude branch. Finally, Fig. 17 also reveals the presence of a pair of Hopf bifurcations on each of the branches bifurcating from  $P_1$  and  $P'_1$ , each of which brackets a saddle node. The presence of these bifurcations provides strong evidence for the presence of the corresponding bifurcations in the  $\epsilon=1$  case in the infinite resolution limit. In addition, the Hopf bifurcations on both of the branches bifurcating from  $T'_2$  converge to the corresponding Hopf bifurcation in the  $\epsilon=1$  case (Fig. 12).

### C. Effects of the numerical grid

In this section, we examine the effects of the numerical grid noticed already in Fig. 12. For this purpose, we decrease the resolution to  $n_x=n_y=6$ . Figure 18 for  $A=1$  shows that the grid splits the primary bifurcation  $P_2$  to  $m=2$  states into two successive bifurcations even when  $\epsilon=1$ . Associated with this splitting is the splitting of the termination point  $S_2$ ; moreover, both branches inherit the Hopf bifurcation present in Fig. 3. In contrast, the primary bifurcation  $P_1$  is not split by the grid, although the branches that emanate from it are. This branch splitting is responsible for the transfer of stability at finite amplitude between these two branches; this transfer occurs via a secondary branch of mixed states [Fig. 18(c)] and is a consequence of the fact that the  $m=1$  states have a zero eigenvalue, associated with rotations, when  $\epsilon=1$ . Figure 19 shows the corresponding results using the total kinetic

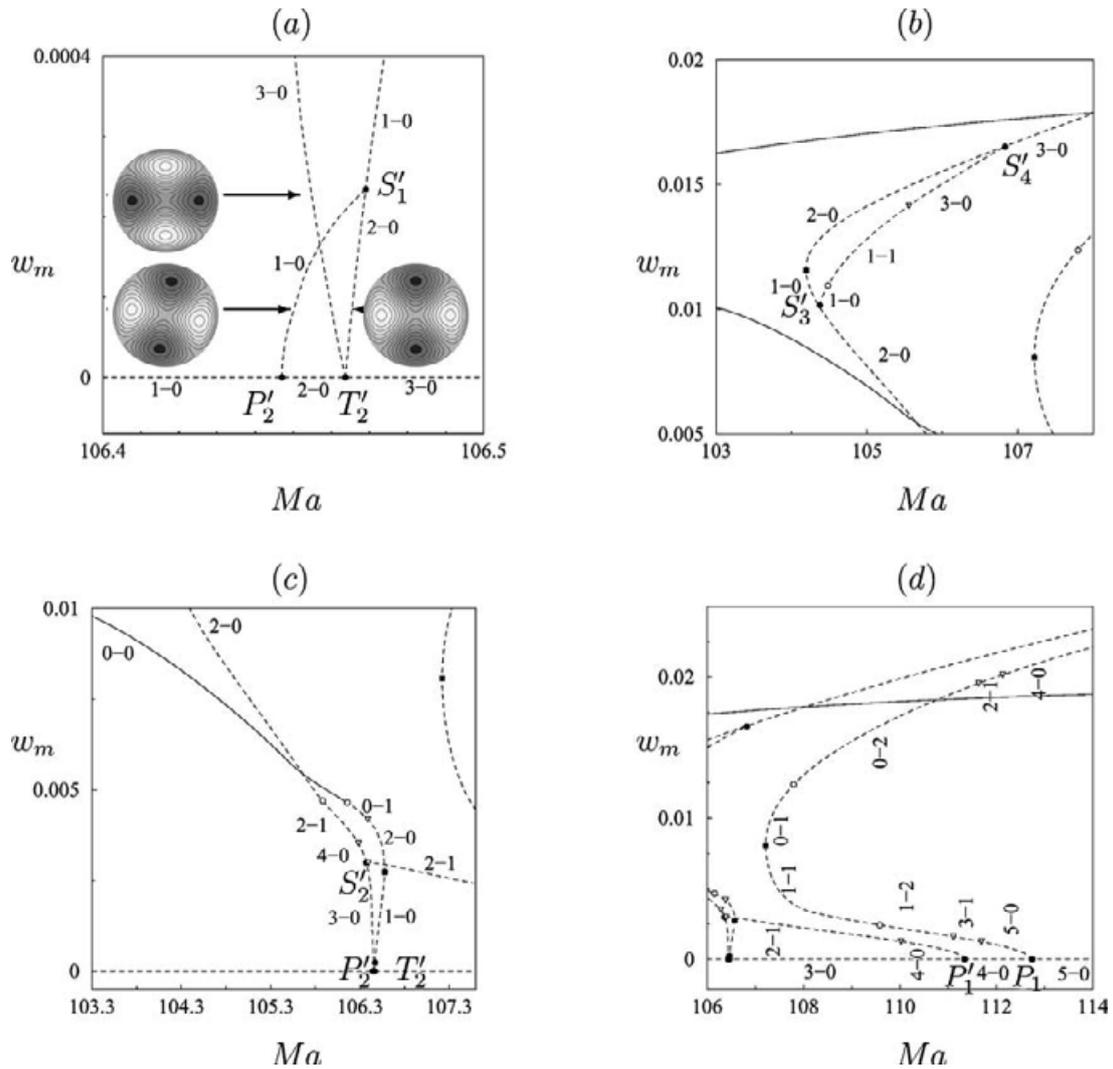


FIG. 14. Closer view of Fig. 13. Parameters are  $\epsilon=0.98$ ,  $A=1.5$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

energy  $\mathcal{E}$  as a measure of the solution amplitude. This procedure confirms that the splitting is due to the symmetry of the grid, and not an artefact produced by changes in the location of the maximum of  $|w|$  with respect to a collocation point.

Figure 20 shows a blowup of some of the branches in Fig. 12, and demonstrates the effect of the computational grid even with the  $10 \times 10 \times 10$  resolution. The figure shows that the pitchfork at  $P_2$  is split by the grid into two nearby (pitchfork) bifurcations ( $P_2, P'_2$ ), one of which is to states with  $\kappa_x$  symmetry and the other is to states with  $\Pi$  symmetry. Both branches that result undergo the same sequence of bifurcations, and these converge on the corresponding bifurcations in the nominally infinite resolution limit. In contrast, the bifurcation  $P_1$  is not split, although two distinct solution branches emerge from it at finite amplitude. Moreover, Figs. 20(a) and 20(b) reveal the presence of one secondary Hopf bifurcation (open circle) on each branch, but this time at quite different locations. Thus the grid has a different effect on different bifurcations. As a result, the stability assignments along the split branches depend on which branch is

considered, and care must be taken when using these types of numerical results to establish stability properties in the nominally infinite resolution limit.

The effect is magnified at lower resolution, as revealed in Figs. 21–23. Note in particular the proliferation of secondary Hopf bifurcations (open circles) on the  $m=1$  branches [Figs. 22(b) and 22(c)]. In contrast, the saddle-node bifurcations (solid squares) and the secondary bifurcations  $S_3$  and  $S'_3$  at which the branches exchange stability [Fig. 22(d)] remain almost unchanged. The new Hopf bifurcations are responsible for the presence of a narrow interval of stability above the leftmost saddle node [Fig. 22(d)]. Evidently, this interval of stability is an artefact of the low resolution, and only the bifurcations that also appear in Fig. 20 are “real.” In contrast, the bifurcations along the  $m=2$  branches emanating from  $P_2$  and  $P'_2$  continue to track each other well (Fig. 23), although we can now discern the presence of a pair of secondary bifurcations  $S_2$  and  $S'_2$  at which these branches trade stability prior to their termination at  $S_1$  and  $S'_1$ , respectively [Fig. 23(b)].

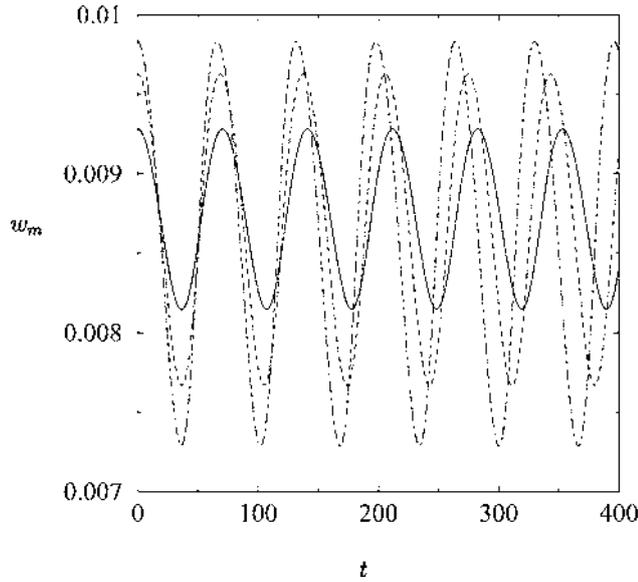


FIG. 15. Oscillations in the maximum vertical velocity  $w_m$  as a function of time obtained at  $Ma=107.24$  (solid line),  $Ma=107.25$  (dashed line), and  $Ma=107.26$  (dot-dashed line). Parameters are  $\epsilon=0.98$ ,  $A=1.5$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

Figure 22 demonstrates that because of the grid, the  $m=1$  branch is already split into a pair of hyperbolic branches, and one expects, therefore, to find three branches at large amplitude, at least for sufficiently small ellipticity; for larger  $\epsilon$ , the first of the  $m=1$  branches collides with and eliminates the large-amplitude  $m=0$  branch, resulting in the presence at large amplitude of only two branches, one with three unstable eigenvalues and the other with four.

Once  $\epsilon \neq 1$ , it is the ellipticity that splits the various branches, and the grid structure plays only a minor, quantitative role. In the following section, we provide a theoretical explanation of these results.

**IV. THEORETICAL DESCRIPTION**

Simulations in an  $A=1$  circular cylinder reveal successive bifurcations to  $m=1, 2$ , and  $0$  states; at the  $m=1, m=2$  bifurcations, two eigenvalues become positive simultaneously, while at  $m=0$  only a single eigenvalue changes sign. The simulations also reveal that in the nonlinear regime the

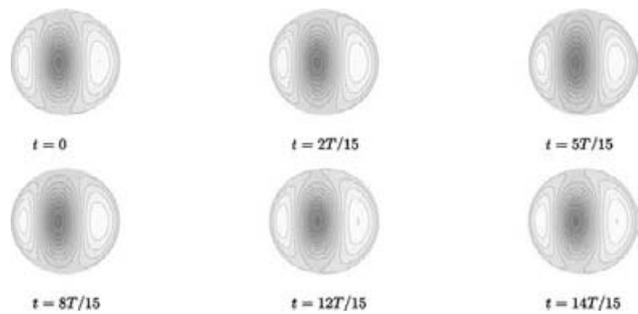


FIG. 16. Snapshots of the oscillation present at  $Ma=107.25$  at six instants within one period. The oscillation is periodic and  $\kappa_x$ -symmetric. Parameters are  $\epsilon=0.98$ ,  $A=1.5$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

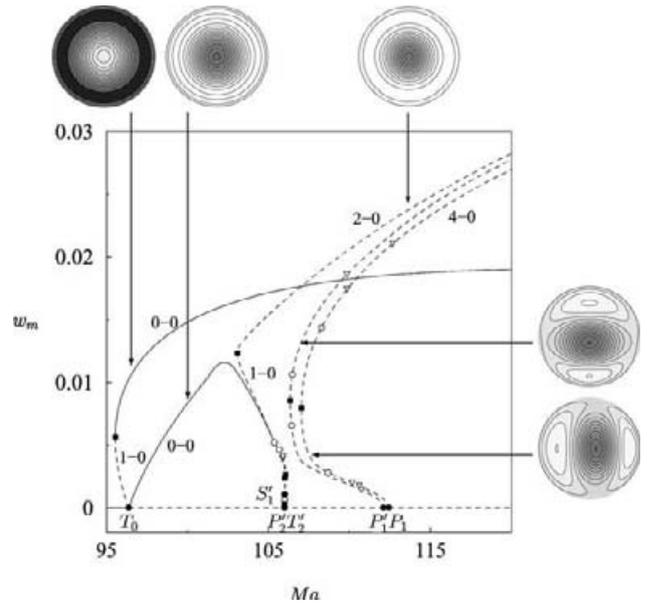


FIG. 17. Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Snapshots show isovalues of the vertical velocity in the midplane of the cylinder. Parameters are  $\epsilon=0.995$ ,  $A=1.5$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

$m=0$  and  $m=2$  states interact. These states interact in the  $A=1.5$  case as well. To describe this (codimension-2) interaction, we write

$$w(r, \theta, z) = \text{Re}\{a(t)f(r, z)\exp 2i\theta\} + b(t)g(r, z) + \dots, \quad (7)$$

where  $w$  is the vertical velocity at the point  $(r, \theta, z)$ , and we suppose that both modes set in in close succession, so that any interaction occurs already at small amplitude. In a cylindrical container, the equations for the amplitudes  $a$  (complex) and  $b$  (real) must commute with the following representation<sup>20,21</sup> of the symmetry group  $O(2)$  of rotations and reflections of a circle:

$$(a, b) \rightarrow (ae^{2i\phi}, b), \quad (a, b) \rightarrow (\bar{a}, b), \quad (8)$$

corresponding to rotations through an arbitrary angle  $\phi$  and reflection in the  $x$  axis. Thus

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \alpha_1 ab + \alpha_2 ab^2 + \dots, \quad (9)$$

$$\dot{b} = \nu b + \beta|a|^2 + \gamma b^2 + \dots, \quad (10)$$

where  $\mu$  and  $\nu$  are bifurcation parameters, and  $\alpha_1, \alpha_2, \beta$ , and  $\gamma$  are real coefficients, cf. Ref. 11. In writing these equations, we have chosen the cubic term to be stabilizing. There are two types of solutions:

$(a, b) = (0, b)$ , corresponding to axisymmetric states; these bifurcate transcrically at  $\nu=0$ .

$(a, b), ab \neq 0$ , corresponding to  $m=2$  modes; these bifurcate in a pitchfork of revolution at  $\mu=0$ , and are accompanied by a nonzero value of  $b$ , i.e., these solutions are not symmetric with respect to  $w \rightarrow -w$ , as observed in the simulations. As already mentioned, this is a consequence of the different boundary conditions at the top and bottom.

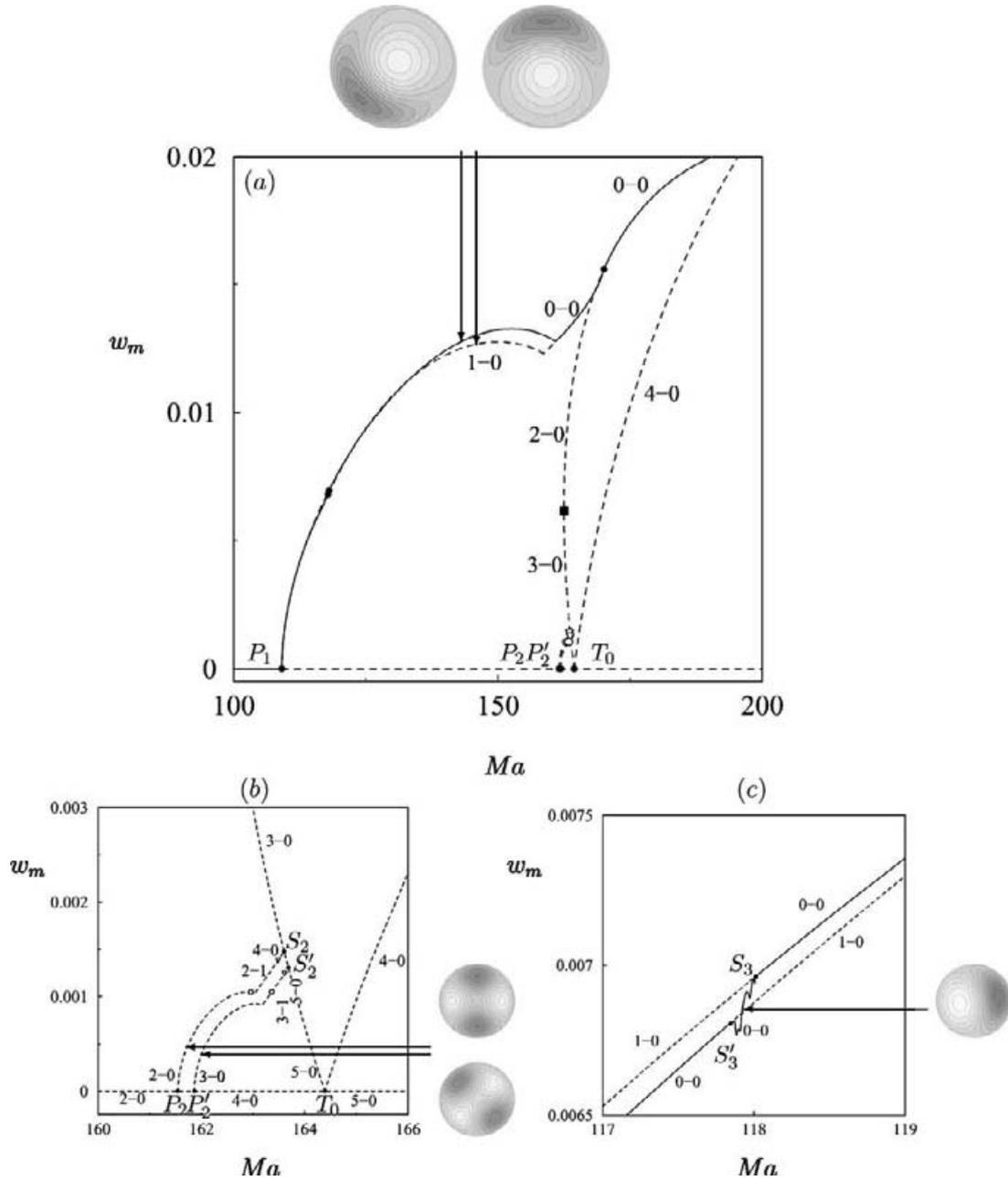


FIG. 18. (a) Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Snapshots show isovals of the vertical velocity in the midplane of the cylinder. (b),(c) Closer view of (a). Parameters are  $\epsilon=1$ ,  $A=1$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_c=12$ ,  $n_x=n_y=6$ , and  $n_z=10$ .

The  $m=2$  branch terminates on the branch of axisymmetric states when  $\mu + \alpha_1 b + \alpha_2 b^2 = 0$ ; this bifurcation is also a pitchfork of revolution.

A similar set of equations can be written down for the  $m=1$  states. These are also accompanied by a nonzero contribution from the axisymmetric state.

**A. Grid effect in a circular domain**

We now explore the effect of the  $D_4$  symmetry of the computational grid. We do so by adding to the above equations small terms that preserve the symmetry of the system under reflection in both the  $x$  and  $y$  axes, as well as in the

diagonals, but break rotational invariance. To this end we look at the bifurcations to  $m=2$  and  $m=1$  separately.

When  $m=2$ , the breaking of  $O(2)$  down to  $D_4$  symmetry leads to an equation of the form

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \alpha_1 a b + \alpha_2 a b^2 + \dots + \epsilon \bar{a}, \tag{11}$$

where  $\epsilon \ll 1$  and is real. A small term proportional to  $b$  can be added to the  $b$  equation as well. It follows that the  $m=2$  mode now sets in at  $\mu = \pm \epsilon$  instead of  $\mu = 0$ , in other words, that the primary bifurcation has been split into two successive bifurcations. The solution that sets in at  $\mu = -\epsilon$  corresponds to real  $a$  and hence to states of the form  $w$

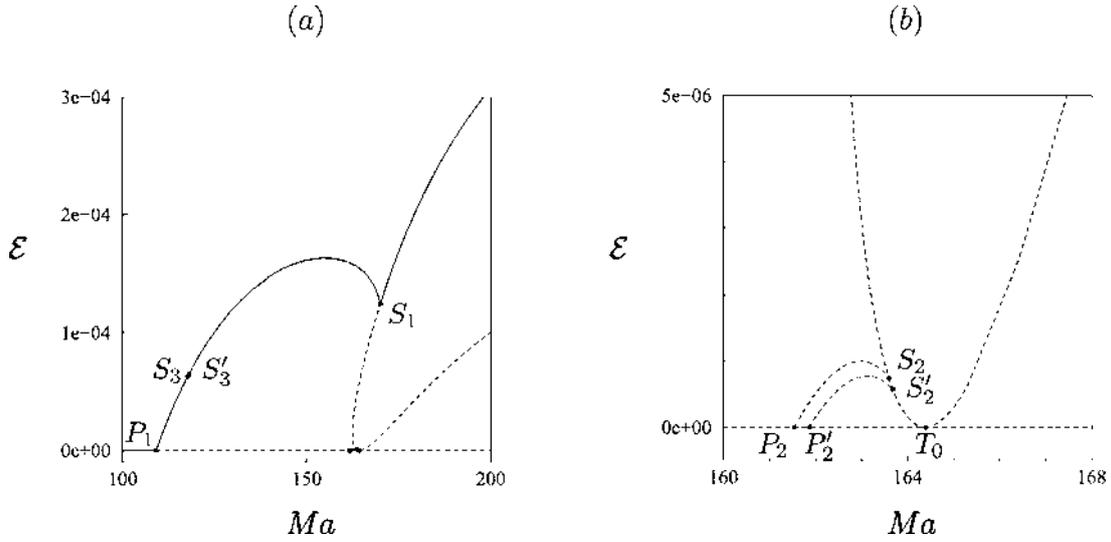


FIG. 19. (a) Bifurcation diagram showing the kinetic energy  $\mathcal{E} \equiv \int_{\Omega} (u^2 + v^2 + w^2) d\Omega$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . (b) Closer view of (a). Parameters are  $\epsilon=1$ ,  $A=1$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_x=12$ ,  $n_x=n_y=6$ , and  $n_z=10$ .

$= a \cos 2\theta f(r, z) + \dots$  which are invariant with respect to reflections in the  $x$  and  $y$  axes. In contrast, the solution that sets in at  $\mu = \epsilon$  corresponds to purely imaginary  $a$  and hence to states of the form  $w = |a| f(r, z) \sin 2\theta + \dots$  that are invariant under reflections in the diagonals. We identify the former with the  $\kappa_x$ -symmetric states, and the latter with the  $\Pi$ -symmetric states.

In contrast, when  $m=1$ , the requirement that rotation by  $90^\circ$  leaves the system invariant (i.e.,  $a \rightarrow ia$ ) shows that the only linear term in  $a$  that can be added to Eq. (9) is proportional to  $a$  itself. Consequently, the grid does not split the bifurcation to  $m=1$  states, although it may shift its location. At finite amplitude we have

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \alpha_1 a b + \alpha_2 a b^2 + \dots + \epsilon \bar{a}^3, \quad (12)$$

where  $\epsilon$  is again real. Writing  $a = \rho \exp i\psi$  leads to the conclusion that  $\psi=0$  or  $\psi=\pi/4$ , indicating the presence of two distinct branches at finite amplitude given by  $\rho^2 = \tilde{\mu}(1 \pm \epsilon)$ , where  $\tilde{\mu} \equiv \mu + \alpha_1 b + \alpha_2 b^2$  and the  $\pm$  signs correspond to  $\psi=0$  and  $\psi=\pi/4$ , respectively. The former are reflection-symmetric with respect to  $\kappa_x$ , the latter with respect to  $\Pi$ . Moreover, the  $\psi=0$  ( $\psi=\pi/4$ ) is stable (unstable) when  $\epsilon > 0$  and vice versa. These stability assignments are modified in the obvious fashion when the bifurcation is subcritical or there are additional unstable eigenvalues that are inherited from the  $a=0$  state.

**B. Elliptical domain**

We suppose that the cylinder is distorted into an ellipse, and that this distortion is small. This distortion preserves the conduction state  $a=b=0$  but breaks the  $O(2)$  symmetry down to  $D_2$ , the symmetry of a rectangle. The symmetry is generated by reflections in the  $x$  and  $y$  axes. In addition, we include the symmetry breaking due to the grid. As already mentioned, the grid has symmetry  $D_4$  and thus breaks the rotational symmetry of the system in a different way. In the following, it is important that the symmetries of the ellipse

are also symmetries of the grid. To incorporate both of these symmetry-breaking effects, we add to Eqs. (9) and (10) the largest terms that break the  $O(2)$  symmetry in the required fashion, while preserving invariance under reflection in the  $x$  and  $y$  axes. The results depend on the azimuthal wavenumber  $m$ .

We begin with the interaction between the  $m=1$  and  $m=0$  modes. In this case, the symmetry  $x \rightarrow -x$  acts by  $(a, b) \rightarrow (-\bar{a}, b)$ , while  $y \rightarrow -y$  acts by  $(a, b) \rightarrow (\bar{a}, b)$ . It follows that

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \alpha_1 a b + \alpha_2 a b^2 + \dots + \epsilon \bar{a}^3 + \delta \bar{a}, \quad (13)$$

$$\dot{b} = \nu b + \beta |a|^2 + \gamma b^2 + \dots, \quad (14)$$

where  $\delta \ll 1$  measures the ellipticity of the container, and is real. The resulting linearized equations are uncoupled:  $\kappa_x$ -symmetric states bifurcate from  $(0, 0)$  at  $\mu = -\delta$ , while  $\kappa_y$ -symmetric states come in at  $\mu = \delta$ . Weakly nonlinear analysis near each of these bifurcation points shows that these bifurcations are pitchforks. The analysis confirms the results of numerical continuation in the vicinity of the bifurcation to the  $m=1$  state in both  $A=1$  and  $1.5$  cylinders (compare Fig. 3 with Fig. 5, and Fig. 12 with Fig. 13).

We next turn to the interaction of the  $m=2$  and  $m=0$  modes. This time both  $x \rightarrow -x$  and  $y \rightarrow -y$  act by  $(a, b) \rightarrow (\bar{a}, b)$ , and we obtain

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \alpha_1 a b + \alpha_2 a b^2 + \dots + (\epsilon + \delta_0) \bar{a} + \delta_1 b, \quad (15)$$

$$\dot{b} = \nu b + \beta |a|^2 + \gamma b^2 + \dots + \frac{1}{2} \delta_2 (a + \bar{a}). \quad (16)$$

In these equations,  $\epsilon \ll 1$  continues to represent the effect of the grid while the  $\delta_j \ll 1$  break the remaining  $D_4$  symmetry further, down to  $D_2$ . Note that the symmetry requirement permits the inclusion of the term  $\delta_0 \bar{a}$  at linear order; thus in this case the grid effect can in effect be absorbed in the

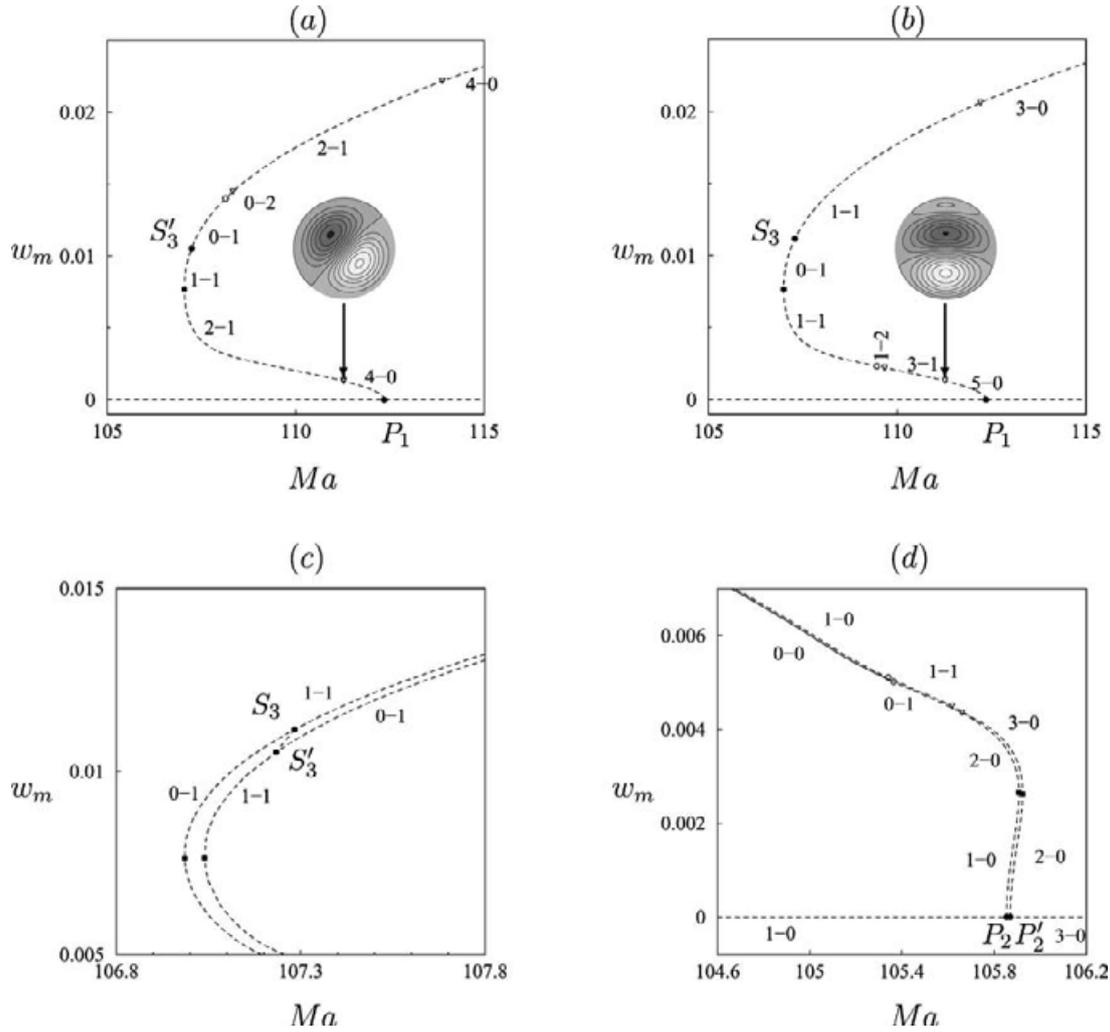


FIG. 20. Closer view of Fig. 12. (a) and (b) show the two branches of  $m=1$  states due to the grid, together with their stability assignments, while (c) shows the transfer of stability between these branches. (d) shows the splitting of the  $m=2$  branches emerging from  $P_2$ , also due to the grid. In contrast to (a) and (b), the secondary Hopf bifurcations occur on both branches. Parameters are  $\epsilon=1$ ,  $A=1.5$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_x=12$ ,  $n_x=n_y=n_z=10$ .

coefficient  $\delta_0$ , although we do not choose to do so. It follows that  $\epsilon \neq 0$  provides the dominant symmetry breaking effect only in circular domains.

With  $a \equiv \rho \exp i\psi$  and  $\epsilon \equiv \epsilon + \delta_0$ , we have

$$\mu\rho - \rho^3 + \alpha_1\rho b + \alpha_2\rho b^2 + \epsilon\rho \cos 2\psi + \delta_1 b \cos \psi = 0, \tag{17}$$

$$\epsilon\rho \sin 2\psi + \delta_1 b \sin \psi = 0, \tag{18}$$

$$\nu b + \beta\rho^2 + \gamma b^2 + \delta_2\rho \cos \psi = 0. \tag{19}$$

It follows that there are two types of solutions, satisfying  $\sin \psi=0$  and  $2\epsilon\rho \cos \psi + \delta_1 b=0$ , respectively. In the former case,  $a$  is real and can take either sign:

$$\mu a - a^3 + \alpha_1 a b + \alpha_2 a b^2 + \epsilon a + \delta_1 b = 0, \tag{20}$$

$$\nu b + \beta a^2 + \gamma b^2 + \delta_2 a = 0. \tag{21}$$

Reconstructing the solution (7), we find

$$w(r, \theta, z) = af(r, z)\cos 2\theta + bg(r, z) + \dots \tag{22}$$

This solution describes a solution with  $D_2$  symmetry, i.e., with two orthogonal axes of reflection. Moreover, the  $\sin \psi=0$  state sets in at

$$\mu = -\epsilon + \frac{\delta_1 \delta_2}{\nu}, \tag{23}$$

representing the threshold shift due to both the grid and the elliptical distortion. A weakly nonlinear calculation near this point shows that

$$\mu = -\epsilon + \frac{\delta_1 \delta_2}{\nu} + \left[ \frac{\alpha_1 \delta_2}{\nu} + \frac{\beta \delta_1}{\nu} + \frac{\delta_1 \delta_2^2 \gamma}{\nu^3} \right] \rho + \dots, \tag{24}$$

indicating that this bifurcation becomes *transcritical* once the circular domain is distorted ( $\delta_1 \neq 0$  and/or  $\delta_2 \neq 0$ ).

We examine next the bifurcation to the  $\sin \psi \neq 0$  branch. Since

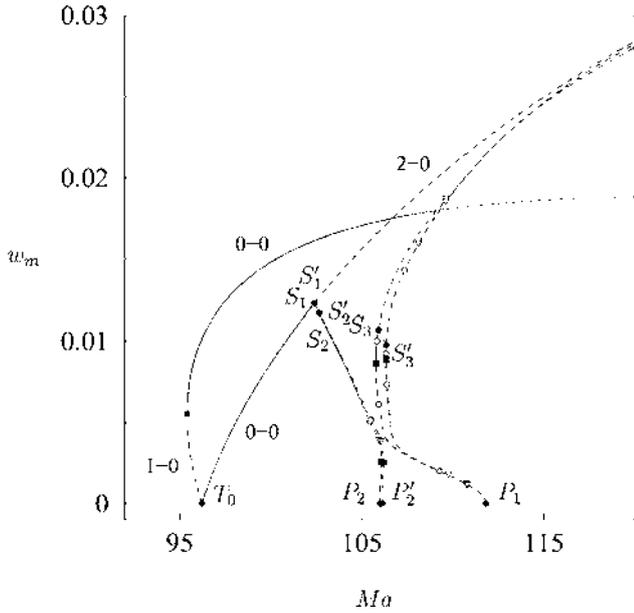


FIG. 21. Bifurcation diagram showing the maximum of the vertical velocity  $w_m$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . Parameters are  $\epsilon=1$ ,  $A=1.5$ , and  $Pr=1$ . Resolution is  $N_c=12$ ,  $n_x=n_y=6$ , and  $n_z=10$ .

$$\cos \psi = -\frac{\delta_1 b}{2\epsilon\rho} \tag{25}$$

the angle  $\psi$  will vary along the branch as a consequence of the variation of the amplitude ratio  $b/\rho$  with the bifurcation parameter  $\mu$ . Equations (17) and (19) become

$$\mu - \epsilon - \rho^2 + \alpha_1 b + \alpha_2 b^2 = 0, \tag{26}$$

$$\nu b + \beta\rho^2 + \gamma b^2 - \frac{\delta_1 \delta_2 b}{2\epsilon} = 0, \tag{27}$$

implying that

$$\mu = \epsilon + \left(-\nu - \beta\alpha_1 + \frac{\delta_1 \delta_2}{2\epsilon}\right) \frac{b}{\beta} + O(b^2), \tag{28}$$

$$\rho^2 = \left(-\nu + \frac{\delta_1 \delta_2}{2\epsilon}\right) \frac{b}{\beta} + O(b^2). \tag{29}$$

The bifurcation at  $\mu=\epsilon$  is therefore a pitchfork:  $\rho \sim (\mu-\epsilon)^{1/2}$ . Equation (25) now shows that  $\cos \psi$  vanishes ( $\psi \rightarrow \pi/2$ ) as  $\mu \rightarrow \epsilon$ , while  $\cos \psi \rightarrow 1$  ( $\psi \rightarrow 0, \pi$ ) as  $\mu$  increases. Consequently, the spatial phase  $\psi/2$  of the pattern gradually rotates with increasing supercriticality, and the total amount of rotation from the primary bifurcation to the end of the branch is  $\pm\pi/4$  as found in the numerical simulations. This rotation is evidently a consequence of the interaction between the  $m=2$  and  $m=0$  modes, and is present whenever  $(\epsilon + \delta_0)\delta_1 \neq 0$ , however small, a situation that we expect to be satisfied generically in elliptically distorted domains; the simulations show that the phase rotation persists even when the corresponding primary bifurcations are far apart, and the codimension-2 analysis just described no longer applies.

The bifurcation from the axisymmetric state to  $m=2$  at  $S_1$  (Fig. 12) is of the same type as  $P_1$ . As a result, the effect of the grid is described by

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \dots + \epsilon \bar{a}. \tag{30}$$

There are two types of solutions, with  $a$  real or pure imaginary; these set in at  $\mu = \mp \epsilon$ , respectively, and correspond to states with  $\kappa_x$  and  $\Pi$  symmetry, as observed in Fig. 23. Likewise, in the absence of the grid, the effect of finite ellipticity is captured by the equation

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \dots + \delta_0, \tag{31}$$

where  $0 < |\delta_0| \ll 1$  is a real parameter.<sup>22</sup> Thus  $a$  must be real, and for fixed  $\delta_0$  the equilibria satisfy a cubic equation. One branch grows monotonically from negative to positive  $\mu$  and is stable throughout; two other (disconnected) solutions appear via a saddle node and are present in  $\mu > 3(\delta_0/2)^{2/3}$  only. Both are *unstable*. These predictions agree exactly with the results shown in Fig. 17 near  $S_1$ ; evidently, the ellipticity in this figure overwhelms the effect of the grid responsible for the splitting of the  $m=2$  branches. It should be observed, however, that Eq. (31) does not capture all aspects of the loss of symmetry;<sup>22</sup> indeed, very close to  $S_1$  a more complete “unfolding” is provided by

$$\dot{a} = \mu a - |a|^2 a + \dots + \delta_1 \bar{a} + \delta_0. \tag{32}$$

This equation shows, by analogy with our discussion of the bifurcation at  $P_1$ , that small intervals of secondary branches with a rotating phase may also be present, and it is precisely these that are required to reconcile the splitting of the  $m=2$  branch when  $\epsilon=1$  into  $\kappa_x$ - and  $\Pi$ -symmetric branches (Fig. 23) with the behavior shown in Fig. 17 for  $1-\epsilon \ll 1$ , which shows that the solutions on either side of  $S_1$  connect to  $\kappa_x$ - and  $\kappa_y$ -symmetric branches.

Finally, near the primary bifurcation  $T_0$  (i.e.,  $\nu=0$ ), we find that

$$\nu = \frac{\delta_1 \delta_2}{\mu + \epsilon} + \left[ -\gamma - \frac{\delta_1 \delta_2 \alpha_1}{(\mu + \epsilon)^2} - \frac{\delta_1^2 \beta}{(\mu + \epsilon)^2} \right] b + \dots, \tag{33}$$

showing that the bifurcation to the analogue of the  $m=0$  state *remains* transcritical. The above results are consistent with those presented in Figs. 5, 13, and 17.

## V. DISCUSSION

In this paper, we have examined the effect of changing the container shape on pattern formation in Marangoni convection in small aspect ratio containers. The present study parallels an earlier investigation of the effects of changing the shape of the container from square to slightly rectangular.<sup>18</sup> In the present case, the change of shape of the container from circular to elliptical has a similar effect, in that the finite ellipticity of the container splits multiplicity-2 eigenvalues, resulting not only in the appearance of multiple hyperbolic branches, but also of a variety of secondary bifurcations, including some responsible for “mode-jumping” at finite amplitude. Although none of the secondary Hopf bifurcations we have identified appears to be supercritical, i.e., none produces stable small-amplitude oscillations, we have



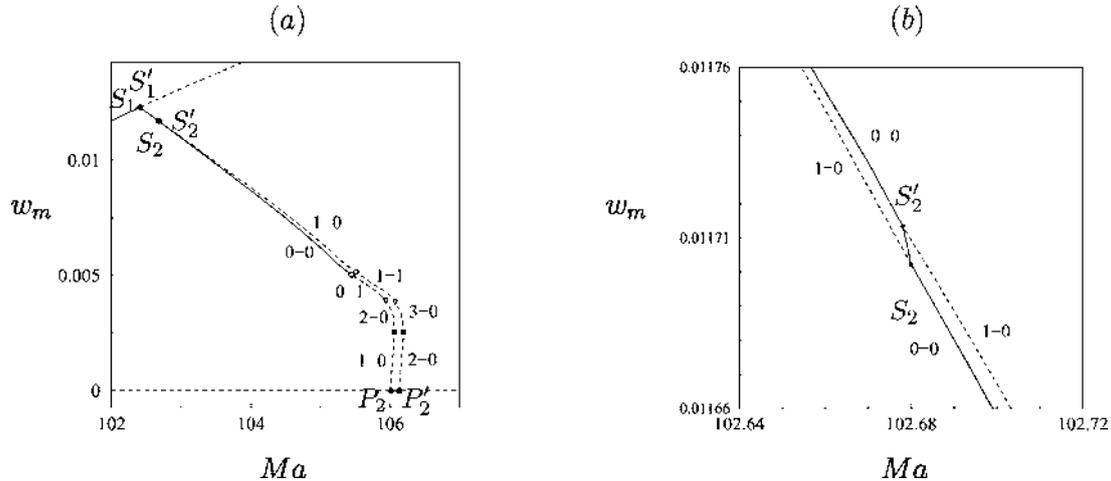


FIG. 23. (a),(b) Closer view of Fig. 21 showing exchange of stability between the two branches emerging from  $P_2$  and  $P_2'$ . Parameters are  $\epsilon=1$ ,  $A=1.5$ , and  $\text{Pr}=1$ . Resolution is  $N_e=12$ ,  $n_x=n_y=6$ , and  $n_z=10$ .

*et al.*<sup>24</sup> that do include finite Rayleigh number effects. However, with increasing aspect ratio, Dauby *et al.* predicted an onset of instability via an  $m=1$  mode, followed by  $m=2$  and more complex structures, while the  $m=1$  state is apparently absent from Koschmieder and Prahl's experiments.

Our results suggest distinct protocols for carrying out more detailed experiments. In particular, when the primary instability is a transcritical bifurcation to an axisymmetric mode, it is vitally important to examine perturbations with both downflow and upflow in the center of the container. Specifically, our results for  $A=1.5$  show that the primary instability leads to a stable  $m=0$  state with downflow in the center, and that this state remains stable until a secondary bifurcation, where it acquires an  $m=2$  contribution; at larger  $\text{Ma}$  this mixed state loses stability to growing oscillations, and a hysteretic transition to a stable  $m=0$  state with upflow in the center takes place. This state remains stable for larger  $\text{Ma}$ . In fact, these upflow states are stable down to a saddle-node bifurcation where the system undergoes a hysteretic transition back to the conduction state. It is significant that upflow states of this type have indeed been observed under microgravity conditions.<sup>7</sup> When the domain is deformed into an ellipse, the downflow  $m=0$  and  $m=2$  branches form a single continuous branch, but the hysteretic transition to the upflow state with increasing  $\text{Ma}$  remains. An appropriate experimental protocol focusing on downflow states near onset could in principle confirm the presence of both hysteresis loops and detect any (finite-amplitude) oscillations that may be associated with the loss of stability of the downflow state.

The results described here are largely insensitive to the precise value of the Prandtl number. In particular, for  $\text{Pr}=7$ ,  $A=1$ , the global properties of the bifurcation diagrams are not drastically affected. For example, when  $\epsilon=1$ , the Marangoni number of the secondary bifurcation  $S_1$  (Fig. 3) is hardly affected. When  $\epsilon=0.98$ , the only noticeable change occurs along the supercritical part of the branch emerging from  $T_2'$ . Here two saddle nodes are present in succession, and the eigenvalues change from 2-0 to 3-0 and then back to 2-0, thereby recovering the stability properties indicated in

Figs. 5 and 6 prior to the connection with the branch emerging from  $P_1'$ . An additional change occurs along the subcritical part of the branch emerging from  $T_2'$ : the Hopf bifurcation is now absent and is replaced by two saddle-node bifurcations. We have been unable, however, to recover the oscillations observed when  $\text{Pr}=1$  and  $A=1.5$  (Fig. 15). This comes as no surprise since in problems of this type, a lower value of  $\text{Pr}$  favors the presence of oscillations.

It is noteworthy that we have seen no evidence of the dynamics expected to arise from the interaction of the  $m=1$  and  $m=2$  modes in circular containers.<sup>25,26</sup> The most dramatic feature of this interaction is the presence, in certain parameter regimes, of structurally stable heteroclinic cycles connecting the  $m=2$  state with its rotations by  $\pi/4$ . Such cycles have been observed in  $A=2.5$  containers by Johnson and Narayanan<sup>5</sup> and reproduced within weakly nonlinear theory by Dauby *et al.*;<sup>24</sup> see also Ref. 7. Presumably this is so because the aspect ratios we have used are too far from the required codimension-2 point for this interaction.

## ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported in part by a CNRS Projet International de Cooperation Scientifique (PICS 3471) and by the National Science Foundation under Grant No. DMS-0305968.

<sup>1</sup>H. Bénard, "Les tourbillons cellulaires dans une nappe liquide," *Rev. Gen. Sci. Pures Appl.* **11**, 1261 (1900).

<sup>2</sup>E. L. Koschmieder and S. A. Prahl, "Surface-tension-driven Bénard convection in small containers," *J. Fluid Mech.* **215**, 571 (1990).

<sup>3</sup>T. Ondařuhu, G. B. Mindlin, H. L. Mancini, and C. Pérez-García, "Dynamical patterns in Bénard-Marangoni convection in a square container," *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3892 (1993).

<sup>4</sup>T. Ondařuhu, J. Millán-Rodríguez, H. L. Mancini, A. Garcimartín, and C. Pérez-García, "Bénard-Marangoni convective patterns in small cylindrical layers," *Phys. Rev. E* **48**, 1051 (1993).

