

Université de Toulouse



### En vue de l'obtention du

### DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Université Toulouse 3 Paul Sabatier (UT3 Paul Sabatier)

Cotutelle internationale avec :

### Présentée et soutenue par : Cédric Beaume

Le lundi 22 octobre 2012

Titre :

Etats localisés dans les systèmes fluides : application à la double diffusion

ED MEGEP : Dynamique des fluides

**Unité de recherche :** Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse (IMFT)

#### Directeur(s) de Thèse :

Prof. Alain Bergeon (IMFT, Université de Toulouse)

#### **Rapporteurs :**

Prof. Uwe Ehrenstein (IRPHE, Université de Provence, Marseille) Dr. Daniel Henry (LMFA, Ecole Centrale de Lyon)

#### Autre(s) membre(s) du jury :

Prof. Edgar Knobloch (University of California, Berkeley) Dr. David Lo Jacono (IMFT, Université de Toulouse) Prof. Isabel Mercader (Universitat Politècnica de Catalunya, Barcelona) Prof. Abdelkader Mojtabi (IMFT, Université de Toulouse) Dr. Laurette S. Tuckerman (PMMH-ESPCI, Paris)

### Remerciements

Bien qu'une thèse ne soit signée que par l'étudiant, elle n'en est pas moins le résultat de rencontres, d'interactions et de collaborations. A ce titre, cette page revêt une importance particulière, même si elle ne représente qu'une maigre récompense pour tous ceux qui ont participé, de près ou de loin.

Je commence donc par remercier chaleureusement Alain Bergeon pour son encadrement. Je regarde maintenant le déroulement de ces trois années et me rends compte que ta pédagogie a été parfaite (toi qui ne voulais pas enseigner...) : tu as su forcer la communication quand j'en avais besoin et me laisser les libertés dont j'avais envie. Au-delà de cela, je te suis extrèmement reconnaissant de m'avoir permis de me frotter à d'autres aspects de la vie de chercheur, comme l'enseignement ou l'élaboration de dossiers de financement, et de m'y avoir encouragé.

I also thank Edgar Knobloch for his non-official supervision. You have been extremely generous with your time. Our discussions have been productive and fruitful, and my thinking has been enriched as a result of your different ways of thinking. I also thank you for the invitation to stay at Berkeley for 3 months. This period was scientifically and culturally enriching for me. I felt very welcome in your group and also thank Hsien-Ching and Jianbo for their kindness during my stay and enjoyable discussions. You made me realize that sharing problems with people who have a different background is a blessing!

La qualité de ce manuscrit a été considérablement améliorée par la relecture attentive des rapporteurs, Uwe Ehrenstein et Daniel Henry, ainsi que par les suggestions des autres membres du jury : David Lo Jacono, Isabel Mercader, Abdelkader Mojtabi et Laurette S. Tuckerman. Je vous en remercie et espère que votre lecture a été (et sera dans cette version améliorée) agréable.

Je souhaite remercier Franck Plouraboué, qui m'a initié à la recherche lors de mon stage de Master. Tu m'as permis de travailler dans d'excellentes conditions et je te remercie aussi pour les discussions et conseils que tu m'as donnés. Merci aussi à Pauline Assemat qui m'a permis de trouver ce stage, puis cette thèse et qui a su se mettre à mon niveau pour m'expliquer les bases des systèmes dynamiques.

Afin d'arriver au niveau scientifique adéquat pour faire cette thèse, j'ai bénéficié d'enseignements de grande qualité à l'Université de Toulouse et suis très reconnaissant de la pédagogie des enseignants que j'ai eu la chance d'avoir. Je remercie particulièrement Benoît Bédat, Alain Bergeon, Pierre Brancher, Patricia Cathalifaud, Abdallah Chalabi, François Charru, David Fabre, André Giovannini et Sébastien Tanguy. Merci aussi à Catherine Bouteillier pour les bons moments passés au secrétariat et les services rendus.

Je remercie aussi Anne, Marie, Marion, Ali, Bafétigué, Gerardo, Joel, Julien,

Romain Ga. et Romain Gu. pour la bonne humeur apportée au laboratoire et ailleurs, les pauses café et les rendez-vous hebdomadaires au Mijana.

I also thank those I met in Woods Hole who shared the final hours of my thesis. Thank you Alban for being such a nice room-mate, I now feel that sharing an apartment can be enjoyable (which was far from obvious as you know). Many thanks to Bevin, Duncan, Matt and especially to my partner-in-lateness Felicity for improving my English. You have all been so patient and willing! I also thank Pascale Garaud for sharing thoughts on double diffusion as well as George Veronis for allowing me to use his table-top experiment on salt fingering as well as for some helpful discussions about science and softball.

Enfin, je remercie l'IMFT et le Département de Mécanique de l'Université de Toulouse pour m'avoir offert un cadre de travail d'une "austérité monacale" (François Charru dixit) certes, mais très confortable et qui m'a permis de travailler au mieux de mes capacités.

Toulouse, le 4 novembre 2012

À Mila

## Table des matières

<b>1</b>	Introduction						
	1.1	Conve	ection de double diffusion	12			
		1.1.1	Configuration avec gradients de température et de concentra-				
			tion horizontaux	16			
		1.1.2	Configuration avec gradients de température et de concentration				
			verticaux	22			
	1.2	Conve	ection thermique en présence de rotation	27			
2	Eta	Etats spatialement localisés 4					
	2.1	Descri	iption théorique	41			
		2.1.1	Equation de Swift–Hohenberg	41			
		2.1.2	Snaking homocline	44			
		2.1.3	Protosnaking homocline	49			
		2.1.4	Effets de taille finie	50			
		2.1.5	Couplage avec un mode à grande échelle	51			
	2.2	Exem	ples physiques	54			
		2.2.1	Convection thermique en mélange binaire	54			
		2.2.2	Ecoulements cisaillés	58			
		2.2.3	Etudes expérimentales	60			
3	Mé	Méthodes numériques 6					
	3.1	Discré	tisation temporelle	67			
		3.1.1	Equations de conservation	67			
		3.1.2	Equation de Navier–Stokes pour un écoulement incompressible	68			
	3.2	Discré	tisation spatiale	71			
		3.2.1	Discrétisation par éléments spectraux	71			
		3.2.2	Inversion des opérateurs de Helmoltz	71			
	3.3	Métho	de de continuation	76			
		3.3.1	Algorithme de continuation	77			
		3.3.2	Méthode de point fixe	78			
		3.3.3	Analyse de stabilité linéaire	79			
	3.4	Valida	ations	80			
	C						
4	Cor	ivectio	n de double diffusion 2D	85			
	4.1	Introd		85			
		4.1.1	Formulation du problème	85			
		4.1.2	Propriétés de symétrie	86			