<sup>5</sup>D. Johnson and R. Narayanan, "Experimental observation of dynamic

- mode switching in interfacial-tension-driven convection near a codimension-two point," *Phys. Rev. E* **54**, R3102 (1996).
- <sup>6</sup>R. Pasquetti, P. Cerisier, and C. Le Niliot, "Laboratory and numerical investigations on Bénard-Marangoni convection in circular vessels," *Phys. Fluids* **14**, 277 (2002).
- <sup>7</sup>D. Schwabe, "Marangoni instabilities in small circular containers under microgravity," *Exp. Fluids* **40**, 942 (2006).
- <sup>8</sup>M. F. Schatz and G. P. Neitzel, "Experiments on thermocapillary instabilities," *Annu. Rev. Fluid Mech.* **33**, 93 (2001).
- <sup>9</sup>B. Hof, P. G. J. Lucas, and T. Mullin, "Flow state multiplicity in convection," *Phys. Fluids* **11**, 2815 (1999).
- <sup>10</sup>W. Meevasana and G. Ahlers, "Rayleigh-Bénard convection in elliptic and stadium-shaped containers," *Phys. Rev. E* **66**, 046308 (2002).
- <sup>11</sup>S. Rosenblat, S. H. Davis, and G. M. Homsy, "Nonlinear Marangoni convection in bounded layers. Part 1. Circular cylindrical containers," *J. Fluid Mech.* **120**, 91 (1982).
- <sup>12</sup>G. Em. Karniadakis, M. Israeli, and S. A. Orszag, "High-order splitting method for the incompressible Navier-Stokes equations," *J. Comput. Phys.* **97**, 414 (1991).
- <sup>13</sup>K. Mamun and L. Tuckerman, "Asymmetry and Hopf bifurcation in spherical Couette flow," *Phys. Fluids* **7**, 80 (1995).
- <sup>14</sup>A. Bergeon, D. Henry, H. BenHadid, and L. S. Tuckerman, "Marangoni convection in binary mixtures with Soret effect," *J. Fluid Mech.* **375**, 143 (1998).
- <sup>15</sup>P. C. Dauby, G. Lebon, and E. Bouhy, "Linear Bénard-Marangoni instability in rigid circular containers," *Phys. Rev. E* **56**, 520 (1997).
- <sup>16</sup>H. Herrero and A. M. Mancho, "On pressure boundary conditions for thermoconvective problems," *Int. J. Numer. Methods Fluids* **39**, 391 (2002).
- <sup>17</sup>A. Vidal and A. Acrivos, "Nature of the neutral state in surface-tension driven convection," *Phys. Fluids* **9**, 615 (1966).
- <sup>18</sup>A. Bergeon, D. Henry, and E. Knobloch, "Three-dimensional Marangoni-Bénard flow in square and nearly square containers," *Phys. Fluids* **13**, 92 (2001).
- <sup>19</sup>C. Canuto, M. Hassani, A. Quarteroni, and T. A. Zang, *Spectral Methods in Fluid Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1987).
- <sup>20</sup>J. D. Crawford and E. Knobloch, "Symmetry and symmetry-breaking bifurcations in fluid dynamics," *Annu. Rev. Fluid Mech.* **23**, 341 (1991).
- <sup>21</sup>M. Golubitsky, I. Stewart, and D. G. Schaeffer, *Singularities and Groups in Bifurcation Theory* (Springer-Verlag, New York, 1988), Vol. 2.
- <sup>22</sup>M. Golubitsky and D. G. Schaeffer, "A discussion of symmetry and symmetry breaking," *Proc. Symp. Pure Math.* **40**, 499 (1983).
- <sup>23</sup>A. Bergeon and E. Knobloch, "Oscillatory Marangoni convection in binary mixtures in square and nearly square containers," *Phys. Fluids* **16**, 360 (2004).
- <sup>24</sup>P. C. Dauby, P. Colinet, and D. Johnson, "Theoretical analysis of a dynamic thermoconvective pattern in a circular container," *Phys. Rev. E* **61**, 2663 (2000).
- <sup>25</sup>D. Armbruster, J. Guckenheimer, and P. Holmes, "Heteroclinic cycles and modulated travelling waves in systems with  $O(2)$  symmetry," *Physica D* **29**, 257 (1988).
- <sup>26</sup>I. Mercader, J. Prat, and E. Knobloch, "Robust heteroclinic cycles in two-dimensional Rayleigh-Bénard convection without Boussinesq symmetry," *Int. J. Bifurcation Chaos Appl. Sci. Eng.* **12**, 2501 (2002).

# Bibliographie

- [1] A. BERGEON, D. HENRY & E. KNOBLOCH Three-dimensional Marangoni-Bénard flow in square and nearly square containers. *Phys. Fluids* **13**, 92 (2001).
- [2] A. BERGEON & E. KNOBLOCH Oscillatory Marangoni convection in binary mixtures in square and nearly square containers. *Phys. Fluids* **16**, 360 (2004).
- [3] J. D. CRAWFORD & E. KNOBLOCH Symmetry and symmetry-breaking bifurcations in fluid dynamics. *Ann. Rev. Fluid Mech* **23**, 341 (1991).
- [4] G. DANGELMAYR & E. KNOBLOCH Hopf bifurcation with broken circular symmetry. *Nonlinearity* **4**, 399 (1991).
- [5] G. DANGELMAYR, J. HETTEL & E. KNOBLOCH Parity-breaking bifurcation in inhomogeneous systems. *Nonlinearity* **10**, 1093 (1997).
- [6] P. C. DAUBY, G. LEBON & E. BOUHY Linear Bénard-Marangoni instability in rigid circular containers. *Phys. Rev. E* **56**, 520 (1997).
- [7] M. GOLUBITSKY, I. STEWART & D. G. SCHAEFFER *Singularities and Groups in Bifurcation Theory*. Vol. 1, Springer-Verlag, New York (1985).
- [8] M. GOLUBITSKY & M. ROBERTS A classification of degenerate Hopf bifurcations with  $O(2)$  symmetry. *J. Diff. Eq.* **69**, 216 (1987).
- [9] M. GOLUBITSKY, I. STEWART, & D. G. SCHAEFFER *Singularities and Groups in Bifurcation Theory*, Vol. 2, Springer-Verlag, New York (1988).
- [10] HENRY, D. & ROUX, B. Soret separation in a quasi-vertical cylinder. *J. Fluid. Mech.* **195**, 175 (1988).
- [11] B. HOF, P. G. J. LUCAS & T. MULLIN Flow state multiplicity in convection. *Phys. Fluids* **11**, 2815 (1999).
- [12] KNOBLOCH, E. On the degenerate Hopf bifurcation with  $O(2)$  symmetry. *Contemp. Math.* **56**, 193 (1986).
- [13] E. KNOBLOCH, J. HETTEL & G. DANGELMAYR Parity breaking bifurcation in inhomogeneous systems. *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4839 (1995).
- [14] E. KNOBLOCH A finite-dimensional mechanism responsible for bursts in fluid mechanics. In *Dynamics and Bifurcation of Patterns in Dissipative Systems*. Edité par G. Dangelmayr et I. Oprea, World Scientific Series on Nonlinear Science Vol. 12 World Scientific, Singapore., 231 (2004).
- [15] J. R. A. PEARSON On convective cells induced by surface tension. *J. Fluid Mech.* **4**, 489 (1958).
- [16] M. L RAMÓN, D. MAZA & H. L. MANCINI Patterns in small aspect ratio Bénard-Marangoni convection. *Phys. Rev. E* **60**, 4193 (1999).
- [17] S. ROSENBLAT, S. H. DAVIS & G. M. HOMS Y Nonlinear Marangoni convection in bounded layers. Part 1. Circular cylindrical containers. *J. Fluid Mech.* **120**, 91 (1982).

- [18] A. VIDAL & A. ACRIVOS Nature of neutral state in surface tension driven Bénard convection. *Phys. Fluids* **9**, 123, No 3, 615 (1966).



# Chapitre 5

## Etats localisés dans la convection de Marangoni-Bénard avec effet Soret

Typiquement, dans la convection de Rayleigh-Bénard et au voisinage du seuil d'instabilité, se forment des rangées de rouleaux de convection dont la longueur caractéristique dépend du fluide et de la géométrie. Ces structures, qui remplissent le domaine, sont prédites théoriquement et observées expérimentalement. Très récemment, il a été mis en évidence qu'à ces rangées périodiques, pouvaient se substituer des structures spatialement localisées appelées solitons dissipatifs. Qualitativement, elles se présentent sous la forme d'un ou plusieurs rouleaux de convection localisés en une certaine région, le reste du fluide restant au repos. Dans le domaine de la convection ces structures inattendues ont été baptisées *convectons* dans le régime stationnaire [12] et *oscillons* dans un régime périodique [26]. Il existe de nombreux autres exemples dans lesquels leur formation a pu être observée : c'est le cas des milieux granulaires en présence de vibrations [38], de la convection thermique en présence d'un mélange fluide binaire [1, 29], de la magnétoconvection [12] ou des instabilités de double-diffusion [6, 7]. Outre en mécanique des fluides, ces structures ont également été observées en optique non-linéaire [35] ou en mécanique des structures [23] pour ne citer que quelques exemples. Pour plus de références, on pourra consulter l'article de synthèse de Knobloch [26].

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au problème de Marangoni-Bénard avec effet Soret dans un domaine bidimensionnel rectangulaire de grande extension horizontale<sup>1</sup>. L'un des objectifs de ce travail est d'une part, de mettre en évidence la formation de structures convectives spatialement localisées et d'autre part, d'étudier leur impact sur la dynamique spatio-temporelle.

L'exposé du travail est organisé comme suit. Dans un premier temps, nous présentons une partie des résultats théoriques obtenus par Burke et Knobloch [13] dans une étude de l'équation de Swift-Hohenberg. Nous nous restreignons à ce qui concerne plus spécifiquement notre travail mais pour plus de détails, on pourra consulter les références [13, 14, 15]. Ces travaux mettent en évidence et expliquent un mécanisme appelé *homoclinic snaking* par lequel se forme une gamme de paramètres dans laquelle existe une multitude d'états spatialement localisés. L'équation de Swift-Hohenberg est une équation variationnelle mais les problèmes issus de la mécanique des fluides ne le sont que rarement. C'est pourquoi

---

<sup>1</sup>On entend par là que l'extension horizontale du domaine est grande devant la longueur d'onde critique que donne l'analyse de stabilité linéaire d'une couche infinie.

ce fut une réelle surprise lorsque Batiste *et al.* [10] et Alonso *et al.* [1] mirent en évidence un mécanisme tout à fait similaire dans le problème de Rayleigh-Bénard en présence d'effet Soret. L'idée de chercher de tels états dans l'instabilité de Marangoni-Bénard avec effet Soret vient essentiellement des nombreux points communs qu'il existe entre ces deux instabilités. Dans une seconde partie, nous présentons le problème de Marangoni-Bénard que nous avons étudié et nous décrivons les mécanismes de l'instabilité et les résultats essentiels à notre étude. Enfin, dans une dernière partie, nous présentons nos résultats. Ils sont consignés dans un article qui constitue le coeur de ce chapitre mais dont nous présentons préalablement la démarche et les principaux résultats.

## 5.1 Description théorique

Formellement, l'appellation d'états spatialement localisés fait référence à des solutions composées de deux structures distinctes spatialement séparées dans le domaine. Ils ont été mis en évidence par Fauve & Thual [21] dans l'étude de l'équation de Ginzburg-Landau complexe sous-critique et par la suite dans d'autres équations modèles utilisées en physique parmi lesquelles les équations de Swift-Hohenberg, de Korteweg de Vries ou l'équation non-linéaire de Schrödinger [16]. La théorie liée à la formation de ces états a été développée récemment par Burke et Knobloch [13, 14, 15] dans le contexte de l'équation Swift-Hohenberg mono-dimensionnelle. Ce sont les résultats de ces travaux sur lesquels nous nous appuyerons et nous les décrivons brièvement dans le paragraphe suivant.

La forme de l'équation de Swift-Hohenberg mono-dimensionnelle étudiée par Burke et Knobloch [13] reprend celle utilisée par Hilali *et al.* [22] et s'écrit :

$$\partial_t u = ru - (\partial_{xx}^2 + q_c^2)^2 u + \alpha u^2 - \beta u^3, \quad (5.1)$$

où  $u(x, t) \in \mathbb{R}$  et  $\nu = (r, q_c, \alpha, \beta)$  sont les paramètres réels caractéristiques de l'équation. On considèrera dans la suite cette équation dans un domaine périodique de période  $L \gg 1$  (soit  $u(x) = u(x + L)$ ) ou dans un domaine infini. Il est aisé de montrer que l'équation possède trois solutions stationnaires homogènes qui sont :

$$u_0 = 0, \quad u_{\pm} = \frac{1}{\beta} \left( \alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 4\beta(r - q_c^4)} \right). \quad (5.2)$$

La solution  $u_0$  existe quelque soit  $r \in \mathbb{R}$ , la solution  $u_-$  est créée par une bifurcation transcritique le long de la branche  $u_0$ . La branche sous-critique associée passe un noeud-col qui donne naissance à la solution  $u_+$ . L'analyse de stabilité de la solution  $u_0$  est menée en linéarisant l'équation et en étudiant le taux de croissance de modes propres  $2\pi/k$  périodiques en espace. Ici  $k$  est le nombre d'onde et les valeurs qu'il peut prendre dans un domaine périodique sont liées à  $L$  par  $Lk/2\pi \in \mathbb{N}$ . L'analyse menée pour un domaine infini ( $k \in \mathbb{R}$ ) montre que la courbe neutre  $r(k)$  admet un minimum  $r = 0$  pour  $k = q_c$ . On choisit donc dans la suite  $L = n\lambda_c = 2n\pi/q_c$  avec  $n \in \mathbb{N}^*$  de sorte que la solution  $u_0$  perd sa stabilité en  $r = 0$ . Le mode marginal associé est spatialement périodique de nombre d'onde  $k = q_c$ . On notera qu'en raison de l'invariance par translation, la bifurcation en  $r = 0$  est une fourche de révolution et les solutions stationnaires qui en émergent ont une valeur propre nulle. En posant :  $y_1 = u$ ,  $y_2 = u'$ ,  $y_3 = u''$  et  $y_4 = u'''$  (où le prime

désigne  $d/dx$ ), les solutions stationnaires de (5.1) sont également solutions d'un système de 4 équations différentielles ordinaires :

$$y_1' = y_2, \quad y_2' = y_3, \quad y_3' = y_4, \quad y_4' = (r - q_c^4)y_1 - 2q_c^2y_3 + \alpha y_1^2 - \beta y_1^3, \quad (5.3)$$

noté schématiquement :

$$\frac{d\mathbf{y}}{dx} = \mathbf{f}(\mathbf{y}, \nu), \quad (5.4)$$

où  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^4$  est le vecteur de coordonnées  $(y_1, y_2, y_3, y_4)$  dont les composantes sont les variables d'un espace des phases de dimension 4. L'équation (5.1) est invariante pour la réflexion  $x \rightarrow -x$ ,  $u \rightarrow u$  ce qui se traduit sur le système (5.4) par l'invariance par la transformation  $R$  :

$$R : (y_1, y_2, y_3, y_4) \rightarrow (y_1, -y_2, y_3, -y_4), \quad (5.5)$$

avec  $R \circ R = I$  où  $I$  est la transformation identité .

Le système dynamique spatial représenté par (5.4) admet bien sur la solution stationnaire triviale  $\mathbf{y} = \mathbf{0}$ , dont l'analyse de stabilité linéaire (en espace) permet d'exprimer, au voisinage de  $r = 0$ , les 4 valeurs propres [13] :

- si  $r > 0$ ,  $\lambda = \pm iq_c \pm i(\sqrt{r}/2q_c) + O(r)$ .
- si  $r = 0$ ,  $\lambda = \pm iq_c$ .
- si  $r < 0$ ,  $\lambda = \pm (\sqrt{-r}/2q_c) \pm iq_c + O(r)$ .

Il en résulte que pour  $r < 0$ , la solution triviale est hyperbolique avec deux paires de valeurs propres complexes conjuguées dont une est à partie réelle positive et l'autre à partie réelle négative. Elles sont associées respectivement à des directions propres instables et stables. Les valeurs propres à partie réelle positive correspondent à une croissance exponentielle de  $u$  depuis  $u = 0$  en  $x = -\infty$  vers une solution non-nulle  $u \neq 0$  tandis que les valeurs propres à partie réelle négative correspondent à une décroissance exponentielle vers  $u = 0$  en  $+\infty$  depuis une solution non-nulle. Pour ces valeurs de  $r < 0$ , si il existe des états spatialement localisés, il sont donc liés à la présence d'une orbite homocline du point fixe hyperbolique  $\mathbf{y} = \mathbf{0}$  dans un espace de dimension 4. Au point  $r = 0$ , les valeurs propres sont imaginaires pures de multiplicité 2 ce qui correspond à une bifurcation de Hopf dans un système réversible en présence d'une résonance 1 : 1 [25]. Pour  $r > 0$ , les quatre valeurs propres sont imaginaires pures de multiplicité 1 et la solution triviale est non-hyperbolique. Dans ce dernier cas, la stabilité linéaire n'indique pas la présence d'états localisés, les variétés non-linéaires n'étant pas connectées à la solution  $u_0$ . L'évolution des valeurs propres avec  $r$  dans le plan complexe est représentée schématiquement sur la figure 5.1.

Au voisinage du seuil, les solutions stationnaires de (5.1) peuvent être calculées par une méthode asymptotique. Le petit paramètre  $\epsilon$  est introduit en posant  $r = -\epsilon^2\mu$  avec  $\mu > 0$  et  $0 < \epsilon \ll 1$ . Le choix du signe repose sur le fait que les solutions stationnaires sont cherchées dans le régime sous-critique. Une seconde échelle spatiale est introduite  $X = \epsilon x$  et correspond à l'échelle sur laquelle varie l'amplitude des structures de longueur d'onde d'ordre  $\lambda_c = 2\pi/q_c$ . Le développement asymptotique de la solution sous la forme  $u(x) = \epsilon u_1(x, X) + \epsilon^2 u_2(x, X) + O(\epsilon^3)$  est introduit dans l'équation et l'identification des différents ordres amène à une solution périodique de la forme :

$$u_p(x) = 2 \left( \frac{-r}{\gamma} \right)^{1/2} \cos(q_c x + \phi) + O(r), \quad (5.6)$$

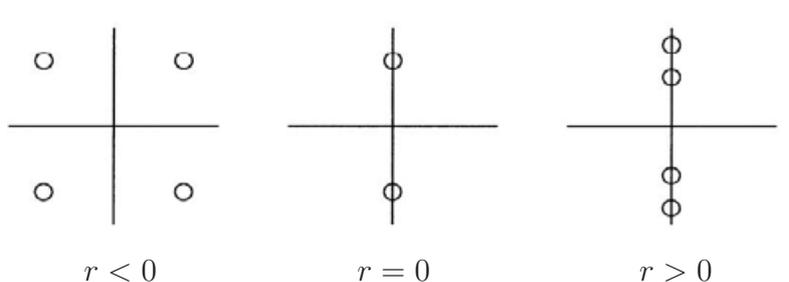


FIG. 5.1 – Evolution schématique des valeurs propres dans le plan complexe pour différentes valeurs de  $r$  au voisinage de  $r = 0$ .

qui bifurque de la branche de solution  $u_0$  de manière sous-critique en  $r = 0$ . Dans la même gamme de paramètres, on obtient également une solution de la forme :

$$u_l(x) = 2 \left( \frac{-2r}{\gamma} \right)^{1/2} \operatorname{sech} \left( \frac{x\sqrt{-r}}{2q_c} \right) \cos(q_c x + \phi) + O(r). \quad (5.7)$$

qui correspond à une solution spatialement localisée dont l'amplitude tend vers 0 dans les limites  $x \rightarrow \pm\infty$  (figure 5.2). Le paramètre  $\gamma$  dépend du poids des non-linéarités au travers de l'expression  $\gamma = 38\alpha^2/9q_c^4 - 3\beta$ . Par ailleurs,  $\phi$  est une phase arbitraire qui pour  $u_p$  sélectionne une solution issue de la fourche de révolution en  $r = 0$  et pour  $u_l$  détermine la phase dans l'enveloppe en  $\operatorname{sech}$ . Pour cette solution, l'ordre de l'expansion est insuffisant pour verrouiller la phase  $\phi$ . En incluant les termes d'ordres supérieurs, on obtient [13] deux valeurs possibles  $\phi = 0$  et  $\phi = \pi$  qui sont aussi les seules valeurs préservant l'invariance de la solution sous  $x \rightarrow -x$ . Ces solutions sont représentées sur les figures 5.2b et 5.2c. On les distingue aisément l'une de l'autre car l'une présente un maximum en  $x = 0$  et l'autre un minimum. Le point  $r = 0$  est un point de codimension 2 et l'analyse de cette bifurcation par la théorie des formes normales est conduite par Burke et Knobloch [13, 15]. Elle confirme notamment dans le voisinage  $0 < r \ll 1$ , l'existence d'états spatialement localisés lorsque  $38\alpha^2 > 27\beta q_c^4$  ( $\gamma > 0$ ), le caractère sous-critique de la bifurcation et la forme (5.6,5.7) des solutions.

L'étude non-linéaire de l'évolution de ces solutions loin du seuil  $r = 0$  doit être menée numériquement [20]. Le diagramme de bifurcation obtenu par Burke & Knobloch pour des grands domaines ( $L \gg \lambda_c$ ) munis de conditions aux limites périodiques est présenté sur la figure 5.3. Les trois branches de solutions issues de la bifurcation en  $r = 0$  y sont présentes. La bifurcation est sous-critique. La branche de solution  $u_p$  initialement instable passe un noeud-col à l'issue duquel elle recouvre sa stabilité. Les deux autres branches correspondent aux branches d'états localisés  $\phi = 0$  et  $\phi = \pi$ . Au voisinage de l'origine, leurs amplitudes sont faibles et voisines l'une de l'autre. L'enveloppe est suffisamment large pour permettre l'existence d'une solution contenant plusieurs longueurs d'ondes (plusieurs oscillations autour de 0). A mesure que l'on s'éloigne de  $r = 0$ , l'amplitude de l'enveloppe croît et son extension spatiale diminue pour devenir de l'ordre de  $\lambda_c$  (figure 5.2a) . Passée cette limite, les deux branches traversent une série de noeuds-cols responsable de la terminologie qualifiant ce phénomène d'*homoclinic snaking*. A chaque noeud col, la structure sous l'enveloppe s'enrichit d'une paire d'oscillations supplémentaire de part et d'autre de sorte que les propriétés d'invariance par la symétrie de réflexion sont pré-

servées. Ces changements s'accompagnent d'un élargissement de l'enveloppe, la longueur d'onde des oscillations sous l'enveloppe restant peu affectée. Après quelques aller-retours, les positions des noeuds cols s'alignent verticalement définissant une gamme de paramètre comprise entre  $r_{P_1}$  et  $r_{P_2}$  à l'intérieur de laquelle prennent place les aller-retours. Pour chaque valeur de  $r$  dans cet intervalle, il existe pour un domaine d'extension infinie, une infinité de solutions spatialement localisées, chacune d'extension spatiale différente. Au fur et à mesure des aller-retours, la solution ressemble de plus en plus à une solution périodique de période  $\lambda_c$  à l'exception de part et d'autre du support d'un front stationnaire assurant le raccord avec la solution  $u_0 = 0$  et s'étalant sur une distance en ordre de grandeur égale à  $\lambda_c$ .

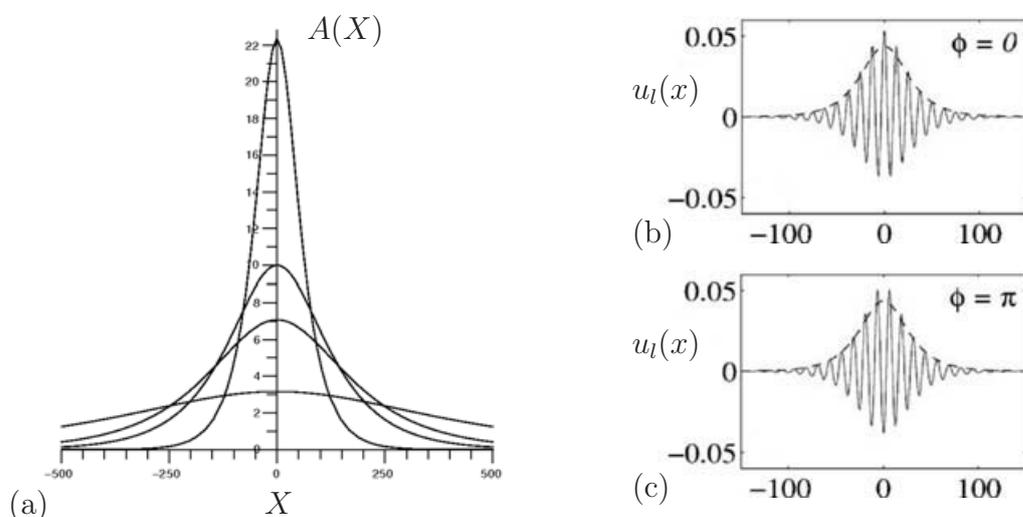


FIG. 5.2 – (a) Evolution de l'enveloppe  $A(X) = \sqrt{2\mu/\gamma} \operatorname{sech}(X\sqrt{\mu}/2q_c)$  pour différentes valeurs de  $r$ . Les amplitudes croissantes correspondent à des  $|r|$  croissants. (b,c) Profil  $u_l(x)$  au voisinage du seuil  $r = 0$ . La phase  $\phi$  est fixée, (b)  $\phi = 0$ , (c)  $\phi = \pi$ . D'après [14].

La structure de la solution entre ces deux fronts suggère l'existence de connections (hétérocline) entre la solution  $u_0$  et la solution périodique  $u_p$ . Si l'on regarde une solution obtenue après un nombre important d'aller-retours, lorsque  $x$  croît de  $-\infty$  à  $+\infty$ , la solution décrit le passage de  $u_0$  à  $u_p$  puis de  $u_p$  à  $u_0$  soit deux connections hétéroclines. C'est dans cette région  $[r_{P_1}, r_{P_2}]$  que se situe le point de Maxwell  $r_M$  pour lequel les solutions  $u_0$  et  $u_p$  (de période  $\lambda_c$ ) ont la même énergie  $F$ . En effet, l'équation de Swift-Hohenbergh dans un domaine périodique de période  $L$  (ici  $L \gg 1$ ) possède une fonctionnelle de Lyapunov  $F$  que l'on appellera énergie définie par :

$$F = \int_0^L \left( -\frac{1}{2}ru^2 + \frac{1}{2}[(\partial_x^2 + q_c^2)u]^2 - \frac{1}{3}\alpha u^3 + \frac{1}{4}\beta u^4 \right) dx, \quad (5.8)$$

et telle que  $\partial_t u = -\delta F/\delta u$ . Le point de Maxwell correspond à la valeur  $r = r_M$  pour laquelle il existe deux états distincts ayant la même énergie. Dans notre cas, il s'agit de la solution  $u_0$  et de la solution périodique  $u_p$  pour une valeur de  $r$  entre le seuil  $r = 0$  et la valeur  $r_{SN}$  associée au noeud col par lequel passe la branche des solutions  $\lambda_c$ -périodiques. Pour cette valeur, les deux solutions sont stables. La présence de ce point de Maxwell est

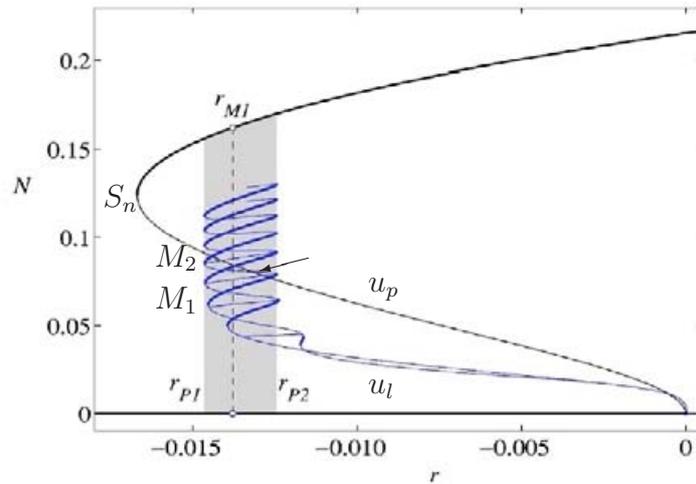


FIG. 5.3 – Diagramme de bifurcation représentant les variations de la norme de la vitesse avec  $r$ . Les solutions linéairement stables sont sur les lignes les plus épaisses. Les paramètres sont  $L = 50\lambda_c = 50\pi, \alpha = 0.41, \beta = 1$ . D'après [14].

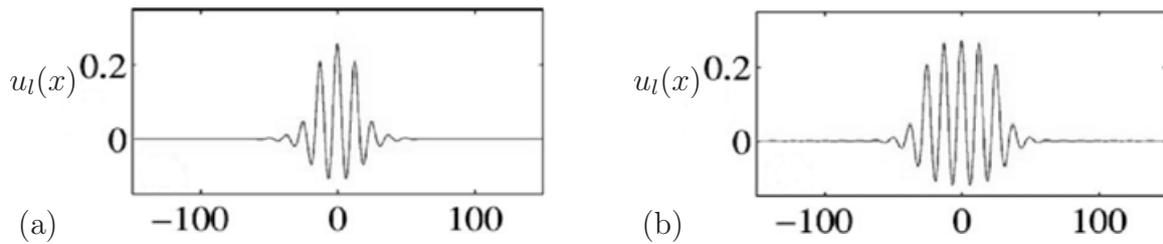


FIG. 5.4 – Solutions aux points  $M_1$  et  $M_2$  de la figure précédente. La phase des solutions est  $\phi = 0$ . D'après [14].

utilisée par Pomeau [32] pour proposer une interprétation qualitative de la multiplicité d'états spatialement localisés. Dans un système variationnel bi-stable entre deux états homogènes disons  $u_0 = 0$  et  $u_1 = 1$ , les fronts liant ces deux états vont se déplacer de sorte à favoriser l'existence de ceux associés à l'énergie la plus faible. Par exemple, si  $u_0 = 0$  a une énergie inférieure à  $u_1 = 1$  en dessous du point de Maxwell, les fronts se déplaceront de sorte à ce que  $u_0$  envahisse les régions où  $u_1$  existe. Au point de Maxwell, les énergies sont égales et donc au delà, c'est l'état  $u_1 = 1$  qui aura l'énergie la plus faible. Les fronts se déplaceront donc de sorte à ce que  $u_1$  envahisse  $u_0$ . Les points associés aux solutions stationnaires correspondent aux points de Maxwell. La situation est différente lorsque l'un des états n'est pas homogène ce qui est le cas ici de l'état périodique. Qualitativement, le front ne peut être invariant dans son avancée et l'hétérogénéité spatiale de l'état périodique va "coincer" son avancée conduisant à un élargissement de la région dans laquelle existent des états stationnaires. Bien que qualitative, cette interprétation indique que dans la région voisine de  $r_{P_1}$ , la solution  $u_0$  a tendance à envahir la solution  $u_p$  ce qui conduit à une compression de la structure spatialement localisée et qu'à l'opposé, dans la région voisine de  $r_{P_2}$ , c'est  $u_p$  qui a tendance à envahir  $u_0$  conduisant à une dilatation de la structure. Ce phénomène est confirmé par Burke et Knobloch [13] qui présentent les

variations du nombre d'onde  $k$  le long d'une branche d'états localisées dans son parcours de  $r_{P_1}$  à  $r_{P_2}$ .

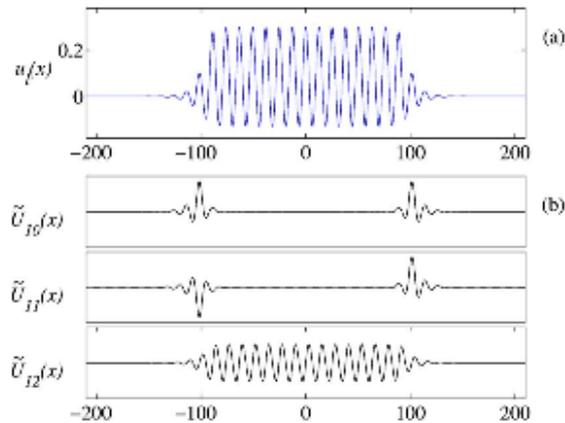


FIG. 5.5 – (a) Représentation de la solution (b) Représentation de 3 des vecteurs propres.  $U_{10}$  représente le mode de phase,  $U_{11}$  le mode d'amplitude et  $U_{12}$  est le mode ayant une valeur propre nulle associé à l'invariance par translation. D'après [13].

La stabilité des solutions le long des branches  $\Phi = 0$  et  $\Phi = \pi$  est une question délicate. Au voisinage de  $r = 0$  la branche  $\Phi = \pi$  est deux fois instable. L'un des modes correspond à une instabilité en amplitude héritée du caractère sous-critique de la bifurcation et est associée à un mode ayant la même parité que la solution. L'autre mode correspond à une instabilité de phase liée au fait que l'invariance par translation est brisée par l'enveloppe. Le mode est de parité opposée puisqu'il tend à déplacer la solution sous l'enveloppe. Cette brisure des symétries du cercle (qui a sélectionné les phases  $\pi$  et  $0$ ) n'induit donc pas d'instabilité de phase pour l'autre solution  $\Phi = 0$  qui n'hérite que de l'instabilité d'amplitude. Au voisinage de  $r = 0$ , la valeur propre temporelle du mode d'instabilité de phase est voisine de 0 pour les deux branches car la forme de l'enveloppe permet encore l'existence d'une solution assez voisine de la solution périodique. En revanche, dès que  $r$  approche de la région de snaking où la largeur de l'enveloppe est de l'ordre de  $\lambda_c$ , cette valeur propre est de l'ordre de grandeur des valeurs propres des modes d'instabilité en amplitude. La branche  $\Phi = \pi$  est alors deux fois instable, la branche  $\Phi = 0$  une fois instable. Après quelques aller-retours dans la région  $[r_{P_1}, r_{P_2}]$ , pour chacune des deux branches, les deux valeurs propres associées aux instabilités de phase et d'amplitude deviennent égales, évoluant donc de la même manière le long de chacune des deux branches. Ceci est dû au fait que les deux modes propres sont spatialement localisés. Ces deux modes propres sont représentés sur la figure 5.5 pour une solution loin le long du snaking. Ils sont formés de deux pulses séparés par une région le long de laquelle la solution est nulle. Lorsque cette région est suffisamment grande i.e. lorsque que l'on a suffisamment parcouru d'aller-retours, les deux pulses sont essentiellement découplés. Le pulse de gauche (figure 5.5(b), mode  $U_{10}$ ) associé à l'instabilité de phase est alors l'opposé du pulse de gauche associé à l'instabilité d'amplitude (figure 5.5(b), mode  $U_{11}$ ). En termes de vecteur propre (donc définis au facteur multiplicatif près), les deux modes sont indiscernables et les valeurs propres associées à chacun d'eux sont donc égales. Le

passage d'un noeud col qui est associé au changement de signe de la valeur propre du mode d'instabilité d'amplitude, s'accompagne alors d'un changement de signe de celle du mode d'instabilité de phase (de parité opposé), responsable de l'existence de branches de bifurcation secondaires, mixtes en terme de symétrie, liant au voisinage de chaque noeud col les solutions  $\Phi = 0$  et  $\Phi = \pi$ . Ces branches sont représentées sur la figure 5.3 et donne au diagramme une forme d'échelle (voir le papier de Burke & Knobloch [14] intitulé *Snakes and ladders : Localized states in the Swift-Hohenberg equation*).

L'étude du régime pleinement non-linéaire dans lequel prennent place ces aller-retours des branches  $\Phi = 0$  et  $\pi$  est menée numériquement dans des domaines périodiques. Bien que leur extension horizontale soit très supérieure à la longueur d'onde critique, le système reste sujet aux effets de taille finie. L'un des plus évidents est que le nombre d'aller-retours dans la région  $[r_{P_1}, r_{P_2}]$  ne peut être infini : à chaque aller-retour, une paire d'oscillations se rajoute à la solution localisée et ce phénomène est nécessairement limité par l'extension spatiale finie du domaine. Il en résulte que le nombre de solutions localisées dans cette région est fini, tout du moins en ce qui concerne ces branches. Lorsque l'on approche le remplissage complet du domaine  $[0, L]$ , les deux branches quittent la région  $[r_{P_1}, r_{P_2}]$ . Les résultats obtenus pour l'équation de Swift-Hohenberg dans des très grands domaines montrent que les branches quittent le domaine par la gauche (coupant la droite  $r = r_{P_1}$ ) pour terminer toutes les deux à proximité du noeud-col  $S_N$  le long de la branche des solutions  $u_p$ . Pour des dimensions finies mais suffisamment grandes devant  $\lambda_c$  pour que les aller-retours prennent place, cette image n'est plus tout à fait correcte. D'abord, les branches  $\Phi = 0$  et  $\Phi = \pi$  bifurquent non pas de la branche  $u_0$  mais de la branche  $u_p$  via une bifurcation secondaire. D'autre part, les résultats montrent que les deux branches peuvent éventuellement ne pas terminer en un même point de bifurcation secondaire, c'est-à-dire terminer chacune sur deux branches de solutions périodiques différentes i.e. associées à des nombres d'onde différents. Ces questions font l'objet d'un travail en cours [8].

## 5.2 Instabilités de Marangoni-Bénard en présence d'effet Soret

### 5.2.1 Equations et adimensionalisation

Dans un mélange fluide binaire non homogène en température et concentration, les flux de chaleur et de masse sont des combinaisons linéaires des gradients thermiques et solutaux (si ceux-ci ne sont pas trop importants). L'effet croisé responsable de la présence du gradient solutal dans le flux de chaleur  $\mathbf{J}_q$  est appelé effet Dufour, sa réciproque responsable de la présence du gradient de température dans l'expression du flux de masse  $\mathbf{J}_c$  est appelé effet Soret. Les relations exprimant les flux et variables loin de l'équilibre thermodynamique dans le cadre de l'hypothèse d'équilibre local [19] prennent la forme :

$$\mathbf{J}_q = -\lambda \nabla T - D_f \nabla C, \quad \mathbf{J}_c = -\rho D' C (1 - C) \nabla T - \rho D \nabla C, \quad (5.9)$$

où  $C$  est la fraction molaire d'un des deux composants du mélange,  $\lambda$  est la conductivité thermique et  $D$  le coefficient de diffusion de masse. Le coefficient  $D'$  est appelé coefficient Soret et l'on posera dans la suite  $D_s = D' C (1 - C)$ . L'influence du coefficient  $D_f$  qui

caractérise l'effet Dufour est particulièrement faible dans les liquides et de quelques pourcent dans les gazs rares [24, 19]. On ne le considèrera pas dans la suite. On suppose dans la suite que les variations de  $C$  sont suffisamment faibles pour que  $D_s$  soit considéré comme constant dans tout le fluide. Dans cette approximation, l'équation de conservation des espèces chimiques s'écrit :

$$\partial C = -(\mathbf{u} \cdot \nabla) C + D \nabla^2 C + D_s \nabla^2 T, \quad (5.10)$$

l'équation de conservation de l'énergie restant celle que nous avons déjà exprimée.

Dans la suite on considère un domaine rectangulaire d'extension horizontale  $0 \leq x \leq L$  et de profondeur  $0 \leq z \leq H$ . On note  $\Gamma = L/H$  le rapport d'aspect. Le fluide est un mélange binaire sujet à l'effet Soret. La surface rigide inférieure  $z = 0$  du domaine est maintenue à une température constante  $T_b$  et sur la surface libre supérieure est appliqué un flux de chaleur constant  $\mathbf{q} = q\mathbf{e}_z$  avec  $q < 0$ . On suppose de la même manière que précédemment que la surface libre supérieure reste plane en dépit de la convection qui peut y prendre place et l'on étudie le système en absence de gravité. On note dans la suite  $\Delta T = -qH/\lambda$  la différence de température entre la surface libre  $z = H$  et le fond du container  $z = 0$  induite par application du flux de chaleur dans l'état conductif (lorsque  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ ). Dans la gamme de paramètres que nous considèrerons, la tension de surface  $\sigma$  est, dans une bonne approximation, une fonction affine de la température et de la concentration le long de la surface libre de sorte que :

$$\sigma(T) = \sigma_0(1 + \gamma_T(T - T_m) + \gamma_C(C - C_m)), \quad (5.11)$$

où  $\gamma_T, \gamma_C$  sont des coefficients constants définis par

$$\gamma_T = \frac{1}{\sigma_0} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right)_{T_m}, \quad \gamma_C = \frac{1}{\sigma_0} \left( \frac{\partial \sigma}{\partial C} \right)_{C_m},$$

et où  $\sigma_0 = \sigma(T_m, C_m)$  où  $T_m = T_b + \Delta T/2$  est la température moyenne,  $C_m$  est une concentration de référence choisie comme la concentration initiale du mélange avant l'application du flux de chaleur sur la surface libre (lorsque  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  et  $T = T_b$ ).

Les longueurs, le temps, la température et la vitesse sont respectivement adimensionnalisés par les grandeurs  $H, H^2/\nu, (T - T_b)/\Delta T$  et  $Ma\nu/H$  où

$$Ma = \frac{-qH^2\sigma_0\gamma_T}{\lambda\rho\nu\kappa} = \frac{\Delta TH\sigma_0\gamma_T}{\rho\nu\kappa}, \quad (5.12)$$

et où  $\rho$  est la densité volumique du fluide,  $\nu$  la viscosité cinématique et  $\kappa$  la diffusivité thermique. La concentration est quant à elle adimensionnalisée par  $(C - C_b)/\Delta C$  où  $\Delta C = -D_s\Delta T/D$  représente la différence de concentration entre la surface libre et la surface inférieure induite via l'effet Soret par l'application du flux de chaleur une fois l'état conductif atteint et  $C_b$  est la concentration qui en résulte le long la paroi inférieure.

Les équations de conservation de la quantité de mouvement pour un écoulement incompressible, de l'énergie et des espèces chimiques s'écrivent sous la forme adimensionnalisée :

$$\partial_t \mathbf{u} = -Ma (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla p + \nabla^2 \mathbf{u}, \quad (5.13)$$

$$0 = \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (5.14)$$

$$\partial_t T = -Ma (\mathbf{u} \cdot \nabla) T + Pr^{-1} \nabla^2 T, \quad (5.15)$$

$$\partial_t C = -Ma (\mathbf{u} \cdot \nabla) C + Sc^{-1} (\nabla^2 C - \nabla^2 T), \quad (5.16)$$

où  $Sc = \nu/D$  est le nombre de Schmidt. On cherchera dans la suite à étudier des domaines qui se rapprochent des couches infinies et l'on considèrera donc des domaines  $\Gamma$ -périodiques dans la direction  $x$  avec  $\Gamma$  grand devant la longueur d'onde de l'instabilité donnée par l'analyse linéaire des couches fluides infinies. Sur la surface inférieure  $z = 0$ , les conditions aux limites de non-glissement, de température constante de flux de masse transverse nul (imperméabilité) s'écrivent :

$$u = w = T = \partial_z C - \partial_z T = 0. \quad (5.17)$$

Le long de la surface libre, compte tenu des hypothèses formulées, l'égalité des contraintes tangentielles, la nullité de la vitesse verticale, la condition de flux de chaleur imposé et de flux de masse transverse nul amènent :

$$\partial_z u - Pr^{-1}(\partial_x T + S_M \partial_x C) = w = \partial_z T - 1 = \partial_z C - 1 = 0, \quad (5.18)$$

où  $S_M$  est le coefficient de Soret-Marangoni défini par :

$$S_M = -\frac{D_s \gamma_C}{D \gamma_T}. \quad (5.19)$$

Il convient de remarquer que la concentration est définie à une constante près par les équations. Cependant, les conditions d'imperméabilité  $\mathbf{J}_c \cdot \mathbf{e}_z = 0$  ainsi que les conditions aux limites périodiques le long de  $0 < x < \Gamma$  fixent la quantité totale dans le volume du composant dont  $C$  mesure la concentration. La valeur  $C_b$  est donc fixée par la concentration initiale  $C_m$ . En variables dimensionnées, pour l'état conductif ( $\mathbf{u} = \mathbf{0}$ ,  $\partial_t T = \partial_t C = 0$ ) on obtient facilement :  $T = T_b - qz/\lambda$  (avec  $q < 0$ ). La condition d'imperméabilité le long de la surface libre amène :  $D\partial_z C = -D_s \partial_z T = qD_s/(\lambda D)$ . Compte tenu que  $C_m = H^{-1} \int C dz$ , on en déduit facilement que :

$$C(z) = C_b + \frac{qD_s}{\lambda D} z \quad \text{avec} \quad C_b = C_m - \frac{qD_s H}{2\lambda D}. \quad (5.20)$$

Cette relation confirme que  $\Delta C = C(z=1) - C(z=0) = qD_s H/(\lambda D) = -D_s \Delta T/D$  et indique que dans le plan milieu on a  $C(H/2) = C_m/2$ .

On note dans la suite  $T_0$  et  $C_0$  les profils de température et de concentration adimensionalisés associés à la solution conductive. Les relations ci-dessus adimensionalisées indiquent que :  $T_0 = C_0 = z$ . L'état conductif est une solution triviale des équations quelque soit la différence de température appliquée, c'est à dire quelque soit le nombre de Marangoni. En revanche, sa stabilité linéaire en dépend.

## 5.2.2 L'instabilité

A la différence du fluide pur, les forces de surfaces produites par les variations éventuelles de concentration le long de la surface libre s'ajoutent à celles d'origine thermique. Suivant les mélanges fluides et les valeurs de la température et de la concentration initiales retenues, le coefficient  $S_M$  peut être positif ou négatif. Il en est de même pour le nombre de Marangoni suivant que la surface supérieure est chauffée ou refroidie (suivant le signe de  $q$ ). On distingue alors quatre quadrants dans lesquels l'effet des forces de surface sur

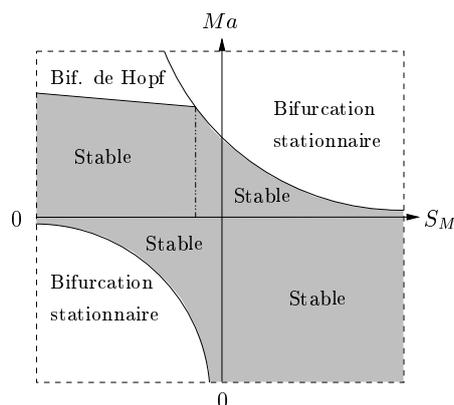


FIG. 5.6 – Vue schématique des quatre quadrants indiquant les régions d’instabilité de la solution conductive.

la stabilité de la solution conductive s’interprète facilement. A l’intersection de ces quadrants se trouve le cas thermique pur  $S_M = 0$  et  $Ma > 0$  que nous avons déjà étudié dans le cas des géométries cylindriques.