	4.2 Résultats					
		4.2.1 Solutions localisées stationnaires	87			
		4.2.2 Solutions localisées instationnaires	94			
	4.3	Publication	98			
5	Con	vection de double diffusion 3D	117			
0	5 1	5.1 Domaines étendus verticalement				
	0.1	5.1.1 Formulation du problème et symétries	117			
		5.1.2 Résultats	120			
	52	Domaine d'extension horizontale	120			
	0.2	5.2.1 Formulation du problème et symétries	120			
		5.2.1 Formulation du probleme et symetries	120			
	53	Publication	123			
	0.0		104			
6	Con	onvection thermique d'une couche fluide en rotation				
	6.1	Introduction	157			
		6.1.1 Formulation du problème	157			
		6.1.2 Propriétés de symétrie	159			
		6.1.3 Invariants	159			
	6.2	Résultats	160			
		6.2.1 Carte des régimes	160			
		6.2.2 Régime sous-critique	164			
		6.2.3 Régime super-critique	171			
	6.3	Publication	176			
7	Conclusion					
•	7 1	Convection de double diffusion 2D	210 914			
	7.1	Convection de double diffusion 3D	214			
	1.4 7 2	Convection thermique d'une couche fluide en retation	$\frac{210}{917}$			
	6.0	Convection thermique a une couche nuide en rotation	411			
8	Anr	nexe : Electrodynamique	221			

# Chapitre 1 Introduction

Cette thèse présente une étude non-linéaire de la formation de structures spatialement localisées dans deux systèmes fluides différents : la convection de double diffusion et la convection de Rayleigh-Bénard en présence de rotation. Si l'étude de la formation d'états spatialement localisés dans les systèmes dissipatifs a une longue histoire, ce n'est que depuis une dizaine d'années que leur mise en évidence dans un certain nombre de systèmes fluides a révélé leur influence sur la dynamique non-linéaire.

On qualifie d'état spatialement localisé une solution structurée d'une certaine manière dans une région de l'espace et structurée différemment partout ailleurs. Dans un système fluide, cela peut désigner un nombre fini de cellules de convection formées dans une région délimitée de l'espace, le reste du fluide étant au repos. Dans le contexte de la convection, ces structures ont été baptisées convectons si elles sont stationnaires et oscillons si elles sont instationnaires. Les exemples de formation de telles structures ne manquent pas, que ce soit en optique non-linéaire [50, 1], en chimie [55], en environnement [79, 53], ou en mécanique des milieux continus [20]. Dans les systèmes fluides, parmi les plus remarquables, on mentionnera les convectons observés en magnétohydrodynamique [13, 48], en convection thermosolutale en présence d'effet Soret [6, 2], en double-diffusion [10], les structures localisées dans l'écoulements de Couette [64], dans les films fluides minces [11], et les oscillons observés dans les suspensions colloidales [45] et les lits granulaires [76] soumis à des vibrations verticales.

L'interprétation mathématique de la formation de telles structures est plus simple dans les systèmes définis sur des domaines monodimensionnels infinis (donc invariants par translation) et équivariants par réflexion. Si l'on admet que le système possède deux états stationnaires A et B, un état localisé stationnaire peut alors s'interpréter comme un cycle hétérocline entre ces deux états qui peuvent être homogènes (uniformes) [38] ou structurés spatialement [37]. On considère principalement le cas où l'un des états, disons B, est structuré (par exemple périodique en espace) et l'autre homogène (uniforme). La connexion hétérocline dans la dynamique spatiale, représentée par les fronts liant les deux états A et B, permet de coincer la structure B au sein de la structure A. Un nombre important d'états spatialement localisés peut ainsi exister dans le voisinage du point d'apparition de cette connexion [56, 82, 24]. Ces différents états se situent sur une ou plusieurs branches qui serpentent dans cette région. Dans les systèmes variationnels (pour lesquels les solutions stationnaires correspondent aux minima d'une fonctionnelle de Lyapunov F), ces branches serpentent autour d'un point de Maxwell défini par le paramètre pour lequel les états A et B ont la même fonctionnelle (F(A) = F(B)). Il faut noter que cette région englobe également des solutions multipulses (formées de plusieurs structures localisées en des endroits différents) ainsi que des solutions asymétriques. Ce mécanisme de formation (appelé homoclinic snaking) a été analysé en détail par Burke & Knobloch sur l'équation de Swift-Hohenberg [15, 17, 16, 19, 18, 14]. Parce qu'il est au coeur des modalités d'apparition des structures localisées que nous considérons dans ce travail, nous y consacrons le chapitre 2 dans lequel nous présentons un certain nombre d'éléments issus de ces travaux et auxquels nous ferons référence tout au long de ce manuscrit.

Notre étude repose sur la simulation numérique. Etudier une région de l'espace des paramètres dans laquelle existe une multiplicité de solutions stables et instables nécessite l'emploi de méthodes spécifiques. Nous utilisons dans ce travail une méthode numérique de continuation reposant sur une discrétisation spatiale par éléments spectraux et le calcul des solutions stationnaires par méthode de point fixe. Nous présentons succintement dans le chapitre 3 les caractéristiques essentielles de la méthode appliquée aux problèmes que nous allons considérer.

Les chapitres 4 à 6 présentent les résultats de nos travaux sur la formation de structures spatialement localisées dans la convection de double diffusion et la convection de Rayleigh-Bénard en présence de rotation. Ils sont chacuns centrés sur des articles (publiés ou soumis) que nous incluons dans ce manuscrit. Le chapitre 7 présente les conclusions et perspectives de ce travail.

Nous avons également inclus dans ce manuscrit une annexe. Elle présente l'analyse du point de vue des systèmes dynamiques d'un problème d'électrodynamique. Cette annexe, relativement déconnectée du corps de ce travail de thèse a pour objectif d'illustrer les potentialités de ce type d'approche sur un système physique différent.

Dans la suite du présent chapitre, nous introduisons les deux configurations (convection de double diffusion et convection de Rayleigh-Bénard en présence de rotation) qui forment le coeur de ce travail.

### **1.1** Convection de double diffusion

La convection de double diffusion fait référence à un mécanisme dans lequel le mouvement du fluide est induit par la présence de deux quantités qui diffusent sur des échelles de temps différentes. Typiquement, il peut s'agir de diffusion de chaleur et de solvant/soluté au sein d'un mélange fluide pour lequel le temps caractéristique de diffusion solutale est largement supérieur à celui de la diffusion de chaleur, correspondant à des nombres de Lewis Le > 1. Une particule (un petit volume) de fluide initialement en équilibre thermique et solutal avec son milieu et déplacée vers un environnement à température et concentration différentes, s'équilibrera thermiquement avec le milieu qui l'entoure plus vite qu'elle ne le fera en concentration. La densité  $\rho$  de la particule fluide restera donc durant un certain temps, inférieure ou supérieure à celle du milieu qui l'entoure, temps durant lequel elle se déplacera par la poussée d'Archimède. Dans certaines conditions, ce mécanisme peut conduire à la formation d'un régime de convection permanent.

Etudiée depuis les années 60 [67], la convection de double diffusion est à l'origine d'une large variété de comportements hydrodynamiques dont les propriétés dépendent de l'orientation et de l'amplitude relative des gradients initiaux ou imposés [73, 74, 75]. Outre son implication dans un contexte océanographique [63], le mécanisme intervient dans une large gamme de situations incluant la géologie [31], l'astrophysique [66, 12], les procédés de fabrication par croissance cristalline [44, 81], la dynamique des suspensions colloidales [54] et celle des films de savon [52]. La convection de double diffusion s'est maintenant imposée comme un paradigme pour l'étude des systèmes dynamiques et les travaux tant numériques qu'expérimentaux mettent à jour une dynamique non-linéaire particulièrement riche : multiplicité des solutions stationnaires, ondes progressives ou stationnaires, modulées ou non ou encore régimes chaotiques [25, 69, 39, 40, 41].

Les premiers travaux, motivés par les applications océanographiques ont essentiellement porté sur des situations dans lesquelles les gradients sont parallèles à la gravité. Les deux exemples les plus remarquables sont les doigts de sel (*salt fingers*) et les couches diffusives (*diffusive layers*). Les mécanismes intervenant dans ces deux configurations mettent initialement en jeu une stratification stable de l'un des composants et instable de l'autre mais dont le résultat global est une stratification de densité stable. Même si la configuration est statiquement stable (le gradient de densité est orienté selon la gravité), le mécanisme peut prendre place dès lors que le système est suffisamment perturbé donnant naissance à un régime sous-critique (où l'instabilité peut uniquement être provoquée par des perturbations d'amplitude finie).

Les doigts de sel apparaissent lorsque le composé diffusant le plus vite (la chaleur) est associé à une stratification stable [68]. Dans un mélange eau-sel, il s'agit d'une couche fluide chauffée par le haut et dont la concentration en sel diminue avec la profondeur. Si une perturbation amène une particule de fluide à se déplacer vers le bas, elle perd du sel et se refroidit. Mais parce qu'elle se refroidit plus vite, sa densité reste plus élevée que celle du fluide qui l'entoure et de fait, elle continue de descendre. La chaleur perdue vient en revanche réchauffer le fluide qui l'entoure et celui-ci, alors moins dense, est poussé vers le haut. Au final, la région se remplit de doigts montant (eau moins concentrée) et descendant (eau très concentrée en sel appelée doigts de sels, figure 1.1.a). Ce mécanisme est connu pour jouer un rôle important à l'échelle océanographique dans la stratification en sel de certaines régions où l'on peut observer des distributions verticales de température et de salinité en escalier appelées thermohaline staircase [57] (figure 1.1.b).

Les couches diffusives [34] sont observées moins fréquemment bien qu'elles soient connues pour se former naturellement aux grandes latitudes. Il s'agit toujours d'une configuration statiquement stable (la densité diminue avec la hauteur) mais dans laquelle le composé diffusant le plus lentement (le sel) est stratifié stable et la température stratifiée instable (ce qui correspond à un chauffage par le bas). Si l'on déplace une particule fluide de la région chaude et salée vers le haut, elle se refroidit rapidement tout en maintenant pendant un temps plus long une concentration plus élevée que son milieu. Dans cet intervalle de temps, elle descend donc. Sa concentration diminue alors à mesure qu'elle se réchauffe et ce réchauffement tend à la faire remonter. Dans certaines configurations, cette situation amène une



FIGURE 1.1 - (a) Doigts de sucre dans un mélange d'eau sucrée chauffée en configuration de formation de doigts de sel (thermiquement stable et solutalement instable) Figure issue de [74]. (b) Mesures expérimentales au voisinage des Barbade (frontière de la mer des Caraïbes et de l'océan Atlantique) de concentration en sel et de température en fonction de la pression (représentant la profondeur). La figure met en évidence des couches à concentration et température constantes séparées par des couches de quelques mètres dans lesquelles ces quantités varient rapidement. Dans ces domaines se forment les doigts de sel. Image issue du site web de la Woods Hole Oceanographic Institution [33].

oscillation qui tend à s'amplifier. Suffisamment loin du seuil d'instabilité linéaire, ce mécanisme peut conduire à la formation d'une couche fluide dite couche diffusive bien mélangée et de densité constante.

Les mécanismes que nous avons évoqués restent dans leur point de départ essentiellement monodimensionnels car les gradients initiaux de température et de concentration y sont parallèles à la gravité. Il existe néanmoins de nombreuses autres situations pour lesquelles ce n'est pas le cas comme la proximité d'icebergs dans les océans.

Dans ce travail de thèse, nous allons considérer deux configurations dans lesquelles un fluide formé d'un mélange binaire est placé entre deux gradients de température et concentration initialement parallèles. Ces deux configurations diffèrent par l'orientation des gradients par rapport à la gravité. Nous considèrerons d'une part (chapitre 4) une couche fluide horizontale dans laquelle les gradients thermiques et solutaux initiaux sont imposés par des valeurs prescrites sur deux surfaces horizontales (gradients parallèles à la gravité), et d'autre part (chapitre 5) des cavités où les gradients initiaux sont imposés sur des surfaces verticales (gradients perpendiculaires à la gravité). Plus précisément, les conditions aux limites sur ces surfaces seront pour la température et la concentration du même type, à savoir une valeur imposée. Nous ne considèrerons pas l'effet Soret (et a fortiori l'effet Dufour) [28]. Sous ces hypothèses, le mécanisme d'instabilité n'est induit que par le contraste des diffusivités thermiques et solutales : il cesse d'exister lorsque les temps de diffusion thermique et solutale sont égaux ce qui correspond à un nombre de Lewis égal à 1  $(Le = \kappa/D = 1 \text{ où } \kappa \text{ et } D \text{ sont respectivement les coefficients de diffusion thermique})$ et solutale). Il faut noter qu'il existe un autre mécanisme conduisant à une convection de double diffusion dans des mélanges pour lesquels les deux diffusivités sont égales. Ce mécanisme identifié par Welander [80] et que l'on peut observer dans des fluides ternaires (l'une des concentrations joue le rôle de la température), est induit par des conditions aux limites différentes le long des surfaces rigides responsables des gradients initiaux. En raison de cette différence, les gradients de température (température assujettie par exemple à une condition de Dirichlet) et de concentration (concentration assujettie par exemple à une condition de type Neuman) ne se compensent plus au voisinage des parois sur des échelles de temps identiques. Ce déséquilibre provoque des gradients de densité et crée l'instabilité en dépit de l'égalité des diffusivités [70, 71, 72].

Les travaux que nous avons menés portent donc sur la convection de double diffusion induite par des gradients thermiques et solutaux initialement parallèles entre eux et perpendiculaires ou parallèles à la gravité. On se place à l'approximation de Boussinesq et sous l'hypothèse où la densité varie faiblement avec la température T et la concentration C:

$$\rho = \rho_0 + \rho_T (T - T_m) + \rho_C (C - C_m), \tag{1.1}$$

où  $\rho_T = \partial \rho / \partial T < 0$  et  $\rho_C = \partial \rho / \partial C > 0$  tous deux supposés constants dans l'intervalle de variation de la température et de la concentration autour des valeurs de référence  $T_m$  et  $C_m$ . En ne considérant que la partie variable de la force de volume (la partie constante  $(\rho_0 - \rho_T T_m - \rho_C C_m) \mathbf{g} \equiv \rho_m \mathbf{g}$  sera incluse dans le gradient de pression), le sens relatif et l'intensité des forces d'origine thermique  $\mathbf{F}_T = -\rho_T g T \mathbf{e}_z = |\rho_T| g T \mathbf{e}_z$  et solutale  $\mathbf{F}_C = -\rho_C g C \mathbf{e}_z$  sont alors mesurés par le facteur adimensionnel :

$$N = \frac{\rho_C \Delta C}{\rho_T \Delta T} = -\frac{Ra_S}{Ra},\tag{1.2}$$

où  $\Delta T$ ,  $\Delta C$  sont respectivement les différences de concentration et de température imposées au travers de la couche fluide, Ra > 0 le nombre de Rayleigh thermique et  $Ra_S > 0$  le nombre de Rayleigh solutal respectivement définis par :<sup>1</sup>

$$Ra = \frac{g|\rho_T|\Delta T d^3}{\rho_0 \kappa \nu}, \qquad Ra_S = \frac{g\rho_C \Delta C d^3}{\rho_0 \kappa \nu}, \tag{1.3}$$

où d est une distance caractéristique égale à celle qui sépare les deux surfaces à l'origine des gradients initiaux. Les deux forces de volumes sont alors dites coopérantes lorsque N > 0 et opposées lorsque N < 0.