Pour que l’interprétation soit plus aisée, il convient de changer l’adimensionalisation du champ de vitesse. Au lieu d’utiliser  $Ma\nu/H$  on utilise  $\nu/H$ . Dans ces conditions, le nombre de Marangoni disparaît des équations en volume pour n’apparaître que dans la condition à la surface libre d’équilibre des contraintes tangentielles qui s’écrit :

$$\partial_z u - MaPr^{-1} (\partial_x T + S_M \partial_x C) = 0. \quad (5.21)$$

On reconnaît les deux contributions des forces de surface, l’une d’origine thermique proportionnelle à  $Ma/Pr$  et l’autre d’origine solutale proportionnelle à  $MaS_M/Pr$ . Dans le cas où  $Ma > 0$ , les forces de surface d’origine thermique ont un effet déstabilisant sur la solution conductive. Si l’on ramène virtuellement une particule de fluide à la température  $T = 0$  du fond du fluide vers la surface libre à la température  $T > 0$ , les forces de surfaces proportionnelles à  $Ma\partial_x T$  tendent à éloigner le fluide à la température  $T = 0$  le long de la surface libre de part et d’autre de l’endroit où il est remonté. Cet effet contribue par conservation de la masse à la remontée de fluide supplémentaire et en ce sens, il est déstabilisant. A l’opposé, lorsque  $Ma < 0$ , les gradients thermiques provoquent des forces qui ramènent du fluide à la température  $T > 0$  vers l’endroit où le fluide est remonté à la surface, s’opposant de fait à l’établissement d’un régime permanent. En ce sens, l’effet des forces de surface d’origine thermique est stabilisant dans ce cas. Un raisonnement identique peut bien entendu être conduit en ne considérant que l’effet des forces solutales, le caractère stabilisant ou déstabilisant dépendant du signe du produit  $MaS_M$ . On retrouve donc les quatre quadrants suivants (figure 5.6) :

(a)  $Ma > 0$ ,  $S_M > 0$ . Dans ce quadrant, les deux contributions solutales et thermiques à la force de surface sont déstabilisantes. Le seuil d’instabilité  $Ma_c = Ma_c(S_M)$  est alors une fonction décroissante de  $S_M$ , l’effet déstabilisant des forces de surfaces d’origine solutale augmentant avec  $S_M$  et s’ajoutant à celui des forces d’origine thermique. L’analyse de stabilité linéaire d’une couche infinie montre que  $Ma_c$  décroît de  $Ma_c \approx 80$

lorsque  $S_M = 0$  vers zéro et que le nombre d'onde critique devient strictement nul lorsque  $S_M$  excède une valeur particulière qui dépend des paramètres  $Pr$  et  $Sc$ . Ce phénomène n'est pas surprenant si l'on se rappelle que le nombre d'onde critique de l'instabilité de Marangoni-Bénard en fluide pur est également zéro lorsque les conditions aux limites thermiques sont du type Neumann ( $\partial_z \theta = 0$  en  $z = 0, 1$  où  $T = T_0 + \theta$ ). Qualitativement, pour des valeurs de  $S_M$  suffisamment grandes et des nombres de Lewis élevés, les effets thermiques et solutaux des forces de surface se découplent. Dans le régime faiblement non-linéaire, la convection d'origine solutale domine la convection d'origine thermique ( $\partial_z u \approx Ma S_M Pr^{-1} \partial_x C$ ) et il faut attendre que  $Ma$  excède la valeur critique  $Ma_c \approx 80$  pour que les forces d'origine thermique aient un effet dominant sur la convection. Le seuil d'instabilité linéaire peut être évalué en ne considérant que les forces de surface d'origine solutale, une approche conduite par Bergeon *et al.* [4]. Le problème est alors identique à celui considéré par Pearson [31] dans le cas de conditions aux limites thermiques de type Neuman à la différence que c'est la concentration qui joue le rôle de la température. Le régime non-linéaire met clairement en évidence le découplage des forces au delà du seuil avec un régime d'écoulement faible dominé solutalement, suivi lorsque le seuil thermique pur est dépassé d'un régime majoritairement convectif directement induit par les forces de surface d'origine thermique.

(b)  $Ma < 0, S_M > 0$ . Dans ce cas les deux contributions à la forces de surface sont stabilisantes et l'état conductif est linéairement stable.

(c)  $Ma < 0, S_M < 0$ . Il s'agit du cas où les forces d'origine solutale sont déstabilisantes et celles d'origine thermique stabilisantes. C'est sans doute la région la moins étudiée dans la littérature. La théorie linéaire indique toutefois que le nombre d'onde de l'instabilité  $y$  est nul et que  $|Ma_c|$  tend vers zéro uniformément lorsque  $S_M \rightarrow -\infty$ .

On notera que dans le cas des deux quadrants précédents où la solution conductive perd sa stabilité, les bifurcations sont stationnaires. Bergeon *et al.* [4] démontrent notamment que la stabilité linéaire de cette solution est en fait en fait contrôlée par deux paramètres  $(\bar{M}a, \psi_M)$  respectivement égaux à  $Ma(1 + S_M)$  et  $Le S_M / (1 + S_M)$  où  $Le = Sc / Pr$ . La courbe neutre donnant  $\bar{M}a_c$  en fonction de  $\psi_M$  permet donc de déterminer les seuils pour tous les couples  $(Pr, Sc)$ .

Dans ces trois quadrants, la théorie linéaire des couches infinies prévoit une bifurcation stationnaire et les simulations indiquent également son caractère supercritique. Ce n'est plus le cas dans le dernier quadrant  $Ma > 0, S_M < 0$  où se place notre étude. Les forces d'origines solutales y sont stabilisantes et celles d'origine thermique déstabilisantes. Cette compétition conduit à une bifurcation instationnaire lorsque  $S_M$  est suffisamment négatif i.e.  $S_M < S_{M_2} < 0$  (figure 5.6).

L'étude des variations du nombre de Marangoni critique avec  $S_M$  fait l'objet des travaux de Bergeon *et al.* [2, 3, 4, 5], Bhattacharjee [11], Van Vaerenbergh *et al.* [37], Chen & Chen [17] et Skarda *et al.* [34]. Suivant les valeurs du couple  $(Pr, Sc)$ , le nombre de Marangoni critique associé à la bifurcation de Hopf croît continuellement avec  $|S_M|$  depuis le point de codimension 2 associé à la valeur  $S_{M_2}$ . Pour des nombres de Lewis plus élevés, cette croissance peut éventuellement être précédée d'une gamme de valeurs de  $S_M$  dans laquelle le seuil décroît pour éventuellement être inférieur au seuil d'instabilité du fluide pur, avant de recroître à nouveau lorsque  $|S_M| \rightarrow \infty$ . La figure 5.7 illustre ce comportement.

L'analyse linéaire de la convection thermo-solutale est conduite par Tuckerman [36]

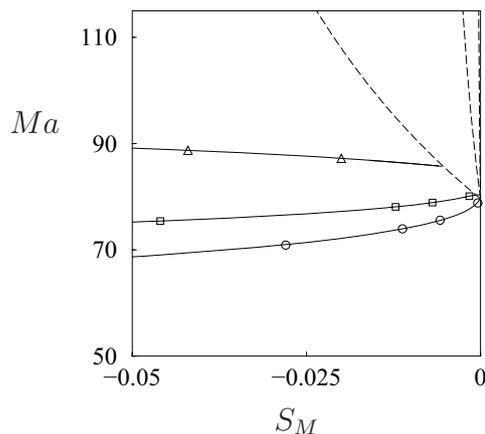


FIG. 5.7 – Courbe de stabilité marginale  $Ma_c(S_M)$ . Les courbes en pointillés sont les bifurcations stationnaires, les courbes en trait plein les bifurcations de Hopf. Les différentes courbes correspondent aux paramètres  $(Pr, Sc) = (10, 100)$  : triangles,  $(1, 100)$  : carrés et  $(0.1, 100)$  : ronds. D’après [5].

à l’aide d’un modèle  $2 \times 2$  et les résultats obtenues sont qualitativement semblables à ceux obtenus par Bergeon *et al.* [4] dans le contexte de l’instabilité de Marangoni-Bénard en présence de l’effet Soret. Dans l’hypothèse<sup>2</sup>  $Le > 1$ , elle montre que lorsque  $S_M > 0$  (noté  $S$  dans l’article), les deux valeurs propres (temporelles) sont réelles et associées à deux modes de nature différente correspondant respectivement à des modes thermiques et solutaux. Dans le régime  $S_M > 0$ , ces valeurs propres ne se croisent pas lorsque  $Ma$  (noté  $r$  dans l’article) varie et ce phénomène provoque l’apparition d’un régime non-linéaire solutalement dominé et faiblement convectif, qui précède un régime fortement convectif et thermiquement dominé aux valeurs de  $Ma$  plus importantes. Lorsque  $S_M < 0$ , ces valeurs propres se croisent pour former un couple de valeurs propres complexes conjuguées associé à des modes mixtes. Dans la région  $S_{M_2} < S_M < 0$  ( $S_{M_2}$  est noté  $S_*$  dans l’article), ces valeurs propres complexes n’existent que dans une gamme de nombre de Marangoni où leur partie réelle est négative. Lorsque  $Ma$  augmente, elles se scindent en deux parties réelles négatives, l’une croissante avec  $Ma$  l’autre décroissante. A mesure que  $Ma$  croît, la partie croissante devient positive, une transition associée donc à une bifurcation stationnaire (figure 5.8(a)). Lorsque  $S_M = S_{M_2}$ , la collision des valeurs propres complexes a lieu exactement lorsque les deux valeurs propres sont simultanément nulles donnant naissance à un point de bifurcation de codimension 2 appelé bifurcation de Bogdanov (figure 5.8(b)). Lorsque  $S_M < S_{M_2}$  les valeurs propres complexes ne se scindent que lorsque leur partie réelle est déjà positive. Dans le plan complexe, elles traversent donc préalablement l’axe imaginaire transversalement et cette transition est associée à un point de bifurcation de Hopf pour  $Ma = Ma_h$  (figure 5.8(c)). Une fois que la collision a eu lieu, à mesure que  $Ma$  croît, la valeur propre réelle associée au mode thermique croît tandis que celle associée au mode solutal décroît pour devenir négative en un point de bifurcation stationnaire pour  $Ma = Ma_s > Ma_h$ . L’écart relatif  $Ma_s - Ma_h$  tend vers l’infini lorsque  $S_M \rightarrow -\infty$  repoussant donc le point de bifurcation stationnaire vers l’infini.

Cette gamme de paramètres dans laquelle l’écart  $Ma_s - Ma_h$  n’est pas trop grand

<sup>2</sup>Dans l’article, le nombre de Lewis noté  $L$  est l’inverse du nombre de Lewis utilisé ici :  $Le = L^{-1}$

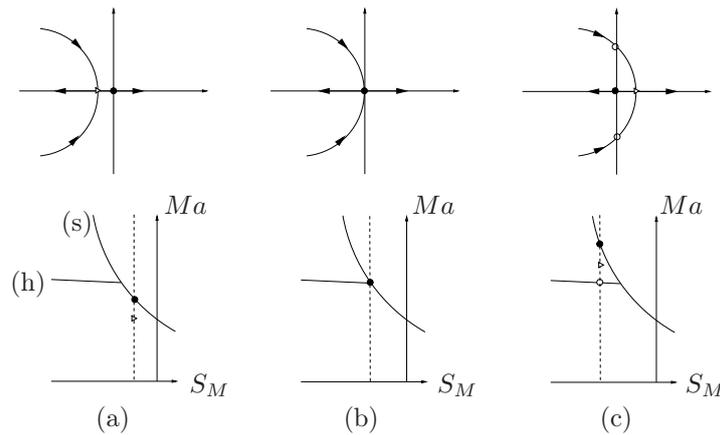


FIG. 5.8 – En haut : Vue schématique de l'évolution des valeurs propres dans le plan complexe en fonction du nombre de Marangoni. En bas : Le graphe de stabilité marginale représentant  $Ma_c$  en fonction de  $S_M$ . La courbe associée aux points de bifurcation de Hopf est indiquée par un (h) et celle associée aux bifurcations stationnaires par un (s). La valeur de  $S_M$  correspondant à la figure du haut est indiquée par une ligne pointillée. Les collisions de valeurs propres sont indiquées par un triangle, les points de bifurcation de Hopf par un cercle ouvert et les points de bifurcation stationnaire par un cercle plein.

est particulièrement intéressante dans notre situation. La bifurcation stationnaire est une fourche sous-critique et c'est précisément l'un des ingrédients d'apparition d'états spatialement localisés. Parce que c'est une bifurcation primaire, il est relativement aisé par continuation d'accrocher cette branche et par suite, de suivre les branches de bifurcation secondaires qui en émergent et dont font parties les branches d'états localisés. Dans notre cas, nous cherchons plus spécifiquement à étudier l'interaction entre les états spatialement localisés susceptibles d'apparaître et les solutions instationnaires nées de la bifurcation de Hopf qui précède la bifurcation stationnaire sous-critique. La difficulté est de trouver une gamme de paramètres qui permet d'observer cette interaction. Plus précisément, on cherchera plutôt une gamme de paramètres dans laquelle la bifurcation de Hopf est supercritique et donne lieu à des régimes périodiques stables sur une gamme suffisante pour permettre une interaction avec la région dans laquelle existent les états localisés. Ce qui rend cette quête ardue, est que dans beaucoup de situations, ces branches de solutions périodiques disparaissent par suite d'une bifurcation globale associée à la formation d'une connection hétérocline entre les solutions linéairement instables des branches sous-critiques issues de la bifurcation stationnaire en  $Ma_s$  [4]. Cette recherche nous a conduit à choisir les paramètres  $S_M = -0.002$ ,  $Pr = 1$  et  $Sc = 50$ .

### 5.3 Résultats

Les résultats sont consignés dans un article que nous reportons dans ce paragraphe. Nous résumons toutefois l'ensemble de l'article pour en illustrer les principaux résultats et la démarche.

### 5.3.1 Etats stationnaires, homoclinic snaking

Les rapports d'aspect  $\Gamma = L/H$  que nous avons étudiés sont un nombre entier de fois la longueur d'onde  $\lambda_0$  de l'instabilité de Marangoni-Bénard en fluide pur,  $\Gamma = n\lambda_0$ ,  $n \in \mathbb{N}$  avec  $n = 6$  et  $n = 10$ . Ce choix n'est d'ailleurs pas le meilleur ; il eut été plus judicieux d'utiliser la longueur d'onde critique associée à la valeur de  $S_M$  utilisée pour une bifurcation stationnaire. Cependant, et parce que la longueur d'onde critique associée aux petites valeurs négatives de  $S_M$  est proche de la longueur d'onde du cas thermique pur,  $n$  donne une bonne approximation du nombre de paires de rouleaux contrarotatifs des structures convectives associées aux premières bifurcations. Toutefois, le seuil d'instabilité linéaire de la solution conductive ne sera pas égal à celui que l'on obtiendrait pour une couche infinie avec  $S_M \neq 0$  et qui coïnciderait avec celui d'une cavité périodique dont la dimension serait un nombre entier de fois la longueur d'onde critique  $\lambda_c$  associée à la valeur de  $S_M$  utilisée.

En terme de symétrie, le problème bidimensionnel de Marangoni-Bénard avec effet Soret que nous étudions est identique à l'équation de Swift-Hohenberg. Les symétries du problème (continu) sont les symétries du groupe  $O(2)$  généré par les translations continues dans la direction  $x$  et la réflexion  $R_{x_0}$  par rapport à l'axe  $x = x_0$  où  $x_0$  est arbitraire dans le domaine. Par la suite, on choisit  $x_0 = \Gamma/2$  de sorte que

$$R : (x, z) \rightarrow (\Gamma - x, z), \quad (u, w, T, C) \rightarrow (-u, w, T, C). \quad (5.22)$$

Dans ces circonstances, la théorie [18] garantit l'existence de solutions  $R$ -symétriques satisfaisant :

$$(u, w, T, C)(x, z) = (-u, w, T, C)(\Gamma - x, z). \quad (5.23)$$

Il y a deux types simples de solutions  $R$ -symétriques : les solutions périodiques de longueur d'onde  $\lambda_0 \ll \Gamma$  et les solutions périodiques de longueur d'onde  $\Gamma$ . Par simplicité on appelle les premières les solutions périodiques et les autres les solutions localisées. Il résulte des symétries que les bifurcations de l'état conductif vers des solutions périodiques sont des fourches de révolution. Par la suite, afin d'éviter les problèmes numériques liées à la valeur propre (temporelle) nulle associée à l'invariance par translation, on imposera numériquement l'invariance par la symétrie  $R$ .

Pour comprendre l'origine des solutions spatialement localisées, on considère d'abord le cas de la couche infinie. On cherche des conditions dans lesquelles il existe des solutions stationnaires qui croissent en espace de zéro (la solution conductive) en  $-\infty$  vers une structure convective puis redécroissent vers zéro lorsque  $x$  tend vers  $+\infty$ . Leur existence dépend en partie de la stabilité linéaire en espace de la solution conductive. Le système d'équation est donc linéarisé autour de la solution conductive et écrit pour un point de bifurcation stationnaire. Les perturbations sont cherchées sous la forme :

$$(u, w, \Theta, \Sigma)(x, z) = e^{qx}(\tilde{u}, \tilde{w}, \tilde{\Theta}, \tilde{\Sigma})(z), \quad (5.24)$$

où  $T = T_0 + \Theta$ ,  $C = C_0 + \Sigma$  et  $q = q_r + iq_i$ . Les champs en  $z$  sont développés sur une base de polynôme de Chebyshev jusqu'à l'ordre 40 pour former un système non-linéaire dont les inconnues sont  $Ma$ ,  $q_i$  et les coefficients des parties réelles et imaginaires des champs  $(\tilde{u}, \tilde{w}, \tilde{\Theta}, \tilde{\Sigma})$ . On fixe  $q_r$  et l'on résoud le système par une méthode de Newton.

Le minimum de la courbe  $Ma(q_r = 0, q_i)$  donne le seuil d'instabilité linéaire temporelle de la couche fluide infinie pour une bifurcation stationnaire. On obtient  $Ma_s = 114.86$  et  $q_i = 2.8749$  pour  $S_M = -0.005$ ,  $Pr = 1$  et  $Sc = 50$ .

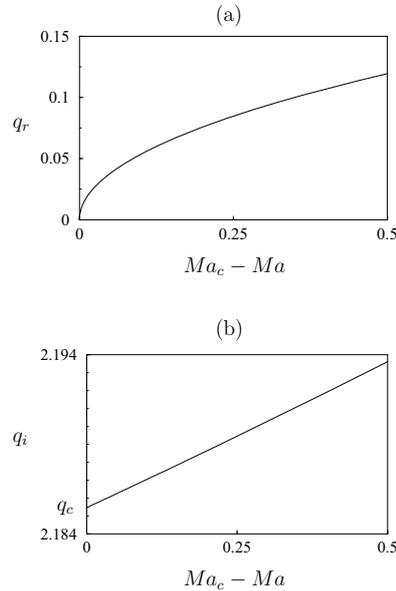


FIG. 5.9 – Evolution de la partie réelle  $q_r$  (a) et de la partie imaginaire  $q_i$  (b) en fonction de l'écart au seuil  $-r = Ma_c - Ma$ .

Les variations de  $q_r$  et  $q_i$  avec l'écart au seuil linéaire d'instabilité temporelle sont reportées sur la figure 5.9 (figure 18 de l'article). Les résultats montrent qu'au seuil  $r = 0$ , les valeurs propres  $q = \pm iq_i$  ont une multiplicité de 2. Pour  $Ma < Ma_s$ , les valeurs propres forment un quartet de la forme  $iq_i + \alpha\sqrt{-r}$  où  $r = Ma - Ma_s$ . Pour  $Ma > Ma_s$ , ces valeurs propres sont imaginaires pures et de multiplicité 1. Au seuil  $r = 0$ , l'état conductif subit une bifurcation de Hopf, la multiplicité de 2 des valeurs propres étant la signature d'une résonance 1 : 1 dans un système (spatialement) réversible [25]. En dessous du seuil, l'état conductif est hyperbolique (en espace) et donc si des états spatialement localisés existent, ils existent pour des valeurs  $Ma < Ma_s$ . Comme nous l'avons indiqué, l'analyse de la forme normale de ce type de bifurcation [25] montre que trois branches de solutions stationnaires bifurquent simultanément et de manière sous-critique en  $Ma_s$  : une est associée à des solutions périodiques, les deux autres correspondent à des branches de solutions spatialement localisées.

L'effet des dimensions finies du domaine et ce que deviennent ces branches dans le régime non-linéaire est illustré au travers du diagramme de bifurcation de la figure 5.10. Le diagramme reporte une mesure de la norme de la vitesse en fonction du nombre de Marangoni. Nous nous sommes limités aux deux premières branches de bifurcations primaires ainsi qu'aux branches de bifurcation secondaires qui en émergent. Cette limitation prendra son sens dans la suite de l'exposé.

La première bifurcation stationnaire, notée  $P_1$  correspond à une branche de solutions formées de  $n = 11$  longueurs d'ondes chacune formée d'une paire de rouleaux contrarotatifs. Cette branche bifurque de manière sous-critique en  $Ma_s = 114.871$  et passe par un

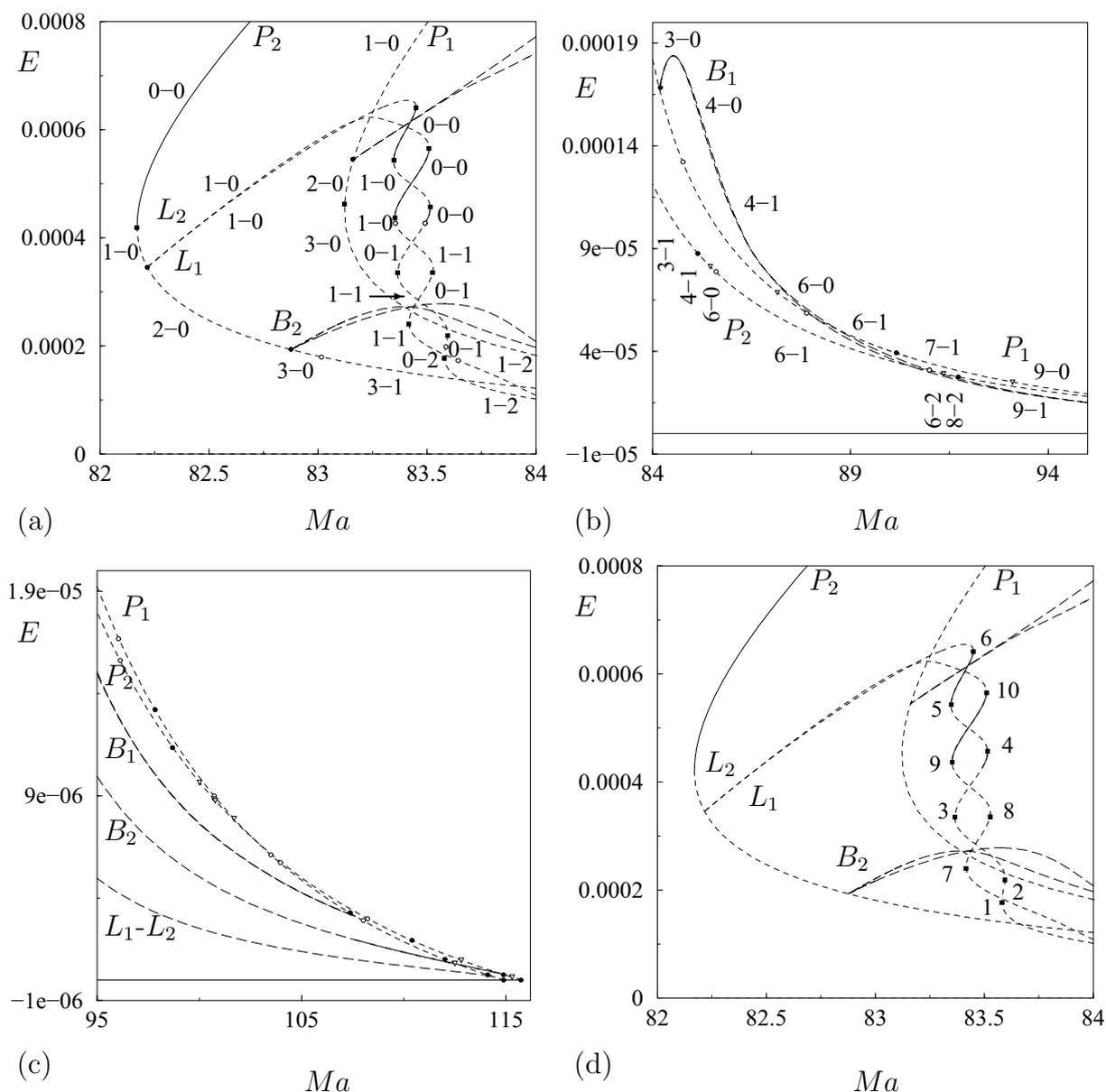


FIG. 5.10 – (a) Diagramme de bifurcation représentant une mesure de la norme  $E = \int \int (u^2 + w^2) dx dz$  de la vitesse en fonction du nombre de Marangoni. A côté des courbes est indiquée la stabilité linéaire sous la forme d'un couple de valeurs  $p - q$  où  $p$  est le nombre de valeurs propres réelles et positives et  $q$  le nombre de couples de valeurs complexes conjuguées à partie réelle positive ( $0 - 0$  signifie donc que la solution est linéairement stable). Ne sont représentées ici que les solutions stationnaires. La branche  $E = 0$  représente la solution conductive. Les noeud-cols sont indiqués par un carré noir, les points de bifurcation de Hopf par un rond blanc et les points de bifurcation stationnaire par un rond noir. Les courbes en traits pleins correspondent aux solutions linéairement stables, celles en pointillés aux instables. (b-c) Zoom sur les différentes parties du diagramme de bifurcation. (d) introduit la numérotation des noeud-cols utilisée dans le texte.

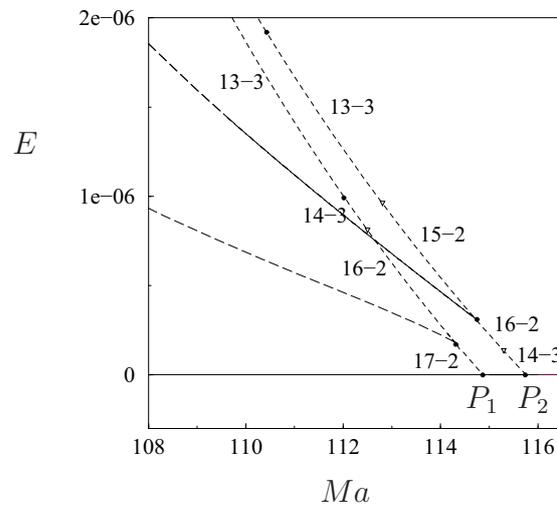


FIG. 5.11 – Grossissement de la figure 5.10c au voisinage des points de bifurcation primaires. Remarque la courbe en traits pleins correspond à la superposition de deux courbes en pointillés.

noeud-col en  $Ma \approx 83.17$ . Cette branche est initialement 21 fois instable mais, par une succession assez complexe de collisions de valeurs propres et de bifurcations secondaires stationnaires, elle n'est plus que 3 fois instable avant le noeud col au passage duquel elle devient 2 fois puis 1 fois instable<sup>3</sup>. L'évolution de la branche issue de  $P_2$ , la seconde bifurcation primaire est similaire. Elle émerge en  $Ma = 115.754$  par une bifurcation fourche et forme des structures périodiques à  $n = 10$  paires de rouleaux. Au passage du noeud-col en  $Ma \approx 82.2$  elle devient stable. La figure montre également que très près du point de bifurcation primaire le long de la branche  $P_1$  émergent deux branches de solutions notées  $L_1$  et  $L_2$ . Les structures associées sont une rangée de  $n = 11$  paires de rouleaux modulées spatialement par un mode  $n = 1$  i.e. la modulation spatiale est de période  $\Gamma$ . Les solutions le long de chacune des branches  $L_1$  et  $L_2$  sont  $R$  symétriques et différent par le sens de l'écoulement le long de  $x = \Gamma/2$  : dans l'une le fluide monte vers la surface libre dans l'autre il descend vers le fond. A cause de la modulation spatiale, les deux types de solutions ne sont pas liés par une propriété de symétrie (voir figure 5.12). Ceci se traduit sur le diagramme par le fait que les branches, initialement proches lorsque la modulation spatiale est faible, se séparent à mesure que  $Ma$  décroît. On notera cependant que la bifurcation qui produit ces branches est quand même une fourche [33].

Près de  $Ma \approx 83.4$  les branches  $L_1$  et  $L_2$  subissent une série de passage par des noeuds cols sensiblement alignés verticalement. Il s'agit du phénomène que nous avons déjà commenté, appelé *homoclinic snaking*. A ce stade, les solutions se présentent respectivement sous la forme majoritairement de deux et trois paires de rouleaux associées respectivement aux branches  $L_1$  et  $L_2$  et correspondant respectivement à des solutions dans lesquelles le fluide monte au centre et des solutions dans lesquelles il descend au centre (figure 5.13,

<sup>3</sup>Par facilité de langage, on dit qu'une branche est  $p$  fois instables lorsque  $p$  est le nombre de valeurs propres réelles ou complexes dont la partie réelle est positive.

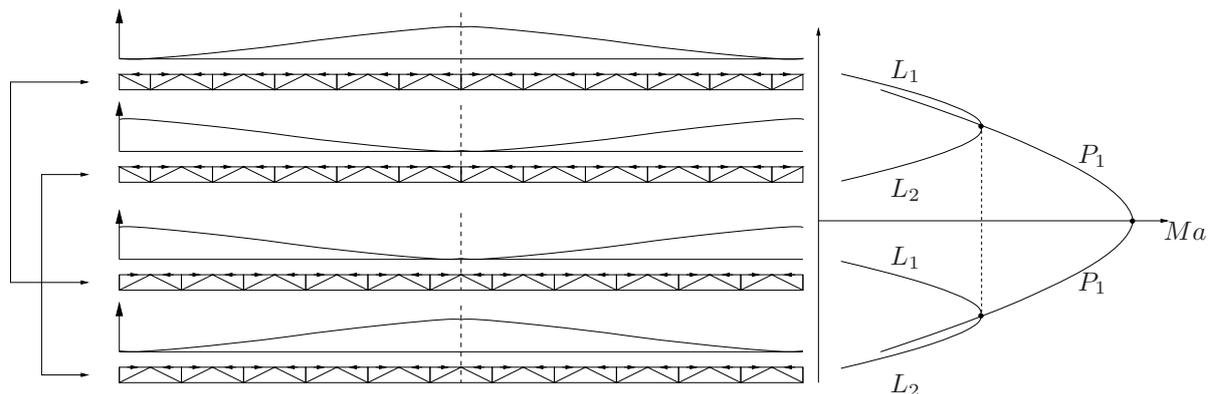


FIG. 5.12 – Vue schématique du diagramme de bifurcation (à droite) déplié (l’ordonnée n’est pas une quantité intégrée comme l’énergie mais ici le maximum de la vitesse verticale dans la section  $x = \Gamma/2$ ) et montrant la branche périodique  $P_1$  ainsi que les deux types de branches  $L_1$  et  $L_2$  associées aux solutions localisées. Ces dernières sont représentées schématiquement sur la gauche. Un rouleau de convection est représenté par un triangle. La modulation spatiale  $n = 1$  est représentée au dessus de la structure de l’écoulement. Les solutions dynamiquement équivalentes liées l’une à l’autre par une translation de  $\Gamma/2$  sont indiquées sur la gauche par une double flèche les reliant.

solutions 1 et 7). Lorsque la branche parcourt la série d’aller-retours, elle s’enrichit après chaque passage d’un noeud col, d’un rouleau supplémentaire de chaque coté (comparer par exemple les solutions 8,9 et 10 de la figure 5.13) de sorte que l’invariance par la symétrie  $R$  est préservée.

Au final, la structure spatialement localisée remplit le domaine et les branches  $L_1$  et  $L_2$  joignent la branche  $P_2$  en un point de bifurcation fourche. Les branches  $L_1$  et  $L_2$  forment donc une connection entre les branches périodiques  $P_1$  et  $P_2$ . Suivant les rapports d’aspect, la théorie indique qu’éventuellement les branches peuvent terminer chacune en un point de bifurcation différent sur deux branches différentes. Les résultats ne mettent pas en évidence ici les variations de la longueur d’onde le long des branches  $L_1$  et  $L_2$  prédits par la théorie ; la compression des longueurs d’onde dans la partie gauche de la région du snaking et la dilatation dans la partie droite. Cela est dû au fait que la variation de la longueur d’onde entre les branches  $P_1$  et  $P_2$  est faible puisqu’elles ne diffèrent que d’une longueur d’onde (voir les travaux de Knobloch & Bergeon [6] sur les instabilités de double-diffusion dans lesquelles cette variation est clairement visible).

La stabilité des branches est également représentée sur la figure (5.14a). Trois segments le long de la région de snaking sont stables. La perte de stabilité est induite par la présence le long des branches de valeurs propres complexes. On remarquera également une bifurcation de Hopf le long de la branche  $L_1$  conduisant à une restabilisation de la branche. Nos simulations numériques indiquent que cette bifurcation est sous-critique. La stabilité linéaire est ici calculée en imposant la symétrie  $R$ . Elle ne renseigne pas sur la stabilité relativement à des perturbations non-symétriques. La figure 5.14b montre comment change la stabilité lorsque la symétrie n’est plus imposée dans le calcul des valeurs propres. On remarque alors que si le segment entre les noeud-cols 5 et 6 le long de  $L_1$  reste stable, le long de  $L_2$  la partie stable s’est réduite à un tout petit segment entre les noeud cols 9 et

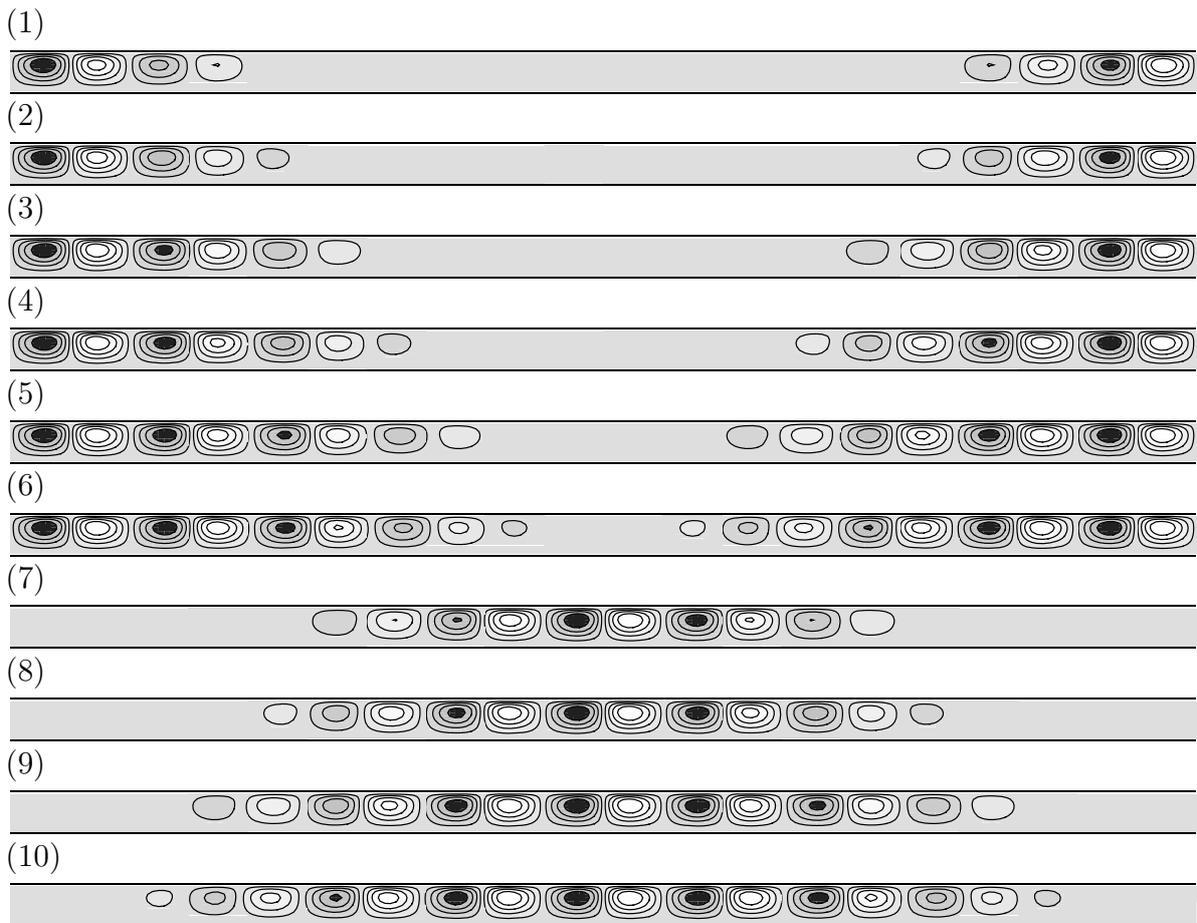


FIG. 5.13 – Solutions aux différents noeud-cols de la figure 5.10(d). Sont représentées les isovalues de la fonction de courant. Les régions claires correspondent à une rotation du fluide dans le sens des aiguilles d’une montre.

10. En absence de symétrie imposée, deux valeurs propres changent de signe au passage des noeuds-cols, l’une associée à une instabilité d’amplitude déjà obtenue (fig 5.14a) et l’autre associée à un mode de phase que le fait d’imposer les symétries enlève du premier diagramme. Les solutions le long des branches emergeant des bifurcations secondaires au voisinage des noeuds-cols (associées à l’instabilité de phase) sont certainement des solutions localisées instationnaires que nous n’avons pas pu visualiser dans cet exemple car l’examen de la stabilité linéaire indique qu’ils sont instables. La structure des vecteurs propres et des écoulements le long des branches de bifurcations  $B$  sont commentés dans l’article joint au paragraphe suivant et nous n’irons pas plus loin ici.

### 5.3.2 Solutions instationnaires

L’un des objectifs de ce travail est d’étudier l’interaction entre les solutions instationnaires issues de la première bifurcation de Hopf de la solution conductive et les états spatialement localisés que nous venons de décrire. Nous utilisons cette fois le code d’inté-

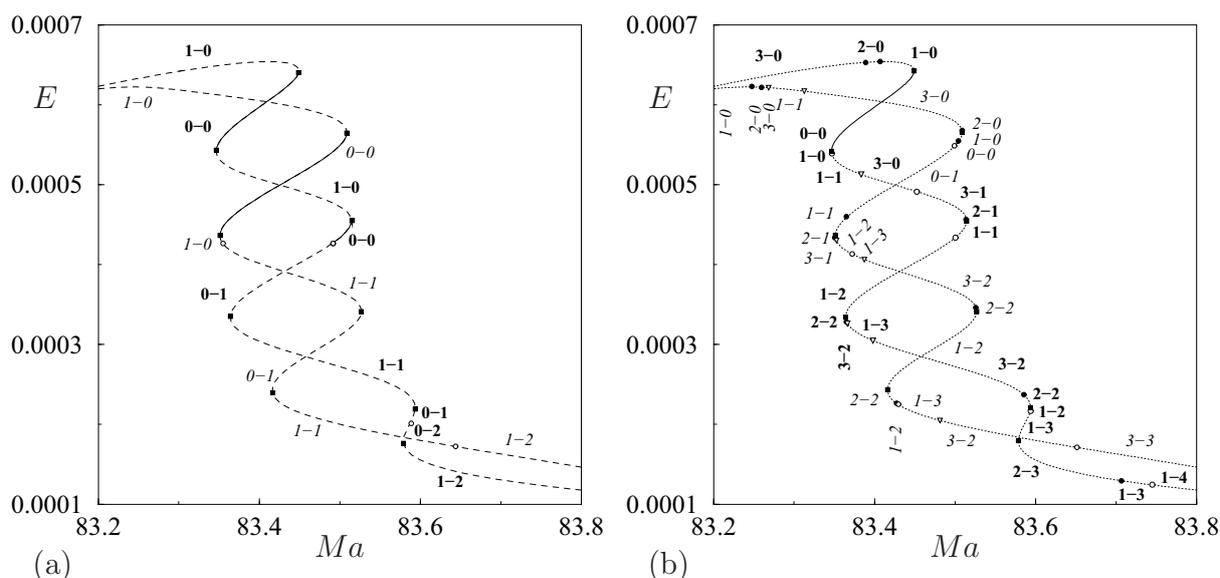


FIG. 5.14 – Grossissement de la région du snaking avec en (b) la stabilité linéaire sans imposer la symétrie  $R$  et en (a) en l'imposant. En numérotant les noeud-cols conformément à la figure 5.10a, les noeud-cols 7-3-9-5 correspondent aux valeurs :  $Ma = 83.416, 83.364, 83.351, 83.346$  et les noeud-cols 8-4-10-6 correspondent aux valeurs  $Ma = 83.527, 83.514, 83.509, \text{ et } 83.449$ . La stabilité linéaire est indiquée en gras pour la branche  $L_1$  et en italique pour la branche  $L_2$ .

gration temporelle à l'ordre 2 et sans imposer la symétrie  $R$ .

La solution conductive perd sa stabilité par une bifurcation de Hopf en  $Ma_h \approx 80.92$ , c'est à dire avant la région dans laquelle existent d'autres solutions stationnaires i.e. avant le noeud col associé à la branche  $P_2$ . Cette valeur est très voisine de celle que l'on obtient dans l'étude de stabilité linéaire d'une couche infinie,  $Ma_h = 80.90$  associée à une longueur d'onde  $\lambda_h = 3.152$ . La bifurcation de Hopf est supercritique et deux branches de solutions, des ondes stationnaires (SW) et des ondes progressives en bifurquent simultanément (figure 5.15). Les ondes progressives sont instables et les ondes stationnaires sont en revanche initialement stables. La branche SW perd ensuite sa stabilité au profit d'ondes progressives par une transition hystérétique. Nous avons pu suivre par continuation la branche des ondes progressives. Cette branche perd sa stabilité en  $Ma \approx 82.2$  et passe ensuite un noeud col en  $Ma = 82.367$ . La simulation numérique directe montre que la perte de stabilité en  $Ma \approx 82.2$  provoque la formation d'ondes progressives spatialement modulées. Toutes ces structures correspondent à un agencement de  $n = 10$  paires de rouleaux contrarotatifs. En augmentant encore  $Ma$ , on observe un régime compliqué formé d'une succession désordonnée d'ondes progressives, d'ondes stationnaires ponctuée par la création temporaire d'états spatialement localisés (figure 5.16). Ultimement, au bout d'un temps long, ce régime s'achève sur une solution stationnaire formée de 10 paires de rouleaux et correspondant à une solution sur la branche  $P_2$ . A mesure que l'on augmente  $Ma$ , les structures spatialement localisées restent formées pendant des temps de plus en plus long. Le transitoire met toutefois clairement en évidence que les structures localisées se forment par le biais d'ondes progressives se propageant vers la droite à gauche de la structure et vers la gauche à droite de la structure. Une fois formées, ces structures

existent dans un environnement d'ondes stationnaires qui sont instables, une instabilité héritée des valeurs de Marangoni plus faibles. Cette instabilité conduit à leur destruction et à une transition vers des ondes progressives modulées dont les directions de propagations dépendent en partie de la manière dont la structure localisée a été détruite. Le comportement général est chaotique. On remarquera que les régions où apparaissent des solutions localisées sont quelconques : le système ne semble pas, à ces valeurs de Lewis, garder trace de la formation antérieure d'une solution localisée.

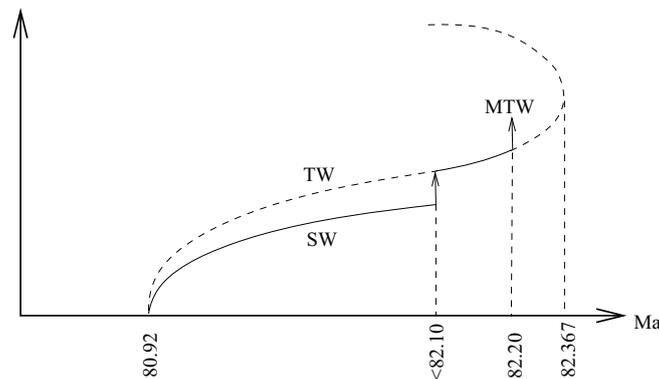


FIG. 5.15 – Vue schématique des branches de solutions instationnaires observées. Les branches en pointillés sont instables. La stabilité de la branches TW entre le seuil d'instabilité linéaire de la solution conductive et la vaaleur approximative de 82.10 n'a pas été calculée. Elle est mise en pointillés. Les notations TW, SW et MTW font référence respectivement aux ondes progressives, ondes stationnaires et ondes progressives modulées.

Si l'on continue d'augmenter le nombre de Marangoni, ces structures spatialement localisées s'installent définitivement dans le domaine comme en témoigne la figure 5.17 obtenue pour  $Ma = 83.20$ . La figure présente deux structures différentes obtenues à partir de conditions initiales différentes. Elles sont formées d'un état localisé qui oscille légèrement et est entouré d'une onde stationnaire de plus faible amplitude. Il est vraisemblable que ces états existent dans une gamme de nombres de Marangoni située au delà d'une valeur à laquelle les ondes stationnaires se sont restabilisées (elles étaient devenues instables vers des ondes progressives). La structure de gauche (figure 5.17a) est formée par un convecton à trois paires de rouleaux de convection, celle de droite (figure 5.17b) à quatre paires de rouleaux.

Il est intéressant de remarquer que ces structures spécifiques commencent à exister avant que le nombre de Marangoni n'entre dans la gamme de paramètres associée au snaking des solutions stationnaires. A mesure que le nombre de Marangoni augmente, ces structures évoluent de manière continue. L'oscillation des convectons s'amenuise et l'on observe une transition dans le nombre de rouleaux des structures spatialement localisées. En règle générale, ce nombre augmente et l'on a pu observer pour  $Ma = 83.35$  des états localisés à 4 et 5 paires de rouleaux environnées par une onde stationnaire (voir article du paragraphe suivant). Les dernières structures de ce type ont été observées pour  $Ma = 83.45$ . Ces structures coexistent avec les états spatialement localisés stationnaires déjà obtenus. Ainsi la structure à 4 paires de rouleaux est devenue une structure stationnaire à 6 paires de rouleaux lorsque l'on a augmenté le nombre de Marangoni progressivement de

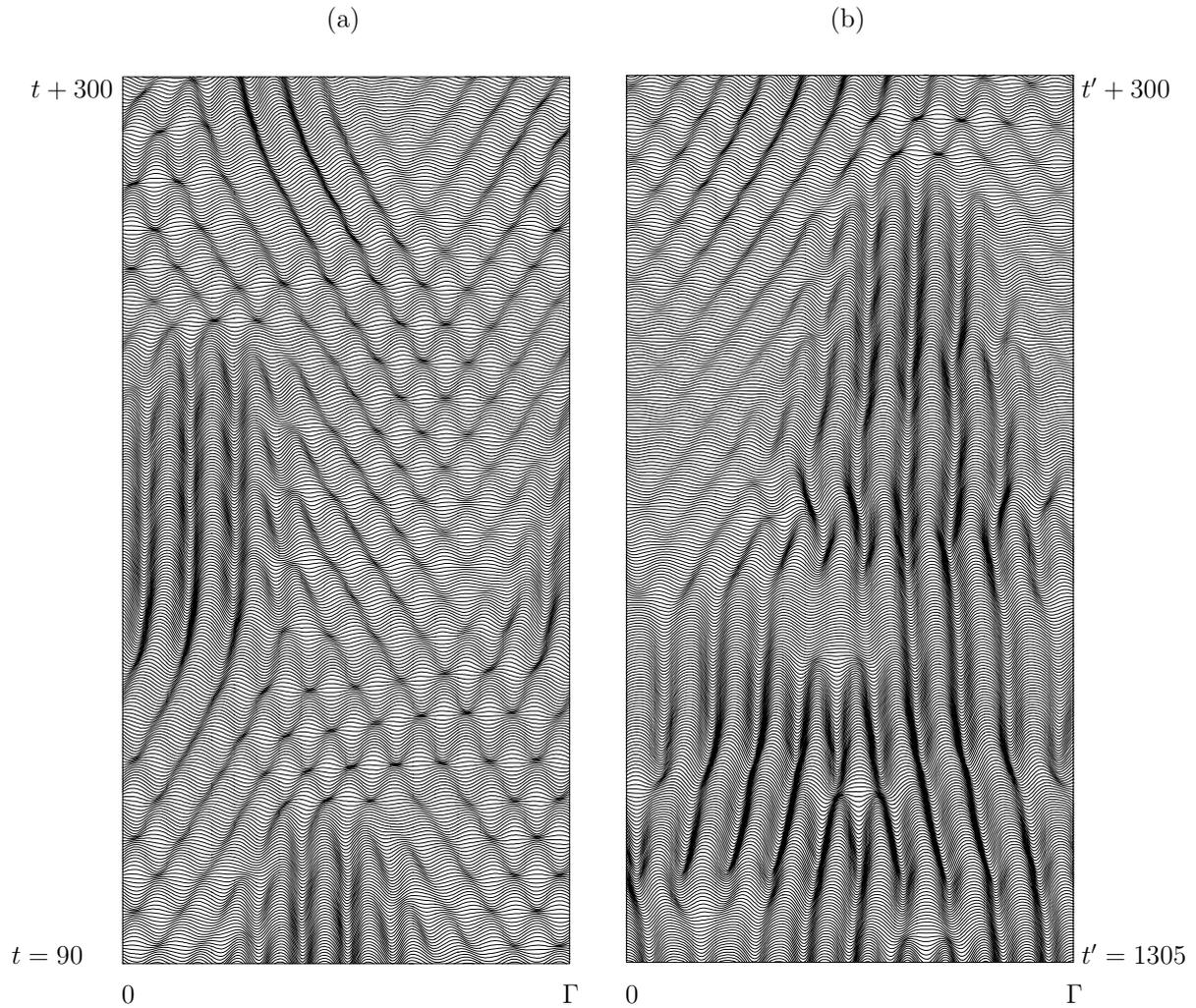


FIG. 5.16 – Deux représentations spatio-temporelles du régime instationnaire (transitoire) pour  $Ma = 83.15$ . En abscisse, la coordonnée  $x$  et en ordonnée le temps. Sont représentées les valeurs de la vitesse verticale dans la section  $z = 0.5$ .