## 1.1.1 Configuration avec gradients de température et de concentration horizontaux

Dans la configuration où les gradients de température et de concentration sont horizontaux (chapitre 5), nos travaux ne concernent que le cas N = -1 dans lequel les forces de volume thermique et solutale ont la même magnitude mais sont opposées. L'intérêt de cette restriction vient de l'existence d'une solution triviale dite solution conductive pour laquelle le fluide est au repos et les distributions de température et de concentration notées  $T_0$  et  $C_0$  sont linéaires. En notant  $T_g, T_d$ et  $C_g, C_d$  les températures et concentrations imposées sur les surfaces verticales de gauche (x = 0) et de droite  $(x = \ell)$  de la couche fluide,  $\Delta T \equiv T_g - T_d > 0$  et  $\Delta C \equiv C_g - C_d > 0$ , en l'absence de convection, ces distributions vérifient :

$$T_0(x) = T_g - \frac{x}{\ell} \Delta T, \quad C_0(x) = C_g - \frac{x}{\ell} \Delta C, \quad (1.4)$$

où  $\ell$  est la distance séparant les deux surfaces. Il apparaît alors que puisque N = -1, la densité  $\rho(T_0, C_0)$  est constante au sein du fluide ce qui explique l'existence d'une solution conductive quels que soient les paramètres adimensionnels et notamment le nombre de Rayleigh thermique Ra. Dès que  $N \neq -1$ , la densité  $\rho$  devient une fonction de x et la convection apparaît. Il n'existe plus de solution conductive [5].

Afin d'avoir un propos plus général, il est plus commode de travailler en variables adimensionnées. Considérant les équations de conservation de la quantité de mouvement pour un écoulement incompressible, de l'énergie et des espèces chimiques dans une couche fluide d'extension verticale infinie, en choisissant la distance  $\ell$  qui sépare les deux surfaces rigides pour adimensionaliser les distances, le temps caractéristique  $\ell^2/\nu$  pour les temps, et les températures et concentrations adimensionnelles  $(T - T_d)/\Delta T$ ,  $(C - C_d)/\Delta C$ , on obtient<sup>2</sup>:

$$\partial_t \mathbf{u} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + Gr(T - C) \mathbf{e}_z, \quad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{1.5}$$

$$\partial_t T = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)T + Pr^{-1}\nabla^2 T, \qquad (1.6)$$

$$\partial_t C = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)C + Sc^{-1}\nabla^2 C, \qquad (1.7)$$

<sup>1.</sup> On trouve également dans la littérature N défini par  $N = Ra_S/Ra$  avec  $Ra_S < 0$  et Ra > 0. Elle repose sur l'écriture  $\rho = \rho_0 - \rho_T(T - T_m) - \rho_C(C - C_m)$  dans laquelle  $\rho_C < 0$  et  $\rho_T > 0$ 

<sup>2.</sup> Afin d'alléger l'écriture, on garde les mêmes notations de variables pour les variables adimensionnées

où **u** représente le champ de vitesse bi-dimensionnel avec u et w ses composantes dans les directions horizontale  $\mathbf{e_x}$  et verticale  $\mathbf{e_z}$ . On munit ce système des conditions aux limites T - 1 = C - 1 = u = w = 0 en x = 0 et T = C = u = w = 0 en x = 1. Il apparaît les nombres de Grashof, de Prandtl et de Schmidt respectivement définis par :

$$Gr = \frac{g|\rho_T|\Delta T d^3}{\rho_0 \nu^2} = \frac{Ra}{Pr}, \qquad Pr = \frac{\nu}{\kappa}, \qquad Sc = \frac{\nu}{D}, \qquad (1.8)$$

avec Le = Pr/Sc. La solution conductive est linéairement stable tant que  $Gr < Gr_c$ . Il est admis que les seules bifurcations susceptibles d'apparaître sont des bifurcations stationnaires [5]. Sous cette hypothèse, on perturbe la solution conductive  $(T = C = 1 - x \text{ et } \mathbf{u} = \mathbf{0})$  en y introduisant des perturbations de la forme  $(\hat{\mathbf{u}}, \hat{t}, \hat{C})e^{i\sigma t}$ . Les équations linéarisées autour de la solution conductive s'écrivent au point de bifurcation sous la forme :

$$\mathbf{0} = -\nabla \hat{p} + \nabla^2 \hat{\mathbf{u}} + Gr_c(\hat{T} - \hat{C})\mathbf{e}_z, \quad \nabla \cdot \hat{\mathbf{u}} = 0, \tag{1.9}$$

$$0 = \hat{w} + Pr^{-1}\nabla^2 T, (1.10)$$

$$0 = \hat{w} + Sc^{-1}\nabla^2 \hat{C}. \tag{1.11}$$

Ces équations sont munies des conditions aux limites  $\hat{T} = \hat{C} = \hat{u} = \hat{w} = 0$  en x = 0, 1. Le changement de variable  $\hat{T} \to Pr \hat{T}$  et  $\hat{C} \to Sc \hat{C}$  montre que les paramètres adimensionnels n'apparaissent que dans le terme de force de volume sous la forme  $Gr_c(Pr\hat{T} - Sc \hat{C})\mathbf{e}_z$ . La stabilité linéaire est donc contrôlée par  $Ra_c(Le-1)$ , évalué à 6509 dans le cas présent [83, 7]. Notons que  $Ra_c \to \infty$  lorsque  $Le \to 1$ , indiquant que l'instabilité est bien entraînée par une différence dans les temps de diffusion thermique et solutal.

La structuration de l'écoulement dans le régime non-linéaire fait l'objet d'un certain nombre de travaux numériques dans des configurations 2D et 3D et pour différentes conditions aux limites. Historiquement, notre intérêt pour ce problème vient des travaux de l'équipe du professeur Mojtabi à Toulouse. Pour des géométries bidimensionnelles confinées dans la direction z (cavités caractérisées par un rapport d'aspect  $A = L/\ell$  où L est l'extension verticale de la cavité), Ghorayeb et Mojtabi [27, 26] mettent en évidence la formation et la multiplicité de solutions spatialement localisées dans le régime sous-critique (figure 1.2).

Dans ces résultats obtenus par simulation numérique directe, les solutions spatialement localisées prennent la forme d'un rouleau de convection de dimension inférieure à l'extension verticale de la cavité et dont la position varie avec la condition initiale.