$Ma = 83.35$  à  $Ma = 83.40$ . Cette solution est effectivement celle située entre les noeuds 5 et 6 de la figure 5.10(d) le long d'une branche stable (figure 5.14(b)). Au delà de  $Ma = 83.45$  ces structures ont cessé d'exister et l'évolution temporelle a naturellement conduit aux solutions périodiques stables de la branche  $P_2$ .

Ces structures rappellent singulièrement celles observées dans l'analogie de Rayleigh-Bénard de notre problème et en particulier les structures observées par Kolodner [28, 29] dans des configurations annulaires minces et pour un mélange eau-éthanol (figure 5.18). Kolodner y observe la formation de structures spatialement localisées mais entourées cette fois d'ondes progressives se déplaçant vers les deux fronts de la structure localisée. Ces résultats ont été confirmés par la suite numériquement par Batiste et Knobloch [9] dans des mélanges  $He^3 - He^4$  et par Batiste *et al.* [10] et Alonso *et al.* [1] dans les mélanges utilisés par Kolodner. Dans les deux situations, celle de l'instabilité de Marangoni-Bénard avec effet Soret et celle de l'instabilité de Rayleigh-Bénard avec effet Soret, le système présente une région dans la quelle existent des solutions stationnaires spatialement loca-

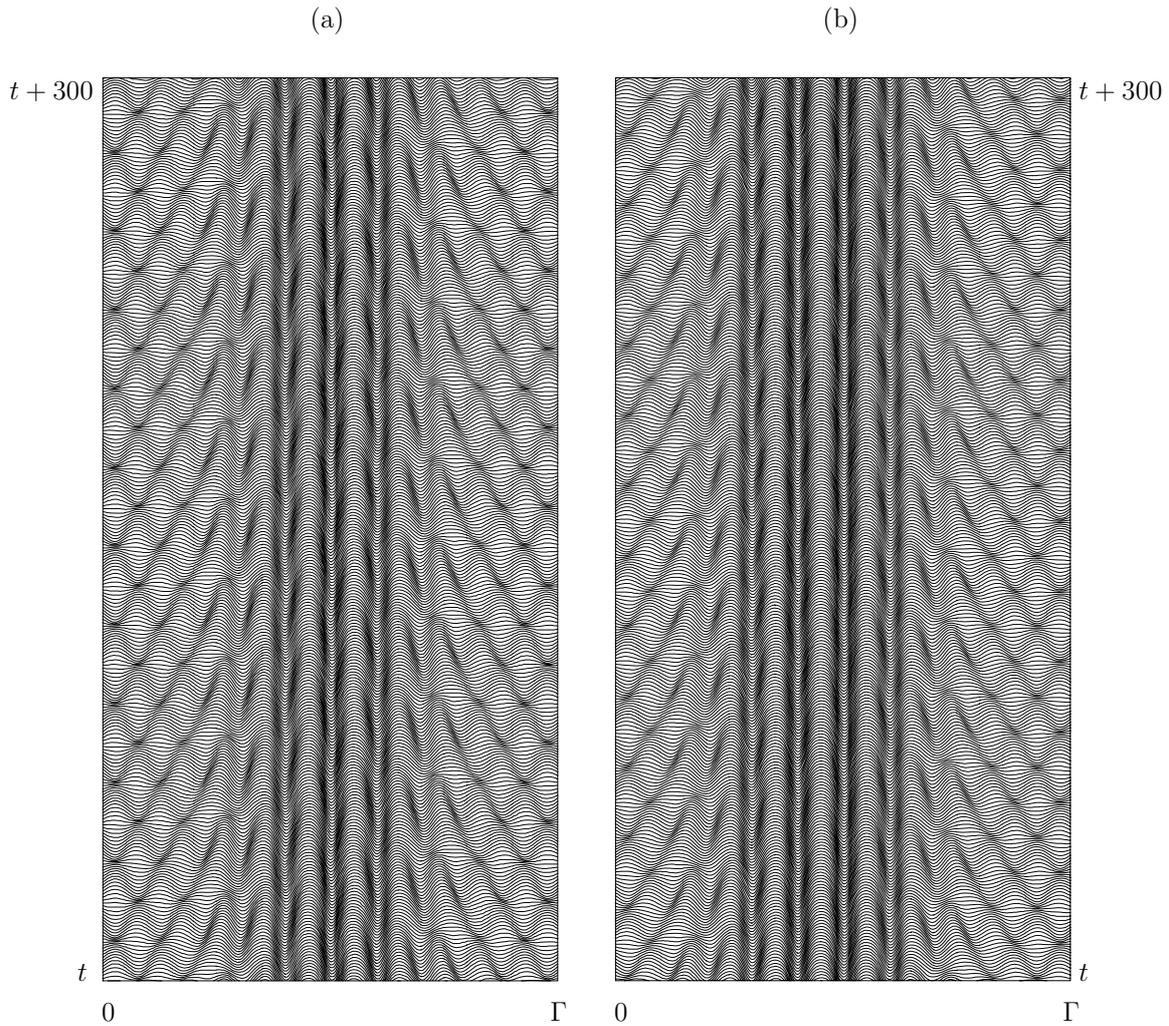


FIG. 5.17 – Deux solutions périodiques en temps dans une représentation spatio-temporelle pour  $Ma = 83.20$ . En abscisse, la coordonnée  $x$  et en ordonnée le temps. Sont représentées les valeurs de la vitesse verticale dans la section  $z = 0.5$ .

lisées associées à des branches sujettes au phénomène d'homoclinic snaking. En raison de la symétrie supplémentaire de réflexion dans le plan moyen  $z = 1/2$  du problème de Rayleigh-Bénard, le système présente quatre branches de solutions localisées et non deux. Le diagramme de bifurcation est présenté dans les travaux de Batiste *et al.* [10] pour des rapports d'aspect  $\Gamma = 60$  et un mélange eau-éthanol [27] avec  $\Psi = -0.021$  (figure 5.19). La solution conductive perd sa stabilité en  $Ra = 1760.8$  par une bifurcation de Hopf d'où émergent simultanément deux branches correspondant respectivement à des ondes progressives (TW) et stationnaires (SW) toutes deux périodiques en espace et d'amplitude constante. La branche TW bifurque de manière sous-critique puis traverse un noeud-col à l'issue duquel elle se termine sur une branche de solutions stationnaires notée (SOC) pour  $Ra = 1747$ . La branche (SOC) initialement instable pour des valeurs de  $Ra < 1747$  devient stable au passage de cette bifurcation. Elle est l'analogue des branches  $P_1$  ou  $P_2$  de notre problème. Elle émerge éventuellement d'une bifurcation primaire pour des valeurs de  $Ra$  très élevée en raison des valeurs importantes du facteur de séparation  $\Psi$  et passe

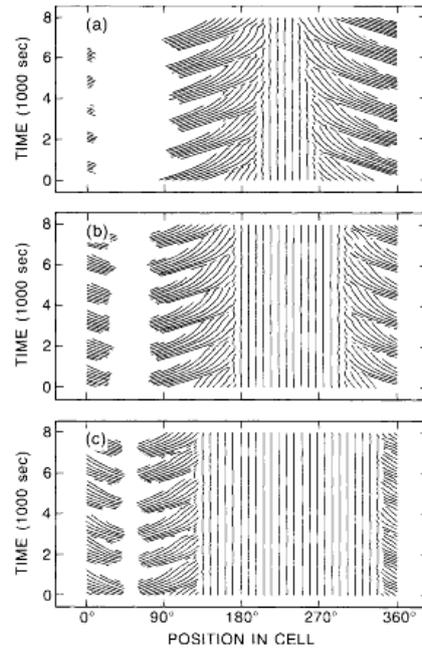


FIG. 5.18 – La figure est une représentation spatio-temporelle de l'évolution de points de même phase associés au bord des rouleaux de convection prenant place dans un anneau étroit par suite de l'instabilité de Rayleigh-Bénard. Le fluide est un mélange eau-alcool avec  $Pr = 5.97$ ,  $Le^{-1} = 0.0085$  et (a)  $\epsilon = 0.01131$ , (b)  $\epsilon = 0.01293$ , (c)  $\epsilon = 0.01535$  où  $\epsilon$  est l'écart relatif au seuil d'instabilité linéaire caractérisé par le nombre de Rayleigh de la bifurcation de Hopf. Le mélange est sujet à l'effet Soret avec un facteur de séparation  $\Psi = -0.02$ . D'après [28].

donc par un noeud col en  $Ra = 1743.3$  (voir figure 5.19).

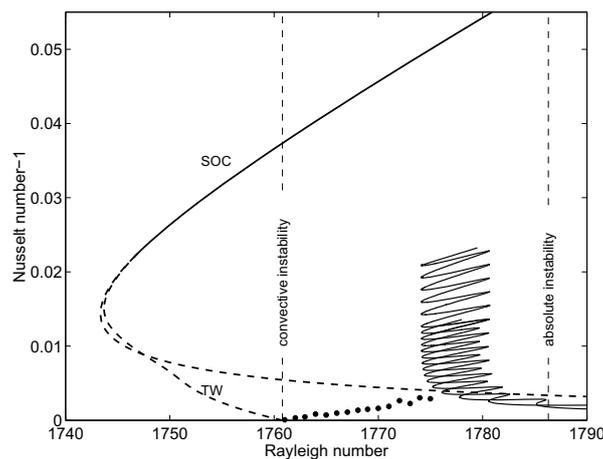


FIG. 5.19 – Diagramme de bifurcation pour l'instabilité de Rayleigh-Bénard en présence d'effet Soret. Les paramètres sont  $\Gamma = 60$ ,  $\Psi = -0.021$ ,  $Pr = 6.22$  et  $Le^{-1} = 0.009$ . D'après [10].

Au delà du seuil d'instabilité linéaire de la solution conductive, le régime est chaotique et à mesure que  $Ra$  augmente, il est interrompu par l'apparition d'états spatialement localisés qui finissent par s'éroder et disparaître. Leur temps de vie augmente à mesure que  $Ra$  augmente. Suivant le nombre de Rayleigh et suivant les conditions initiales, Alonso *et al.* montrent que dans la région d'existence des solutions spatialement localisées, peut exister de part et d'autre de la solution localisée un système d'ondes progressives tout à fait similaire à celui obtenu expérimentalement par Kolodner [29]. La nature de ces ondes est interprétée comme étant due à l'instabilité des ondes (SW) relativement aux ondes (TW). Au contraire, dans notre situation les structures localisées existent au sein des ondes (SW) principalement car celles-ci sont stables relativement aux perturbations du type (TW). Alonso *et al.* montrent également que ces structures existent au delà de la région de snaking. Cela n'est pas notre cas ici : les structures disparaissent tout simplement parce-que la structure localisée remplit le domaine. La question de savoir si des ondes progressives auraient été préférées dans des rapports d'aspect plus grands et si la région d'existence de ces états localisés au milieu d'un système d'onde aurait perduré au delà de la région de snaking est encore une question ouverte.

L'ensemble de nos résultats est présenté dans l'article suivant.

### 5.3.3 Ensemble des résultats publiés



## Spatially localized states in Marangoni convection in binary mixtures<sup>☆</sup>

P. Assemat<sup>a,\*</sup>, A. Bergeon<sup>a</sup>, E. Knobloch<sup>b</sup>

<sup>a</sup>*IMFT UMR CNRS 5502-UPS UFR MIG, 31062 Toulouse Cedex, France*

<sup>b</sup>*Department of Physics, University of California, Berkeley, CA 94720, USA*

Received 7 August 2007; received in revised form 28 September 2007; accepted 27 November 2007

Available online 22 February 2008

Communicated by S. Kida

### Abstract

Two-dimensional Marangoni convection in binary mixtures is studied in periodic domains with large spatial period in the horizontal. For negative Soret coefficients convection may set in via growing oscillations which evolve into standing waves. With increasing amplitude these waves undergo a transition to traveling waves, and then to more complex waveforms. Out of this state emerge stable stationary spatially localized structures embedded in a background of small amplitude standing waves. The relation of these states to the time-independent spatially localized states that characterize the so-called pinning region is investigated by exploring the stability properties of the latter, and the associated instabilities are studied using direct numerical simulation in time.

© 2008 The Japan Society of Fluid Mechanics and Elsevier B.V. All rights reserved.

*Keywords:* Marangoni convection; Spatially localized states; Homoclinic snaking

### 1. Introduction

Surface tension-driven flows are of importance in a variety of applications, and are a consequence of surface tension inhomogeneities that are either imposed externally or develop spontaneously as a result of an instability. Typical of these is the Marangoni instability that sets in in liquids with a temperature-dependent surface tension once the temperature difference, measured by the Marangoni number, exceeds

<sup>☆</sup> This paper is a contribution to the special issue ‘Collected papers by regional editors’ which will be published in Fluid Dynamics Research in 2009.

\* Corresponding author.

*E-mail address:* [assemat@imft.fr](mailto:assemat@imft.fr) (P. Assemat).

a critical value. Such flows occur even in the absence of gravity. In binary mixtures in which the surface tension depends in addition on concentration, temperature-induced concentration inhomogeneities can either enhance instability or lead to overstability, depending on the sign of the Soret coefficient (Castillo and Velarde, 1978, 1982; Bergeon et al., 1994, 1995, 1998; Bergeon and Knobloch, 2004). In the latter case the resulting overstable convection may coexist with steady overturning convection that sets in at a larger value of the Marangoni number. Typically the overstable oscillations are supercritical, while steady convection is subcritical.

In the present paper we are interested in exploring the resulting region of bistability in greater detail. Recent work on two related systems, binary fluid convection (Batiste et al., 2006) and natural doubly diffusive convection (Bergeon and Knobloch, 2007) showed that in this regime time-independent *spatially localized* convection may be present, and uncovered an unexpectedly rich multiplicity of such states. Following Blanchflower (1999) we call these states *convectons*. This behavior has been attributed to the presence of so-called homoclinic snaking in these systems, a phenomenon that is well understood in spatially reversible fourth order systems on the real line with variational structure (Champneys, 1998; Burke and Knobloch, 2006). In particular, in binary mixture convection the convectons emerge from a state called dispersive chaos as the Rayleigh number is increased via a remarkable sequence of relaxation oscillations (Batiste et al., 2006; Alonso et al., 2007). These states are stable despite being embedded within an unstable state, the conduction state, something that is possible when the conduction state is convectively but not absolutely unstable (Batiste et al., 2006). In contrast, above the snaking region the fronts bounding the localized states unpin, and the convecting state grows at the expense of the conduction state, until the whole domain is filled with convection cells.

The system studied here differs from both binary fluid convection and natural doubly diffusive convection, although like the others it is reversible in space and nonvariational. Specifically, the time-independent binary fluid system studied in Batiste et al. (2006) and Alonso et al. (2007) is equivariant under the spatial reflection  $R : x \rightarrow -x$ , where  $x$  is the horizontal coordinate, and hence is reversible as a dynamical system in space, i.e., with  $x$  playing the role of a time-like variable. In this case  $R$  acts on the fields by  $+1$  (see below). However, the system is in addition also equivariant under a second reflection, the reflection  $\kappa$  in the layer midplane. This symmetry is present as a consequence of the Boussinesq approximation and the use of identical boundary conditions at the top and bottom of the layer, and is responsible for the presence in this system of convectons of both even and odd parity. The even convectons, that is, states that are invariant under  $R_\ell : x \rightarrow \ell - x$  for a suitably chosen  $\ell$ , are expected to be time-independent solutions of  $R$ -equivariant systems. This is not so of the odd parity convectons. In generic  $R$ -equivariant systems such states are expected to drift in the  $x$ -direction, but here their drift is prevented by the symmetry  $\kappa R_\ell$  of these states. Thus the binary convection example exhibits two classes of steady localized states, of opposite parity with respect to  $R$ . Since each state can also be reflected in the layer midplane there are in fact four branches of localized states each of which undergoes homoclinic snaking in the same region of parameter space.

In contrast, the natural doubly diffusive system studied in Bergeon and Knobloch (2007) possesses only the symmetry  $\Delta \equiv \kappa R$  but the symmetry  $R$  is absent. Moreover, the symmetry  $\Delta$  acts on the fields by  $-1$ . As a result there are only two branches of steady convectons, and both are invariant under  $\Delta_\ell \equiv \kappa R_\ell$  for suitable  $\ell$ .

The Marangoni convection problem studied here shares many properties with the binary convection system but lacks the additional symmetry  $\kappa$ . As a result we expect only two types of time-independent convectons, both even with respect to  $R_\ell$ , but distinguished by the direction of the flow along the line of

symmetry,  $x = \Gamma/2$ , where  $\Gamma$  is the dimensionless length of the periodic domain. All odd parity states now drift, and must be located by solving an appropriate nonlinear eigenvalue problem for the drifting localized states and their drift speed. Moreover, for the parameter values used here the time-independent even parity convectons emerge with increasing Marangoni number from a time-dependent state consisting of a spatially localized structure embedded in a background of small amplitude standing waves.

The paper is organized as follows. In Section 2 we introduce the basic equations of the study, and review the numerical techniques used to compute the solutions. These include numerical branch following techniques as well as direct numerical simulation. Our results are presented in Section 3, and interpreted theoretically in Section 4.

## 2. Marangoni convection

### 2.1. Equations and dimensionless parameters

We study two-dimensional Marangoni convection in the presence of a Soret effect in a spatially periodic domain of period  $\Gamma = n\lambda_c$ , where  $n$  is an integer and  $\lambda_c \approx 3.1$  is the critical wavelength for the onset of convection in a single component liquid. A constant normal heat flux  $-q > 0$  is applied (in the downward direction) at the free upper surface. The velocity vanishes along the bottom wall, assumed to be no-slip. The surface tension  $\sigma$  along the free upper surface varies linearly with the surface temperature and concentration:  $\sigma = \sigma_0(1 + \gamma_T T + \gamma_C C)$ , where  $\sigma_0$  is a constant. We assume that to leading order the free surface remains undeformed by the flow ( $\sigma$  is large) and assume that the gas in contact with the free surface has no influence.

In the following distance, time, temperature, concentration and velocity are nondimensionalized using  $H$ ,  $H^2/\nu$ ,  $\Delta T \equiv -qH/\lambda$ ,  $\Delta C \equiv -D_S \Delta T/D$  and  $Ma \nu/H$ , respectively. Here  $Ma \equiv -qH^2 \sigma_0 \gamma_T / \lambda \rho \nu \kappa_T$  is the flux Marangoni number, and  $\rho$  is the density of the fluid,  $\nu$  is its kinematic viscosity,  $\kappa_T$  is its thermal diffusivity, and  $\lambda \equiv C_V \rho \kappa_T$  is the thermal conductivity. In addition  $D$  is the concentration diffusivity and  $D_S$  is the Soret diffusion coefficient. In zero gravity the system is described by the dimensionless equations (Bergeon and Knobloch, 2004):

$$\partial_t \mathbf{u} = -Ma(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} - \nabla p + \nabla^2 \mathbf{u}, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\partial_t T = -Ma(\mathbf{u} \cdot \nabla) T + Pr^{-1} \nabla^2 T, \quad (2)$$

$$\partial_t C = -Ma(\mathbf{u} \cdot \nabla) C + Sc^{-1} (\nabla^2 C - \nabla^2 T), \quad (3)$$

where  $\mathbf{u}$ ,  $p$ ,  $T$ ,  $C$  are, respectively, the dimensionless velocity, pressure, temperature and concentration, and  $Pr \equiv \nu/\kappa_T$  and  $Sc \equiv \nu/D$  are the Prandtl and Schmidt numbers. The boundary conditions along the free surface ( $z = 1$ ) are

$$\partial_z u - Pr^{-1} (\partial_x T + S_M \partial_x C) = w = \partial_z T - 1 = \partial_z (C - T) = 0, \quad (4)$$

while those along the bottom ( $z = 0$ ) are

$$u = w = T = \partial_z (C - T) = 0. \quad (5)$$

Here

$$S_M = -\frac{D_S \gamma_C}{D \gamma_T}$$

is a dimensionless quantity analogous to the separation ratio familiar from buoyancy-driven convection. In the following we shall be interested in mixtures with  $S_M < 0$ . In this case the conduction case may lose stability with increasing Marangoni number to growing oscillations; the physical mechanism of this instability is discussed in Bergeon and Knobloch (2004). Note that for liquids with  $\gamma_T < 0$  we must reverse the sign of  $q$ , i.e., the surface must be cooled to generate instability instead of being heated.

The above problem has the solution  $\mathbf{u}=\mathbf{0}$ ,  $T_0(z)=z$ ,  $C_0(z)=z$ , present for all values of  $Ma$ , corresponding to the conduction state. In the following we study the states resulting from instability of this state in periodic domains with moderately large spatial period  $\Gamma$ . As already explained, in the present case the  $R$ -symmetry acts by  $+1$ , and hence  $R$ -symmetric states satisfying

$$u(-x, z) = -u(x, z), \quad w(-x, z) = w(x, z), \quad T(-x, z) = T(x, z), \quad C(-x, z) = C(x, z) \quad (6)$$

play a prominent role.

## 2.2. Numerical method

To solve the above equations we use a numerical continuation method based on a Newton solver for the time-independent version of Eqs. (1)–(3) with the boundary conditions (4)–(5). The implementation of the method follows that of Tuckerman (1989) and Mamun and Tuckerman (1995), but employs a spectral element method in which the domain  $[0, 1] \times [0, \Gamma]$  is decomposed into  $N_e$  macro-elements of size  $[0, 1] \times [i\Gamma/N_e, (i+1)\Gamma/N_e]$ , where  $N_e$  is the number of spectral elements and  $i \in \{0, \dots, N_e - 1\}$ . In each element, the fields are approximated by a high order interpolant through the Gauss–Lobatto–Legendre points (Funaro, 1991). The Newton solver uses a first order time-stepping scheme for the equations in conservation form; we use the scheme proposed by Karniadakis et al. (1991) in which the diffusive linear part of the equations is treated implicitly. Each time step therefore requires the inversion of four Helmholtz problems. This is carried out using a Schur factorization procedure on the weak form of the equations (Deville et al., 2002), a procedure that ensures the periodicity of the unknowns and their first derivative in the  $x$ -direction. The dynamical behavior in time is computed using a second order version of the scheme (Karniadakis et al., 1991).

Two types of states are of interest: spatially periodic wavetrains and spatially *localized* states. In domains of finite spatial period  $\Gamma$  only the former bifurcate from the conduction state; the latter bifurcate in secondary pitchfork bifurcations from the periodic states, and do so already at small amplitude when  $\Gamma$  is large. All results are computed for  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$  with  $\Gamma = 6\lambda_c$  or  $\Gamma = 10\lambda_c$ , where  $\lambda_c \approx 3.1$  is the wavelength of the primary unstable mode.

## 3. Results

We focus on two representative values of the separation ratio  $S_M$ ,  $S_M = -0.002$  and  $S_M = -0.005$ . We present the results in the form of bifurcation diagrams showing either the velocity norm  $E \equiv \int_0^1 \int_0^\Gamma (u^2 + w^2) dx dz$  or  $\Delta T_m \equiv \max |T(x, z) - T_0(z)|$  as functions of  $Ma$ . Stability of each branch is indicated using the notation  $n - p$ , where  $n$  is the number of unstable real eigenvalues, and  $p$  is the number of *pairs* of unstable complex eigenvalues. Thus the number of unstable eigenvalues is  $n + 2p$ . In the figures we use solid (dashed) lines to indicate solutions that are stable (unstable) with respect to  $R$ -symmetric perturbations of period  $\Gamma$ , and use solid circles, open circles and solid squares to indicate the location of

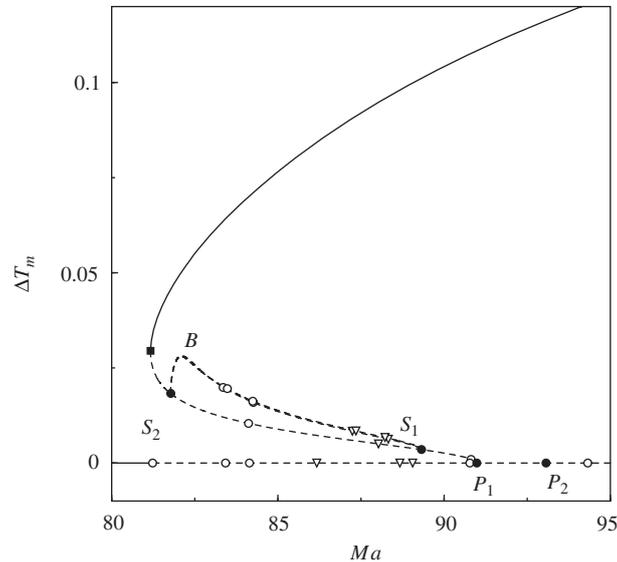


Fig. 1. Bifurcation diagram showing  $\Delta T_m \equiv \max |T(x, z) - T_0(z)|$  as a function of the Marangoni number  $Ma$ . The two branches labeled  $B$  between  $Ma_{S_1} = 89.33$  and  $Ma_{S_2} = 81.78$  are almost identical but are not related by symmetry. Parameters are  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$ ,  $S_M = -0.002$  and  $\Gamma = 6\lambda_c$ . Resolution is  $N_e = 12$  with  $N_x = 11$  and  $N_z = 17$ .

pitchfork, Hopf and saddle-node bifurcations; open triangles indicate collisions of complex eigenvalues on the real axis and hence do not correspond to a change in stability. Stability with respect to  $R$ -symmetry breaking perturbations is discussed in the text as necessary. With the exception of the primary branch of traveling waves we do not follow branches of time-periodic states. The steady states are all computed by imposing the reflection symmetry  $R_{\Gamma/2}$ , i.e., reflection symmetry with respect to the line  $x = \Gamma/2$ .

### 3.1. The case $S_M = -0.002$ , $\Gamma = 6\lambda_c$

We show the results for  $S_M = -0.002$ ,  $\Gamma = 6\lambda_c$  in Fig. 1. The figure shows that for these parameter values the conduction state loses stability at  $Ma \approx 81.24$  to exponentially growing oscillations with wavenumber  $n = 6$ , followed by two additional Hopf bifurcations; with increasing Marangoni number the corresponding eigenvalues collide pairwise on the positive real axis and thereafter remain real. The first of these eigenvalues crosses into the negative half plane at  $Ma \approx 90.99$  resulting in a pitchfork of revolution to a spatially periodic steady state with wavenumber  $n = 6$  (Fig. 2). A second pitchfork of revolution, to states with  $n = 7$ , follows at  $Ma \approx 93.08$ . The first of the Hopf bifurcations is supercritical and evolves into a stable standing wave. In contrast, the first pitchfork of revolution is subcritical and the resulting steady spatially periodic states are therefore initially five times unstable (Fig. 3). These undergo a secondary pitchfork bifurcation ( $S_1$ ) to a spatially modulated state, followed by a secondary Hopf bifurcation before undergoing a further pitchfork ( $S_2$ ), after which the periodic solutions are only once unstable; these states acquire stability at a saddle-node bifurcation at  $Ma \approx 81.175$ , and are thereafter stable.

In Fig. 4 we show sample solutions along one of the branches  $B$  created at  $S_1$  and destroyed at  $S_2$ . The figure reveals a tendency towards modulation with a spatial scale comparable to the imposed period, and suggests a tendency towards spatial localization. The states shown are correctly described as an  $n = 1$

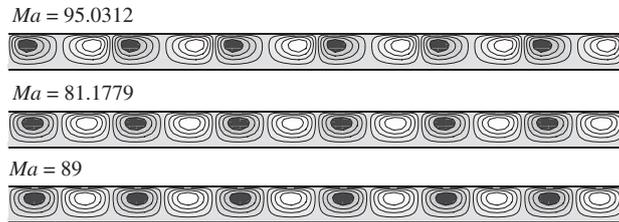


Fig. 2. Solution streamlines at several locations along the  $P_1$  branch; white regions correspond to clockwise flow while black regions correspond to counter-clockwise flow. Contour density does not reflect absolute strength of flow. The Marangoni number  $Ma = 89.0$  ( $E = 0.23 \times 10^{-05}$ ) is close to  $P_1$ ,  $Ma = 81.1779$  ( $E = 0.15 \times 10^{-03}$ ) is close to the saddle-node, and  $Ma = 95.0312$  ( $E = 0.24 \times 10^{-02}$ ) is along the stable part of the branch. Parameters are  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$ ,  $S_M = -0.002$  and  $\Gamma = 6\lambda_c$ . Resolution is  $N_e = 12$  with  $N_x = 11$  and  $N_z = 17$ .

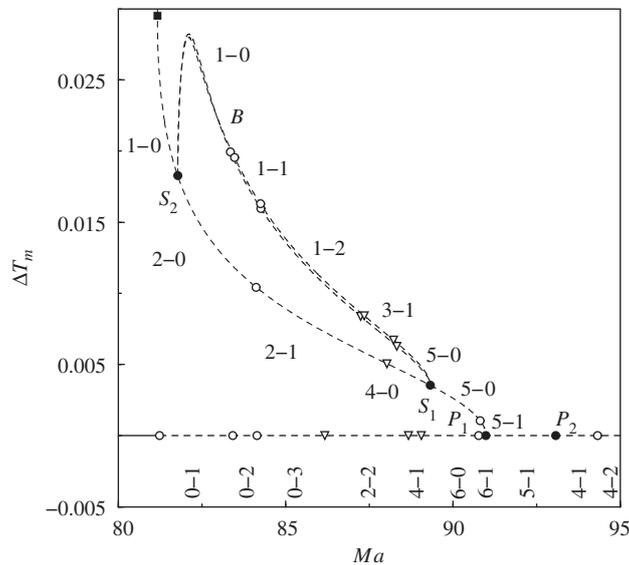


Fig. 3. Enlargement of Fig. 1 indicating the stability properties of the different solution branches. Stability is indicated using the notation  $n - p$ , where  $n$  is the number of unstable real eigenvalues, and  $p$  is the number of pairs of unstable complex eigenvalues. Thus none of nontrivial solutions is stable. Parameters are  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$ ,  $S_M = -0.002$  and  $\Gamma = 6\lambda_c$ . Resolution is  $N_e = 12$  with  $N_x = 11$  and  $N_z = 17$ .

modulation of a finite amplitude  $n = 6$  state. Each has a line of symmetry at  $x = \Gamma/2$ , corresponding to a region of upflow. Solutions with downflow at  $x = \Gamma/2$  are also present, but differ in detail: there is no symmetry that takes an upflow state into a downflow state. Despite this the bifurcations at  $S_1$  and  $S_2$  are pitchforks. This is a consequence of the fact that the 1:6 spatial resonance is a *weak* spatial resonance (Prat et al., 1998). Although both the upflow and the downflow states undergo two tertiary Hopf bifurcations each of which decreases their degree of instability, neither ever acquires stability.

We have not explored the branches created in the various bifurcations described above but observe that the scenario described resembles that identified in doubly diffusive convection in a horizontal layer

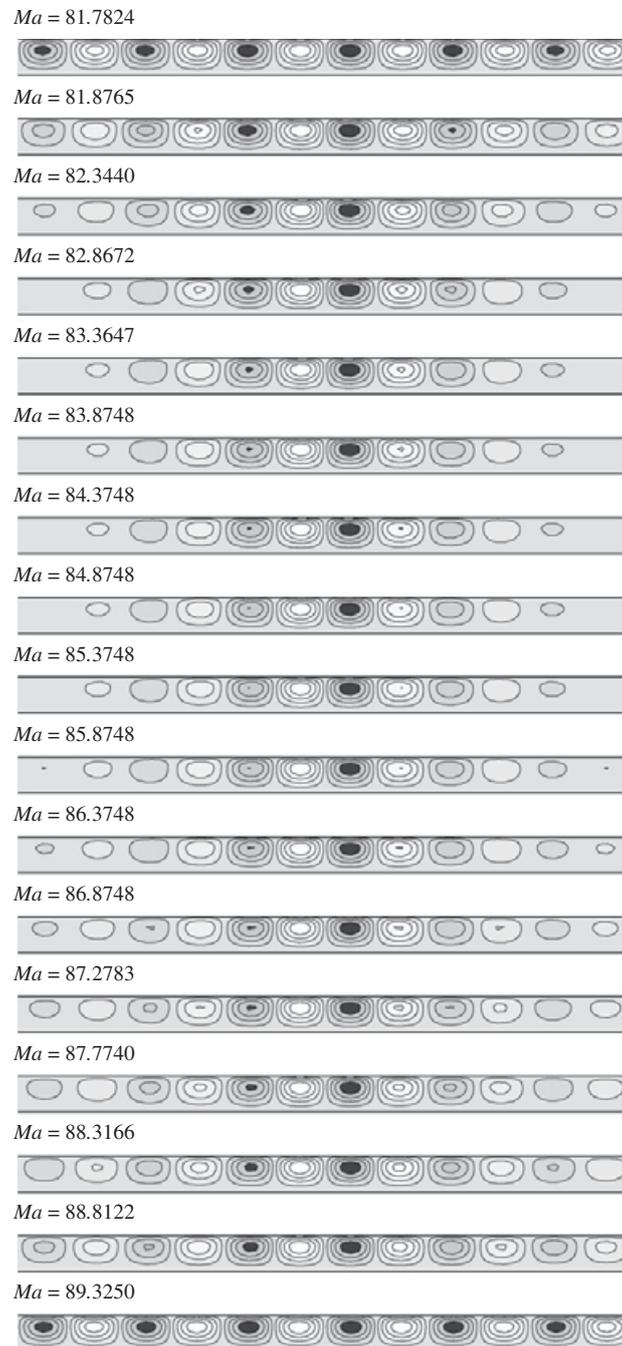


Fig. 4. Solution streamlines at different locations along one of the branches  $B$  bifurcating subcritically at  $S_1$  from the first primary periodic branch. The values of  $Ma$  decrease from bottom (close to  $S_1$ ) to top (close to  $S_2$ ). Parameters are  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$ ,  $S_M = -0.002$  and  $\Gamma = 6\lambda_c$ . Resolution is  $N_e = 12$  with  $N_x = 11$  and  $N_z = 17$ .

(Moore and Weiss, 2000) in a smaller domain (and in the presence of the additional reflection symmetry  $\kappa$ ). In the following we use the observed behavior as motivation for looking for time-independent spatially localized states. For this purpose it is advantageous to examine the regime in which the primary steady state branch is more subcritical, i.e., a smaller value of  $S_M$ , and to examine the solutions in a larger domain.

### 3.2. The case $S_M = -0.005$ , $\Gamma = 10\lambda_c$

#### 3.2.1. Time-independent states

Figs. 5a–c show the results for  $S_M = -0.005$ ,  $\Gamma = 10\lambda_c$ . This time the figures show the velocity norm  $E$  as a function of  $Ma$ , focusing on branches of steady states only. The figures show two primary branches of spatially periodic states, labeled  $P_1$  and  $P_2$ , that bifurcate from the conduction state in close succession, with  $P_1$  preceding  $P_2$ . Of these  $P_1$  corresponds to states with 11 wavelengths ( $n = 11$ ) within the imposed spatial period, while  $P_2$  corresponds to 10 wavelengths ( $n = 10$ ). Both branches bifurcate strongly subcritically. Fig. 5c shows that  $P_1$  undergoes a secondary pitchfork bifurcation already at very small amplitude, producing a pair of states labeled  $L_1$ ,  $L_2$ , followed at larger amplitude by two further pitchfork bifurcations, the second of which produces the branches labeled  $B_1$ ; the  $P_2$  branch likewise undergoes a secondary bifurcation to a pair of branches labeled  $B_2$ . The two states  $L_1$ ,  $L_2$  created in the first of these bifurcations both have spatial wavenumber  $n = 11$ , modulated by wavenumber  $n = 1$ , but once again are not related by symmetry. As a result the two branches of localized states in Fig. 5c differentiate with decreasing  $Ma$  into distinct branches (Fig. 5a); as this occurs the modulation amplitude increases and the emerging states become more and more spatially localized. Near  $Ma \approx 83.4$  the two branches undergo a sequence of saddle-node bifurcations as both branches begin to oscillate back and forth, in a behavior known as *snaking*. In this region the localized states grow in extent, each type adding a roll on each side as one proceeds up the snaking branch in such a way that the symmetry  $R$  of the state is preserved. When the localized states almost fill the domain  $\Gamma$  the snaking ends and both branches turn over to connect to a primary branch of periodic states. In the present case both terminate on the branch  $P_2$ , once again in a pitchfork bifurcation. Thus the two snaking branches provide a connection between the two primary branches  $P_1$  and  $P_2$ .

Fig. 6 shows the evolution of the localized states as one proceeds from the secondary pitchfork on the  $P_1$  branch to the secondary pitchfork on the  $P_2$  branch. All states shown are  $R$ -symmetric; the states numbered (1)–(6) have minimum amplitude in the center of the domain and lie on the branch labeled  $L_1$ , while those numbered (7)–(10) lie on  $L_2$  and have maximum amplitude in the center. After translation by  $\Gamma/2$  the  $L_1$  states, like the  $L_2$  states, are localized in the center of the periodic domain, with  $L_1$  ( $L_2$ ) characterized by an upflow (downflow) at  $x = \Gamma/2$ . Once again these two states are unrelated by any symmetry.

Near  $P_1$  both  $L_1$  and  $L_2$  have 11 wavelengths and are weakly modulated over the period  $\Gamma$ ; the upflow state  $L_1$  bifurcates from the  $P_1$  state with upflow at  $x = \Gamma/2$ , while the downflow state  $L_2$  bifurcates from the half-wavelength translate of this  $P_1$  state, with downflow at  $x = \Gamma/2$ . As  $Ma$  decreases both patterns contract, eventually forming states consisting of a few dominant pairs of rolls, with the rest of the domain filled with the conduction state. At this point both branches start to snake, and the localized states begin to spread laterally by nucleating rolls pairwise on either side. Once the domain is almost full the solutions resemble holes in an otherwise periodic state, with the hole becoming shallower and wider as one approaches the termination of the branch. At this point the solutions therefore resemble

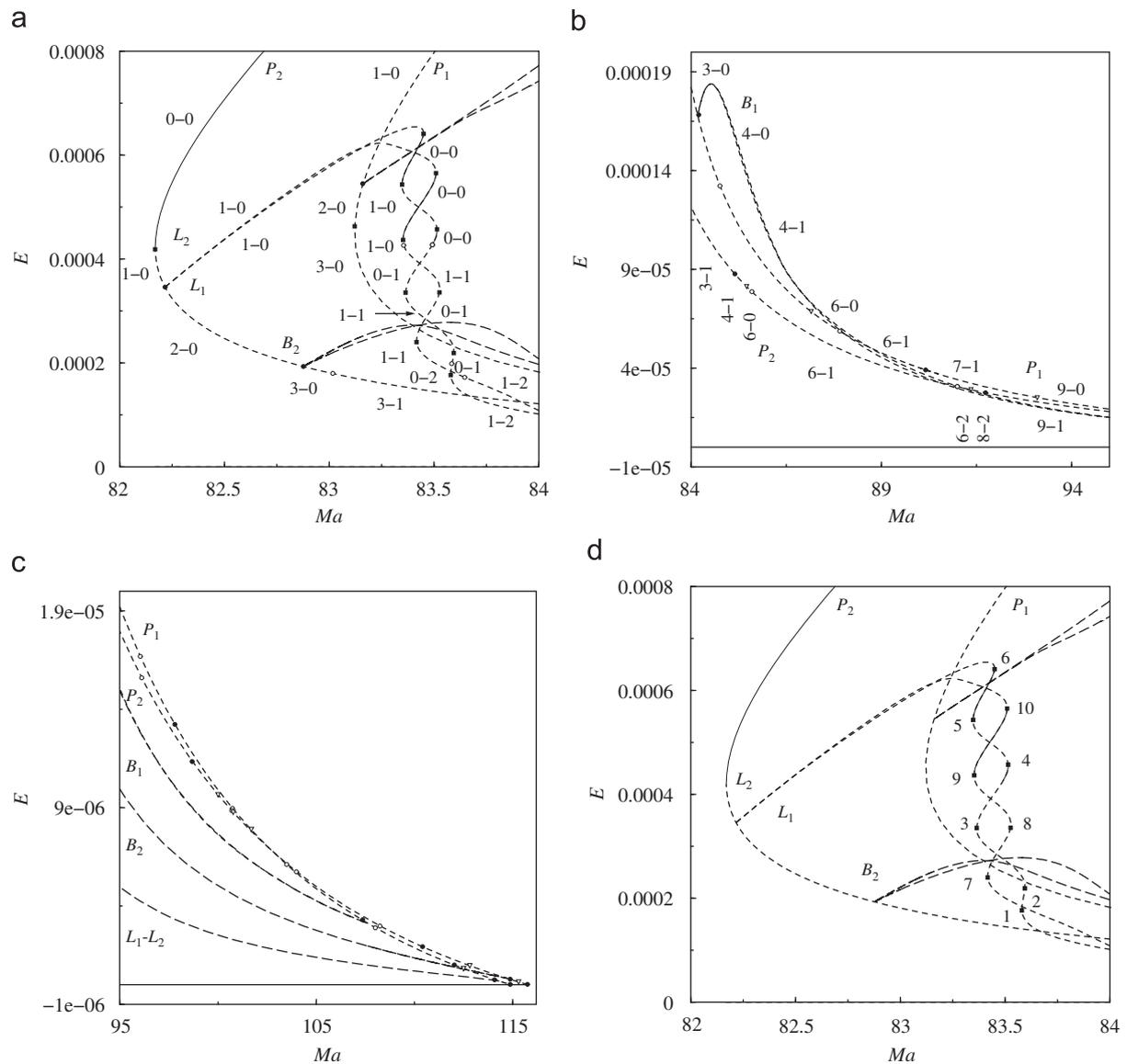


Fig. 5. (a)–(c) Bifurcation diagrams showing the velocity norm for time-independent solutions in three different ranges of the Marangoni number  $Ma$ , together with the stability assignments with respect to perturbations preserving the reflection symmetry  $R$ . In (b) only some of the branches are shown. (d) Labeled saddle-nodes on the branches  $L_1$  and  $L_2$  of localized states used in Fig. 6. Solid (dashed) lines indicate stable (unstable) solutions. Parameters are  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$ ,  $S_M = -0.005$ ,  $\Gamma = 10\lambda_c$ , where  $\lambda_c = 3.1$  is the critical wavelength for the onset of convection in a pure fluid. Resolution is  $N_e = 20$ – $22$ ,  $N_x = N_z = 17$ .

large scale modulation of the spatially periodic state  $P_2$ , and both branches terminate together just below the saddle-node on the  $P_2$  branch (Fig. 5a). Once again the upflow state terminates on the  $P_2$  state with upflow at  $x = \Gamma/2$ , while the downflow state terminates on the half-wavelength translate of this state, characterized by downflow at  $x = \Gamma/2$ .

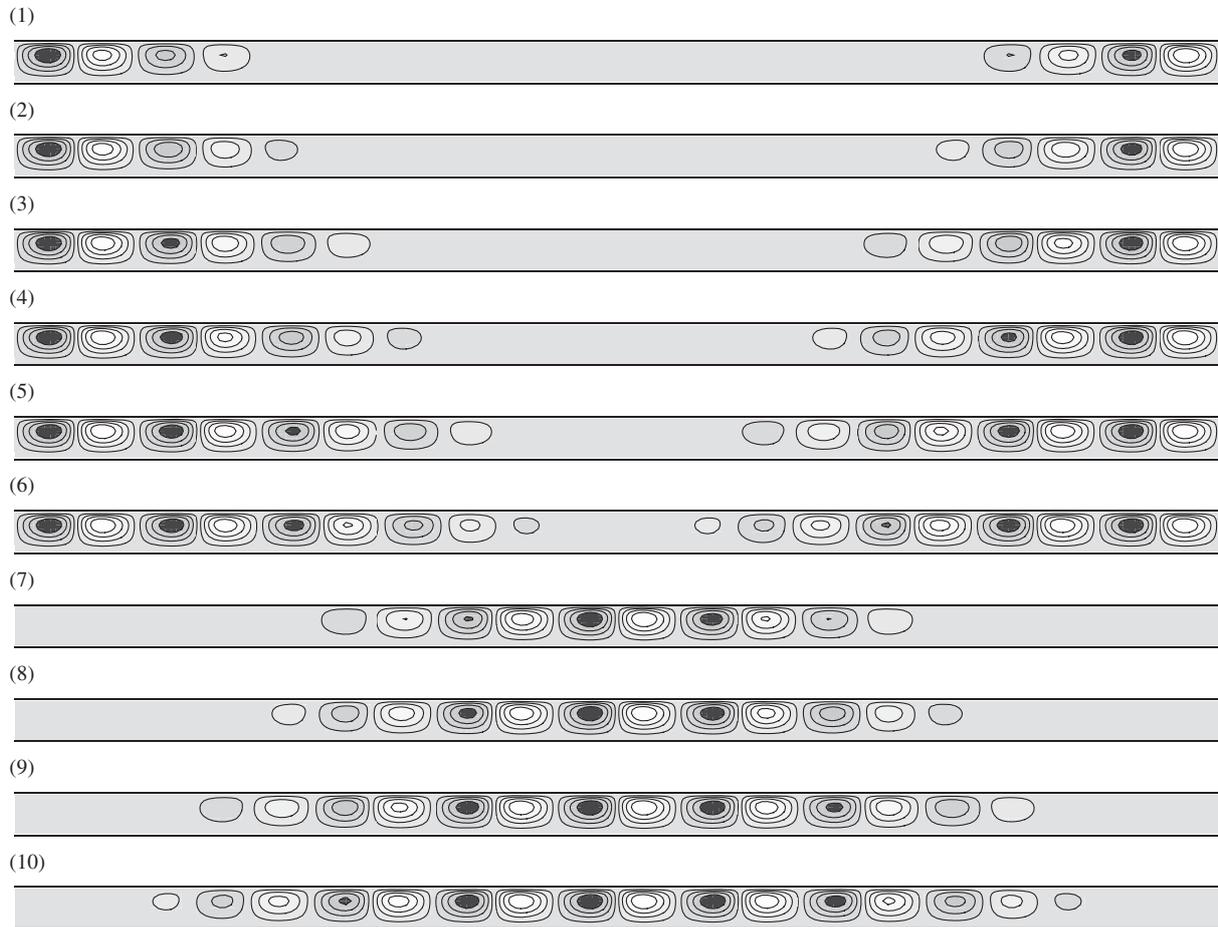


Fig. 6. Solutions in the neighborhood of the saddle-nodes on the snaking branches  $L_1$  (1)–(6) and  $L_2$  (7)–(10). (1)  $Ma = 83.6271$ , (2)  $Ma = 83.5935$ , (3)  $Ma = 83.3641$ , (4)  $Ma = 83.5138$ , (5)  $Ma = 83.3466$ , (6)  $Ma = 83.4447$ , (7)  $Ma = 83.4166$ , (8)  $Ma = 83.5254$ , (9)  $Ma = 83.3536$  and (10)  $Ma = 83.4819$ . The  $L_2$  states are distinct from  $\Gamma/2$  translates of the  $L_1$  states.