L'analyse de la formation de ces structures dans ce système fluide est menée par Bergeon et Knobloch [10, 9] pour des couches infinies  $\Gamma$ -périodiques dans la direction verticale. La période  $\Gamma$  est choisie grande devant la longueur d'onde critique des couches infinies :  $\Gamma \approx n\lambda_c = 2n\pi/k_c$  avec n = 12. Les résultats présentés sous la forme énergie cinétique versus nombre de Grashof (figures 1.3–1.5) révèlent les mécanismes donnant naissance à des structures convectives spatialement localisés baptisés convectons [13]. La figure 1.3 montre le diagramme de bifurcation obtenu. De la solution conductive bifurquent de manière sous-critique des branches de solutions composées chacunes d'un même nombre de paires identiques de rouleaux



FIGURE 1.2 – Différentes solutions (linéairement stables) observées dans le régime sous-critique et produites par l'instabilité de double-diffusion. Les paramètres sont A = 10 (rapport d'aspect), Le = 11 et Ra = 550. Sont représentées les lignes de courant. La cavité est munie sur toutes ses surfaces de conditions aux limites de non-glissement. La surface verticale de gauche est maintenue à T = C = 1 et celle de droite à T = C = 0. Figure issue de la thèse de doctorat de K. Ghorayeb [26].



FIGURE 1.3 – Diagramme de bifurcation représentant l'énergie cinétique  $\mathcal{E}$  en fonction du nombre de Grashof. Les paramètres sont Pr = 1, Sc = 11 et une couche fluide  $\Gamma$ -périodique dans le direction z avec  $\Gamma \approx 12\lambda_c$  où  $\lambda_c$  est la longueur d'onde critique de la couche infinie. Les branches P1 et P2 sont associées à des solutions périodiques, les branches L1 et L2 à des convectons. La solution conductive correspond à  $\mathcal{E} = 0$ . D'après [10].



FIGURE 1.4 – A gauche : grossissement du diagramme de bifurcation de la figure précédente (a) au voisinage du point où les branches de solutions spatialement localisées L1 et L2 se terminent et (b) à l'endroit où sont produites les branches périodiques P1 et P2 et les branches de solutions spatialement localisées. Les branches de solutions localisées émergent d'une solution périodique à 12 longueurs d'ondes et se terminent sur une branche à 9 longueurs d'onde. A droite : représentation des solutions (isovaleurs de la fonction de courant) en différents points des branches P1 (a) et P2 (b) avec de gauche à droite : au voisinage du point de bifurcation primaire, au voisinage du noeud col et au terme du domaine de calcul. D'après [10].



FIGURE 1.5 – Représentation des solutions aux différents noeuds cols des branches L1 et L2. Les noeuds-cols sont numérotés sur la figure de gauche. D'après [10].

contra-rotatifs. Nous qualifierons de périodiques ces solutions et ces branches. Le nombre de rouleaux dépend de la branche et de la période  $\Gamma$ . Dans cet exemple,  $\Gamma \approx 12\lambda_c$  de sorte que 12 paires de rouleaux composent les solutions de la première branche de bifurcation primaire (figure 1.4). Cette branche initialement instable passe par un noeud-col avant de croître vers des nombres de Grashof plus élevés. A mesure que les non-linéarités deviennent importantes, la structure évolue vers une rangée de rouleaux co-rotatifs. Il faut noter que passé le noeud-col, la branche redevient linéairement stable. La sous-criticalité caractéristique des problèmes de double diffusion produit donc une région de bistabilité entre la solution conductive et la solution périodique.

Les solutions spatialement localisées émergent par le biais d'une bifurcation secondaire sous-critique le long de la branche périodique (figure 1.4). Deux branches sont produites ayant chacunes des propriétés de symétrie différentes. Ces branches traversent ensuite une succession de noeuds-cols au passage desquels la structure va peu à peu s'étendre par nucléation de rouleaux (figure 1.5). On obtient ainsi une gamme de nombres de Grashof dans laquelle existe une multiplicité de solutions que ne limite que la périodicité  $\Gamma$ : le processus stoppe dès que le domaine est rempli. La branche quitte alors cette région pour reconnecter une branche de solutions périodiques éventuellement différentes de celle dont elle a émergé.

Ce mécanisme générique appelé homoclinic snaking est présenté dans le chapitre 2. A l'origine de la création des états spatialement localisés, il est la clé de ce travail de thèse. Il n'existait pas à notre connaissance de mise en évidence de ce mécanisme dans des géométries 3D et en particulier des géométries non périodiques dans la direction z. Le chapitre 5 y est consacré.

Comme nous le verrons, le fait que le domaine soit une cavité d'extension finie affecte le scénario précédent. Les bifurcations primaires dans le cas de conditions aux limites périodiques sont toutes des fourches de révolution. Avec les conditions aux limites de non-glissement, la nature de la bifurcation (fourche ou transcritique)



FIGURE 1.6 – (a) Vue de la géométrie 3D utilisée dans [8] avec L = 2. Les surfaces grisées extérieures représentent les surfaces maintenues à température et concentration constantes. La symétrie de réflexion  $S_y$  par rapport au plan y = 1/2 (en grisé sur la figure) correspond à celle brisée par les solutions qualifiées de pleinement tridimensionnelles (branche issue de  $S_1$  sur la figure de droite). (b) Diagramme de bifurcation représentant le maximum de la valeur absolue de la vitesse verticale en fonction du nombre de Grashof Gr pour une cavité verticale d'extensions horizontales  $1 \times 1$  et d'extension verticale L = 2. Les paramètres sont Pr = 1 et Sc = 11. Les snapshots représentent les isosurfaces de vitesse verticale constante. Les surfaces maintenues à T et C constants sont celles de la figure de gauche (a). D'après [8].

dépend des propriétés de symétrie du vecteur propre marginal. L'un des objectifs est donc également de comprendre comment se transforme le diagramme de bifurcation lorsque l'on passe des couches verticales  $\Gamma$ -périodiques aux cavités d'extension verticale finie. Nous verrons en particulier que les branches d'états spatialement localisés correspondent alors aux branches de bifurcations primaires (et non secondaires).

A ceci, et c'est une motivation supplémentaire pour cette étude, s'ajoute le fait que dans les cavités tridimensionnelles de petits rapports d'aspect, apparaissent des écoulements pleinement tridimensionnels. Sous ce terme, il faut comprendre des solutions qui ne sont plus invariantes par la réflexion par rapport au plan vertical médian orthogonal aux surfaces le long desquelles T et C sont imposées (figure 1.6.a). Il s'agit de solutions qui n'ont pas d'analogue dans le problème bidimensionnel. De telles structures ont été observées par Sezai et & Mohamad [65] dans des gammes de paramètres -2 < N < 0,  $10 < Ra < 2.10^5$  et 0.1 < Le < 150. Les auteurs mentionnent également la présence de régimes chaotiques.

L'étude de la formation de structures pleinement tridimensionnelles a été menée par Bergeon et Knobloch [8] dans des cavités de faibles rapports d'aspect (cavités voisines de la cavité cubique). Les auteurs mettent en évidence une instabilité secondaire apparaissant le long de la partie sous-critique de la branche issue de la première bifurcation transcritique (figure 1.6.b). Cette branche est à l'origine de l'existence de la région de bistabilité dans la version bidimensionnelle du problème. La présence de cette instabilité déstabilise une fois de plus la branche primaire (qui devient deux fois instable) ce qui ne lui permet plus de se restabiliser au passage du noeud-col. Cette instabilité tri-dimensionnelle est associée à la formation de cellules de convection dont l'axe n'est plus orthogonal au gradient imposé (figure 1.6.b) et est également à l'origine de régimes chaotiques.

L'objectif de ce travail est donc également de reconsidérer les travaux menés dans [8] sous l'oeil de la formation de structures spatialement localisées et de comprendre comment cette instabilité affecte la formation de ces structures. Des géométries de grands rapports d'aspect sont donc considérées.