The stability properties of the steady localized states with respect to  $R$ -symmetric perturbations are summarized in Fig. 5a. The figure shows that while throughout most of their region of existence the localized states are unstable, there are intervals of parameter values within the snaking or pinning region in which these can indeed be stable. The stable segments lie between adjacent saddle-nodes and have positive slope, much as occurs in systems with variational structure (Burke and Knobloch, 2006). However, lower down the snaking branches the localized states lose stability with respect to  $R$ -symmetric oscillations, eliminating some of the stable segments. This situation occurs on the branch  $L_1$ . The associated Hopf bifurcation appears to be subcritical since no stable  $R$ -symmetric oscillations were located near the Hopf bifurcation, and the system evolves towards  $P_2$  as the final state. The corresponding bifurcation on the  $L_2$  branch occurs on a branch segment that is already unstable. In other systems with nonvariational structure the stability properties are similar but spatially localized oscillations are found instead (Yochelis et al., 2006).

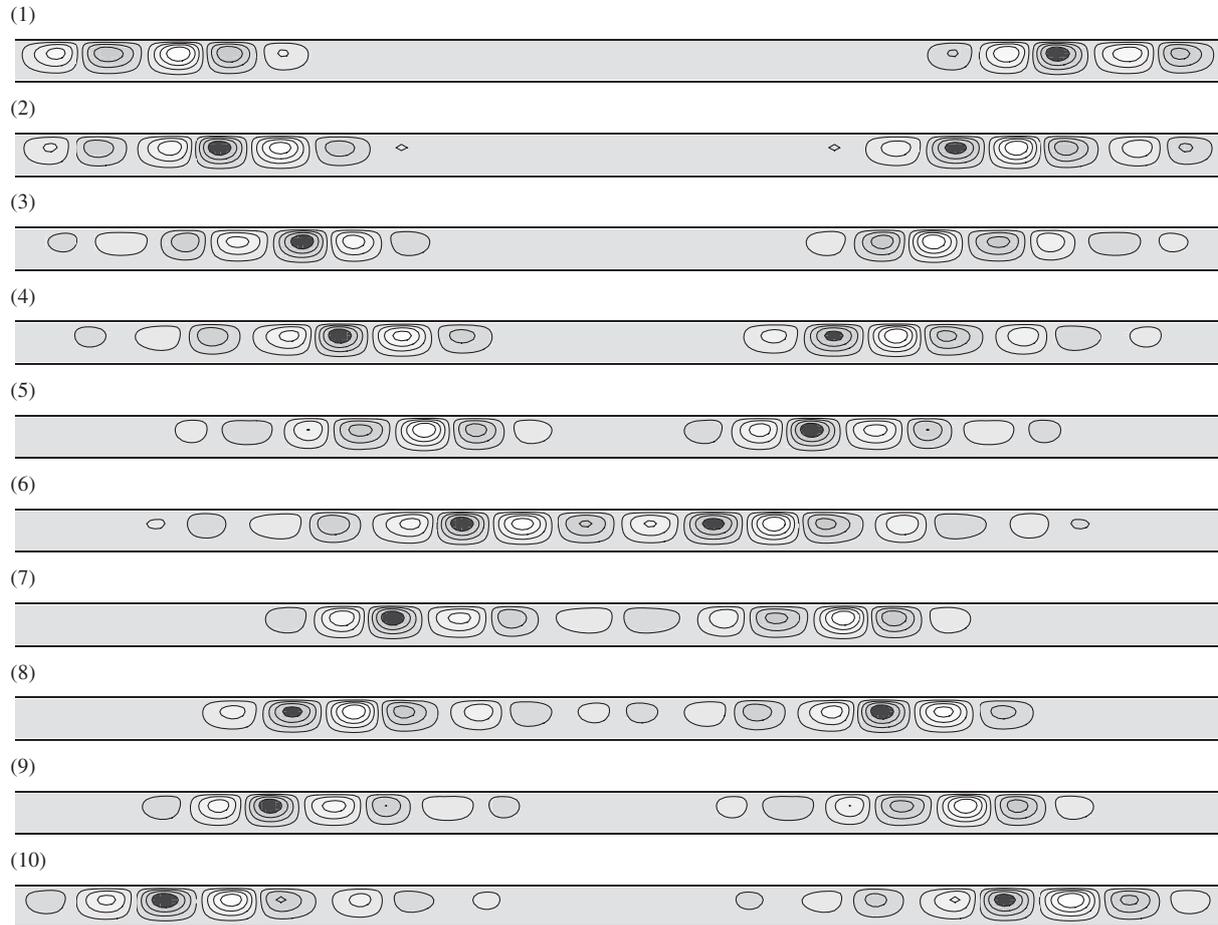


Fig. 7. Eigenmodes associated with the saddle-nodes of the snaking branches  $L_1$  (1)–(6) and  $L_2$  (7)–(10). (1)  $Ma = 83.6271$ , (2)  $Ma = 83.5794$ , (3)  $Ma = 83.3652$ , (4)  $Ma = 83.5122$ , (5)  $Ma = 83.3512$ , (6)  $Ma = 83.4414$ , (7)  $Ma = 83.4166$ , (8)  $Ma = 83.5246$ , (9)  $Ma = 83.3549$  and (10)  $Ma = 83.4673$ .

Fig. 7 shows the eigenfunctions close to the saddle-node bifurcations labeled in Fig. 5d, corresponding to the states in Fig. 6. These eigenfunctions are  $R$ -symmetric and correspond to modes that are neutrally stable at the saddle-nodes. The figure reveals that the eigenfunctions are localized near the fronts at either end of the localized states, and are responsible for the nucleation of new rolls that lead to the growth of the structure as one proceeds up the snaking curve.

The stability properties summarized in Fig. 5a depend on the imposed symmetry  $R$ . If this requirement is relaxed the stability properties may change. We find that while the  $L_1$  states remain stable between saddle-nodes (5) and (6), the  $L_2$  states are now only stable in a very small interval of Marangoni numbers between saddle-nodes (9) and (10), bounded on the left by a Hopf bifurcation and on the right by a parity-breaking bifurcation that produces (unstable) asymmetric localized states that drift either to the left or the right. Neither bifurcation is shown in the figure. The Hopf bifurcation, like the parity-breaking bifurcation, breaks the  $R$ -symmetry, and results in the appearance of standing oscillations in the wings

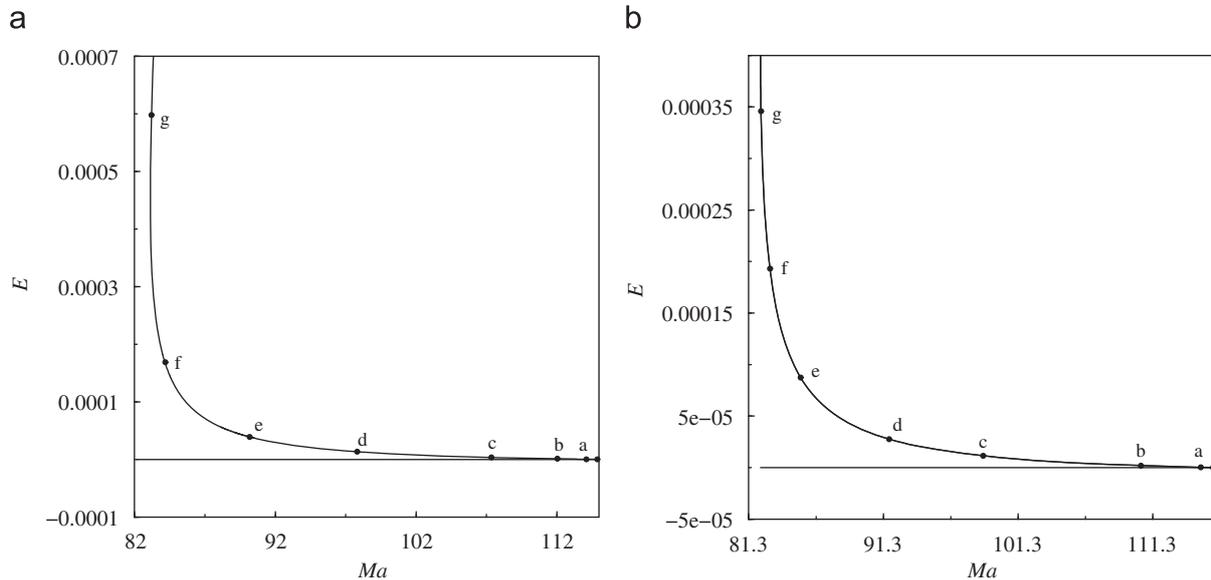


Fig. 8. Bifurcation diagram showing the location of secondary bifurcations, labeled a–g, along (a) branch  $P_1$ , (b) branch  $P_2$ . Parameters are  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$ ,  $S_M = -0.005$  and  $\Gamma = 10\lambda_c$ . Resolution is  $N_e = 20$ ,  $N_x = N_z = 17$ .

of the solution that are *exactly* out of phase. Solutions of this type are discussed in greater detail in the following section.

The linear stability results for the  $P_1$  and  $P_2$  branches with respect to  $R$ -symmetric perturbations, summarized in Figs. 5a–c, indicate the presence of additional secondary steady state bifurcations. Since both branches consist of very similar states their stability properties are also similar (Fig. 8). Fig. 9 shows the marginally stable eigenfunctions along  $P_1$ . The eigenfunction  $a$  is responsible for triggering the small amplitude instability leading to the snaking branches  $L_1$ ,  $L_2$ ; when added to  $P_1$  it produces a pattern with wavenumber  $n = 11$  modulated by a wavenumber 1 perturbation. The succeeding bifurcations also lead to wavelength modulation. For example, the bifurcations at  $c$  and  $f$  mark the beginning and end of the secondary branches labeled  $B_1$  in Fig. 5b. Fig. 10 shows a solution on one of these branches near the location  $f$ . Finally, solution  $g$  shows that a secondary branch consisting of nine pairs of rolls bifurcates from  $P_1$  just above the saddle-node. We have not followed all of these secondary branches, nor examined their stability properties; however, the branches  $B_1$  are unstable throughout.

In contrast, the corresponding bifurcation at  $a$  on  $P_2$  (Fig. 11) produces a pair of branches  $B_2$  with admixture of wavenumber 12, which terminate back on  $P_2$  at  $f$ . These branches are also unstable throughout. A sample solution on one of these branches near  $f$  is also shown in Fig. 10. The bifurcation at  $g$  corresponds to the termination of the snaking branches  $L_1$ ,  $L_2$  (cf. Fig. 9a).

### 3.2.2. Time-dependent states

We now turn to time-dependent states. For the parameter values used the conduction state loses stability to a Hopf bifurcation at  $Ma \approx 80.92$  just before the saddle-node bifurcation on the  $P_2$  branch at  $Ma \approx 82.16$ . This is very close to the result for the infinite layer ( $\Gamma \rightarrow \infty$ ), for which the critical Marangoni number  $Ma_H \approx 80.9003$ , corresponding to the wavelength  $\lambda_H \approx 3.152$  and frequency  $\omega_H \approx 0.3675$ .

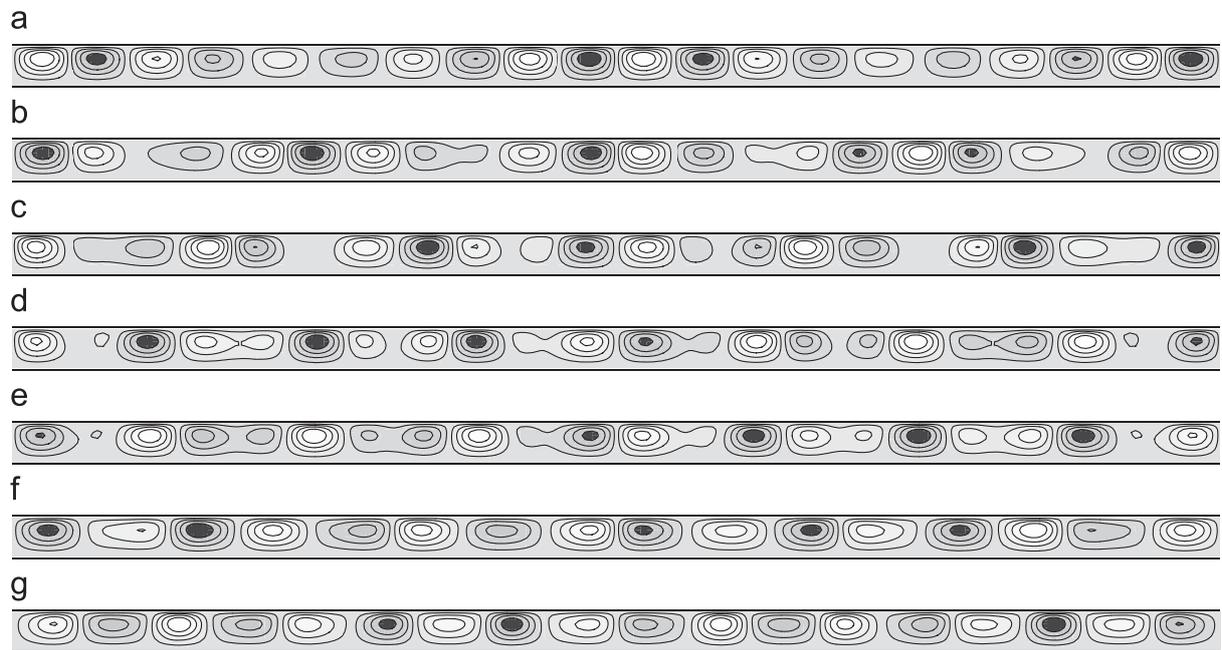


Fig. 9. Eigenmodes associated with the different secondary bifurcations along the  $P_1$  branch (Fig. 8a). Parameters are  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$ ,  $S_M = -0.005$ ,  $\Gamma = 10\lambda_c$ , with (a)  $Ma = 114.2958$ , (b)  $Ma = 112.1941$ , (c)  $Ma = 107.6806$ , (d)  $Ma = 98.4211$ , (e)  $Ma = 90.3703$ , (f)  $Ma = 84.1869$  and (g)  $Ma = 83.1399$ . Resolution is  $N_e = 20-22$ ,  $N_x = N_z = 17$ .

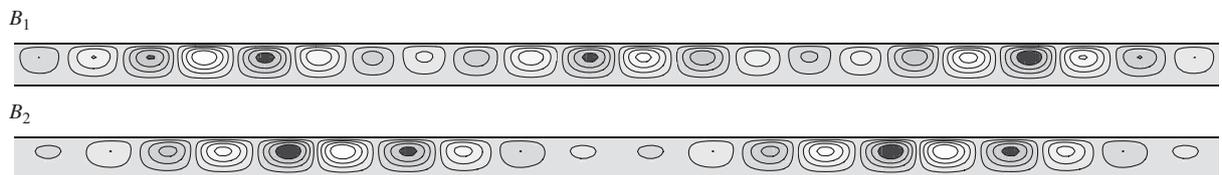


Fig. 10. Solutions on one of the  $B_1$  and one of the  $B_2$  branches near their termination points closest to the saddle-nodes on  $P_1$ ,  $P_2$ . Parameters are  $Ma = 84.4711$  ( $B_1$ ),  $Ma = 83.6335$  ( $B_2$ ),  $Sc = 50$ ,  $Pr = 1$ ,  $S_M = -0.005$  and  $\Gamma = 10\lambda_c$ . Resolution is  $N_e = 20-22$ ,  $N_x = N_z = 17$ .

In this regime one must find time-dependent states, and indeed one finds that the Hopf bifurcation is supercritical and evolves into a pattern of stable standing waves (hereafter SW, see Fig. 12). With increasing  $Ma$  there is a hysteretic transition to stable traveling waves (hereafter TW, see Fig. 13a). Both branches are produced in the same primary Hopf bifurcation, and both have the same spatial wavenumber  $n = 10$ . The TW branch (not shown) goes through a saddle-node bifurcation at  $Ma \approx 82.367$  at which it turns towards smaller values of  $Ma$ , but not before losing stability to a spatially modulated state at  $Ma \sim 82.20$  (Fig. 13b). With further increase in  $Ma$  these states lose stability and the system evolves, after a long and complex transient involving transitions between both left and right TW and SW to the spatially periodic  $n = 10$  steady state  $P_2$ . With increasing  $Ma$  these transients involve the episodic

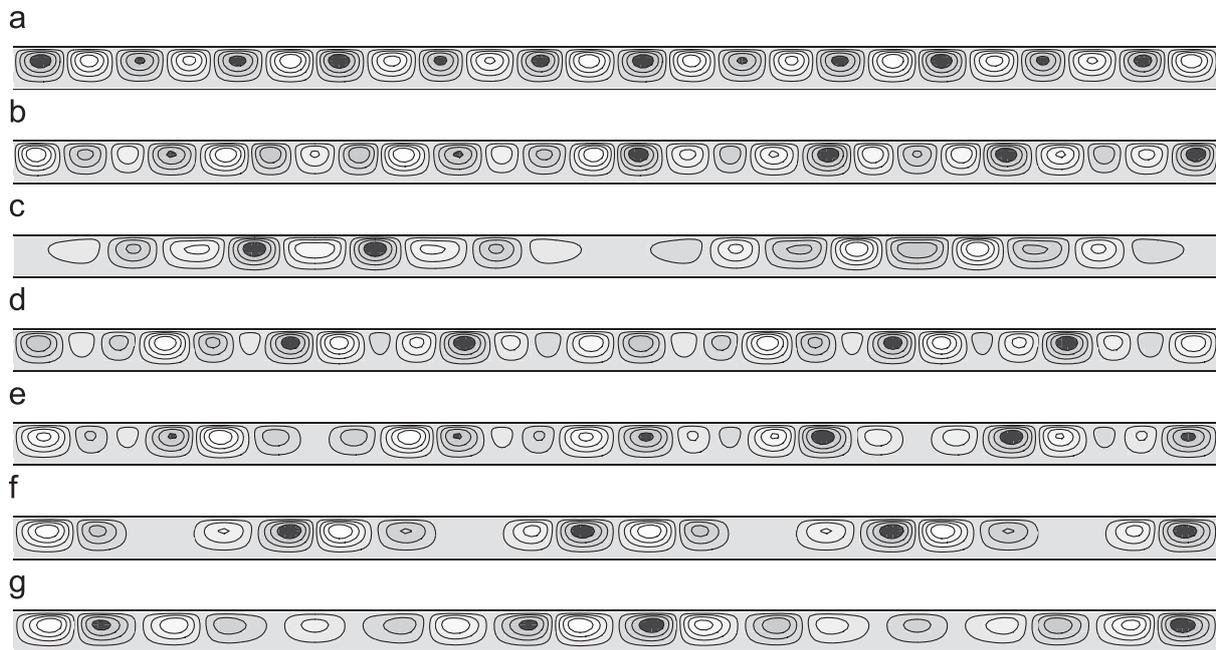


Fig. 11. Eigenmodes associated with the different secondary bifurcations along the  $P_2$  branch (Fig. 8b). Parameters are (a)  $Ma = 114.8119$ , (b)  $Ma = 110.1928$ , (c)  $Ma = 98.6935$ , (d)  $Ma = 92.1226$ , (e)  $Ma = 85.2025$ , (f)  $Ma = 82.8894$  and (g)  $Ma = 82.2163$ . Resolution is  $N_e = 20-22$ ,  $N_x = N_z = 17$ .

creation of spatially localized steady states, but the system eventually always reaches the  $P_2$  state. Fig. 14 shows two snapshots of a typical transient observed at  $Ma = 83.15$ . Observe that the localized structures form intermittently and occur spontaneously in various parts of the domain. This is in contrast to the case of binary fluid mixtures where the small Lewis number results in the presence of a slow field (the concentration) that produces a memory effect that in turn favors creation of localized structures always in the same location. Since these states are almost stationary they collapse initially to the unstable SW which are in turn unstable to TW disturbances, an instability inherited from lower values of  $Ma$  (Fig. 13a), before the process repeats. The observed behavior is undoubtedly a consequence of the absence of the TW branch at these Marangoni numbers, together with the conjectured absence or instability of the associated modulated TW. As a result there is an interval in Marangoni number in which all solutions evolve to the stable steady spatially periodic states  $P_2$  on the upper branch, but necessarily do so via a complex transient of the type shown in Fig. 14. The resulting evolution is similar to that found in binary fluid convection where the unstable SW decay into dispersive chaos, a state that appears to be locally ‘unstable’ to the formation of localized structures but globally ‘stable’.

As  $Ma$  is increased the incipient localized states persist for longer and longer times, until the localized structures persist apparently indefinitely. Interestingly, the Marangoni number at which this first occurs ( $Ma \approx 83.175$ ) lies substantially below the value corresponding to the presence of the saddle-node bifurcations on the  $L_1$ ,  $L_2$  branches identified in Fig. 5, viz.  $Ma \approx 83.35$ . It appears that this is so because the first spatially localized states that appear are not in fact time-independent. Fig. 15 shows two distinct localized states both found at  $Ma = 83.20$ . Both states are embedded in a background of small amplitude

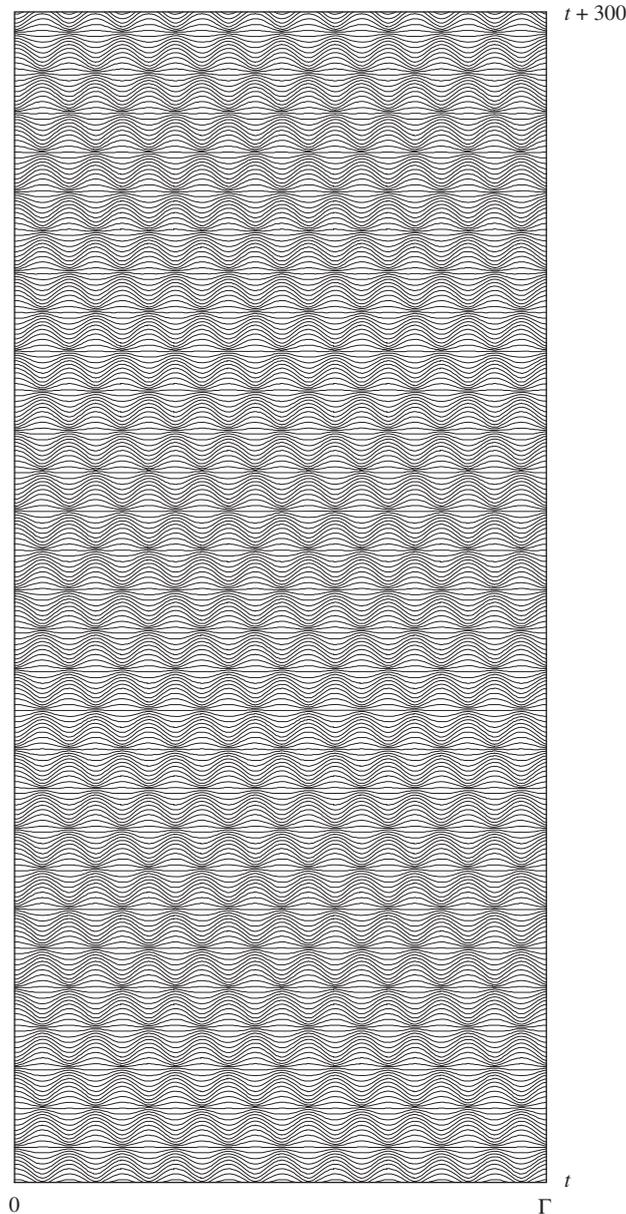


Fig. 12. Space-time plot showing the vertical velocity in the midplane for a stable standing wave solution at  $Ma = 82.0$ .

SW that are preferred over TW in the small domains left over by the localized state. The first of these states consists of two dominant pairs of rolls with downflow in the middle, while the second consists of three pairs of rolls with upflow in the middle. Both structures are almost time-independent and appear to be sustained by the small amplitude background SW. In both cases the overall state is periodic in time, and numerically stable. Note that the SW on the two sides are exactly out of phase, implying that the

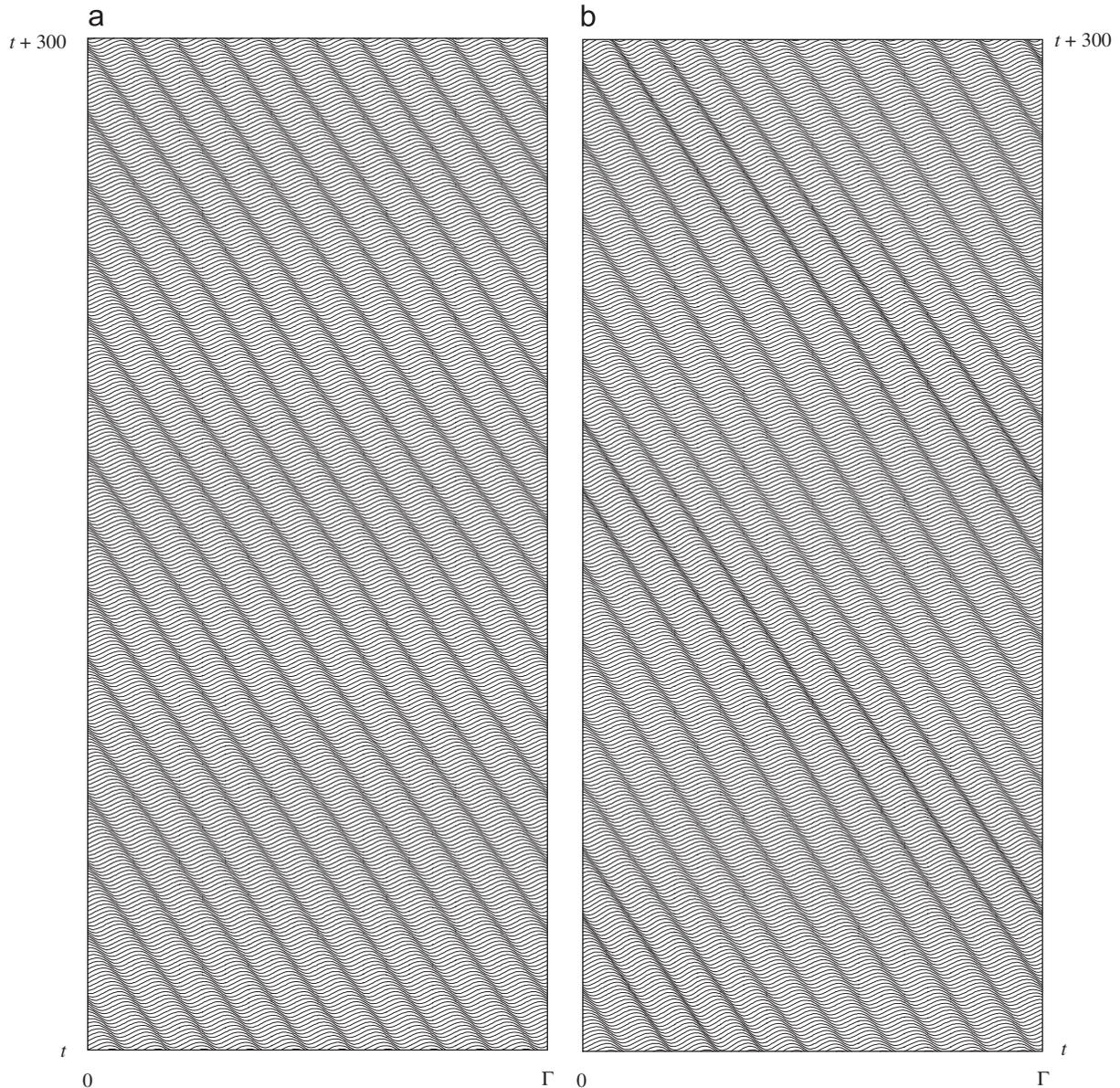


Fig. 13. Space–time plot showing (a) a stable left-traveling wave and (b) a stable modulated traveling wave solution at  $Ma=82.10$  and  $82.35$ , respectively.

whole structure executes small back and forth oscillations. We conjecture that states of this type become possible once the SW in the domain outside the localized state acquire stability, i.e., only for convectons that are sufficiently broad. As  $Ma$  increases the bistability between states with odd and even numbers of roll pairs persists but the localized states gradually broaden. For example, at  $Ma = 83.35$  (Fig. 16) the state in Fig. 15a has added a roll on either side while the state in Fig. 15b remains qualitatively unchanged.

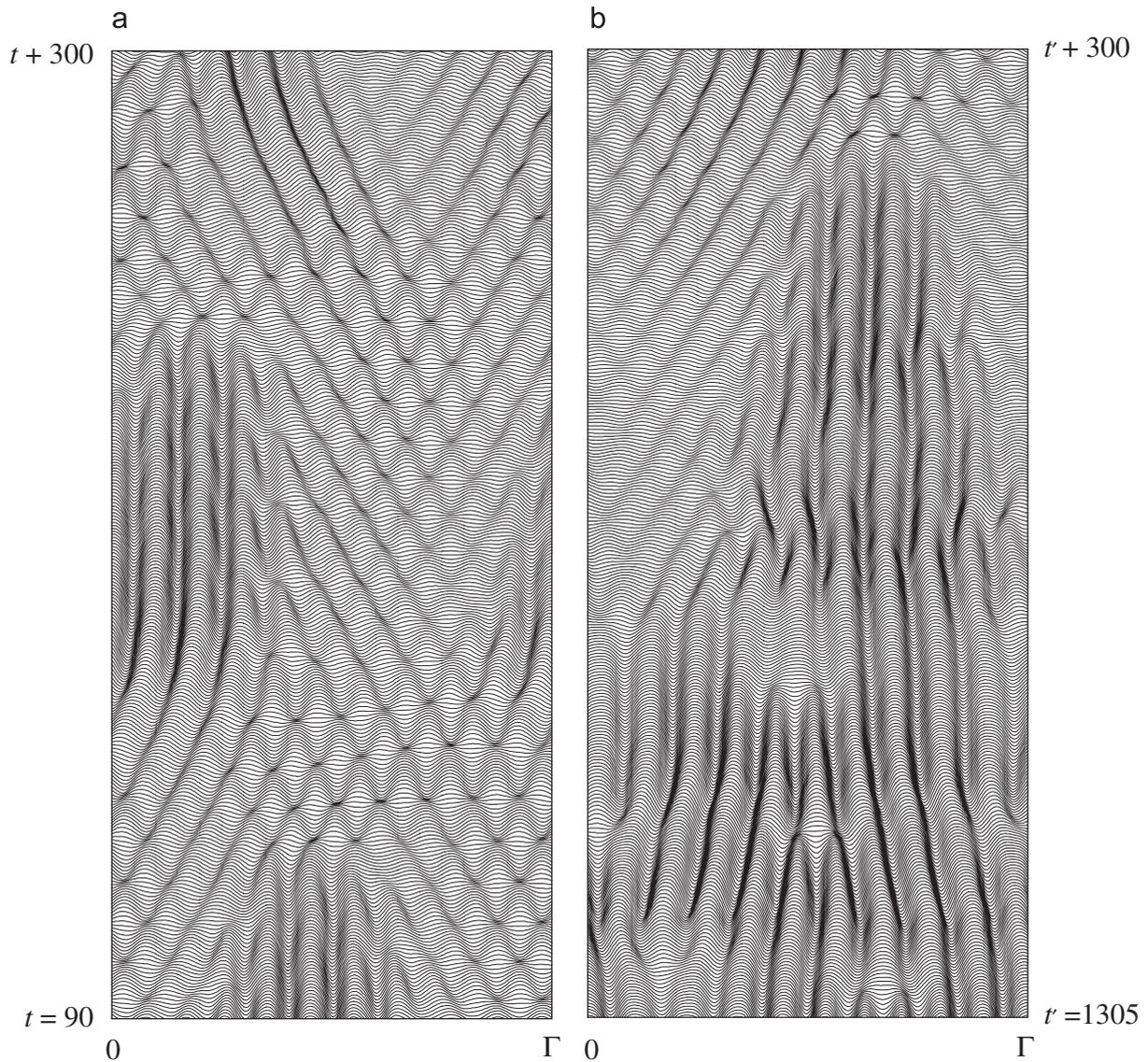


Fig. 14. Two segments of a space–time plot of the transient at  $Ma = 83.15$ , showing the episodic generation of spatially localized structures followed by their collapse into small amplitude standing waves that are in turn unstable to traveling wave perturbations.

Throughout this process the sustaining waves on either side remain out of phase and periodic in time, while their amplitude (and period) gradually decreases. Despite the evident hysteresis between the upflow and downflow states that echoes that present for the time-independent spatially localized states (Fig. 5) the transitions that preserve upflow or downflow in the center appear to be largely nonhysteretic. The overall picture suggests the presence of snaking for *time-periodic* spatially localized states resembling that already described for time-independent states (Fig. 5).

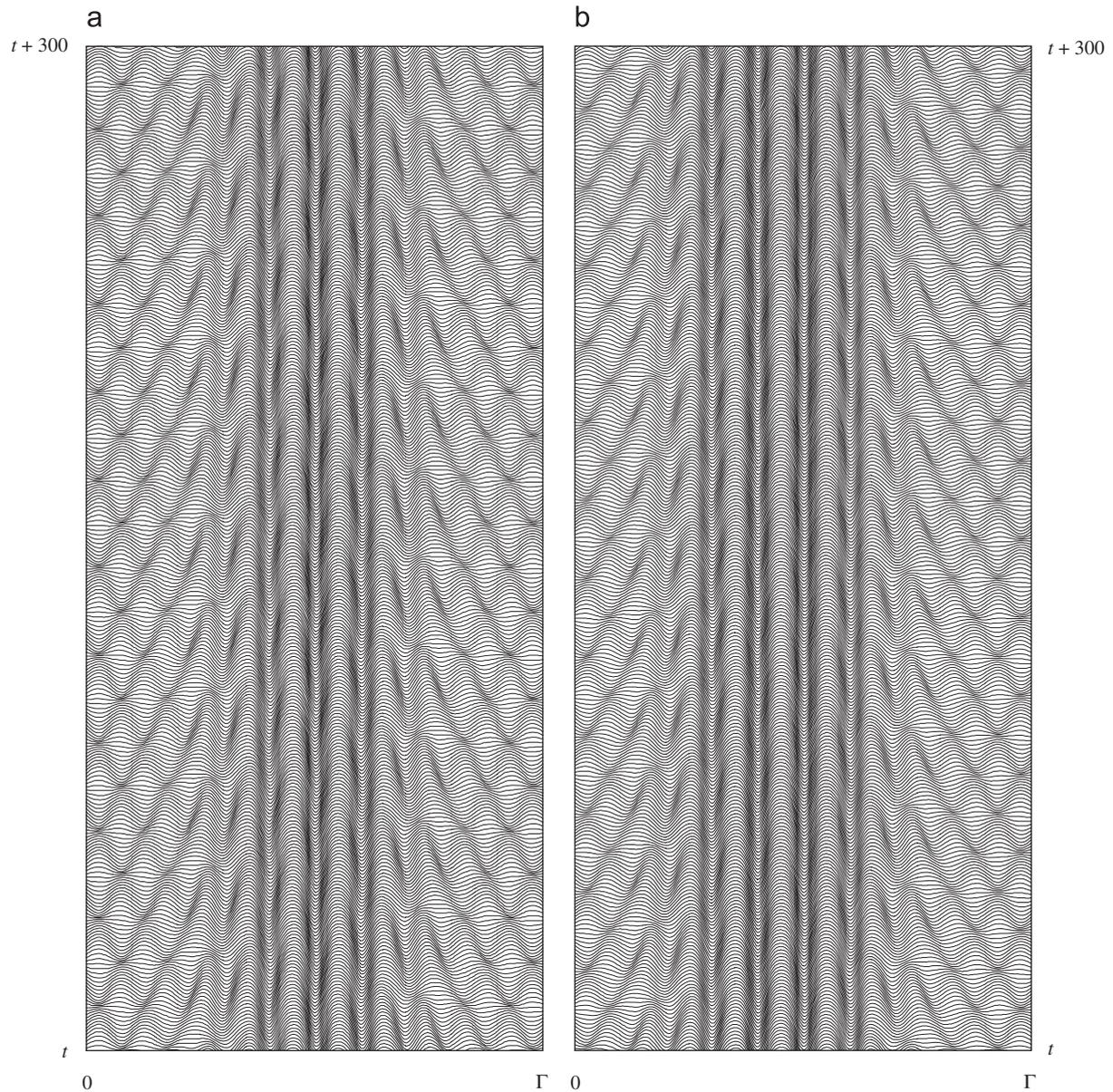


Fig. 15. Space–time plots of two distinct convectons in a background of standing waves at  $Ma = 83.20$ . State (a) consists of two roll pairs with downflow in the center; while (b) consists of three roll pairs with upflow in the center. Both states are strictly periodic in time.

Fig. 17a shows a broader localized structure with downflow in the center obtained at  $Ma = 83.45$ , starting from a narrower solution at  $Ma = 83.40$  resembling Fig. 16a. This structure is still sustained by the surrounding waves, in agreement with the stability results for steady upflow and downflow states described in the preceding section, although the amplitude of the waves is now quite small. In contrast,

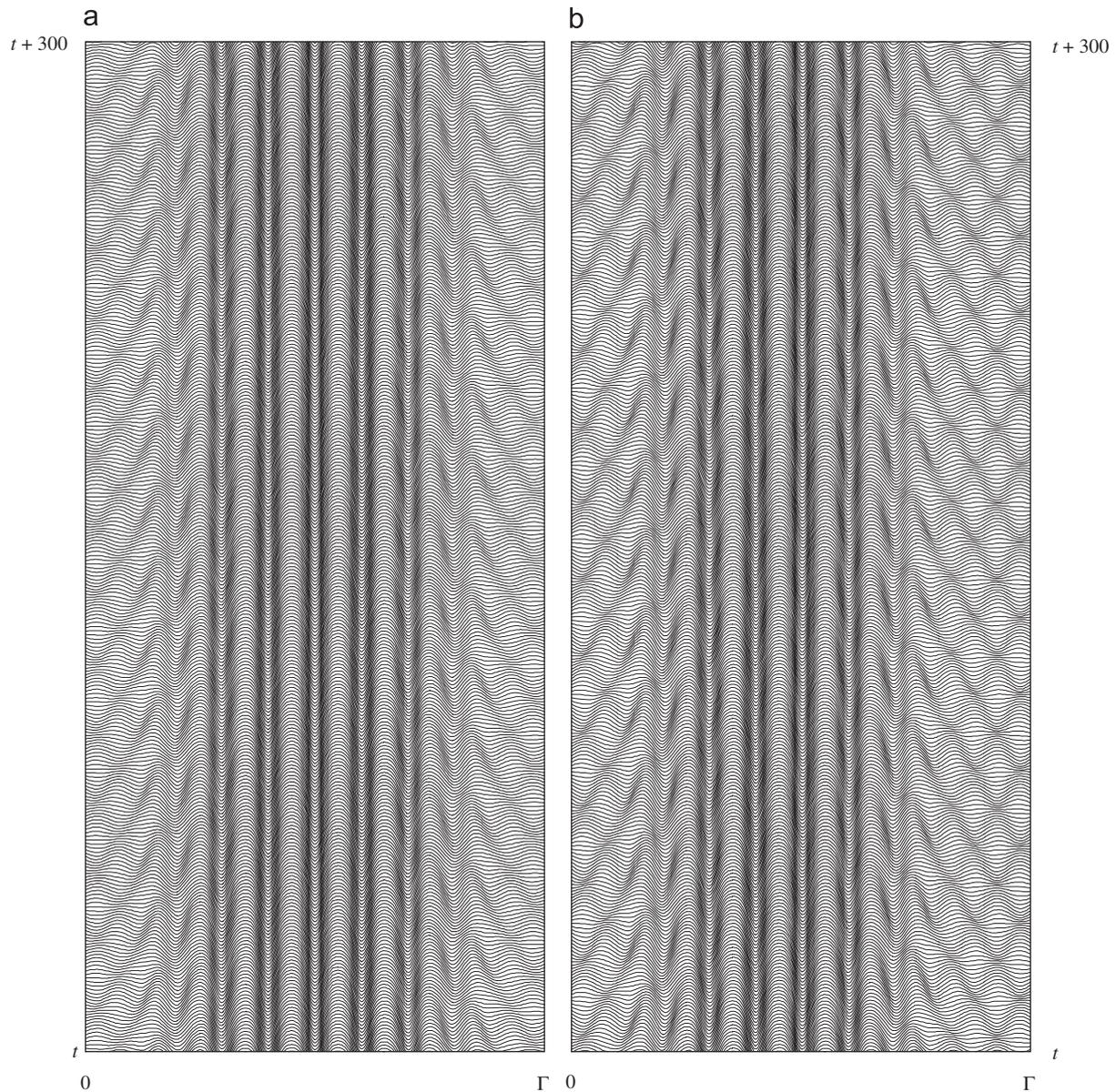


Fig. 16. Space–time plots of two distinct convectons in a background of standing waves at  $Ma = 83.35$ . Both states are strictly periodic in time.

when  $Ma = 83.40$  we have found a localized structure with upflow in the center but no sustaining SW (Fig. 17b). This state is therefore an example of one of the stable localized steady states present on the  $L_1$  branch in Fig. 5, and was obtained here from the narrower wave-sustained upflow state at  $Ma = 83.35$  (Fig. 16b) by increasing  $Ma$ . On the other hand starting from this solution and increasing  $Ma$  to 83.50 led to an instability in which the pattern rapidly nucleates new rolls at either side and evolves towards

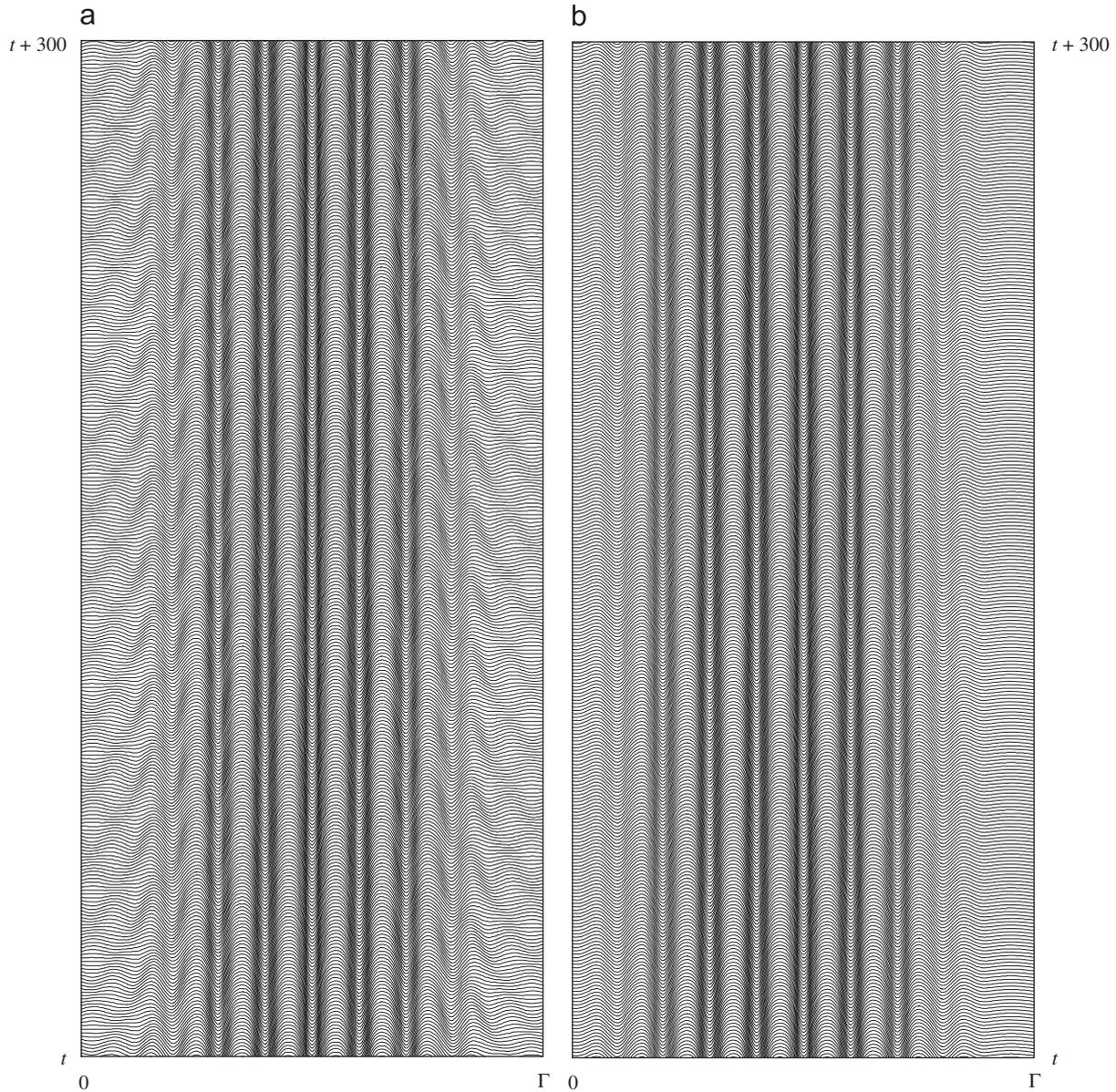


Fig. 17. Space–time plots of convectons at (a)  $Ma = 83.45$  and (b)  $Ma = 83.40$ . In (b) no background waves are present.

the  $P_2$  state, a result that is consistent with Figs. 5 and 6. Note in particular that in the pinning region identified in Fig. 5 the convectons are stable despite connecting to a conduction state that is unstable to growing oscillations. Despite this for some parameter values (e.g.,  $Ma = 83.40$ ) no waves are visible in direct numerical simulations (Fig. 17b).