## 1.1.2 Configuration avec gradients de température et de concentration verticaux

Dans le cas où les gradients de température et de concentration sont verticaux, suivant le signe de  $Ra_s$  et Ra (c'est-à-dire suivant le signe de  $\Delta T$  et  $\Delta C$ ), la configuration peut correspondre à un chauffage par le bas ou par le haut en présence d'une stratification en concentration stable ou instable. On se restreint ici au cas où les deux contributions, thermique et solutale, affectent la densité de manière opposée ce qui correspond au cas N < 0. Sans perte de généralité, on considère le cas où  $T(z = 0) = T_h + \Delta T$  et  $T(z = H) = T_h$  avec  $\Delta T > 0$  et  $C(z = 0) = C_h + \Delta C$ ,  $C(z = H) = C_h$  avec  $\Delta C > 0$ . Il s'agit d'un système thermiquement instable (chauffage pas le bas) et solutalement stable (plus concentré en z = 0). Si la diffusivité thermique est plus grande que celle du soluté ( $Le = \kappa/D > 1$ ), le système est sujet à une instabilité de type oscillatoire (conduisant aux couches diffusives) tandis que si elle est inférieure (Le < 1), il s'agit de la configuration conduisant à la formation de doigts de T (analogue des doigts de sels mais avec la température jouant le rôle de la concentration). On ne considère dans la suite que le cas Le > 1.

Pour conserver de la généralité, on adimensionne les équations. En choisissant la distance h qui sépare les deux surfaces rigides pour les distances, le temps caractéristique  $h^2/\kappa$  pour les temps et les températures et concentrations adimensionnelles  $(T - T_h)/\Delta T$ ,  $(C - C_h)/\Delta C$ , on obtient :

$$Pr^{-1}\partial_t \mathbf{u} = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u} - \nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + (Ra \ T - Ra_s C)\mathbf{e}_z, \ \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \ (1.12)$$

$$\partial_t T = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)T + \nabla^2 T, \qquad (1.13)$$

$$\partial_t C = -(\mathbf{u} \cdot \nabla)C + Le^{-1} \nabla^2 C, \qquad (1.14)$$

munis des conditions aux limites T = C = 1 en z = 0 et T = C = 0 en z = 1. L'analyse de stabilité linéaire de la solution conductive  $T \equiv T_0(z) = 1 - z$ ,  $C \equiv C_0(z) = 1 - z$  avec  $\mathbf{u} = 0$  peut être menée assez simplement dans des couches horizontales infinies. On perturbe la solution conductive en cherchant des perturbations de la forme  $(\hat{u}, \hat{w}, \hat{p}, \hat{T}, \hat{C})(x, z)e^{(\sigma t)}$ . Le système (1.12–1.14) devient :

$$Pr^{-1}\sigma\hat{\mathbf{u}} = -\nabla\hat{p} + \nabla^{2}\hat{\mathbf{u}} + (Ra\ \nabla^{2}\hat{T} - Ra_{S}\nabla^{2}\hat{C})\mathbf{e}_{z}, \qquad (1.15)$$

$$\sigma T = \hat{w} + \nabla^2 T, \qquad (1.16)$$

$$\sigma C = \hat{w} + \tau \nabla^2 C, \qquad (1.17)$$

où  $\hat{\mathbf{u}} = (\hat{u}, \hat{w})$  et  $\tau = 1/Le = D/\kappa$ . En introduisant la fonction de courant  $\hat{\psi}$  et la vorticité  $\hat{\omega}$  telles que  $\hat{\omega} = \partial_x \hat{w} - \partial_z \hat{u}$  et  $\nabla^2 \hat{\psi} = \hat{\omega}$  et en prenant le rotationnel de l'équation (1.15), on obtient :

$$Pr^{-1}\sigma\nabla^2\hat{\psi} = \nabla^4\hat{\psi} + Ra\ \partial_x\hat{T} - Ra_S\partial_x\hat{C}.$$
(1.18)

Si l'on s'intéresse aux bifurcations stationnaires ( $\sigma = 0$ ), compte tenu des conditions aux limites  $\hat{T} = 0$  et  $\hat{C} = 0$  en z = 0, 1, on déduit des équations (1.16) et (1.17) que  $\hat{T} = \tau \hat{C}$ . L'équation (1.18) se réécrit alors :

$$0 = \left(Ra - \tau^{-1}Ra_S\right)\partial_x \hat{T} + \nabla^4 \hat{\psi}.$$
(1.19)

Il s'agit d'une équation identique à celle que l'on obtient pour l'analyse de stabilité linéaire de la convection de Rayleigh-Bénard mais le paramètre qui joue le rôle du nombre de Rayleigh est maintenant le groupement  $Ra - \tau^{-1}Ra_S$ . Donc, tant qu'une bifurcation stationnaire existe, la solution conductive est instable pour  $Ra > Ra_{\rm RB} + \tau^{-1}Ra_S$  où  $Ra_{\rm RB}$  est le seuil d'instabilité linéaire de la configuration de Rayleigh-Bénard. La présence du nombre de Prandtl dans l'équation (1.15) et du nombre de Lewis dans l'équation (1.17) ne permet plus l'analogie formelle avec l'instabilité de Rayleigh-Bénard dans le cas de transition vers des régimes instationnaires pour lesquels  $\sigma = i\omega$  (il n'y a en effet pas de bifurcation instationnaire pour la convection de Rayleigh-Bénard). Dans le cas de conditions aux limites de type glissement, un calcul plus complet prédit une bifurcation stationnaire pour [78, 4] :

$$Ra = \tau^{-1}Ra_S + Ra_{\rm RB} \quad \text{si} \quad \alpha^2 \frac{\tau + Pr}{1 + Pr} < \tau < 1 \quad \text{ou} \quad \tau > 1 \tag{1.20}$$

et une bifurcation de Hopf pour :

$$Ra = (Pr + \tau) \left( \frac{1}{Pr + 1} Ra_S + \frac{1 + \tau}{Pr} Ra_{RB} \right) \quad \text{si} \quad \alpha^2 \frac{\tau + Pr}{1 + Pr} > \tau \quad \text{ou} \quad \tau < 1, (1.21)$$

où  $\alpha^2 = Ra_S/(\tau Ra)$ .

Dans ce travail, on considère le cas  $\tau < 1$  (Le > 1). Les résultats de l'analyse de stabilité (linéaire et par méthode énergétique) menée par Balmforth *et al.* [4] sont reportés sur la figure 1.7. Les courbes correspondant aux seuils d'instabilité linéaire des relations (1.20) et (1.21) y sont représentées. Les auteurs ont également calculé le noeud-col associé à la branche de bifurcation sous-critique (lorsqu'elle l'est) issue du point de bifurcation stationnaire. La transition d'une bifurcation stationnaire supercritique vers une bifurcation sous-critique se produit au point A de la figure pour un nombre  $Ra_S$  inférieur à celui à partir duquel la bifurcation de Hopf apparaît (correspondant au point B sur la figure).