It is noteworthy that as  $Ma$  increases the amplitude of the background decreases. This unexpected aspect of the problem is a consequence of the relatively small spatial period  $\Gamma$  used in the calculations.

As already mentioned the preferred length  $L_{\text{loc}}$  of the localized states decreases with decreasing  $Ma$ , and consequently the length  $L_w \equiv \Gamma - L_{\text{loc}}$  of the domain supporting waves grows. Since the critical Marangoni number for the onset of an oscillatory instability in a domain of length  $L_w$  decreases with increasing  $L_w$  (Bergeon et al., 2003) the background state is in fact more supercritical for lower values of  $Ma$  than for higher values for which the background region is quite narrow and the threshold Marangoni number therefore high. Of course once  $Ma$  is increased past the snaking region steady localized states no longer exist, and the convectons grow in length by nucleating rolls symmetrically at either end until the domain is filled, much as in other systems of this type (Batiste et al., 2006; Bergeon and Knobloch, 2007).

In the following section we provide an interpretation of these results.

#### 4. Discussion and conclusions

In this paper we have identified the presence of stable spatially localized states in Marangoni convection in a binary mixture when the separation ratio is negative. The requirement  $S_M < 0$  is responsible for the subcriticality of the primary steady branches and hence for the presence of ‘bistability’ between the conduction state and spatially periodic states required for the existence of a pinning or snaking region in spatially reversible systems on the real line.

The localized states we have found emerge from a parameter regime associated with long transients, and are typically embedded in a background of SW, in contrast to similar states present in variational systems. States of this type are present for  $83.175 < Ma < 83.50$ ; related states been seen in experiments by Kolodner on water–ethanol mixtures in a narrow annulus (Kolodner, 1993; Kolodner et al., 1995), as well as in numerical simulations of He<sup>3</sup>–He<sup>4</sup> mixtures (Batiste and Knobloch, 2005) and water–ethanol mixtures (Batiste et al., 2006; Alonso et al., 2007). In these systems, like in the present one, stable convectons are found in a regime in which the background conduction state is unstable to oscillations. In binary mixtures this fact is now understood as being due to the fact that the conduction state is only convectively unstable, while remaining stable with respect to absolute instability. Batiste et al. (2006) and Alonso et al. (2007) show that when the absolute instability threshold is exceeded the region between adjacent convectons fills with TW, a consequence of the instability of weakly nonlinear SW to TW. Thus in binary fluid convection above the absolute instability threshold convectons are embedded in a background of TW, and this state is present for larger forcing than the TW-free state. In contrast, in the present system the situation appears to be reversed: when the convectons first appear they are embedded in a background of SW, and these SW disappear with *increasing* Marangoni number. However, in the present system the explanation for the observed behavior is quite different. The convectons are embedded in a background of SW since these waves are stable with respect to TW perturbations in the domains considered. The distinction between convective and absolute instability does not enter the discussion since no propagating disturbances are involved. Instead the SW background gradually disappears for the simple reason that the localized states broaden and the remainder of the domain becomes subcritical for oscillatory instability. Whether these conclusions carry over to larger domains requires computations in much larger domains, and these do not currently permit stability computations that have proved so useful in the present work.

Despite their complexity the phenomena described in the preceding section have a simple explanation. This explanation is based on the observation that with increasing spatial period  $\Gamma$  the secondary pitchfork bifurcation on the  $P_1$  branch moves to smaller and smaller amplitude; at the same time the primary bifurcations corresponding to the branches  $P_1$  and  $P_2$  approach a common bifurcation value. Thus in the

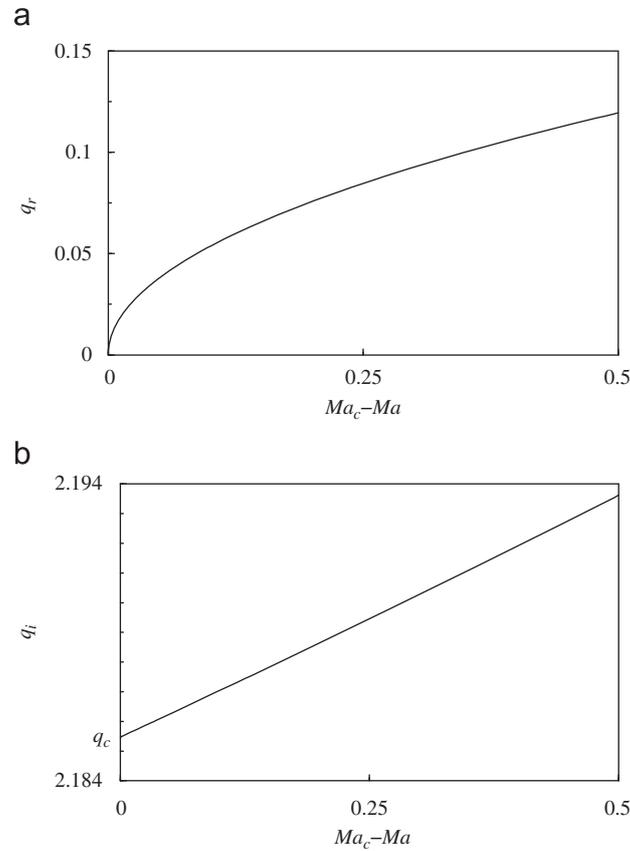


Fig. 18. The (a) real and (b) imaginary parts of the spatial growth rate  $q$  as a function of the Marangoni number  $Ma$  near onset of the primary steady state instability on the real line.

limit  $\Gamma \rightarrow \infty$  all these bifurcations coincide with the point  $Ma \equiv Ma_c$  that corresponds to the minimum of the neutral stability curve for stationary perturbations, and the spatially localized states bifurcate directly from the conduction state. This minimum in turn defines the (real) wavenumber  $q_c$  selected by linear theory in an unbounded domain, and hence the wavelength  $2\pi/q_c$  of the spatially periodic state that results from the stationary instability. On the other hand this wavenumber need not be the preferred wavenumber in the nonlinear regime. The behavior at the upper end of the snaking branches is more complex, and depends, in general, on the choice of the spatial period  $\Gamma$  (Bergeon et al., 2008): the branches can either terminate together on the same branch of periodic states as in Fig. 5 and do so below or above the saddle-node, or separately on different branches periodic states, or indeed not terminate at all.

To show that in an infinite domain the time-independent spatially localized states bifurcate *directly* from the conduction state we solve the linear stability problem on the real line, i.e., we look for solutions proportional to  $\exp qx$ , and solve for the spatial eigenvalues  $q$ . We compute only the four eigenvalues whose real part passes through zero as  $Ma$  passes through  $Ma_c \approx 114.806$ , the threshold for the onset of the primary steady state instability on the real line. Fig. 18 shows that near  $Ma > Ma_c$  the four important eigenvalues all lie on the imaginary axis while for  $Ma < Ma_c$  these eigenvalues form a quartet in the

complex  $q$  plane. At the same time the imaginary part (the spatial wavenumber) varies linearly with  $Ma$ . This eigenvalue structure is a consequence of the spatial reversibility  $R$  of Eqs. (1)–(5). At  $Ma = Ma_c$  there is a pair of purely imaginary eigenvalues  $\pm iq_c \approx \pm 2.18547i$  of double multiplicity, corresponding to wavelength  $\lambda_c \approx 2.8749$ . Evidently exponentially localized states, i.e., states that depart from the conduction state as  $x$  increases from  $x = -\infty$  and return to it as  $x \rightarrow \infty$  can only be present for  $Ma < Ma_c$ , where the conduction state is hyperbolic. Under these conditions it is possible to demonstrate the existence of such states by examining the neighborhood of the 1:1 reversible Hopf bifurcation that takes place at  $Ma = Ma_c$  (Champneys, 1998; Burke and Knobloch, 2006). The theory shows that both periodic states and two branches of distinct localized states bifurcate generically from the conduction state at  $Ma = Ma_c$ , and that both do so in the same direction, in the present case subcritically. Near a particular codimension two point this approach can capture the snaking region as well (Kozyreff and Chapman, 2006).

As  $Ma$  decreases the localized states produced at  $Ma_c$  contract to an  $O(1)$  width and grow to an  $O(1)$  amplitude, before beginning to snake. In the limit of infinitely large  $\Gamma$  the localized states high up the ‘snake’ resemble a bound state of two fronts, the left one connecting the conduction state to the spatially periodic state and vice versa on the right. A state of this type corresponds to the simultaneous formation of a pair of heteroclinic connections, between the conduction state and the periodic state, and back to the conduction state. These connections are related by the symmetry  $R$ , and correspond to the bounding fronts. Such pairs of heteroclinic connections are present throughout the snaking region. In variational systems the presence of the resulting time-independent structures can be attributed to the *pinning* of the bounding fronts to the periodic structure within. It is this pinning that is responsible for the multiplicity of time-independent spatially localized states within the snaking region, as well as for its finite extent in the Marangoni number  $Ma$ .

In variational systems the snaking or pinning region is organized around the so-called Maxwell point at which the spatially periodic state has the same energy as the conduction state. As a result the pinning region can be thought of as the broadening of the Maxwell point due to the pinning of the fronts at either end of the localized states to the periodic structure within. Moreover each localized state is characterized by different energy, although all stable localized states correspond to local energy minima. In the presence of noise the system can ‘tunnel’ from higher ‘metastable’ minima to minima with lower energy, i.e., from wider localized states to narrow localized states. The tunneling rate depends of course on the noise level as well as on the energy difference between adjacent states. As the Marangoni number is decreased shorter, more compact convectons, become energetically preferred, and the incident waves push the system in this direction (Sakaguchi and Brand, 1996; Aranson et al., 2000; Clerc et al., 2005). Thus the wave background is responsible for selecting, at each value of the Marangoni number, a (stable) localized state with upflow in the center and a (stable) localized state with downflow in the center, each with a *preferred* length. Related behavior has been noted in experiments on buoyancy-driven convection in binary fluids (Kolodner, 1993); indeed, we expect our results to describe qualitatively the corresponding Marangoni–Bénard problem provided buoyancy effects remain weak. It is of interest to note that in stochastic variational systems the location of the resulting ‘phase transition’ is also determined by a Maxwell construction (Sastry and Hijab, 1981).

It is perhaps unexpected that the behavior of the present system is so similar to that of binary fluid convection and natural doubly diffusive convection. Evidently this is so because all three systems are spatially reversible in the appropriate sense, all three exhibit subcritical bifurcations to spatially periodic states thereby generating bistability between the conduction state and a spatially periodic state. All the

systems are also of sufficiently high order in the extended variable that they exhibit a reversible Hopf bifurcation with 1:1 resonance (in space). An example is described in Fig. 18. Under these conditions spatially localized states bifurcate from the primary bifurcation point and do so subcritically as well. The snaking region is the result of a transverse intersection between the unstable manifold of the conduction state (in space) and the stable manifold (in space) of the periodic state viewed as a periodic orbit in phase space. Once this structure forms the rest of the behavior follows. Moreover, in cases where the primary steady state bifurcation is preceded by a Hopf bifurcation, the snaking region is preceded by relaxation oscillations, and destroyed by the unpinning of the bound fronts as the forcing increases. In some cases the latter transition may be complicated by the presence of waves between adjacent convectons, but the presence of such waves is largely benign, and can be understood on the basis of simple linear notions. Indeed, we may think of the waves as a superposition of left- and right-TW of the form

$$\operatorname{Re}\{A(x) e^{ikx+i\omega t} + B(x) e^{-ikx+i\omega t}\}, \quad (7)$$

where  $A(x)$ ,  $B(x)$  are complex amplitudes. The numerical results shown in Figs. 15 and 16 indicate that away from the convecton  $|A(x)|$ ,  $|B(x)|$  become equal, producing standing oscillations, while near the left (right) boundary  $|B(x)| > |A(x)|$  ( $|B(x)| < |A(x)|$ ) indicating that right-TW dominate near the left boundary, while left-TW dominate near the right boundary. Thus the waves always impinge on the convecton thereby helping to sustain the state even outside the pinning region.

## Acknowledgments

This work was supported in part by a CNRS Projet International de Cooperation Scientifique (PICS 3471) and by the National Science Foundation under Grant DMS-0605238. We are grateful to J. Burke for helpful discussions.

## References

- Alonso, A., Batiste, O., Meseguer, A., Mercader, I., 2007. Complex dynamical states in binary mixture convection with weak negative Soret coupling. *Phys. Rev. E* 75, 026310.
- Aranson, I.S., Malomed, B.A., Pismen, L.M., Tsimring, L.S., 2000. Crystallization kinetics and self-induced pinning in cellular patterns. *Phys. Rev. E* 62, R5.
- Batiste, O., Knobloch, E., 2005. Simulations of localized states of stationary convection in  $^3\text{He}$ – $^4\text{He}$  mixtures. *Phys. Rev. Lett.* 95, 244501.
- Batiste, O., Knobloch, E., Alonso, A., Mercader, I., 2006. Spatially localized binary-fluid convection. *J. Fluid Mech.* 560, 149.
- Bergeon, A., Knobloch, E., 2004. Oscillatory Marangoni convection in binary mixtures in square and nearly square containers. *Phys. Fluids* 16, 360.
- Bergeon, A., Knobloch, E., 2007. Spatially localized states in natural doubly diffusive convection. *Phys. Fluids*, in press.
- Bergeon, A., Henry, D., Ben Hadid, H., 1994. Marangoni–Bénard instability in microgravity conditions with Soret effect. *Int. J. Heat Mass Transfer* 37, 1545.
- Bergeon, A., Henry, D., Ben Hadid, H., 1995. Analytical linear stability analysis of Marangoni instability with Soret effect. *Microgravity Q* 37, 123.
- Bergeon, A., Henry, D., Ben Hadid, H., Tuckerman, L.S., 1998. Marangoni convection in binary mixtures with Soret effect. *J. Fluid Mech.* 375, 143.
- Bergeon, A., Mollaret, R., Henry, D., 2003. Soret effect and slow mass diffusion as a catalyst for overstability in Marangoni flows. *Heat Mass Transfer* 40, 105.

- Bergeon, A., Burke, J., Knobloch, E., Mercader, I., 2008. Eckhaus instability and homoclinic snaking. Preprint.
- Blanchflower, S., 1999. Magnetohydrodynamic convectons. *Phys. Lett. A* 261, 74.
- Burke, J., Knobloch, E., 2006. Localized states in the generalized Swift–Hohenberg equation. *Phys. Rev. E* 73, 056211.
- Castillo, J.L., Velarde, M.G., 1978. Thermal diffusion and the Marangoni instability of a two component fluid layer heated from below. *Phys. Lett. A* 66, 489.
- Castillo, J.L., Velarde, M.G., 1982. Buoyancy-thermocapillary instability: the role of interfacial deformation in one- and two-component fluid layers heated from below or above. *J. Fluid Mech.* 125, 463.
- Champneys, A.R., 1998. Homoclinic orbits in reversible systems and their applications in mechanics, fluids and optics. *Physica D* 112, 158.
- Clerc, M.G., Falcon, C., Tirapegui, E., 2005. Additive noise induces front propagation. *Phys. Rev. Lett.* 94, 148302.
- Deville, M., Fischer, P.F., Mund, E.H., 2002. *High-order Methods for Incompressible Fluid Flow*. Cambridge University Press, Cambridge.
- Funaro, D., 1991. *Polynomial Approximation of Differential Equations*. Springer, New York.
- Karniadakis, G.E., Israeli, M., Orszag, S.A., 1991. High-order splitting method for the incompressible Navier–Stokes equations. *J. Comput. Phys.* 97, 414.
- Kolodner, P., 1993. Coexisting traveling waves and steady rolls in binary-fluid convection. *Phys. Rev. E* 48, R665.
- Kolodner, P., Slimani, S., Aubry, N., Lima, R., 1995. Characterization of dispersive chaos and related states of binary-fluid convection. *Physica D* 85, 165.
- Kozyreff, G., Chapman, S.J., 2006. Asymptotics of large bound states of localized structures. *Phys. Rev. Lett.* 97, 044502.
- Mamun, C.K., Tuckerman, L.S., 1995. Asymmetry and Hopf bifurcation in spherical Couette flow. *Phys. Fluids* 7, 80.
- Moore, D.R., Weiss, N.O., 2000. Resonant interactions in thermosolutal convection. *Proc. R. Soc. London Ser. A* 456, 39.
- Prat, J., Mercader, I., Knobloch, E., 1998. Resonant mode interactions in Rayleigh–Bénard convection. *Phys. Rev. E* 58, 3145.
- Sakaguchi, H., Brand, H.R., 1996. Stable localized solutions of arbitrary length for the quintic Swift–Hohenberg equation. *Physica D* 97, 274.
- Sastry, S., Hijab, O., 1981. Bifurcation in the presence of small noise. *Syst. Control Lett.* 1, 159.
- Tuckerman, L.S., 1989. Steady-state solving via Stokes preconditioning: recursion relations for elliptic operators. In: Dwoyer, D.L., Hussaini, M.Y., Voigt, R.G. (Eds.), *Proceedings of the Eleventh International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, Springer, New York, p. 573.
- Yochelis, A., Burke, J., Knobloch, E., 2006. Spatially localized oscillating states in periodically forced dissipative systems. *Phys. Rev. Lett.* 97, 254501.

# Bibliographie

- [1] A. ALONSO, O. BATISTE, A. MERSEGUER & I. MERCADER Complex dynamical states in binary mixture convection with weak negative Soret coupling. *Phys. Rev. E* **75**, 026310 (2007).
- [2] A. BERGEON, D. HENRY, H. BEN HADID & L. S. TUCKERMAN Stability analysis of Marangoni convection in binary mixtures subjected to the Soret effect. *ASME HTD* **290**, 63 (1994).
- [3] A. BERGEON D. HENRY & H. BEN HADID Analytical linear stability analysis of Marangoni instability with Soret effect. *Microgravity Quat.* **5**, 123 (1995).
- [4] A. BERGEON, D. HENRY, H. BEN HADID & L. S. TUCKERMAN Marangoni convection in binary mixtures with Soret effect. *J. Fluid Mech.* **375**, 143 (1998).
- [5] A. BERGEON, R. MOLLARET & D. HENRY Soret effect and slow mass diffusion as a catalyst for overstability in Marangoni-Bénard flows. *Heat Mass Trans.* **40**, 105 (2003).
- [6] A. BERGEON & E. KNOBLOCH Spatially localized states in natural doubly diffusive convection.. *Phys. Fluids* **20**, 034102 (2008).
- [7] A. BERGEON & E. KNOBLOCH Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection. *Physica D*, **237**(8), 1139 (2008).
- [8] A. BERGEON, J. BURKE, E. KNOBLOCH & I. MERCADER Eckaus instability and homoclinic snaking. preprint,(2008).
- [9] O. BATISTE & E. KNOBLOCH, Simulations of localized states of stationary convection in  $^3\text{He}$ - $^4\text{He}$  mixtures. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 244501 (2005).
- [10] O. BATISTE, E. KNOBLOCH , A. ALONSO & I. MERCADER, Spatially localized binary fluid convection. *J. Fluid Mech.* **560**, 149 (2006).
- [11] J. K. BHATTACHARJEE Marangoni convection in binary liquids. *Phys. Rev. E* **50**, 1198 (1994).
- [12] S. M. BLANCHFLOWER Magneto-hydrodynamic convectons. *Phys. Lett. A* **361**, 74 (1999).
- [13] J. BURKE & E. KNOBLOCH Localized states in the generalized Swift-Hohenberg equation. *Phys. Rev. E* **73**, 056211 (2006).
- [14] J. BURKE & E. KNOBLOCH Snakes and ladders : Localized states in the Swift-Hohenberg equation. *Phys. Lett. A* **360**, 681 (2007).
- [15] J. BURKE & E. KNOBLOCH Homoclinic snaking : Structure and stability. *Chaos* **17**, 037102 (2007).
- [16] A. R. CHAMPNEYS, Homoclinic orbits in reversible systems and their applications in mechanics, fluids and optics. *Physica D* **112**, 158 (1998).
- [17] C. F. CHEN & C. E. CHEN. Effect of surface tension on the stability of a binary fluid layer under reduced gravity. *Phys. Fluids* **6**, 1482 (1994).

- [18] J. D. CRAWFORD & E. KNOBLOCH Symmetry, symmetry-breaking bifurcations in fluid dynamics. *Ann. Rev. Fluid Mech.* **23**, 341 (1991).
- [19] S. R. DE GROOT & P. MAZUR Non Equilibrium thermodynamics. *North Holland, Amsterdam*, 1969.
- [20] E. DOEDEL, R. C. PAFFENROTH, A. R. CHAMPNEYS, T. F. FAIRGRIEVE, Y. A. KUZNETSOV, B. E. OLDEMAN, B. SANDSTEDE & X. WANG AUTO97 : Continuation and bifurcation software for ordinary differential equations. Concordia University, <http://indy.cs.concordia.ca/auto/main.html>, 2002.
- [21] S. FAUVE & O. THUAL Solitary waves generated by subcritical instabilities in dissipative systems. *Phys. Rev. Lett.* **64**, 282 (1990).
- [22] M. F. HILALI, S. MÉTENS, P. BORCKMANS & G. DEWEL Parttern selection in the generalized Swift-Hohenbergh model. *Phys. Rev. E* **51**, 2046 (1995).
- [23] G. W. HUNT, G. J. LORD & A. R. CHAMPNEYS Homoclinic and heteroclinic orbits underlying the post-buckling of axially-compressed cylindrical shells. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* **170**, 239 (1999).
- [24] D. T. HURLE & E. JAKEMAN Soret driven thermosolutal convection. *J. Fluid Mech.* **47**, 667 (1971).
- [25] G. IOOSS & M. C. PÉROUÈME Perturbed homoclinic solutions in reversible 1 :1 resonance vector fields. *J. Diff. Eq.* **102**, 62 (1993).
- [26] E. KNOBLOCH Spatially localized structures in dissipative systems : open problems. *Nonlinearity* **21**, 45 (2008).
- [27] P. KOLODNER, J.A. GLAZIER & H. WILLIAMS Dispersive chaos ans related states of binary convection. *Phs. Rev. Lett.* **65**, 1579 (
- [28] P. KOLODNER Coexisting traveling waves and steady rolls in binary-fluid convection. *Phys. Rev. E* **48**, R665 (1993).
- [29] P. KOLODNER, S. SLIMANI, N. AUBRY & R. LIMA Characterization of dispersive chaos and related states of binary-fluid convection. *Physica D* **85**, 165 (1995).
- [30] C. R. LAING & W. C. TROY, PDE methods for nonlocal models. *SIAM J. Appl. Dyn. Sys.* **2**, 487 (2003).
- [31] J. R. A. Pearson On convective cells induced by surface tension. *J. Fluid Mech.* **4**, 489 (1958).
- [32] Y. POMEAU Front motion, metastability and subcritical bifurcations in hydrodynamics. *Physica D* **23**, 3 (1986).
- [33] J. PRAT, I. MERCADER & E. KNOBLOCH, Resonant mode interactions in Rayleigh-Bénard convection. *Phys. Rev. E* **58**, 3145 (1998)
- [34] J. R. L. SKARDA, D. JACQMIN, & F. E. MCCAUGHAN, Exact and approximate solutions to the double-diffusive Marangoni-Bénard problem with cross-diffusive terms. *J. Fluid Mech.* **366**, 109–133, 1998.
- [35] M. TLIDI, P. MANDEL & M. HAELTERMAN Spatiotemporal patterns and localized structures in nonlinear optics. *Phys. Rev. E* **56**, 6524 (1997).
- [36] L. S. TUCKERMAN Thermosolutal and binary fluid convection as a 2 x 2 matrix problem. *Physica D* **156**, 325–363, 2001.
- [37] S. VAN VAERENBERGH, P. COLINET, PH. GEORIS & J. C. LEGROS Preparatory results for a Marangoni-Bénard experiment with Soret effect in micro-gravity conditions. *Unpublished*, 1991.

- [38] P. B. UMBANHOWAR, F. MELO F & H. L. SWINNEY Localized excitations in a vertically vibrated granular layer *Nature* **382**, 793 (1996)

# Chapitre 6

## Écoulements et transport entre surfaces texturées

Nous étudions dans ce chapitre l'influence des effets inertiels sur les trajectoires Lagrangiennes d'un écoulement incompressible confiné entre deux surfaces texturées. La dispersion des traceurs passifs dans la direction transverse à l'écoulement principal, résulte de l'effet combiné des contraintes géométriques et des termes advectifs inertiels.

Nous présentons tout d'abord en 6.1 le contexte bibliographique de cette étude et en 6.2 le système modèle que nous avons étudié. Des aspects plus techniques relatifs aux outils numériques développés pour ce travail sont ensuite détaillés en 6.3. Dans une dernière partie 6.4 nous abordons enfin les résultats numériques obtenus.

### 6.1 Le contexte

Ces quinze dernières années, un intérêt pour les problèmes de micro-fluidique est né d'un nouvel enjeu technologique : celui de la miniaturation. Les progrès accomplis ont engendré une forte activité motivée par de nombreuses applications. Les laboratoires sur puce (Labs-on-Chip) réduisent par leur miniaturisation le temps d'analyse, le volume de fluide mis en jeu et les coûts. En génie des procédés, la miniaturisation rend possible le contrôle des réactions (chimiques et/ou biochimiques), améliore la sélectivité et le rendement des réactions. On pourra trouver dans la référence [27] une revue récente des différentes applications des systèmes micro-fluidiques et des futurs enjeux dans ce domaine. Cet article, souligne en particulier l'importance de la découverte et de l'exploitation de nouveaux phénomènes opérant dans les fluides aux petites échelles. C'est dans ce contexte que nous nous intéressons dans ce chapitre, à la structure de l'écoulement de fluides dans des micro-canaux texturés.

Plus précisément, nous étudions ici les propriétés de transport des écoulements entre deux surfaces texturées formant un canal dont l'ouverture et les variations d'ouverture sont faibles. Dans la limite des nombres de Reynolds nuls, ces écoulements sont décrits par l'approximation de lubrification qui permet de lier le flux au gradient de pression par une équation de type Darcy. Lorsque le champ d'ouverture varie de manière périodique dans la direction de l'écoulement moyen, l'écoulement possède des propriétés de symétrie qui garantissent que les coordonnées transverses d'un traceur passif demeurent inchangées

à l'issue d'une période. Un précédent travail dû à Lo Jacono *et al.* [19] a montré que l'effet combiné de faibles corrections inertielles et de la texturation peut en revanche briser cette invariance et induire une déviation significative des trajectoires dans la direction transverse à l'écoulement. C'est précisément ce que nous avons cherché à mieux quantifier en fonction de la géométrie choisie et du poids des termes inertiels. Dans cette étude, on ne s'intéresse qu'aux propriétés lagrangiennes de l'écoulement et l'on ne considère donc pas la diffusion moléculaire. Cette approximation correspond à un nombre de Péclet infini (ce nombre est le rapport entre le transport de masse dû à la convection et celui dû à la diffusion). C'est également la situation rencontrée dans de nombreux systèmes expérimentaux [22].

Les travaux sur lesquels nous concentrons la revue bibliographique présentée ci-dessous sont les études portant sur les écoulements à nombres de Reynolds modérés ( $Re < 100$ ). En particulier dans la limite où  $Re \ll 1$ , le principe de réversibilité de Stokes impose de développer des stratégies originales pour complexifier l'écoulement dans le but de permettre le mélange<sup>1</sup> et l'advection chaotique en est un concept central. Ce terme, introduit par Aref [2] caractérise un écoulement laminaire suffisamment complexe pour que les trajectoires de traceurs passifs soient extrêmement sensibles aux conditions initiales. Un tel écoulement ne s'obtient pas facilement et Aref [2] indique en particulier que le nombre de degrés de liberté du système doit y être suffisamment important. Dans l'exemple bidimensionnel qu'il présente, l'écoulement est généré par deux tourbillons ponctuels fixes, co- ou contra-rotatifs. Lorsque les deux tourbillons sont actionnés simultanément, l'écoulement répartit les traceurs passifs le long des lignes de courant. En introduisant un degré de liberté supplémentaire, ici le temps, l'écoulement peut engendrer une répartition très différente avec des régions qui portent la trace du mouvement chaotique des trajectoires suivies par les traceurs et dans lesquelles la distribution de traceurs est plus uniforme. Pour introduire ce degré de liberté supplémentaire, les tourbillons qui pilotent le mouvement du fluide sont actionnés alternativement toutes les demi-périodes, d'où le nom de "blinking vortex" donné à ce dispositif. Ce premier travail sur l'advection chaotique a ouvert différentes questions sur ses conditions d'existence et sur sa caractérisation. En se référant au livre d'Ottino [23], il est établi qu'une des conditions nécessaires est la non-intégrabilité des trajectoires. L'intégrabilité est ici à comprendre au sens mathématique où il est possible de calculer suffisamment de constantes du mouvement (hamiltonien, intégrale première) pour prédire qualitativement le mouvement dans l'espace des phases. La présence d'advection chaotique est interprétée par Aref [2] par l'existence de points fixes elliptiques et hyperboliques autour desquels les filaments de fluides sont respectivement étirés et repliés [23].

Dans la limite des faibles nombres de Reynolds, deux familles de mélangeurs ont été développées suite à ces études sur l'advection chaotique. Il s'agit des mélangeurs actifs actionnés par des systèmes extérieurs qui génèrent un écoulement instationnaire et les mélangeurs passifs créant naturellement par les géométries dans lesquelles ils prennent place, un écoulement ayant la propriété de créer l'advection chaotique. Les premiers sont souvent 2D (éventuellement 3D) avec un forçage périodique de l'écoulement, les seconds sont plutôt des écoulements tridimensionnels dans des géométries complexes. Les articles

---

<sup>1</sup>Il faut noter que les systèmes à faibles nombres de Reynolds ne sont pas exclusivement liés aux dimensions caractéristiques rencontrées en micro-fluidique mais peuvent aussi résulter d'une forte viscosité des liquides considérés comme dans certains exemples que nous discuterons.

de Aref [3, 4] présentent une revue des travaux fondateurs sur le mélange par advection chaotique.

### 6.1.1 Les mélangeurs actifs

Les mélangeurs actifs sont ceux pour lesquels une action extérieure à l'écoulement, généralement dépendante du temps, est nécessaire pour l'obtention du mélange.

Parmi les travaux traitant des mélangeurs actifs, on peut citer les travaux de Chaiken *et al.* [7] développant un système nommé "journal bearing flow". Pour ce problème l'écoulement est généré par le mouvement relatif de deux cylindres imbriqués, le cylindre intérieur étant décentré par rapport au cylindre extérieur (Dans le même esprit, on peut se référer au problème de l'écoulement dans une cavité doublement entraînée [8, 23]). Le mouvement relatif des cylindres peut être contrôlé et l'écoulement être instationnaire. Dans le cas stationnaire, il est en particulier possible de calculer un Hamiltonien - ici la fonction de courant scalaire - qui décrit le champ de vitesse et les trajectoires de traceurs passifs et dans certaines circonstances, le régime instationnaire peut s'interpréter comme la perturbation d'un système Hamiltonien. Les trajectoires dans l'espace des phases correspondent alors à un enchevêtrement de variétés stables et instables qui séparent le domaine fluide en régions très différentes. Dans certaines, on ne retrouve aucun traceur passif tandis que dans d'autres, la répartition des traceurs est chaotique. Les premières, que l'on appelle aussi "îles isolées" (ou tore de KAM) entourent des points fixes du système, et leurs frontières séparent les domaines chaotiques se prêtant bien au mélange des domaines non-chaotiques. La qualité du mélange que l'on peut obtenir dans ce type de système a été en particulier étudiée par Amon *et al.* [1] et Lee *et al.* [17].

Inspiré de systèmes à plus grande échelle, les "rotated arc mixer" [20, 21] sont un type de micromélangeurs actifs et efficaces dont le design correspond à une utilisation intelligente de l'écoulement dans la section transverse. Le système correspond à deux cylindres concentriques évidés dont les rayons caractéristiques sont voisins. Le cylindre extérieur est mis en rotation et un écoulement produit dans le cylindre intérieur par un gradient de pression imposé. Ce dernier étant percé à différents endroits stratégiques, le fluide à l'intérieur est entraîné localement par le cylindre extérieur ce qui induit des changements alternatifs de la position relative des lignes de courant dans la section transverse. Un autre principe exploité par les micromélangeurs actifs est la dispersion de Taylor obtenu au sein des fluides agités à haute fréquence [11] phénomène dont nous ne tiendrons pas compte dans le cadre de cette thèse; les écoulements que nous étudions étant stationnaires.

### 6.1.2 Les mélangeurs passifs

Les mélangeurs passifs correspondent à des systèmes pour lesquels aucune intervention extérieure à l'écoulement n'est nécessaire pour l'obtention du mélange. Ces systèmes sont particulièrement intéressants car leur mise en oeuvre est simple et leur coût modéré.

Ces procédés sont souvent associés à des écoulements dans des géométries suffisamment complexes pour qu'un écoulement généré par un gradient de pression stationnaire engendre de l'advection chaotique. Différentes configurations ont été proposées parmi lesquelles on peut citer les canaux découpés (partitioned pipes) dans lesquels le canal est régulièrement séparé transversalement en régions distinctes [9, 14, 16, 18]. Le même principe peut-

être exploité si l'écoulement se sépare de lui même en zones distinctes par des effets hydrodynamiques. C'est le cas dans des écoulements fermés dans des gouttes sphériques [15], où dans des canaux courbés par les tourbillons inertiels de Dyne [5, 13].

Dans le contexte des micromélangeurs, l'advection chaotique a inspiré de nombreux travaux en raison des nombres de Reynolds faibles qui proscrivent l'apparition des régimes turbulents. Une revue récente est présentée dans l'article de Nguyen & Wu [22]. En général, localement la structure de l'écoulement dans la section transverse est trop simple pour induire rapidement un mélange efficace des constituants. Un des scénarii envisagés consiste alors à modifier périodiquement la géométrie de manière à détruire les séparatrices, véritables barrières au mélange. C'est en particulier ce qu'utilisent Stroock *et al.* [25] pour générer un mélange efficace au sein d'un microcanal dont les dimensions caractéristiques sont de l'ordre de la centaine de micromètres.

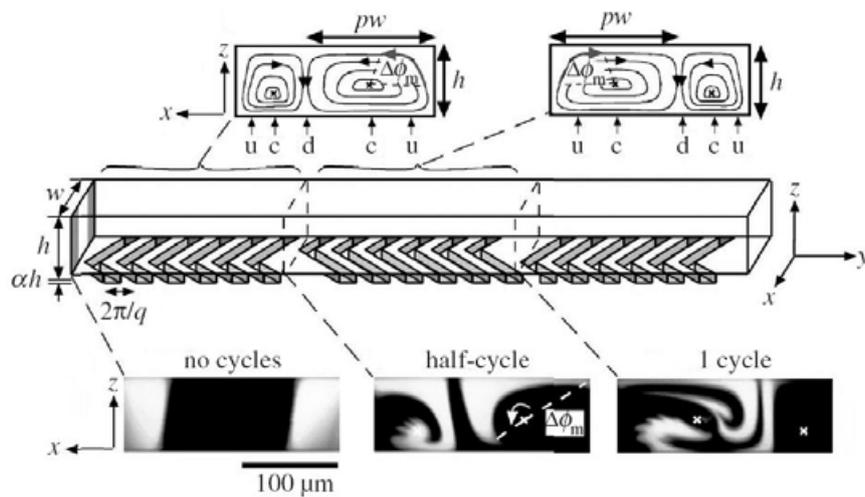


FIG. 6.1 – En haut : visualisation des lignes de courant dans la section transverse. Au milieu : représentation du micro-canal dont la paroi inférieure est rainurée. En bas : visualisation de l'écoulement dans la section transverse toute les demi-périodes. Image extraite de [25].

Sur la figure 6.1, on peut voir que disposer des chevrons sur la surface inférieure du canal permet de générer un écoulement dans la section transverse formé de deux tourbillons contra-rotatifs coaxiaux à la direction longitudinale (figure 6.1) dont les tailles caractéristiques dans la direction transverse dépendent de la position de la pointe du chevron. Autour des points fixes elliptiques repérés par (c) sur la figure 6.1, les filaments fluides sont étirés. En modifiant périodiquement la position de la pointe, on modifie la position de la séparatrice (repérée par (d) sur la figure 6.1) entre les deux tourbillons ce qui crée des zones de repliement. La présence de zones d'étirement et de repliement constitue l'un des ingrédients fondamentaux du mélange par advection chaotique.

Au travers des quelques exemples que nous venons de présenter, on voit que l'élaboration d'un mélangeur requiert une compréhension précise et quantitative de l'hydrodynamique de l'écoulement que l'on va par la suite perturber de sorte à favoriser le mélange. C'est dans ce contexte que nous cherchons à étudier un écoulement original dont la complexité est liée à la prise en compte d'effets faiblement inertiels et de complexité de la géométrie.

## 6.2 Modélisation

Le système modèle que nous étudions a été tout d'abord étudié par Lo Jacono *et al.* [19]. Nous rappelons dans ce paragraphe les principaux résultats concernant l'approximation réalisée sur le calcul du champ de vitesse. La géométrie retenue (figure 6.2) est un canal formé d'une succession de cellules élémentaires identiques assemblées dans la direction  $x$ . L'une de ces cellules est représentée figure 6.2.

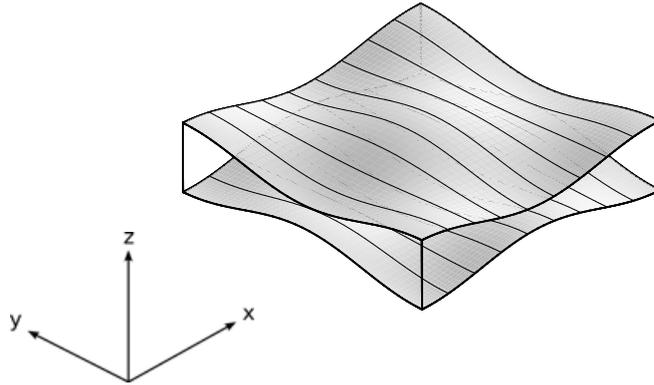


FIG. 6.2 – Cellule élémentaire modèle.

L'extension horizontale de ces cellules est  $L \times L$  dans les directions  $x$  et  $y$ . Le canal est défini par le volume contenu entre les deux surfaces  $z = Z_1(x, y)$  et  $z = Z_2(x, y)$  telles que  $H(x, y) = Z_2 - Z_1 > 0$  (l'inégalité stricte garantit que les deux surfaces n'entrent pas en contact) et où  $Z_1(x, y)$  et  $Z_2(x, y)$  sont deux fonctions  $\mathcal{C}^\infty$  sur  $\Omega = [0, L] \times [0, L]$ , périodiques en  $x$  et  $y$ . Dans la suite, on définit l'ouverture moyenne  $\langle H \rangle$  du canal par :

$$\langle H \rangle = \frac{1}{L^2} \int_0^L \int_0^L H(x, y) \, d\Omega. \quad (6.1)$$

Notre étude porte sur des microcanaux de sorte que l'extension horizontale  $L$  est très supérieure à l'ouverture moyenne  $\langle H \rangle$ . On considère également que les variations d'ouverture sont faibles c'est à dire que la pente caractéristique de variation de l'ouverture est d'ordre  $\epsilon \ll 1$ . L'écoulement du fluide est conduit par un forçage constant identifié à un gradient de pression extérieur imposé noté  $\nabla P_0$  et orienté dans la direction  $x$ . On introduit enfin  $U_{\text{ref}} = \langle u \rangle$  une vitesse caractéristique construite sur la vitesse longitudinale  $u$  moyenne dans le plan moyen  $z = (Z_1 + Z_2)/2$ . Enfin, on considère des situations dans lesquelles les couches limites visqueuses sont pleinement développées dans la direction transverse  $z$  à l'écoulement. Les champs de vitesse, de pression et les distances dans les directions horizontales et verticales sont respectivement adimensionnalisés par  $U_{\text{ref}}$ ,  $\mu U_{\text{ref}}/\epsilon \langle H \rangle$ ,  $\langle H \rangle/\epsilon$  et  $\langle H \rangle$  où  $\mu$  est la viscosité dynamique.

Sous ces hypothèses, les équations de Navier-Stokes incompressibles sont par la suite développées dans le cadre d'une approximation de couche limite. Toutes les grandeurs que nous manipulerons désormais sont des grandeurs adimensionnelles. L'incompressibilité s'écrit :

$$\tilde{\nabla} \cdot \mathbf{U} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (6.2)$$

ce qui nous amène à introduire l'ajustement asymptotique :

$$\mathbf{u} = (u, v, \epsilon w). \quad (6.3)$$

Les équations de Navier-Stokes s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \text{Re } \epsilon \quad (u\partial_x u + v\partial_y u + w\partial_z u) &= -\partial_x p + \partial_z^2 u, \\ \text{Re } \epsilon \quad (u\partial_x v + v\partial_y v + w\partial_z v) &= -\partial_y p + \partial_z^2 v, \\ \text{Re } \epsilon^3 \quad (u\partial_x w + v\partial_y w + w\partial_z w) &= -\partial_z p + \epsilon^2 \partial_z^2 w. \end{aligned} \quad (6.4)$$

où le nombre de Reynolds  $\text{Re}$  est défini par  $\text{Re} = U_{\text{ref}}\langle H \rangle/\nu$ . Dans la suite, un développement asymptotique de ces équations sur le petit paramètre du problème  $\epsilon\text{Re}$  est alors recherché sous la forme :

$$\begin{aligned} p &= p_0 + \text{Re } \epsilon p_1 + O(\epsilon^2, \text{Re}^2 \epsilon^2), \\ u &= u_0 + \text{Re } \epsilon u_1 + O(\epsilon^2, \text{Re}^2 \epsilon^2), \\ v &= v_0 + \text{Re } \epsilon v_1 + O(\epsilon^2, \text{Re}^2 \epsilon^2), \\ \epsilon w &= \epsilon w_0 + \text{Re } \epsilon^2 w_1 + O(\epsilon^3, \text{Re}^2 \epsilon^3), \\ \mathbf{q} &= \mathbf{q}_0 + \text{Re } \epsilon \mathbf{q}_1 + O(\epsilon^2, \text{Re}^2 \epsilon^2), \end{aligned} \quad (6.5)$$

où les indices représentent l'ordre en  $\epsilon\text{Re}$  du développement et  $\mathbf{q}$  est le flux horizontal de vitesse donné par :

$$\mathbf{q} = \int_{Z_1}^{Z_2} (u, v) dz. \quad (6.6)$$

On introduit ce développement en (6.4) pour obtenir une hiérarchie de systèmes d'équations. Le développement est limité à l'ordre  $O(\epsilon\text{Re})$  afin d'évaluer les premiers effets dus à l'inertie. A l'ordre 0, on obtient :

$$\begin{aligned} 0 &= -\partial_x p_0 + \partial_z^2 u_0, \\ 0 &= -\partial_y p_0 + \partial_z^2 v_0, \\ 0 &= \partial_z p_0. \end{aligned} \quad (6.7)$$

et à l'ordre 1 :

$$\begin{aligned} u_0 \partial_x u_0 + w_0 \partial_z u_0 &= -\partial_x p_1 + \partial_z^2 u_1, \\ v_0 \partial_y v_0 + w_0 \partial_z v_0 &= -\partial_y p_1 + \partial_z^2 v_1, \\ 0 &= \partial_z p_1. \end{aligned} \quad (6.8)$$

L'ordre 0 correspond aux équations classiques de lubrification. La pression  $p$  y est indépendante de la coordonnée  $z$ . Le système à l'ordre 1 possède la même structure avec un champ de pression également invariant dans la direction  $z$  mais avec une correction inertielle. En intégrant (6.7) selon  $z$  et en tenant compte des conditions aux limites imposant la vitesse nulle sur les parois  $Z_1$  et  $Z_2$ , on obtient l'expression des vitesses  $u_0, v_0$  sur tout le domaine. On retrouve alors la relation de Reynolds :

$$\begin{aligned} u_0 &= (z - Z_1)(z - Z_2) \partial_x p_0, \\ v_0 &= (z - Z_1)(z - Z_2) \partial_y p_0. \end{aligned} \quad (6.9)$$

En intégrant dans la direction  $z$  le champ de vitesse  $(u_0, v_0)$ , on obtient la relation locale de Darcy-Reynolds entre le flux de vitesse et le gradient de pression :

$$\mathbf{q}_0 = -\frac{H^3}{12} \hat{\nabla} p_0, \quad (6.10)$$

où  $\hat{\nabla} = (\partial_x, \partial_y)$ . Cette équation est bidimensionnelle. Comme l'écoulement est incompressible,  $\mathbf{q}_0$  est à divergence nulle et on obtient l'équation bidimensionnelle sur le champ de pression de type Darcy :

$$\hat{\nabla} \cdot (H^3 \hat{\nabla} p_0) = 0. \quad (6.11)$$

La vitesse verticale  $w_0$  s'obtient à partir de la relation (6.2). Compte tenu que  $w_0$  est un polynôme d'ordre 3 en  $z$ , les deux conditions aux limites de non-glissement aux parois ne permettent *a priori* pas de fixer les trois constantes attendues du polynôme. Cette difficulté apparente est levée en réalisant que l'approximation de lubrification doit en fait être écrite le long des coordonnées curvilignes  $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$  pour lesquelles  $(\tilde{x}, \tilde{y})$  épousent la surface moyenne de référence  $Z_+(x, y) = (Z_1(x, y) + Z_2(x, y))/2$  et  $\tilde{z} = z - Z_+(x, y)$ . Le rapport d'échelle  $\epsilon$  entre les dimensions  $(\tilde{x}, \tilde{y})$  et  $\tilde{z}$  permet alors de montrer que l'opérateur de dérivée covariante écrit le long des coordonnées curvilignes  $\tilde{x}$  ou  $\tilde{y}$  ne diffère de l'opérateur usuel en coordonnées cartésiennes que par une correction d'ordre  $\epsilon^2$  (voir l'annexe A de la référence [24] pour plus de détails). Ceci s'exprime comme :

$$(\partial_{\tilde{x}}, \partial_{\tilde{y}}) = (\partial_x, \partial_y) + O(\epsilon^2).$$

Comme nous avons précédemment négligé ces termes dans l'approximation asymptotique considérée ci-dessus, ils peuvent être aussi négligés de façon consistante en considérant que les équations (6.7) et (6.8) précédemment établies dans les coordonnées  $(x, y, z)$  s'appliquent aussi aux coordonnées  $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$ . L'avantage de ces nouvelles coordonnées curvilignes  $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$  c'est qu'elles symétrisent les conditions aux limites. En effet, dans ces coordonnées les bords des parois sont maintenant situées en  $\tilde{z} = \pm Z_-(\tilde{x}, \tilde{y})$  avec

$$Z_-(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{1}{2} H(\tilde{x}, \tilde{y}) = \frac{1}{2} (Z_2(\tilde{x}, \tilde{y}) - Z_1(\tilde{x}, \tilde{y})). \quad (6.12)$$

En considérant les conditions aux limites de non glissement  $u_0(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z} = \pm Z_-) = v_0(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z} = \pm Z_-) = 0$  on retrouve ainsi l'expression du profil parabolique en coordonnées curvilignes dans les directions horizontales pour le champ de vitesse à deux composantes  $\mathbf{u}_0 = (u_0, v_0)$  :

$$\mathbf{u}_0 = \frac{1}{2} \nabla p_0 (\tilde{z}^2 - Z_-^2), \quad (6.13)$$

où cette fois-ci on définit  $\nabla = (\partial_{\tilde{x}}, \partial_{\tilde{y}})$  qui s'identifie au précédent  $\hat{\nabla}$  en négligeant les termes d'ordre  $O(\epsilon^2)$ . A partir de l'équation 6.2 on peut maintenant trouver  $w_0$  en intégrant :

$$\partial_z w_0 = -(\partial_x u_0 + \partial_y v_0),$$

de sorte que

$$w_0 = -\frac{\Delta p_0}{6} z(z^2 - Z_-^2), \quad (6.14)$$

où  $\Delta = \partial_{xx}^2 + \partial_{yy}^2$  désigne l'opérateur Laplacien bidimensionnel. On réitère la même procédure pour le système d'ordre 1 (équation (6.8)). Après calculs, on obtient :

$$\nabla \cdot (H^3 \nabla p_1) = -\frac{3}{560} \nabla \cdot (\nabla (\nabla p_0)^2 H^7 + 4 \nabla p_0 (\nabla p_0 \cdot \nabla H) H^6). \quad (6.15)$$

De même qu'à l'ordre 0, en intégrant (6.8) selon  $z$  on obtient analytiquement  $\mathbf{u}_1 = (u_1, v_1)$  en fonction de  $\nabla p_0$  et  $\nabla p_1$

$$\mathbf{u}_1 = (z^2 - Z_-^2) \left[ \frac{\nabla p_1}{2} + (z^4 - 4z^2 Z_-^2 + 11Z_-^4) \left( \frac{\nabla (\nabla p_0)^2}{240} + \frac{\nabla p_0 (\nabla p_0 \cdot \nabla Z_-)}{60Z_-} \right) \right], \quad (6.16)$$

On remarque deux contributions distinctes liées à la correction inertielle pour ce champ de vitesse  $\mathbf{u}_1$  qui font intervenir chacune les gradients de pression bidimensionnels  $\nabla p_0$  et  $\nabla p_1$  qui ne dépendent que de  $x$  et  $y$ . De la même façon que précédemment on peut maintenant trouver  $w_0$  en intégrant l'équation 6.2. Des calculs fastidieux montrent que

$$w_1 = -z(z^2 - Z_-^2) \left[ \frac{\nabla p_1 \cdot \nabla Z_-}{2Z_-} + \wp_1 (\nabla \otimes \nabla p_0 : \nabla \otimes \nabla p_0 - \frac{\nabla (\nabla p_0 \cdot \nabla Z_-) \cdot \nabla p_0}{Z_-} - \wp_2 (\nabla p_0 \cdot \nabla Z_-)^2 - \wp_3 \nabla (\nabla p_0)^2 \cdot \nabla Z_- \right], \quad (6.17)$$

où " $\otimes$ " représente le produit tensoriel, ":" la double contraction et  $\wp_1, \wp_2, \wp_3$  sont des polynômes dépendants de  $z$  et  $Z_-$  consignés dans [19] :

$$\begin{aligned} \wp_1(z) &= \frac{1}{840} (z^2 - Z_-^2) (z^2 - 5Z_-^2), \\ \wp_2(z) &= \frac{1}{840Z_-^2} (5z^4 - 2z^2 Z_-^2 + 109Z_-^4), \\ \wp_3(z) &= \frac{Z_-}{120} (z^2 + 3Z_-^2). \end{aligned} \quad (6.18)$$

Remarquons tout d'abord qu'avec les relations (6.16), (6.17) et (6.18) nous avons les dépendances explicites du champ de vitesse avec la coordonnée  $z$ . Les seuls champs à calculer numériquement sont donc  $p_0, p_1$  qui sont bidimensionnels.

Dans la suite on considère le cas  $L = 2\pi$  et la famille de problèmes associés à des fonction  $Z_-$  périodiques de la forme :

$$Z_-(x, y) = \frac{\epsilon}{2} \left( 1 + \frac{\sigma}{2} (\cos(x+y) + \cos(x-y)) \right)$$

où  $\epsilon\sigma$  donne l'ordre de grandeur des variations d'ouverture. Au regard des propriétés de symétrie du champ et à partir des équations écrites à l'ordre 0, il est par exemple aisé de montrer que  $p_0(x, 2\pi - y, z)$  et  $p_0(x, y, z)$  sont solutions de la même équation de sorte que  $p_0(x, 2\pi - y, z) = p_0(x, y, z)$ . Les équations à l'ordre 0 amènent alors directement à la conclusion que  $u_0(x, 2\pi - y, z) = u_0(x, y, z)$ ,  $v_0(x, 2\pi - y, z) = -v_0(x, y, z)$  et  $w_0(x, 2\pi - y, z) = w_0(x, y, z)$ . De la même manière, on montre que  $u_0(x, y, -z) = u_0(x, y, z)$ ,  $v_0(x, y, -z) = v_0(x, y, z)$  et  $w_0(x, y, -z) = -w_0(x, y, z)$ . Ces propriétés peuvent être étendues aux champs à l'ordre 1 bien que la démonstration soit plus fastidieuse. Elles nous permettront néanmoins de n'étudier les propriétés de transport que dans un quart du volume compris entre les deux surfaces texturées.

## 6.3 Méthodes et outils d'analyse

### 6.3.1 Adaptation des méthode aux éléments spectraux

Les champs de vitesse et pression sont calculés par deux codes différents déjà existants élaborés par D. Lojacono, A. Bergeon, F. Plouraboué. Le premier résoud numériquement les équations bidimensionnelles aux ordre 0 et 1 en  $\epsilon Re$ . Le second simule directement les équations de Navier-Stokes tridimensionnelles incompressibles. Les méthodes aux éléments spectraux présentées dans le chapitre 3 de ce manuscrit sont adaptées dans chacune des deux situations.

#### Approximation de lubrification, champs 2D

Les problèmes (6.11) et (6.15) sur la pression aux ordres 0 et 1 sont de la forme :

$$-\nabla \cdot (k(x, y) \nabla p(x, y)) = F(x, y), \quad \forall (x, y) \in [0, 2\pi] \times [0, 2\pi], \quad (6.19)$$

et sont munis de conditions aux limites périodiques dans les directions  $x$  et  $y$ . Dans cette écriture  $\nabla = (\partial_x, \partial_y)$ . On notera que pour le problème à l'ordre 0, on ne calcule que la correction périodique au gradient de pression imposé. En posant  $p_0 = p'_0 + P_0$  avec  $\nabla P_0 = \mathbf{e}_x$ , le problème (6.11) sur  $p'_0$  s'écrit :

$$-\nabla \cdot (H^3 \nabla p'_0) = \nabla \cdot (H^3 \nabla P_0), \quad (6.20)$$

et est bien de la forme (6.19) avec  $k = H^3$ . A l'ordre 1 en  $\epsilon Re$ ,  $p_1$  n'a pas de composante affine, et le problème (6.19) est obtenu directement par la relation (6.15).

Pour ces deux problèmes, l'inconnue  $p$  est approximée par une série dont les fonctions de base sont le produit de fonctions de Fourier dans les directions  $x$  et  $y$  [6]. L'approximation numérique  $p_N$  de  $p$  est cherchée sous la forme :

$$p_N(x, y) = p_N^x(x) p_N^y(y)$$

où  $p_N^x(x)$  et  $p_N^y(y)$  sont des développements en série de Fourier tronqués où :

$$p_N^x(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{(N_x+1)/2} a_n \cos(nx) + \sum_{n=1}^{(N_x-1)/2} b_n \sin(nx), \quad (6.21)$$

avec  $a_n, b_n$  les inconnues du problème. La fonction  $p_N^y(y)$  est développée de la même manière. Les  $N_x$  et  $N_y$  sont choisis de la forme  $2^m - 1$  avec  $m$  suffisamment grand pour éviter le phénomène d'aliasing pouvant apparaître du fait des fortes non-linéarités du second membre lors du calcul de  $p_1$ .

La discrétisation des équations se fait sur les  $N_x$  et  $N_y$  points équirépartis de Gauss dans les directions  $x$  et  $y$ . Le problème défini dans  $\Omega = [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$  est posé sous sa formulation variationnelle. En supposant  $p$  suffisamment régulière, la formulation variationnelle consiste à chercher  $p \in P_{N_x, N_y}(\Omega)$  solution de :

$$a(p, v) = L(v), \quad (6.22)$$

où  $v$  est une fonction test dans  $P_{N_x, N_y}(\Omega)$ . Ici,  $P_{N_x, N_y}(\Omega)$  est l'espace des fonctions  $2\pi$ -périodiques de la forme (6.21) dans chacune des directions  $x$  et  $y$ . Par intégration par partie, et du fait des conditions aux limites choisies, on obtient :

$$\int_{\Omega} -k \nabla p \cdot \nabla v \, d\Omega = \int_{\Omega} F v \, d\Omega.$$

Dans notre problème  $k(x, y) = H^3(x, y)$ . Les intégrales sont approximées par une formule de quadrature de Gauss. A partir de la relation (6.22), les inconnues sont calculées en inversant le système linéaire associé par une méthode de gradient conjugué préconditionné par l'inverse du laplacien lui-même inversé par diagonalisation successive. Ce calcul nous permet de trouver l'approximation de  $p_0$  et de  $p_1$  et par conséquent de reconstruire le champ de vitesse à partir des relations (6.13, 6.14, 6.16, 6.17).

### Simulation numérique directe, champs 3D

Le simulation directe des équations de Navier-Stokes incompressible est réalisée sur une cellule caractéristique (figure 6.2) et la discrétisation des équations se fait sur un unique élément spectral. De la même manière que dans les géométries cylindriques, la transformation  $\mathcal{F}$  liant l'élément courbe dans l'espace physique  $\Omega$  à l'élément de référence  $\bar{\Omega}$  est construite par une transformation de Gordon Hall. L'élément de référence est ici un parallélépipède de dimensions  $[0, 2\pi] \times [0, 2\pi] \times [0, 1]$ . En reprenant les notations du chapitre 3, on note  $(x, y, z)$  les coordonnées d'un point de l'espace physique  $\Omega$  et  $(\eta, \zeta, \gamma)$  celles d'un point de l'élément de référence. Les relations liant les différentes coordonnées s'écrivent :

$$x = \eta, \quad y = \zeta, \quad z = \epsilon(\gamma - 0.5)g(\eta, \zeta), \quad (6.23)$$

où l'on a posé :

$$Z_-(\eta, \zeta) = \epsilon g(\eta, \zeta).$$

La Jacobienne de la transformation  $\mathcal{F}$  est alors :

$$J_{\mathcal{F}}(\eta, \zeta, \gamma) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \epsilon \frac{\partial g}{\partial \eta} & \epsilon \frac{\partial g}{\partial \zeta} & \epsilon g(\eta, \zeta) \end{pmatrix}. \quad (6.24)$$

Les équations de Navier Stokes sont ensuite résolues selon la méthode exposé au chapitre 3 pour un domaine déformé.

### 6.3.2 Calcul des trajectoires

Le champ de vitesse  $\mathbf{u} = (u, v, \epsilon w)$  obtenu est stationnaire et périodique dans les direction  $x$  et  $y$ . Ici les termes  $u$ ,  $v$  et  $w$  sont calculés par l'expansion (6.5). Dans la suite, nous cherchons à intégrer le champ de vitesse afin de calculer les trajectoires des traceurs passifs. Pour un champ de vitesse stationnaire, le système à résoudre prend la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= u(x, y, z), \\ \frac{dy}{dt} &= v(x, y, z), \\ \frac{dz}{dt} &= \epsilon w(x, y, z). \end{aligned} \quad (6.25)$$

Par ailleurs, compte tenu des symétries des champs à l'ordre 0 et 1 que nous avons mentionné, nous restreindrons notre étude à celle des sections de Poincaré restreinte à l'un des quarts d'une section transverse.

### Section de Poincaré

Du fait de la périodicité spatiale du champ de vitesse dans la direction  $x$ , nous avons cherché à visualiser les trajectoires par l'étude de la section de Poincaré. Cet outil mathématique permet d'étudier la dynamique au temps long du système (6.25) sur une hypersurface de l'espace des phases. Ici les variables de l'espace des phases sont assimilées aux variables  $(x, y, z)$ . Dans notre situation la section de Poincaré peut correspondre à n'importe quel plan  $\Sigma$ , transverse à l'écoulement. En réalité ici notre géométrie étant bornée dans la direction  $z$ , il s'agit plus d'une coupe transverse de la géométrie que d'un plan, terme que l'on utilisera parfois par commodité. Dans la suite on fixe  $\Sigma$  comme soit la section  $\Sigma_0 = (x_0 = 0, y, z)$  soit la section  $\Sigma_0 = (x_0 = \pi/2, y, z)$  selon les résultats que nous discuterons. Notons que l'invariance topologique de la section de Poincaré avec  $x_0$  garantit que s'il existe des invariants du type points fixes ou cycles limites, ils existeront quelque soit la section de Poincaré choisie i.e. quelque soit  $x_0$ .

La dynamique dans la section de Poincaré est visualisée en superposant les positions successives sur les plans  $\Sigma_n = (x = x_0 + 2n\pi, y, z)$  avec  $n \in \mathbb{N}$ , d'une distribution initiale de traceurs passifs dans le plan  $\Sigma_0$ . Dans notre étude de la dynamique dans la section de Poincaré, on ne s'intéresse pas au temps mis pour parcourir l'intervalle égal à  $2\pi$  dans la direction  $x$  qui sépare deux croisements successifs d'une trajectoire avec la section de Poincaré. En d'autres termes, nous nous intéressons aux lignes d'émission plutôt qu'aux trajectoires proprement dites. Mais du fait que  $\mathbf{u}$  est stationnaire celles-ci coïncident [23]. Physiquement, ce que nous visualisons correspond à une injection continue de colorant en absence de diffusion de celui-ci dans le fluide environnant ( $Pe \rightarrow \infty$ ).

En superposant la distribution des traceurs passifs sur les différents plans  $\Sigma_n$  avec  $n \in \mathbb{N}$ , on décrit l'évolution des trajectoires dans la section de Poincaré. Cette évolution est discrète. Il est à priori impossible de calculer analytiquement, dans cette section, l'application de Poincaré  $\Pi$  qui aux coordonnées d'une position initiale dans le plan  $\Sigma_n$  fait correspondre les coordonnées dans le plan  $\Sigma_{n+1}$ , ces deux coordonnées étant liées par une trajectoire. En d'autres termes,  $(x_{n+1}, y_{n+1}, z_{n+1}) = \Pi(x_n, y_n, z_n)$  avec  $x_{n+1} = x_0 + 2(n+1)\pi$  et  $x_n = x_0 + 2n\pi$ . Dans cette écriture  $(x_n, y_n, z_n)$  est la position d'un traceur passif initialement en  $(x_0, y_0, z_0)$  après  $n$  passages dans la cellule élémentaire. Ce calcul est donc réalisé numériquement en intégrant le système (6.25).

Les premiers résultats indiquent la présence de différents invariants du type points fixes (trajectoires périodiques dans le système 3D) et cycles limites (tores en 3D). La présence de ces invariants illustre la richesse de notre problème dans le sens où l'éventuelle complexité des trajectoires est liée au comportement du système au voisinage de ceux-ci [2, 23]. Dans la suite on note  $(Y_n^i, Z_n^i) = (y_n, z_n)$  la position du  $i$ -ème traceur passif ( $i = 1, \dots, N_t$ ) au bout de la  $n$ -ième itération dans la section de Poincaré ( $n = 0, \dots, N_p$ ).

### Méthode de Tucker

La méthode que nous avons utilisée pour intégrer numériquement le système (6.25) est la méthode proposée par Tucker [26]. Cette méthode est particulièrement adaptée pour

calculer avec précision une section de Poincaré dans un système différentiel.

Les méthodes classiques d'intégration du système (6.25) du type Runge-Kutta posent le problème du calcul exact de  $(Y_n^i, Z_n^i)$ . En effet le pas  $\Delta t$  d'intégration en temps doit être ajusté de sorte à ce que la dernière position calculée coïncide avec un point de la section de Poincaré. D'autre part, le nombre d'itérations nécessaire au calcul de la trajectoire d'un traceur passif pour qu'il atteigne la section de Poincaré (c'est à dire qu'il parcourt  $2\pi$  dans la direction  $x$ ) dépend de sa position initiale. En particulier plus le traceur est initialement proche des parois, plus la vitesse est faible et donc plus le nombre d'itérations requis sera important. En effet, dans ces situations, l'augmentation du pas de temps est limité par la proximité des surfaces rigides que le traceur ne doit pas franchir.

La méthode proposée par Tucker permet de s'affranchir des deux inconvénients en choisissant une des variables de l'espace des phases comme indépendante. Dans le cas général, la méthode introduite dans [26] approxime numériquement la solution  $\mathbf{x}$  d'un système de la forme :

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = \mathbf{f}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x}(t=0) = \mathbf{x}_0, \quad (6.26)$$

avec  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_i, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$  et  $\mathbf{f}$  une application vectorielle  $C^1$  de  $\mathbb{R}^n$  dans  $\mathbb{R}^n$ . Le principe de la méthode est résumé dans les relations suivantes. Dans un premier temps on cherche à déterminer la composante maximale du champ  $\mathbf{f}$  au point  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$  telle que

$$|f_{\hat{i}}(\mathbf{x})| = \max_{i=1..n} |f_i(\mathbf{x})|.$$

En notant  $t = x_{n+1}$ , le système (6.26) s'écrit :

$$\frac{dx_{n+1}}{dt} = 1, \quad \frac{dx_i}{dt} = f_i(\mathbf{x}) \quad (i = 1, \dots, n). \quad (6.27)$$

Pourvu que  $f_{\hat{i}}(\mathbf{x}) \neq 0$ , on réécrit (6.27) sous la forme :

$$\frac{dx_{n+1}}{dx_{\hat{i}}} = \frac{1}{f_{\hat{i}}(\mathbf{x})}, \quad \frac{dx_i}{dx_{\hat{i}}} = \frac{f_i(\mathbf{x})}{f_{\hat{i}}(\mathbf{x})} \quad (i = 1, \dots, n). \quad (6.28)$$

C'est maintenant la  $\hat{i}$ -ème composante qui est indépendante dans le système (6.28), en d'autres termes il existe  $i \in [1, n]$  tel que  $dx_i/dx_{\hat{i}} = 1$ . Dans le cadre de notre problème  $n = 3$ . D'autre part, quelque soit  $\mathbf{x} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$  la composante dominante est la composante  $u$ , le gradient de pression étant imposé dans la direction  $x$ . Le système (6.28) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{dy}{dx} &= \frac{v(x, y, z)}{u(x, y, z)}, \\ \frac{dz}{dx} &= \frac{w(x, y, z)}{u(x, y, z)}, \\ \frac{dt}{dx} &= \frac{1}{u(x, y, z)}, \end{aligned} \quad (6.29)$$

l'avancement dans la direction  $x$  étant fixé par le pas  $\Delta x$  utilisé pour intégrer (6.29). Ainsi calculer  $(Y_n^i, Z_n^i)$  reviendra à intégrer (6.29) sur une distribution de points  $x_k = k\Delta x$  tels

que  $k = 0, \dots, N$  avec  $x_N = x_0 + 2\pi$ . Un pas de cette intégration reviendra à calculer :

$$\begin{aligned} x_k &= x_{k-1} + \Delta x, \\ y_k &= y_{k-1} + \Delta x G(x_{k-1}, y_{k-1}, z_{k-1}, \Delta x), \\ z_k &= z_{k-1} + \Delta x G(x_{k-1}, y_{k-1}, z_{k-1}, \Delta x) \end{aligned} \quad (6.30)$$

avec  $\Delta x = 2\pi/N$  et  $G$  une fonction dépendante de la méthode d'intégration choisie. Dans notre situation nous avons suivant les cas utilisé une méthode de Runge-Kutta d'ordre 4 ou une méthode prédicteur-correcteur à pas adaptatif allant jusqu'à l'ordre 8.

L'évaluation de  $G$  au point  $(x_{k-1}, y_{k-1}, z_{k-1})$  demande la connaissance de  $u$ ,  $v$  et  $w$  en ce point. Dans un paragraphe précédent nous avons vu que le champ de vitesse était obtenu analytiquement dans la direction  $z$  et numériquement dans les directions  $x$  et  $y$ . Pour conserver l'évaluation exacte dans la direction  $z$ , seuls les opérateurs dépendant de  $\nabla p_0$  et  $\nabla p_1$  dans les expressions (6.13, 6.14, 6.16, 6.17) sont interpolés dans le plan moyen. Le résumé des notations choisies est reporté figure 6.3.

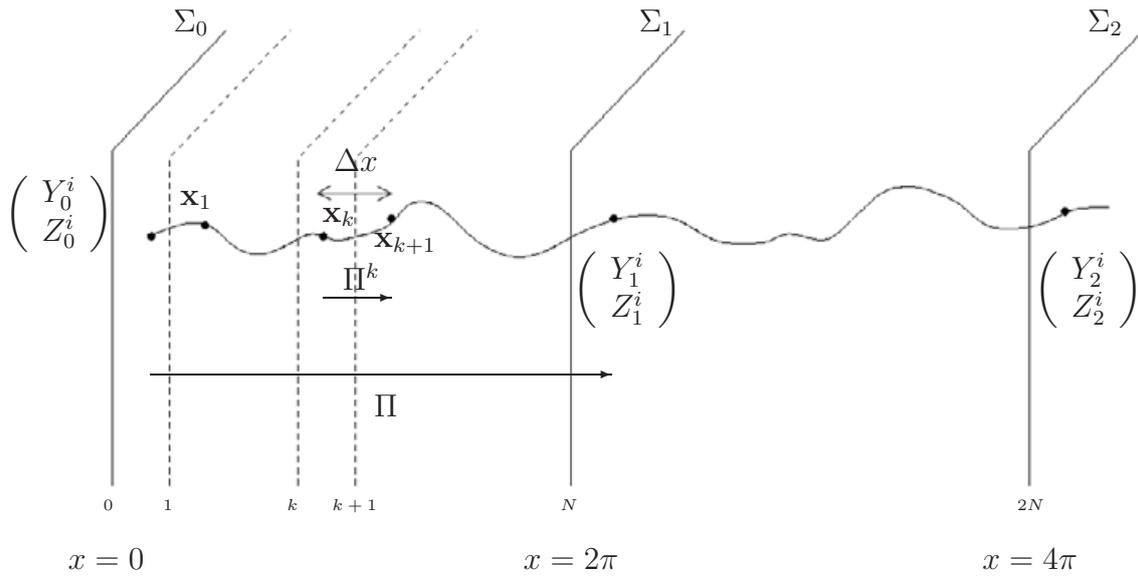


FIG. 6.3 – Illustration des notations.

Pour valider nos résultats, nous avons comparé le calcul des trajectoires sur un champ de vitesse obtenu par l'approximation faiblement inertielle et par la simulation directe des équations de Navier-Stokes incompressibles 3D. Dans ce dernier cas, pour des raisons de temps de calcul, le calcul du champ de vitesse n'a pu être réalisé au maximum que sur une grille de  $63 \times 63 \times 60$ . Bien que l'approximation soit suffisamment précise dans cette situation, le degré du polynôme d'interpolation utilisé pour évaluer les champs de vitesse en chaque point de la trajectoire est, à précision égale, plus élevé qu'en 2D ce qui accroît de manière rédhibitoire le temps de calcul. Nous nous sommes cependant assurés que les sections des Poincaré avaient la même structure dans les deux cas.

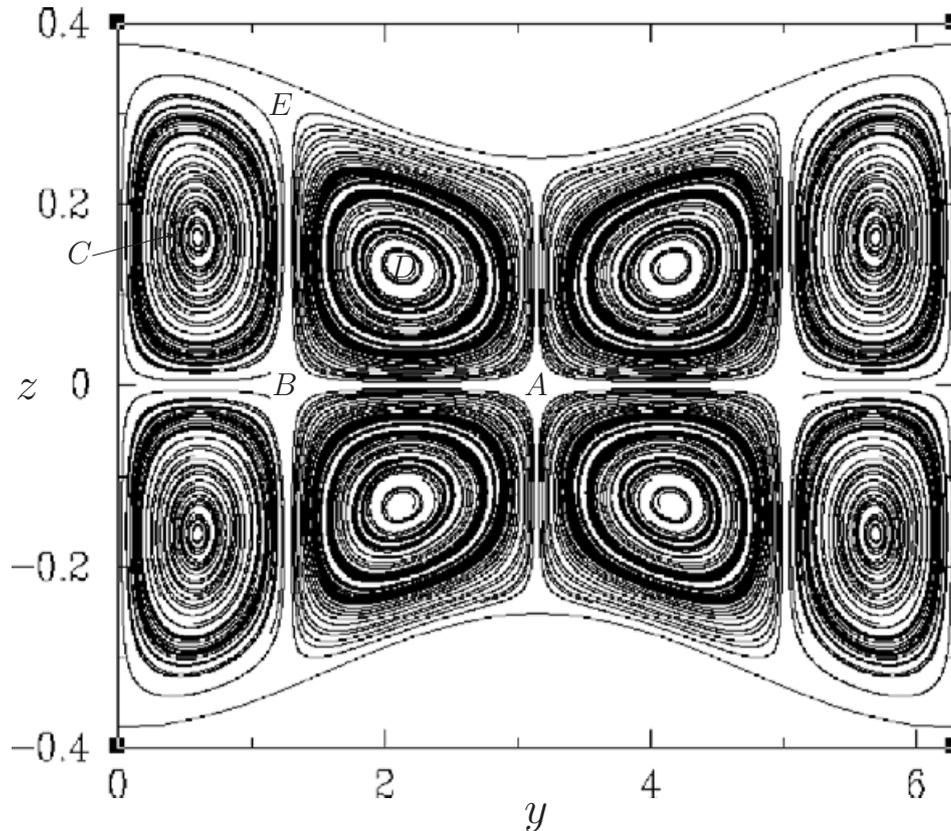


FIG. 6.4 – Exemple de section de Poincaré,  $A$  est en  $(y = \pi, z = 0)$ ,  $B$  est un point sur le plan moyen tel que  $(y \neq \pi, z = 0)$ ,  $E$  est le point à la verticale de ce dernier situé près de la paroi supérieure,  $C$  et  $D$  sont les deux points du quadrant haut gauche autour desquels les trajectoires dans la section tournent,  $\sigma = 0.25$ ,  $Re = 100$ ,  $N_t = 200$ ,  $N_p = 10000$ . Le calcul du champ de vitesse est réalisé avec l'approximation de lubrification dans le plan moyen.

### 6.3.3 Calcul des points fixes et de la matrice de monodromie

#### Definition

Les sections de Poincaré calculées pour le problème de lubrification ont mis en évidence des points fixes (figure 6.4) et ceci quelque soit les paramètres  $(\sigma, \epsilon, Re)$  choisis. Ces points fixes dans la section de Poincaré correspondent à des trajectoires spatialement périodiques du point de vue du problème 3D. Au premier abord, les points fixes observés sur la figure 6.4 sont des points fixes hyperboliques correspondant à des points selles (points  $A$ ,  $B$  et  $E$ ). La question de la nature des points  $C$  et  $D$  est plus complexe car ils semblent être soit des foyers soit des centres. Pour vérifier ces observations et étudier la stabilité linéaire des points fixes obtenus, nous avons été amenés à calculer la matrice de monodromie. Cette matrice  $M$  correspond à l'intégrale lagrangienne de la déformation locale autour d'une trajectoire périodique, c'est à dire du point de vue discret à la linéarisation de l'application de Poincaré  $\Pi$  autour d'un point fixe. En écrivant les composantes de l'application vectorielle  $\Pi$  sous la forme suivante  $\Pi = (\Pi_x, \Pi_y, \Pi_z)$ , la matrice  $M$  linéarisé autour de la

solution périodique  $(x_p, y_p, z_p)$  s'écrit :

$$M = \begin{pmatrix} \frac{\partial \Pi_x}{\partial x} & \frac{\partial \Pi_x}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_x}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_y}{\partial x} & \frac{\partial \Pi_y}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_z}{\partial x} & \frac{\partial \Pi_z}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_z}{\partial z} \end{pmatrix}_{(x_p, y_p, z_p)}. \quad (6.31)$$

Les valeurs propres de la matrice  $M$  permettent de déterminer la stabilité de la trajectoire périodique. En effet, si une valeur propre est en module supérieure à 1 alors la trajectoire périodique sera instable dans la direction définie par le vecteur propre associé ce qui se traduira par un éloignement des traceurs passifs du point fixe dans la section de Poincaré. Si au contraire la valeur propre est en module inférieure à 1 alors les positions successives des traceurs au voisinage du point fixe se rapprocheront de celui-ci dans la direction propre associée. Une des propriétés de la matrice de monodromie est qu'elle présente toujours une valeur propre égale à 1 [10]. Dans le cas où on considère l'application associée aux lignes d'émission du problème, cette matrice présente une structure plus simple que la forme générale écrite en (6.31). En effet dans ce cas particulier, toutes les coordonnées longitudinales  $x$  de tous les points sont identiques le long de toutes les trajectoires. Il en résulte que  $\Pi_x = x$  et que la matrice  $M$  s'écrit :

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{\partial \Pi_y}{\partial x} & \frac{\partial \Pi_y}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_z}{\partial x} & \frac{\partial \Pi_z}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_z}{\partial z} \end{pmatrix}_{(x_p, y_p, z_p)}. \quad (6.32)$$

On voit aisément que le vecteur propre associé à la valeur propre 1 s'identifie à la première colonne de  $M$ . Le calcul des autres valeurs propres et vecteurs propres peut alors se restreindre à celui de la mineure  $F$  telle que :

$$F = \begin{pmatrix} \frac{\partial \Pi_y}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_y}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_z}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_z}{\partial z} \end{pmatrix}_{(x_p, y_p, z_p)}, \quad (6.33)$$

qui n'est autre que la matrice de Floquet puisqu'il s'agit de la restriction de la matrice  $M$  à la section de Poincaré. On voit en effet que tout vecteur propre  $v$  de  $F$  dont la valeur propre est  $\lambda$  permet de construire le vecteur  $(0, v)$  vecteur propre de  $M$  associé à la même valeur propre  $\lambda$ .

Outre le calcul de la stabilité linéaire des points fixes ainsi que les directions propres associées, la construction de  $F$  va nous permettre de calculer leur position par une méthode de Newton. Pour ce faire, l'application de Poincaré (notée  $\Pi$ ) est dérivée dans le plan de la section de Poincaré. Une méthode aux différences finies a été utilisée pour pouvoir calculer les différents termes de la matrice  $F$ . Pour la construire, nous utilisons une méthode aux différences finies d'ordre 2 basée sur un schéma à 5 points. Nous avons aussi implémenté

un schéma à 9 points pour tester l'influence de la discrétisation spatiale sur les résultats comme discuté dans la suite.

Numériquement la matrice  $F$  peut être calculée de deux manières différentes : la première méthode consiste à étudier le déplacement d'un jeu de 5 points disposés en croix centrée sur le point fixe et à évaluer leurs déplacements respectifs à l'issue d'une application  $\Pi$ . Les différences finies permettent ensuite d'évaluer les termes de  $F$ . Cependant cette méthode s'est révélée peu précise. La méthode que nous avons préférée est celle proposée par Tucker [26] qui consiste à évaluer  $F$  en composant les matrices résultantes de la linéarisation des applications de Poincaré partielles ce qui se traduit du point de vue numérique par l'évaluation à chaque pas d'intégration en espace de la matrice  $F^{(k)}$  définie par :

$$F^{(k)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \Pi_y^k}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_y^k}{\partial z} \\ \frac{\partial \Pi_z^k}{\partial y} & \frac{\partial \Pi_z^k}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad (6.34)$$

où  $(x_k, y_k, z_k) = \Pi^k(x_{k-1}, y_{k-1}, z_{k-1})$ . La matrice  $F$  est donnée par :

$$F = \prod_{k=0}^N F^{(k)}.$$

Lorsque  $\Delta x$  est petit, les déplacements  $(x_k, y_k, z_k)$  sont faibles relativement à la position  $(x_{k-1}, y_{k-1}, z_{k-1})$ .

### Méthode de Newton

Le calcul de la position des points fixes se fait par une méthode de Newton. Soit  $(Y_0, Z_0)$  les coordonnées d'un point dans la section de Poincaré. Un point fixe  $(Y, Z)$  vérifie  $\Pi_x Y = Y$  et  $\Pi_x Z = Z$ . En notant  $(Y, Z)^{(p)}$  la suite des itérés obtenus par la méthode de Newton, on obtient :

$$\begin{pmatrix} Y^{(p+1)} \\ Z^{(p+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Y^{(p)} \\ Z^{(p)} \end{pmatrix} + (I - F)^{-1} \begin{pmatrix} \Pi_Y(Y^{(p)}, Z^{(p)}) - Y^{(p)} \\ \Pi_Z(Y^{(p)}, Z^{(p)}) - Z^{(p)} \end{pmatrix}. \quad (6.35)$$

En utilisant les notations indiquées sur la figure 6.4, on peut remarquer que le point fixe  $A$  à l'intersection des axes de symétries de la section est associé à une trajectoire rectiligne dans le domaine 3D. Sa position est constante et située en  $(Y_A, Z_A) = (\pi, 0)$ . L'étude de la convergence de la méthode de Newton sur la position des points fixes est donc menée sur les points  $B$ ,  $C$  et  $D$ . Si la condition initiale est dans le bassin de convergence de la méthode, celle-ci est quadratique pour la gamme de  $\sigma$ ,  $\epsilon$ ,  $Re$  étudiée. Notons et ceci a été vérifié numériquement que  $B$  est un point selle et les valeurs propres de la matrice  $F$  associée sont réelles. La première  $\lambda_y(B)$ , associée à la direction propre  $y$  est supérieure à un 1 et caractérise un éloignement de  $B$  des itérés successifs dans la section de Poincaré. La seconde  $\lambda_z(B)$  est associée à la direction propre  $z$  est inférieure à 1 et indique que cette direction propre est stable. Les points fixes  $C$  et  $D$  sont des centres associés à des valeurs propres de  $F$  complexes conjuguées de modules égaux à 1.

Nous avons par ailleurs étudié la précision des résultats en fonction du pas  $\Delta_y = \Delta_z$  de la méthode aux différences finies utilisée pour évaluer  $F$ . Ces pas représentent les écarts qui séparent initialement, dans les directions  $y$  et  $z$ , les quatres points utilisés pour évaluer par différences finies la matrice  $F$ , du point où elle doit être évaluée. La courbe (6.5) montre l'évolution du module de la valeur propre de  $\lambda_y(B)$  en fonction de  $\Delta_y = \Delta_z$ . Un plateau de convergence est atteint pour des valeurs du pas situées entre  $10^{-3}$  et  $10^{-7}$ . Dans la suite, nos calculs sont réalisés avec  $\Delta_y = \Delta_z = 10^{-5}$ .

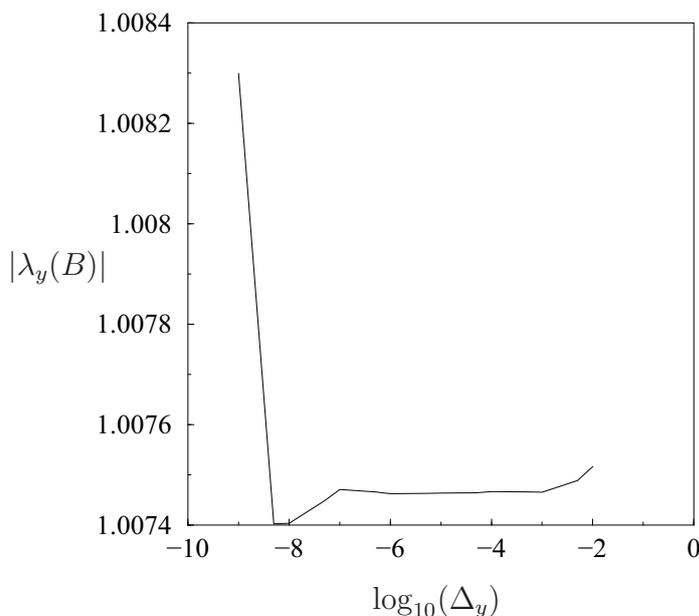


FIG. 6.5 – Représentation du module de  $\lambda_y(B)$  en fonction  $\log_{10}(\Delta_y)$   $\sigma = 0.3$ ,  $Re = 100$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $N_x + 1 = N_y + 1 = 512$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ .

De manière à étudier la précision de la position des points fixes sur une section indépendante du  $\sigma$  auquel est réalisé le calcul, on choisit  $\Sigma_0$  positionné en  $x_0 = \pi/2$ . Dans cette situation, la section de Poincaré  $\Sigma$  est rectangulaire avec  $\Sigma = [0, 2\pi] \times [-\epsilon/2, \epsilon/2]$ . En d'autres termes ceci revient à réaliser le calcul dans une géométrie de la forme

$$Z_-(x, y) = \frac{\epsilon}{2} \left( 1 + \frac{\sigma}{2} (\sin(x + y) + \sin(x - y)) \right),$$

situation correspondant à la figure 6.6b.

Dans la suite on fixera  $\epsilon = 2\pi/10$ . La raison de ce choix est principalement numérique. Ce paramètre nous assure d'une précision des résultats sur le champ de vitesse inférieure à 3% en comparaison avec simulation directe 3D des équations de Navier-Stokes et ceci pour une gamme de nombre de Reynolds allant de 0 à 100 [19]. Un autre paramètre joue de la précision sur les résultats, il s'agit du nombre de points de maillage utilisé pour le calcul de la pression dans le plan moyen. Le tableau 6.1 donne l'évolution de la position des points fixes en fonction du maillage utilisé.

L'erreur commise sur le calcul de la position des points fixes est de l'ordre de  $10^{-5}$  ce qui est consistant avec l'erreur commise par le schéma numérique à l'issue d'une application II. L'évaluation des valeurs propres de  $F$  associées aux différents points fixes reste du même ordre de grandeur (tableau 6.2). Cependant, bien que la stabilité du point fixe  $B$

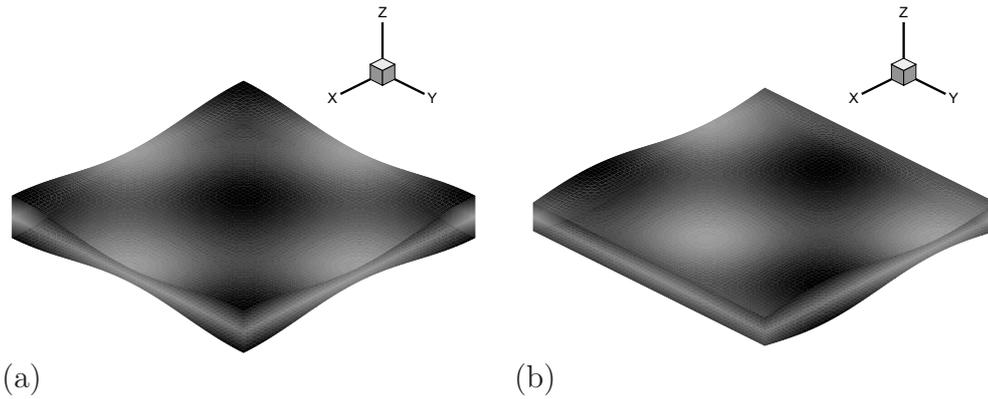


FIG. 6.6 – (a) Cellule élémentaire avec  $Z_-(x, y) = \epsilon(1 + \sigma(\cos(x + y) + \cos(x - y))/2)/2$ , (b) Représentation de sa translatée de  $\pi/2$  dans la direction  $x$ .

$N_x = N_y$	$Y_B$	$Z_B$	$Y_C$	$Z_C$	$Y_D$	$Z_D$
63	1.544590706	0.	0.756833801	0.138422335	2.35036553	0.137987648
127	1.544603785	0.	0.757358204	0.136835281	2.34973938	0.136402847
255	1.544601282	0.	0.757401108	0.136347565	2.34966844	0.135915622
511	1.544601112	0.	0.757418983	0.136238756	2.34964390	0.135806926
1023	1.544601112	0.	0.757423198	0.136212020	2.34963800	0.135780213

TAB. 6.1 – Evolution des positions des points fixes  $B$ ,  $C$  et  $D$  avec le maillage. Ici  $N_x + 1$  et  $N_y + 1$  correspondent au nombre de points de maillage utilisés pour évaluer la pression dans le plan moyen. Les autres paramètres sont  $\sigma = 0.25$ ,  $Re = 100$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $\Delta_y = \Delta_z = 10^{-5}$ .

soit définie de manière univoque par les résultats, celle des points fixes  $C$  et  $D$  reste plus problématique : elle dépend du maillage et des paramètres  $Re$  et  $\sigma$  (voir les figures 6.7a 6.7b). Toutefois, le module des valeurs propres complexes conjuguées de  $F$  calculé autour des points  $C$  et  $D$  tend vers 1 lorsque l'on augmente la précision du maillage.

Pour se conforter dans cette conclusion, nous avons représenté (figure 6.7a) l'évolution de  $|\lambda(C)|$  en fonction du nombre de Reynolds pour  $\sigma = 0.25$  (tirets-pointillés) et  $\sigma = 0.3$  (pointillés) pour des maillages de  $N_x = 1024$  (lignes épaisses),  $N_x = 512$  (lignes fines). La figure 6.7b donne  $|\lambda(C)|$  en fonction de  $\sigma$  à  $Re = 50$  pour différents maillages. Ces figures montrent la tendance de  $|\lambda(C)|$  à évoluer vers 1 pour  $Re < 100$ .

## 6.4 Analyse

### 6.4.1 Analyse théorique

Dans cette section nous montrons qu'en l'absence d'effets inertiels et dans le cadre de l'approximation de lubrification tous les points dans la section de Poincaré sont des points

$N_x$	$\lambda_y(B)$	$\lambda_z(B)$	$ \lambda(C) $	$ \lambda(D) $
63	1.00825951	0.99256379	1.000758772	1.000758835
127	1.00814481	0.99255193	0.999965700	0.999965699
255	1.00774723	0.99255321	1.000062877	1.000062886
511	1.00746331	0.99255315	0.999967241	0.999967232
1023	1.00752170	0.99255309	0.999995727	0.999995717

TAB. 6.2 – Evolution des valeurs propres avec le maillage.  $\sigma = 0.3$ ,  $Re = 100$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$

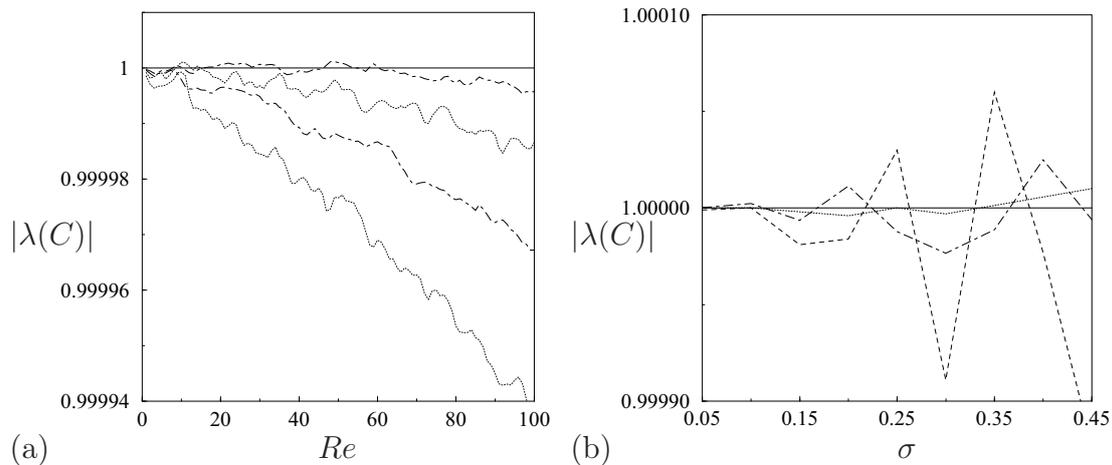


FIG. 6.7 – (a) Variation de  $|\lambda(C)|$  avec  $Re$ , (lignes épaisses)  $N_x = 1024$ , (lignes fines)  $N_x = 512$ . Les lignes en pointillés correspondent aux cas  $\sigma = 0.3$  et les lignes en tirets-pointillés au cas  $\sigma = 0.25$ . (b) Variation de  $|\lambda(C)|$  avec  $\sigma$ ,  $Re = 50$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ , (tirets)  $N_x + 1 = 256$ , (tirets-pointillés)  $N_x + 1 = 512$ , (pointillés)  $N_x + 1 = 1024$ .

fixes. Pour  $Re = 0$ , l'équation à résoudre dans le plan moyen est :

$$\nabla \cdot (H^3 \nabla p_0) = 0, \quad \text{avec} \quad H(x, y) = 2Z_-(x, y).$$

Il est possible alors d'écrire  $\psi$ , la fonction de courant dans le plan moyen telle que :

$$H^3 \frac{\partial p_0}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad H^3 \frac{\partial p_0}{\partial y} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \quad (6.36)$$

Dans cette écriture  $\psi$  est une fonction de  $(x, y)$  puisque  $p_0$  et  $H$  ne dépendent que de  $x$  et  $y$ . Le système permettant de calculer les trajectoires lagrangiennes, du fait des relations (6.13, 6.14), s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial t} &= \frac{1}{2H^3} \frac{\partial \psi}{\partial y} (z^2 - Z_-^2), \\ \frac{\partial y}{\partial t} &= -\frac{1}{2H^3} \frac{\partial \psi}{\partial x} (z^2 - Z_-^2), \\ \frac{\partial z}{\partial t} &= -\frac{1}{6} \nabla^2 p_0 z (z^2 - Z_-^2). \end{aligned} \quad (6.37)$$

En utilisant le changement de variable  $\partial/\partial t = \partial/f\partial\tau$  avec  $f$  positif tel que :

$$f = \frac{2H^3}{Z_-^2 - z^2},$$

le système (6.37) s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial x}{\partial \tau} &= -\frac{\partial \psi}{\partial y}, \\ \frac{\partial y}{\partial \tau} &= \frac{\partial \psi}{\partial x}, \\ \frac{\partial z}{\partial \tau} &= \frac{1}{3}H^3\nabla^2 p_0 z. \end{aligned} \tag{6.38}$$

Comme  $p_0$  est indépendant de  $z$ , on a :

$$z = \bar{z} \exp\left(\frac{1}{3} \int_0^\tau \nabla^2 p_0 H^3 d\tau\right), \tag{6.39}$$

où  $\bar{z}$  est la position initiale d'une particule dans le plan ( $x = 0, y, z$ ). A partir des relations (6.36), on peut montrer que :

$$\frac{1}{3}\nabla^2 p_0 H^3 = \frac{1}{H} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial H}{\partial x} \right),$$

ce qui intégré à la relation (6.39) donne :

$$\begin{aligned} z &= \bar{z} \exp\left(\int_0^\tau \frac{1}{H} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial H}{\partial x} \right) d\tau\right) \\ &= \bar{z} \exp\left(\int_0^\tau \frac{1}{H} \left( \frac{\partial H}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \tau} + \frac{\partial H}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau} \right) d\tau\right) \\ &= \bar{z} \exp\left(\int_0^{2\pi} \frac{1}{H} \frac{\partial H}{\partial x} dx + \frac{1}{H} \frac{\partial H}{\partial y} dy\right) \\ &= \bar{z} \exp\left(\int_0^{2\pi} d(\log H)\right) \\ &= \bar{z}, \end{aligned}$$

du fait de la périodicité de  $H$  dans les directions  $x$  et  $y$ . En montrant ceci, on montre qu'après une évolution de  $2\pi$  dans la direction  $x$  la particule initialement en  $\bar{z}$  retrouve sa position initiale dans la direction  $z$ . De plus, à partir du système (6.38), on peut déduire que

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \tau} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \tau} = 0,$$

c'est-à-dire que  $\partial\psi/\partial\tau = 0$ . De ceci on trouve que  $\psi(x, y) = cte = \psi(\bar{x}, \bar{y})$ . Par conséquent lorsque  $x = \bar{x} + 2\pi$  on obtient  $\psi(\bar{x} + 2\pi, y) = \psi(\bar{x}, \bar{y})$  et comme  $\psi(\bar{x} + 2\pi, y) = \psi(\bar{x}, y)$  on en déduit que  $y = \bar{y}$ . En conclusion, on en déduit que lorsque  $x = \bar{x} + 2\pi$ ,  $(y, z) = (\bar{y}, \bar{z})$  et donc que tout point initialement en  $(\bar{y}, \bar{z})$  sur le plan transverse à l'écoulement positionné

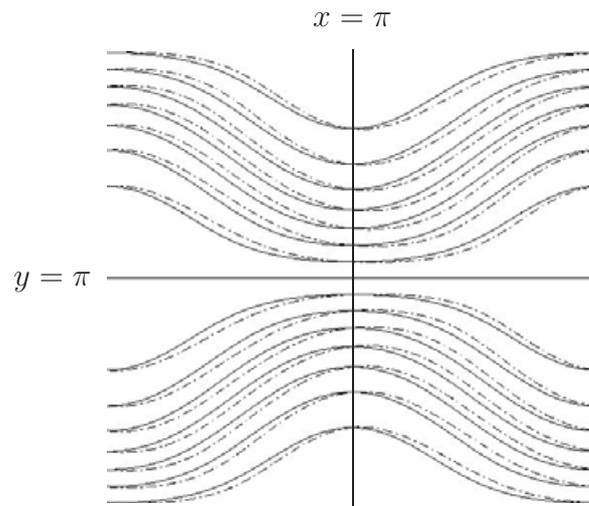


FIG. 6.8 – Comparaison dans le plan moyen entre les lignes de courant à l'ordre 0 en  $\epsilon Re \psi_0$  (lignes continues) et  $\psi = \psi_0 + \epsilon Re \psi_1$  (— · —) les lignes de courant à l'ordre 1. Image extraite de [19].

en  $\bar{x}$  conservera la même position quelque soit le plan transverse fixé en  $\bar{x} + 2k\pi$  avec  $k \in \mathbb{N}$ . En d'autres termes tout point dans la section de Poincaré sera un point fixe.