Le diagramme est similaire à celui que l'on obtient dans le cas des mélanges fluides sujets à l'effet Soret sous l'hypothèse d'un coefficient de séparation Soret négatif. Cette équivalence a été démontrée par Knobloch [36] avec un résultat plus général montrant l'équivalence entre un mélange binaire sujet aux effets Soret et Dufour [28] et la situation considérée ici, moyennant une redéfinition des nombres de Rayleigh thermique et solutal. La transposition des résultats de l'analyse linéaire se fait très simplement. En dépit de cette équivalence formelle entre ces problèmes,



FIGURE 1.7 – Diagramme de stabilité dans le plan  $Ra/Ra_{\rm RB}$ ,  $Ra_S/Ra_{\rm RB}$  où  $Ra_{\rm RB}$ est le seuil d'instabilité linéaire de la configuration de Rayleigh-Bénard. Les paramètres sont  $\tau = 0.5$  et Pr = 2. La figure présente les seuils d'instabilité linéaire (stationnaire et oscillatoire), les positions du noeud-col associé à la branche de la première bifurcation lorsqu'elle est sous-critique. Cette transition (super-critique sous-critique) correspond au point A sur la courbe des bifurcations stationnaires. A  $Ra_S$  fixé, la première bifurcation est une bifurcation stationnaire à gauche du point B et une bifurcation instationnaire à droite de B. Le seuil d'apparition de structures convectives calculé par méthode énergétique est également représenté sur la figure. A droite du point C le noeud col s'est déplacé vers des Ra inférieurs à ceux de l'instabilité oscillatoire. Le point D correspond au croisement du seuil évalué par méthode énergétique et du seuil de la première instabilité (oscillatoire dans cette région). Figure issue de [4].

la dynamique non-linéaire n'est pas transposable aussi simplement car les expressions des nombres de Rayleigh du problème de double diffusion (celui que nous considérons) en fonction de ceux du problème en présence d'effet Soret ne sont pas triviales : les variations de Ra dans notre problème correspondent aussi à des variations du coefficient Soret i.e. à des fluides différents.

Les mélanges fluides sujets à l'effet Soret et placés dans les conditions thermiques de notre étude ont fait l'objet d'études numériques dans le contexte des états spatialement localisés. Pour des coefficients de séparation Soret négatifs [42], les travaux de Batiste et al. [6] mettent en évidence la formation de convectons suivant un mécanisme de création identique à celui que nous avons décrit dans la convection de double diffusion en géométrie verticale (figure 1.8). Dans ce travail, nous considérons des couches fluides bi-dimensionnelles  $\Gamma$ -périodiques dans la direction horizontale x. Ce système et celui d'une couche fluide sujet à l'effet Soret étudié dans [6] partagent un certain nombre de propriétés communes. Les deux systèmes ont un diagramme de stabilité linéaire similaire présentant dans certaines gammes de paramètres, une instabilité oscillatoire de l'état de base suivie d'une bifurcation stationnaire. Dans le cas des mélanges sujets à l'effet Soret, cette bifurcation stationnaire disparaît pour des coefficients Soret suffisamment négatifs mais la branche stationnaire persiste. Dans les deux situations, la bifurcation stationnaire est sous-critique dès que  $Ra_S$ (resp. le coefficient Soret) est suffisamment grand (resp. suffisamment négatif). Enfin, les deux configurations ont les mêmes propriétés d'invariance par symétrie et notamment la réflexion par rapport au plan vertical médian de la cavité. Comme nous le verrons dans le chapitre 2, ces éléments sont des ingrédients importants pour l'apparition du mécanisme de formation des états spatialement localisés.

Ceci justifie notre intérêt pour l'étude des couches horizontales (chapitre 4) dans l'objectif de mettre en évidence pour la première fois dans ce type de configuration, des états spatialement localisés.

Il faut souligner qu'en dépit des similarités évoquées entre la convection thermosolutale avec effet Soret et la convection de double diffusion, il existe toutefois des différences importantes et notamment dans les conditions aux limites. En présence d'effet Soret, le flux des espèces chimiques  $\mathbf{J}_c$  est calculé par une combinaison linéaire des gradients thermique et solutal :  $\mathbf{J}_c = D\nabla C + D_s\nabla T$  où  $D_s$  est le coefficient de diffusion (croisée) Soret. L'imperméabilité d'une surface rigide (par exemple z = 0, 1) s'écrit  $\mathbf{J}_c \cdot \mathbf{n} = 0$  où  $\mathbf{n}$  est le vecteur unitaire normal à la surface. En variables adimensionnées, ceci s'écrit  $\partial_n C = \partial_n T$  où n est la coordonnée normale à la surface. Donc à la différence d'une condition aux limite de type Dirichlet (C imposé sur la surface), le flux d'espèces chimiques est contraint à la paroi. Cet effet induit des différences sur l'évolution des branches associées aux états spatialement localisés (voir figure 1.8 : on lui impute notamment le fait que les noeuds-cols de droite des deux branches ne sont pas alignés sur la même valeur). L'existence éventuelle d'un tel effet dit de pompage sera analysée en détail dans le chapitre 4.



FIGURE 1.8 – Diagramme de bifurcation représentant Nu - 1 (où Nu est le nombre de Nusselt) en fonction du nombre de Rayleigh. La ligne Nu = 1 correspond à la solution conductive. Celle-ci devient instable linéairement après une bifurcation de Hopf au voisinage de Ra = 1760. La branche associée à des ondes progressives (TW) en bifurque de manière sous-critique pour disparaître sur la partie stable de la branche stationnaire sous-critique référencée SOC (Steady Overturning Convection). La partie instable de cette branche est représentée en pointillés. Les solutions représentées en points gras correspondent à du chaos dispersif. De la droite du diagramme émergent deux branches en traits continus qui serpentent et s'enchevêtrent dans une certaine gamme de paramètres. Elles correspondent toutes deux à des solutions spatialement localisées. Sur le graphe, les seuils d'instabilité absolue et convective (bifurcation de Hopf) sont également représentés. Les paramètres sont  $\Gamma = 60, Pr = 6.22, \tau = 0.009$  et S = -0.021 (coefficient de séparation). Figure issue de [6].

### 1.2 Convection thermique en présence de rotation

Dans notre dernière étude, l'instabilité du système fluide met en jeu une compétition entre deux effets, l'un stabilisant (s'opposant à la mise en mouvement du fluide) et l'autre déstabilisant. On considère une couche fluide horizontale placée entre deux surfaces horizontales maintenues à des températures différentes. Le fluide est chauffé par le bas et donc dans une configuration du type Rayleigh-Bénard. La poussée d'Archimède a alors un effet déstabilisant. La couche fluide est également en rotation à vitesse angulaire  $\Omega = \Omega \mathbf{e}_z$  constante où  $\mathbf{e}_z$  est la direction verticale normale aux surfaces maintenues à température constante ( $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_z$ ). La rotation a, quant à elle, un effet stabilisant.