La figure 6.8 indique l'évolution des lignes d'émission (trajectoires) dans le plan moyen. L'effet de la prise en compte des effets inertiels se traduit par la brisure de la symétrie de réflexion par rapport au plan  $x = \pi$ . La conséquence de cette symétrie brisée est le déplacement des traceurs passifs en  $x = 2\pi$  relativement à leur position initiale en  $x = 0$ . Les lignes d'émission à l'ordre 0 préservent quant à elles cette symétrie. Ce point est consistant avec la preuve précédente indiquant que tout point dans la section de Poincaré est un point fixe lorsque le champ de vitesse considéré est d'ordre 0.

### Deformation des parois dans les directions $x$ et $y$ nécessaire

Nous nous plaçons maintenant dans la situation où le nombre de Reynolds est non nul. Si on considère une paroi uniquement déformée dans la direction  $y$ , c'est à dire de la forme :

$$Z_- = \frac{\epsilon}{2}(1 + \sigma \cos y),$$

nous avons pu observer numériquement que tout point dans la section de Poincaré est un point fixe du fait que toute trajectoire est une trajectoire rectiligne. Ce résultat est attendu pour un écoulement inertiel dans un canal rectiligne pour lequel il est possible de trouver une solution unidirectionnelle aux équations de Navier-Stokes. La vitesse n'ayant qu'une composante longitudinale cela impose alors que les trajectoires soient rectilignes.

Si on considère maintenant une paroi uniquement déformée dans la direction  $x$ , c'est-à-dire de la forme :

$$Z_- = \frac{\epsilon}{2}(1 + \sigma \cos x),$$

les trajectoires évoluent dans les plans  $(x, z)$  et le déplacement des traceurs dans la section de Poincaré se fait uniquement dans la direction  $z$ . On peut conclure de la preuve menée

au paragraphe précédent et des observations réalisées sur des géométries déformées dans une seule direction que c'est le couplage des effet inertiels et de la déformation 3D des parois supérieure et inférieure qui génèrent une dispersion des traceurs passifs dans le plan transverse à l'écoulement.

### Topologie : index de Poincaré, caractéristique d'Euler

Quelque soit le  $\epsilon$ ,  $Re$ ,  $\sigma$  dans la gamme de paramètres que nous avons choisie de traiter, la section de Poincaré possède la structure présentée sur la figure 6.4. La sensibilité aux paramètres numériques montrent que la variation avec les paramètres numériques du module des valeurs propres complexes conjuguées de  $F$  associées aux points fixes  $C$  et  $D$  est de l'ordre de l'erreur numérique commise sur le calcul des trajectoires. Les résultats (tableau 6.2) indiquent que ces points fixes sont des centres, fait corroboré par l'augmentation du nombre de cycles limites autour de ceux ci lorsque que l'on augmente le nombre de points de collation dans le calcul du champ de vitesse. Pour conforter cette conclusion nous avons calculé les index de Poincaré associées aux point fixes dans la section de Poincaré dont on a donné ci-dessous une représentation schématique (figure 6.9). D'après le théorème de Poincaré [12], la somme des index de Poincaré est égale à la caractéristique d'euler du domaine considéré. Pour calculer ces index, il faut définir un contour fermé autour de chaque point fixe. On se donne le champ de vitesse  $\vec{v}$  associé à la dynamique dans la section de Poincaré en chaque point du contour. L'index de Poincaré correspond alors au nombre de tour dans le sens inverse des aiguilles d'une montre réalisé par  $\vec{v}$  dans la base  $(O, y, z)$  lorsque le contour fermé est parcouru dans le sens inverse des aiguilles d'une montre. C'est ainsi que les points fixes  $C$  et  $D$  et leurs symétriques sont associés à des indices  $+1$ , les points  $A$ ,  $B$  à des indices  $-1$  et les points de séparation ou réattachement de type  $E$  sont associés à l'index  $-1/2$ . Sur la figure 6.9 les étoiles correspondent aux points selles (associés à des valeurs propres de  $F$  réelles, telles que  $0 < \lambda_1 < 1 < \lambda_2$ ), les cercles pleins à des points fixes elliptiques (centres associés à des valeur propres de  $F$  complexes conjuguées de module 1), et enfin les cercles vides à des points fixes paraboliques (points de séparation et réattachement). En sommant les index de Poincaré on trouve bien  $\chi = 0$ . Ceci est cohérent avec la caractéristique d'Euler  $\chi = 0$  d'un cylindre<sup>2</sup>.

## 6.4.2 Etude quantitative

### Position points fixes

Dans la suite nous étudions la position des points fixes  $B$ ,  $C$  et  $D$  en fonction de  $\sigma$  et  $Re$ . L'étude sur  $E$  ne sera pas développée car ce point fixe se situant près de la parois, les méthodes de Newton élaborées pour le calcul de la position des autres points fixes ne peuvent pas être adaptées. On considèrera cependant qu'il se situe à la verticale du point  $B$  les deux points fixes étant reliés par une séparatrice. En réalité, numériquement cette variété liant le point fixe hyperbolique  $B$  et le point fixe parabolique  $E$  n'est pas présente et on se retrouve dans une situation présentée figure 6.10. Sur cette figure le point fixe  $C$  est représenté par un cercle plein et le point fixe  $D$  par un cercle vide.

<sup>2</sup>L'évolution des trajectoires dans la section de Poincaré est périodique dans la direction  $y$ .

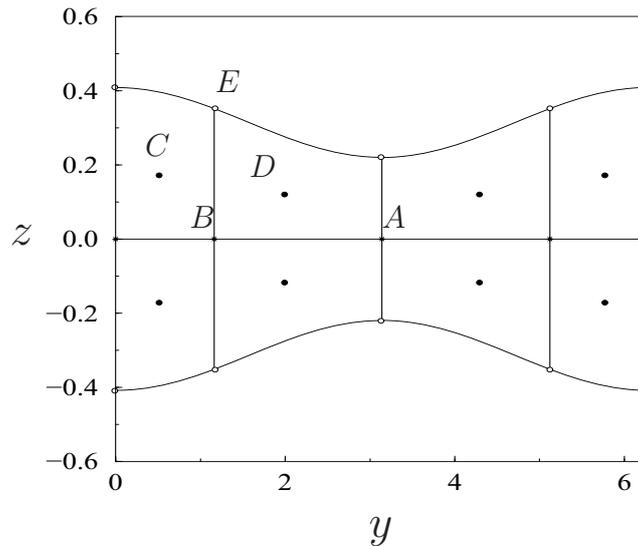
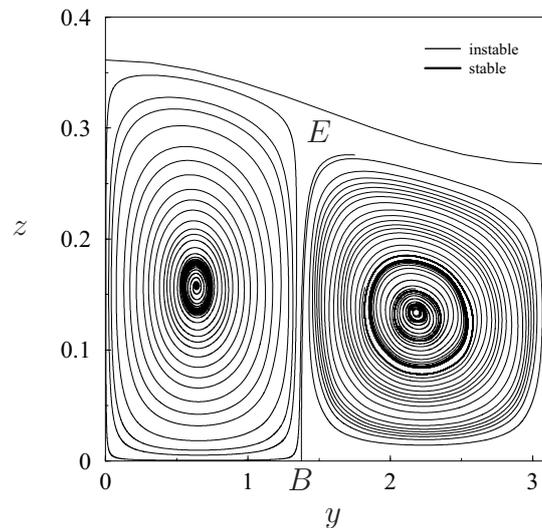


FIG. 6.9 – Représentation schématique des invariants dans la section de Poincaré.

FIG. 6.10 – Quart supérieur gauche de la section de Poincaré calculé avec une résolution  $N_x+1 = N_y+1 = 64$ . Les paramètres sont  $\sigma = 0.15$ ,  $Re = 100$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ .

En augmentant  $N_x$ , il devient de plus en plus difficile de trouver des conditions initiales associées à des trajectoires qui coupent le segment  $E$  et  $B$ . De la même manière que nous avons pu conclure que les points fixes  $C$  et  $D$  étaient des points fixes elliptiques relativement à la précision numérique, nous considérons ici que  $B$  et  $E$  sont reliés par une connection hétérocline. Par ailleurs notons que le nombre de cycles limites que l'on distingue sur la figure 6.10 par l'accumulation des trajectoires au temps long, varie également avec la résolution numérique. Dans la limite d'une résolution infinie et du fait que l'on ait considéré dans cette limite là que  $C$  et  $D$  sont des centres, on s'attend à ce que toute condition initiale au voisinage de ces points fixes soit sur un cycle limite.

Les figures (6.11, 6.12 et 6.13) indiquent l'évolution de la position des point fixes lorsque  $\sigma$  varie. Ces courbes montrent que pour  $\sigma \rightarrow 0$ , les abscisses des points fixes

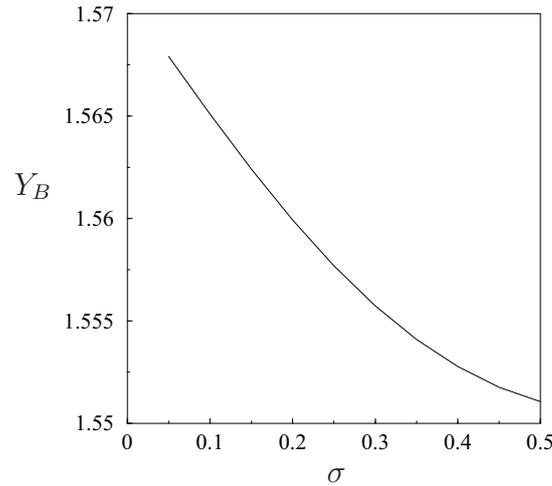


FIG. 6.11 – Variation de la position de B ( $Y_B, 0$ ) avec  $\sigma$ ,  $Re = 50$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = 512$ .

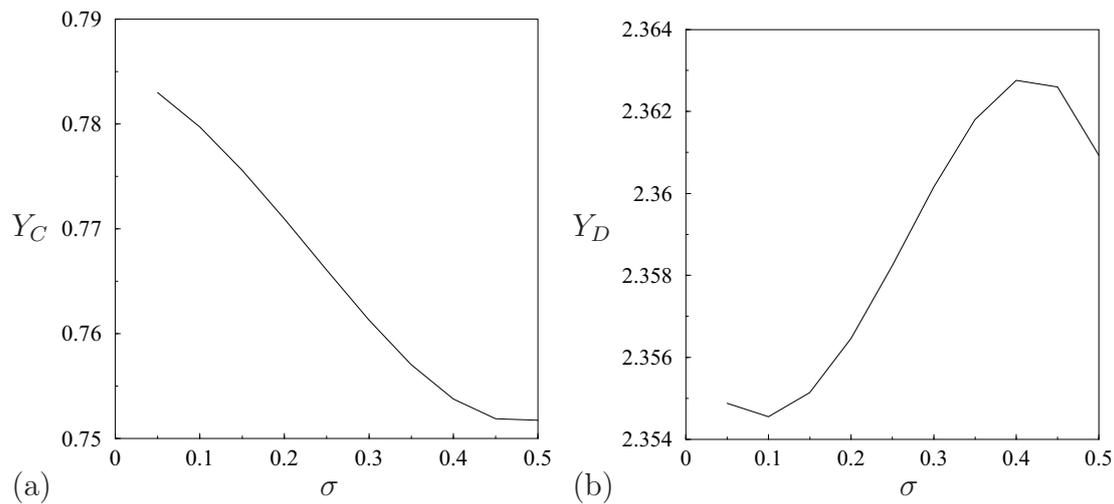


FIG. 6.12 – (a) Variation de  $Y_C$  avec  $\sigma$ , (b) Variation de  $Y_D$  avec  $\sigma$ . Les paramètres sont  $Re = 50$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = 512$ .

dans la section de Poincaré évoluent de sorte que  $Y_C \rightarrow \pi/4$  (figure 6.12a),  $Y_B \rightarrow \pi/2$  (figure 6.11),  $Y_D \rightarrow 3\pi/4$  (figure 6.12b). Pour interpréter ce résultat, nous nous intéressons aux symétries du problème. La section de Poincaré présente dans chaque quart deux circulations contra-rotatives. Il est possible de montrer qu'il ne peut n'y en avoir qu'une. La raison tient au fait que le quart supérieur gauche (celui représenté sur la figure 6.10) est le symétrique du quart supérieur droit. L'image de la moitié supérieure de la section de Poincaré que l'on aurait en la représentant dans le plan  $x = \pi$  doit être topologiquement équivalente à celle dans le plan  $x = 0$ . Elle s'obtient en fait tout simplement en plaçant le quart supérieur droit de la section en  $x = 0$  dans le quart supérieur gauche et, inversement, le quart supérieur gauche de la section en  $x = 0$  dans le quart supérieur droit (figure 6.14(a,b)). Ceci est la conséquence de la périodicité de la section dans direction  $y$ . La

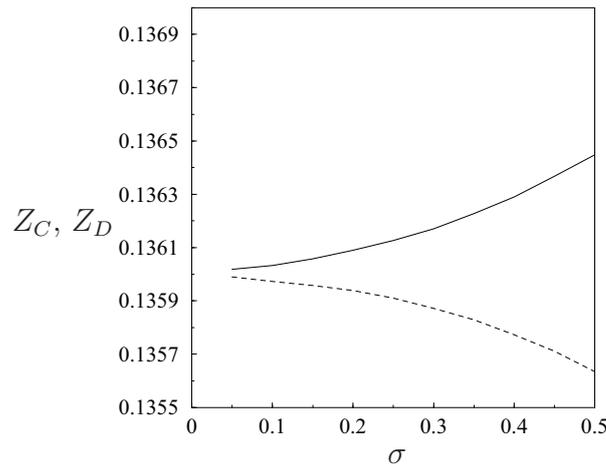


FIG. 6.13 – Variation de  $z_C$  (continu)  $z_D$  (tirets) avec  $\sigma$ ,  $Re = 50$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = 512$ .

section ainsi obtenue est bien topologiquement équivalente. Mais si il n'y avait qu'une recirculation dans chacun des quarts, la circulation dans le quart supérieur gauche serait contra-rotative à celle du quart supérieur droit. La même opération conduirait à une section de Poincaré dans le plan  $x = \pi$  différente de celle dans le plan  $x = 0$  car les circulations dans chacun des quarts y seraient de sens opposé (figure 6.14(c,d)). En réalité, tout nombre pair de rouleaux dans chaque quadrant satisfait cette condition d'invariance bien que le nombre sélectionné par le système soit deux dans notre cas.

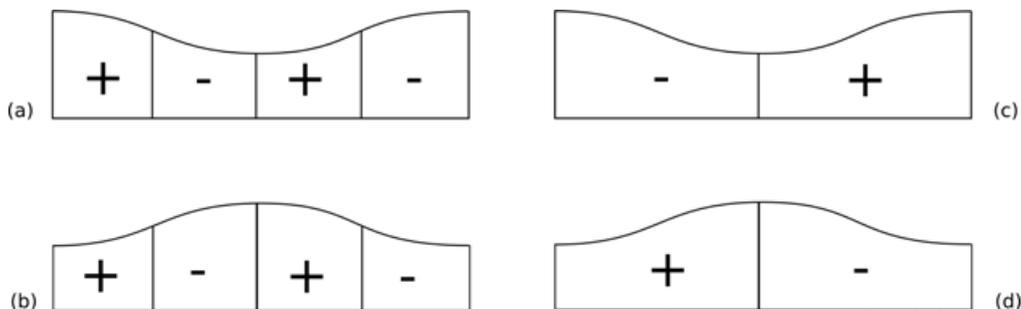


FIG. 6.14 – Vue schématique des circulations dans le demi-plan supérieure d'une section de Poincaré en  $x = 0$  (a,c) et  $x = \pi$  (b,d). L'image montre que l'on ne peut avoir une seule circulation dans chaque quart sans violer l'invariance topologique de l'application (voir texte).

Dans la direction  $z$ , la position des points fixes  $C$  et  $D$  tend vers une même valeur  $Z \approx 0.1360$  lorsque  $\sigma \rightarrow 0$  avec  $\epsilon = 2\pi/10$  (figure 6.13). Cette position dépend d'ailleurs linéairement de  $\epsilon$  comme le montre les colonnes 5 et 7 du tableau 6.3. Les figures (6.15, 6.16 et 6.17) montrent que l'évolution de la position des points fixes est linéaire avec le nombre de Reynolds quelque soit le  $\sigma$ .

$\epsilon$	$Y_B$	$Z_B$	$Y_C$	$Z_C$	$Y_D$	$Z_D$
$2\pi/10$	1.55993399	0.	0.770974556	0.136089614	2.35645671	0.135938839
$2\pi/50$	1.57081025	0.	0.778060037	0.0272024766	2.36352793	0.0272024862
$2\pi/100$	1.570761	0.	0.778056495	0.0136011466	2.36352836	0.0136012679
$2\pi/500$	1.57027822	0.	0.779563375	0.00248556915	2.349959	0.0024919402

TAB. 6.3 – Evolution des positions avec  $\epsilon$  pour une géométrie section de Poincaré rectangulaire. Les paramètres sont  $\sigma = 0.3$ ,  $Re = 100$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = 512$ .

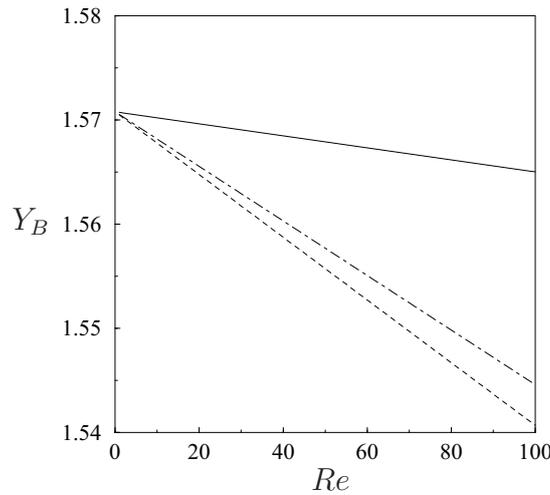


FIG. 6.15 – Variation de la position de B ( $Y_B, 0$ ) avec  $Re$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = 512$ . La représentation des courbes indique (lignes continues)  $\sigma = 0.05$ , (tirets-pointillés)  $\sigma = 0.25$  (tirets)  $\sigma = 0.3$ .

### Valeurs propres

La figure 6.18a représente l'évolution des valeurs propres de  $I - F$  calculée autour du point fixe  $B$  en fonction de  $\sigma$  pour  $Re = 50$ . La direction propre  $z$  est une direction stable<sup>3</sup> alors que la direction propre  $y$  est instable. Ce point est consistant avec les résultats obtenus pour le point fixe  $A$  où la direction propre instable est la direction  $z$  alors que la direction propre stable est  $y$  (résultats non présentés ici). La figure 6.18b montre l'évolution de la partie imaginaire des valeurs propres complexes conjuguées de  $F$  calculée autour du point fixe  $C$ . On ne donne pas ici l'évolution autour du point fixe  $D$ , celle-ci est qualitativement et quantitativement similaire à celle de  $C$ . Nous avons vu précédemment que les points fixes  $C$  et  $D$  étaient des points fixes elliptiques. La partie imaginaire des valeurs propres est liée au taux de rotation du champ de vitesse dans la section de Poincaré autour de ces points fixes. En d'autres termes, lorsqu'un traceur se trouve au voisinage du point fixe, ses déplacements successifs évoluent sur une trajectoire fermée assimilée à un cercle et le déplacement entre deux itérations successives est lié au taux de rotation

<sup>3</sup>Pour ce point, on qualifie une direction propre de stable (resp. instable) lorsque la valeur propre qui lui est associée est positive (resp. négative).

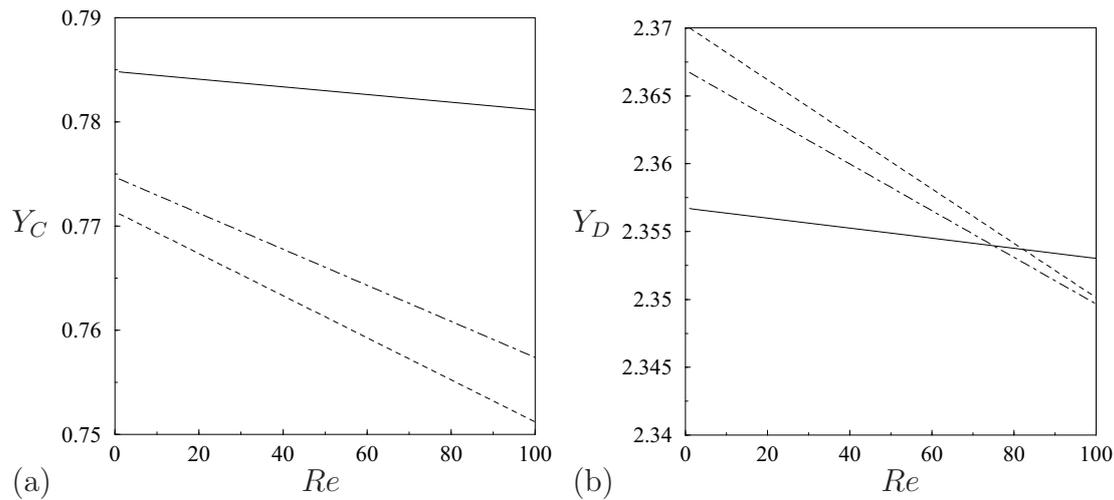


FIG. 6.16 – (a) Variation de  $Y_C$  avec  $Re$ , (b) Variation de  $Y_D$  avec  $Re$ . Les paramètres sont  $Re = 50$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = 512$ . La représentation des courbes indique (lignes continues)  $\sigma = 0.05$ , (tirets-pointillés)  $\sigma = 0.25$  (tirets)  $\sigma = 0.3$ .

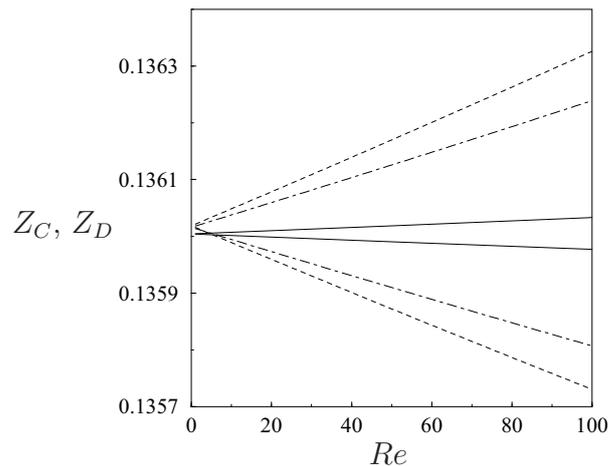


FIG. 6.17 – Variation de  $z_C$  (lignes épaisses)  $z_D$  (lignes fines) avec  $Re$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = 512$ . La représentation des courbes indique (lignes continues)  $\sigma = 0.05$ , (tirets-pointillés)  $\sigma = 0.25$  (tirets)  $\sigma = 0.3$ .

et à sa distance initiale au point fixe. La figure 6.18b indique comment ce déplacement évolue non-linéairement avec  $\sigma$ .

La figure 6.19a indique l'évolution des valeurs propres de  $I - F$  selon les directions propres  $y$  et  $z$ . Quelque soit  $\sigma$  cette évolution est linéaire. Il en est de même pour la partie imaginaire des valeurs propres complexes conjuguées associées au calcul de  $F$  autour des points fixes elliptiques (figure 6.19b). On confirme ainsi nos observations sur les résultats numériques indiquant que le déplacement entre deux itérés successifs dans la section de Poincaré évolue linéairement avec le nombre de Reynolds du moins dans le voisinage des points fixes.

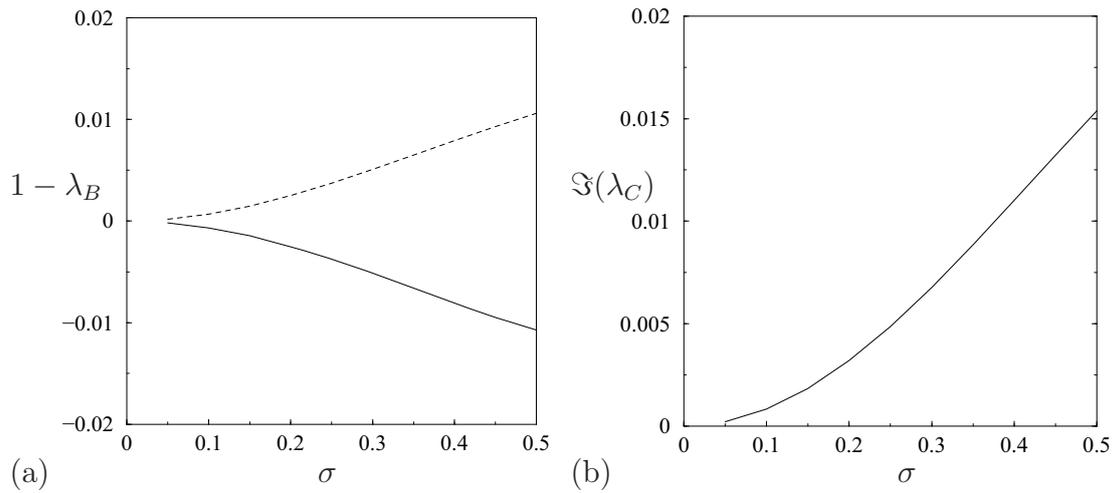


FIG. 6.18 – (a) Variation des valeurs propres de  $I - F$  calculés autour de  $B$  avec  $\sigma$ , (ligne continue)  $1 - \lambda_y(B)$  (lignes pointillées)  $1 - \lambda_z(B)$ . (b) Variation de  $\Im(\lambda(C)) \sim \Im(\lambda(D))$  avec  $\sigma$ ,  $Re = 50$ ,  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = N_y + 1 = 512$ .

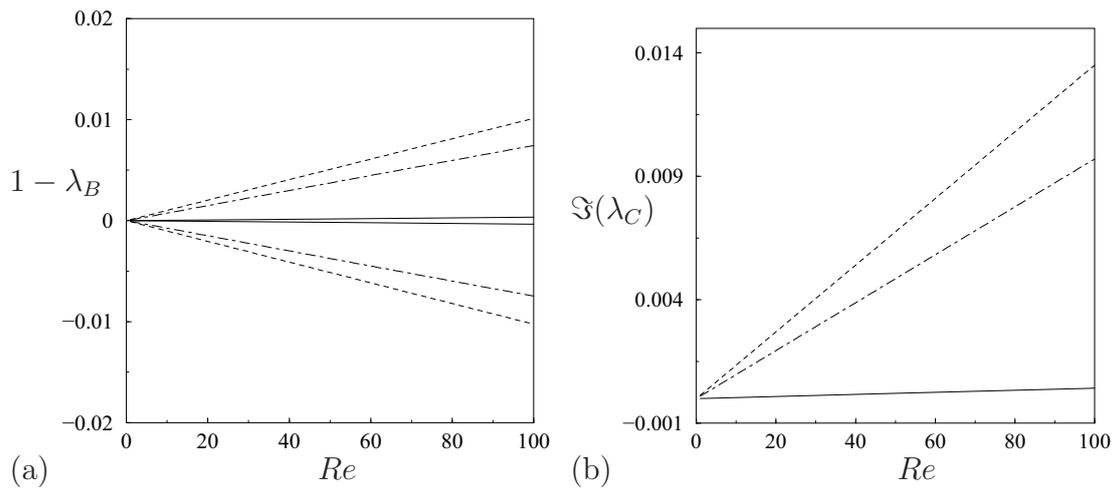


FIG. 6.19 – (a) Variation des valeurs propres de  $I - F$  avec  $Re$  (lignes fines)  $\lambda_y(B)$  et (lignes épaisses)  $\lambda_z(B)$ . Les lignes continues correspondent à  $\sigma = 0.05$ , les tirets-pointillés  $\sigma = 0.25$ , les pointillés  $\sigma = 0.3$ , (b) Variation de  $\Im(\lambda(C))$  avec  $Re$ . Les paramètres sont  $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = 512$ . (lignes continues) :  $\sigma = 0.05$ , (tirets-pointillés) :  $\sigma = 0.25$ , (tirets) :  $\sigma = 0.3$ .

De nombreux résultats obtenus sur ce problème n'ont pas été reportés dans ce manuscrit, certains étant toujours en cours. En particulier nous n'avons pas détaillé les résultats obtenus par simulation directe des équations de Navier-Stokes. Pour ce cas, un zoom de la section de Poincaré au voisinage d'un cycle limite entourant le point fixe  $C$  est représenté figure 6.20. La régularité avec laquelle les points parcourent le cycle limite est étonnante, cette situation n'ayant pas été observée dans les simulations où le calcul du champ de vitesse est réalisé par l'approximation de lubrification.

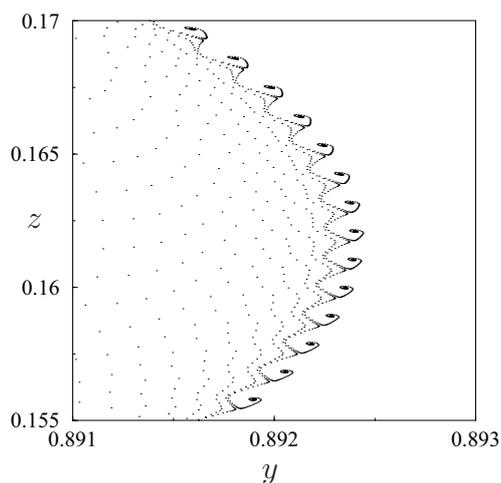


FIG. 6.20 – Zoom sur un cycle limite obtenu dans la section de Poincaré autour du point fixe  $C$  par résolution directe des équations de Navier-Stokes. Les paramètres sont  $\sigma = 0.3$ ,  $Re = 100$   $\epsilon = 2\pi/10$ ,  $\Delta_x = 2\pi/10000$ ,  $N_x + 1 = N_y + 1 = 256$ ,  $N_z = 30$ .

Une partie des travaux en cours visent à élucider ce comportement.



# Bibliographie

- [1] C. AMON AND H. M. GUZMÁN & B. MOREL, Lagrangian chaos, Eulerian chaos and mixing enhancement in converging-diverging channel flow. *Phys. Fluids* **8**, 5, 1192 (1996).
- [2] H. AREF, Stirring by chaotic advection. *J. Fluid Mech.* **143**, 1 (1984).
- [3] H. AREF Chaotic advection of fluid particles. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **333**, 273 (1990).
- [4] H. AREF, Order in chaos. *Nature* **401**, 6755 (1999).
- [5] A. BERTSCH, S. HEIMGARTNER, P. COUSSEAU & P. RENAUD, Static micromixers based on large-scale industrial geometry. *Lab Chip* **1**, 56 (2001).
- [6] J. P. BOYD , Chebyshev & and Fourier Spectral Methods. Springer-Verlag, Berlin (1999).
- [7] J. R. CHAIKEN, M. CHEVRAY, M. TABOR & Q. M. TAN, Experimental study of Lagrangian turbulence in Stokes flow. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **408**, 165 (1986).
- [8] W. L. CHIEN, H. RISING & J. M. OTTINO, Laminar mixing and chaotic mixing in several cavity flows. *J. Fluid Mech.* **170**, 355 (1986).
- [9] J. G. FRANJIONE & J. M. OTTINO, Symmetry concepts for the geometric analysis of mixing flows. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **338**, 301 (1992).
- [10] J. GUCKENHEIMER & P. HOLMES, Nonlinear oscillations, dynamical systems, and bifurcations of vector fields. Springer-Verlag, New-Work Inc., (1983).
- [11] Y. HUIQIAN, N. T. NGUYEN, X. HUANG, Micromixer based on taylor dispersion. *J. Phys. : Conference Series* **34** 136 (2006).
- [12] S. C. JANA, G. METCALFE & J. M. OTTINO, Experimental and computational studies of mixing in complex Stokes flows : the vortex mixing flow and multicellular cavity flows. *J. Fluid Mech.* **269**, 199 (1994).
- [13] S. W. JONES, O. M. THOMAS & H. AREF, Chaotic advection by laminar-flow in a twisted pipe. *J. Fluid Mech.* **209**, 335 (1989).
- [14] D. V. KHAKHAR, J. G. FRANJIONE & J. M. OTTINO, A case study of chaotic mixing in deterministic flows : the partitioned pipe mixe. *Chem. Engng Sci.* **42**, 2909 (1987).
- [15] A. KROUJILINE AND H. A. STONE, Chaotic streamlines in steady bounded three-dimensional Stokes flows. *Physica. D* **130**, 1-2, 105 - 132, (1994).
- [16] H. A. KUSCH & J. M. OTTINO, Experiments on mixing in continuous chaotic flows. *J. Fluid Mech.* **236**, 319 (1992).
- [17] B. S. LEE AND I. S. KANG & H. C. LIM, Chaotic mixing and mass transfer enhancement by pulsatile laminar flow in an axisymmetric wavy channel. *Int J. Heat and mass transfer* **42**, 14, 2571 (1999).
- [18] R. H. LIU, M. A. STREMLER, K. V. SHARP, M. G. OLSEN, J. G. SANTIAGO, R. J. ADRIAN, H. AREF & D. J. BEEBE, Passive mixing in a three-dimensional serpentine microchannel. *IEEE J. Microelectromech. Syst.* **9**, 190 (2000).

- [19] D. LO JACONO, F. PLOURABOUÉ, & A. BERGEON, Weak-inertial flow between two rough surfaces. *Phys. Fluids* **17**, 063602 (2005).
- [20] G. METCALFE, M. RUDMAN, A. BRYDON & L. GRAHAM, Numerical mixing experiments in the rotated arc mixer. In Proc. 6th World Cong. Chemical Engineering, Melbourne, Australia, (2001).
- [21] G. METCALFE, M. RUDMAN & L. GRAHAM, Chaotic structures from continuous blending. In Proc. 19th Annual Meeting of the Polymer Processing Society, Melbourne, Australia. (2004).
- [22] N. T. NGUYEN & Z. WU, Micromixers—a review. *J. Micromech. Microeng.* **15**, R1 (2005).
- [23] J. M. OTTINO, The kinematic of mixing : stretching, chaos and transport. Cambridge University Press, (1989).
- [24] M. PRAT, F. PLOURABOUÉ & N. LETALLEUR, Average Reynolds equation for flow between rough surfaces in sliding motion. *Transp. Porous Media* **48**, 291 (2002).
- [25] A. D. STROOCK, S. K. W. DERTINGER, A. AJDARI, I. MEZIĆ, H. A. STONE & G. M. WHITESIDE, Chaotic mixer for microchannels. *Science* **295**, 647 (2002).
- [26] W. TUCKER, Computing accurate Poincaré maps. *Physica D* **171**, 127 (2002).
- [27] G. M. WHITESIDES The origins and the future of microfluidics. *Nature* **44**, 368 (2006).
- [28] S. WIGGINS & J. M. OTTINO Foundations of chaotic mixing. *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A* **362**, 937 (2004).

# Chapitre 7

## Conclusion

Cette thèse qui aborde des problématiques plutôt fondamentales apporte une contribution à l'étude des solutions dans le régime non-linéaire des écoulements confinés. Divers exemples ont été traités dont on résume les principaux résultats dans ce chapitre.

### 7.1 Instabilités de Marangoni-Bénard

La convection de Marangoni d'origine thermocapillaire et soluto-capillaire a été étudiée ici dans des géométries cylindriques ou des couches fluides bidimensionnelles de grande extension horizontale. L'étude a été menée sur l'instabilité de Marangoni-Bénard seule (c'est à dire en absence de gravité) pour un fluide dont la surface libre est plane et indéformée par l'écoulement. La surface rigide inférieure est maintenue à température constante et sur la surface libre qui lui fait face est appliqué un flux de chaleur constant. Ces deux études n'ont pas eu les mêmes objectifs.

L'étude des cavités cylindriques a eu pour objet de mettre à jour l'impact des contraintes géométriques induites par le confinement du fluide dans des cylindres de rapports d'aspect modéré i.e. dont l'extension horizontale est d'ordre de grandeur de la profondeur. Nous y avons étudié, par voie numérique, les changements induits par le passage de cylindres à section transversale circulaire aux cylindres à section transversale elliptique. La méthodologie a été de tracer les diagrammes de bifurcation des solutions stationnaires et d'interpréter les changements par la théorie des bifurcations en présence de symétrie.

Ce travail a mis à jour que les équations discrétisées ne possédaient pas les mêmes propriétés de symétrie que les équations continues. Dans le cas des cylindres à section transversale circulaire, cette différence dépend de la méthode numérique choisie et elle est particulièrement importante dans notre cas où la discrétisation spatiale repose sur méthode spectrale aux éléments spectraux. Le système discret ne possède plus l'invariance par rotation autour de l'axe principal du cylindre mais les symétries discrètes du carré. L'impact est significatif tant au niveau de l'analyse linéaire que non-linéaire. Bien entendu, cet effet s'amenuise à mesure que la discrétisation augmente c'est à dire à mesure que le problème discret tend vers le problème continu. Nous avons analysé cet impact dans le cas circulaire et dans le cas elliptique. Les résultats obtenus sur ce problème ont été publiés dans l'article "Nonlinear Marangoni convection in circular and elliptical cylinders", *Phys. Fluids*, 104101 (2007).

L'idée d'étudier le passage de cylindres à section transversale circulaire à des cylindres à section transversale elliptique est initialement motivé par le souhait d'étudier les écoulements oscillatoires produits par des bifurcations de Hopf lorsque le fluide est un mélange binaire sujet à l'effet Soret. L'étude que nous avons présentée sur ce sujet n'est pas complète. Historiquement, la première raison est que l'étude des fluides à un composant menée en parallèle a révélé la problématique que nous avons décrite sur les symétries des équations discrétisées et sur laquelle nous avons concentré une partie de nos efforts. La seconde tient au fait que nos résultats préliminaires n'ont pas révélé de différences significatives de comportement d'avec une étude déjà menée par Bergeon et Knobloch sur les cavités tridimensionnelles à section horizontale carrée et presque carrée (rectangle). Dans ce manuscrit, nous avons toutefois voulu présenter les résultats préliminaires mais beaucoup reste à faire. En particulier, le scénario sur la dynamique non-linéaire reste à confirmer par une étude plus approfondie notamment dans la région où les ondes tournantes à deux fréquences disparaissent via une bifurcation globale. De plus, nous n'avons conduit ce travail que pour un ensemble de paramètres mais les possibilités sont nombreuses. Ceci représente l'extension naturelle à ce travail.

Le second point abordé dans ce travail concerne les états spatialement localisés dans des mélanges binaires sujets à l'effet Soret. Cette étude, conduite sur des cavités bidimensionnelles, n'était pas initialement dans les objectifs de ce travail de thèse. Elle fait suite à des travaux récents, publiés au cours de cette thèse, révélant l'existence d'états spatialement localisés dans la convection de Rayleigh-Bénard en présence d'un mélange fluide sujet à l'effet Soret (travaux menés par l'équipe du Professeur Mercader) et leur analyse théorique par l'équipe du Professeur Knobloch. Ce sont les points communs qu'il existe entre ce système et le notre qui ont inspiré cette partie de notre travail.

Nous avons mis en évidence la présence de branches de solutions stationnaires correspondant à des convectifs (rouleaux de convection spatialement localisés) dont le comportement en fonction du nombre de Marangoni correspond à celui identifié théoriquement par Burke et Knobloch et baptisé *homoclinic snaking*. Ces branches effectuent des aller-retours dans une gamme de nombre de Marangoni spécifique, chaque aller-retour étant associé à l'accroissement du nombre de convectifs. Nos travaux ont révélé qu'à ces branches se superposaient des solutions voisines mais dans lesquelles les convectifs oscillent périodiquement et sont encerclés par une onde stationnaire de plus faible amplitude.

La manière dont ces solutions stationnaires sont liées aux solutions stationnaires spatialement localisés que nous avons mis en évidence, requiert un travail supplémentaire qui peut inclure le développement d'outils numériques spécifiques. L'interprétation que nous en avons faite n'est pas complète car leur origine n'y est pas formellement identifiée. A ce titre, l'une des perspectives naturelles est d'étudier des cavités de plus grands rapport d'aspect comme cela a été fait dans le cas de la convection de Rayleigh-Bénard. Dans ce cas, les résultats numériques et expérimentaux ont montré une structuration de l'écoulement similaire mais où les convectifs sont encerclés par un système d'ondes progressives. Il existe un nombre considérable d'extensions possibles à ce travail avec en particulier, l'étude des cas tridimensionnels ou l'impact des effets de taille finie (conditions aux limites le long des parois latérales).

## 7.2 Ecoulements entre surfaces texturées

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés aux propriétés de transport des écoulements entre surfaces texturées dans le régime faiblement inertiel. Ce travail est prospectif et nous avons cherché à caractériser ces écoulements dans des configurations simples, en fonction des paramètres  $\epsilon \ll 1$ ,  $\epsilon\sigma$  et  $Re$  représentant respectivement l'ouverture moyenne de la géométrie, l'amplitude des oscillations des parois et le nombre de Reynolds. Notre étude a principalement porté sur l'impact de ces deux derniers paramètres sur le transport lagrangien que l'on a décrit par le calcul des trajectoires d'une distribution de traceurs passifs. Notre premier objectif était de déterminer la capacité de mélangeur de ce type d'écoulement. Pour ce faire, nous avons mis en place différents outils numériques permettant de calculer la réduction de la dynamique à la section de Poincaré et de calculer la position des points fixes ainsi que leur nature par le biais du calcul de valeurs propres de la matrice de Floquet. Les résultats ont révélé une structure particulière pour cet écoulement.

A partir d'une situation où toutes les trajectoires étaient périodiques dans l'approximation de Stokes, la prise en compte des effets inertiels couplée à la présence d'une déformation des parois selon les deux directions longitudinales a permis de faire apparaître différents invariants, tels que des points fixes elliptiques, hyperboliques et des connections hétéroclines entre différents points fixes hyperboliques. Ces invariants tels que nous les avons obtenus restent dans les configurations étudiées des barrières au mélange. Cependant la comparaison avec d'autres systèmes présentés dans la littérature indique qu'ils peuvent être les éléments de base autour desquels une perturbation judicieuse du système peut générer les étirements et repliements caractéristiques des situations de mélange.

Dans l'objectif de préparer les bases d'une future étude portant sur le sujet nous avons détaillé l'évolution de ces invariants avec les paramètres caractéristiques du problème. En particulier, nous avons pu vérifier l'évolution linéaire de la position des points fixes avec le nombre de Reynolds ainsi que l'amplitude des valeurs propres associées à la matrice de Floquet calculée autour des points fixes hyperboliques et elliptiques. L'évolution de la position des points fixes en fonction du paramètre  $\sigma$ , est plus complexe. On a pu cependant remarquer un regain de symétries de la section pour des  $\sigma$  faibles.

En perspectives, la solution aux faibles  $\sigma$  laisse présager que la dynamique dans la section de Poincaré pourrait être Hamiltonienne dans cette limite. Notre objectif sera dans un premier temps de confirmer ou d'infirmer cette hypothèse. Deux pistes sont envisageables, la première étant de développer asymptotiquement l'application de Poincaré aux faibles  $\sigma$ , la seconde étant de vérifier la nullité de la divergence du champ de vitesse associé à la dynamique dans la section de Poincaré. A partir des informations extraites de ces deux études, on pourrait enfin imaginer une perturbation judicieuse de la géométrie pouvant générer une situation de mélange.