En variables dimensionnées, l'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit dans le référentiel en rotation :

$$\rho \left(\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} + 2\mathbf{\Omega} \times \mathbf{u} + \mathbf{\Omega} \times \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}\right) = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} - \rho g \mathbf{e}_z, \qquad (1.22)$$

équation à laquelle il faut adjoindre l'incompressibilité de l'écoulement :  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ . Le terme  $-\rho \mathbf{\Omega} \times \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}$  représente la force centrifuge et le terme  $-2\rho \mathbf{\Omega} \times \mathbf{u}$  représente la force de Coriolis. On se place à l'approximation de Boussinesq de la même manière que précédemment de sorte que la densité est constante et égale à  $\rho_0$  à l'exception des termes de force volumique dans lesquels elle s'écrit :  $\rho = \rho_0 + \rho_T (T - T_m)$  où  $T_m$  est une température de référence et  $\rho_T = \partial \rho / \partial T < 0$ . En introduisant :

$$\Pi \equiv \frac{p}{\rho_0} + \frac{1}{2} \left( \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r} \right)^2 + \left( 1 - \frac{\rho_T}{\rho_0} T_m \right) gz, \qquad (1.23)$$

et en rappelant que les variations de densités dans les termes ne dérivant pas d'un potentiel (force de Coriolis) sont négligeables [51], l'équation (1.22) se réécrit :

$$\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla \Pi + \nu \nabla^2 \mathbf{u} - 2\mathbf{\Omega} \times \mathbf{u} + \alpha_T g T \mathbf{e}_z + \alpha_T T \mathbf{\Omega} \times \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}, \quad (1.24)$$

où **r** représente le vecteur liant le centre de rotation au point courant et  $\alpha_T = -\rho_T/\rho_0 > 0$ . Dans la suite, nous nous placerons sous l'hypothèse où les effets centrifuges sont faibles devant les effets gravitationnels. Il convient de remarquer que sans cette hypothèse, l'existence d'un état statique (dans lequel **u** = **0**) n'est plus possible. En comparant  $|\mathbf{\Omega} \times \mathbf{\Omega} \times \mathbf{r}|$  avec g, l'hypothèse implique que  $\Omega^2 \Gamma/g \equiv Fr \ll 1$  où Frest le nombre de Froude et  $\Gamma$  une distance caractéristique représentant l'extension dans la direction horizontale de la couche fluide.

L'effet stabilisant de la rotation peut s'interpréter de deux manières. La première consiste à s'appuyer sur le théorème de Taylor-Proudman. Pour un écoulement stationnaire d'un fluide parfait, dans l'hypothèse où cet écoulement est suffisamment lent pour que les termes non-linéaires puissent être négligés, l'écoulement ne peut varier dans la direction  $\mathbf{e}_z$  du vecteur rotation  $\Omega$  (on a :  $\nabla \times (\mathbf{u} \times \Omega) = \mathbf{0}$  qui, puisque  $\Omega = \Omega \mathbf{e}_z$  est constant, donne  $\Omega \partial_z u_j = 0$ ). Sous ces hypothèses, il n'est pas possible d'observer d'instabilité d'origine thermique puisque celle-ci implique un mouvement ascendant et descendant du fluide dans un espace confiné dans la direction z. Au voisinage d'un point de bifurcation primaire, les deux hypothèses de stationnarité et



FIGURE 1.9 – Schéma représentant l'effet Coriolis sur une perturbation de vitesse  $\tilde{\mathbf{u}}$  horizontale de l'écoulement statique dans le référentiel tournant ( $\mathbf{e_x}, \mathbf{e_y}, \mathbf{e_z}$ ). Le fluide tourne à une vitesse angulaire  $\mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega} \mathbf{e_z}$  et on considère l'écoulement dont la vitesse est identiquement nulle dans ce référentiel. On impose une perturbation  $\tilde{\mathbf{u}} = \tilde{u} \mathbf{e_x}$  qui crée une force de Coriolis  $\mathbf{F_c} = -F_c \mathbf{e_y}$  (étape 1). Cette force génère une composante de vitesse  $\tilde{\mathbf{u}}' = -\tilde{u}' \mathbf{e_y}$ , laquelle, à l'étape 2, crée une force de Coriolis  $\mathbf{F'_c} = -F'_c \mathbf{e_x}$ . Cette force s'oppose à la perturbation initiale et témoigne de l'effet stabilisant de l'effet Coriolis.

de termes non-linéaires négligeables restent pertinentes. L'hypothèse de fluide parfait n'est bien sûr pas vérifiée dans les fluides que nous considérons. Cependant, la tendance de la rotation à maintenir l'écoulement invariant dans la direction de  $\Omega$ reste présente ce qui lui donne ce caractère stabilisant.

La seconde manière d'interpréter le mécanisme consiste à regarder l'effet de la rotation sur un champ de vitesse donné. Notons  $\mathbf{e}_x$  et  $\mathbf{e}_y$  les vecteurs de base associés au repère tournant. Si l'on introduit une perturbation en vitesse verticale, aucune force de Coriolis n'est produite puisque la perturbation horizontale  $\mathbf{\tilde{u}} = \mathbf{\tilde{u}}\mathbf{e}_x$ , elle rotation. En revanche, si l'on introduit une perturbation horizontale  $\mathbf{\tilde{u}} = \mathbf{\tilde{u}}\mathbf{e}_x$ , elle produit une force de Coriolis :  $\mathbf{F} = -2\rho \mathbf{\Omega} \times \mathbf{\tilde{u}} = -2\rho \mathbf{\Omega} \mathbf{\tilde{u}}\mathbf{e}_y$  et donc un écoulement suivant  $-\mathbf{e}_y$ . Cette vitesse produit en retour une force de Coriolis suivant  $-\mathbf{e}_x$ , s'opposant donc à la perturbation initiale (figure 1.9). Ainsi, si la rotation n'a aucun effet sur les mouvements fluides verticaux, elle tend à s'opposer aux mouvements horizontaux et aura donc plutôt tendance à stabiliser la configuration de Rayleigh-Bénard et à réduire la longueur d'onde des rouleaux de convection que l'on aurait en son absence.

Dans ce travail, nous allons considérer une couche fluide  $\Gamma$ -périodique dans la direction x et confinée entre deux surfaces rigides z = 0, h maintenues respectivement aux températures  $T'(z = 0) = T_h + \Delta T$  et  $T'(z = h) = T_h$ . Par la suite, il est plus commode de travailler en variables adimensionnées. Sous l'approximation de Boussinesq, en adimensionnant les longueurs par l'épaisseur h, le temps par le temps caractéristique de diffusion thermique  $h^2/\kappa$  et en introduisant la température



FIGURE 1.10 – Vue de la configuration utilisée : une couche de fluide chauffée par la bas en présence de rotation (vecteur rotation  $\mathbf{\Omega} = \Omega \mathbf{e}_z$ ). Les structures étudiées dans ce chapitre correspondent à des rouleaux parallèles coaxiaux à la direction y.

adimensionée  $\tilde{T} = (T' - T_h)/\Delta T$ , on obtient :<sup>3</sup>

$$Pr^{-1}(\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} - T \mathbf{e}_z \times \mathbf{u} + Ra \Theta \mathbf{e}_z, \quad (1.25)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (1.26)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{1.26}$$

$$\partial_t \Theta + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Theta = w + \nabla^2 \Theta, \qquad (1.27)$$

où l'on a noté  $\tilde{T} = 1 - z + \Theta$ , Pr le nombre de Prandtl, T le nombre de Taylor et Ra le nombre de Rayleigh respectivement définis par :

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa}, \qquad T = \frac{2\Omega h^2}{\nu} \qquad Ra = \frac{g\alpha_T \Delta T h^3}{\kappa \nu}.$$
 (1.28)

Nous nous restreindrons dans la suite au cas bidimensionnel (figure 1.10). Mais comme le terme de Coriolis induit nécessairement une composante dans la troisième direction, nous considèrerons un champ de vitesse de la forme :

$$\mathbf{u}(x,z) = (u,v,w) = (-\psi_z, v, \psi_x), \tag{1.29}$$

où  $\psi$  est la fonction de courant poloïdale associée au mouvement du fluide dans le plan (x, z) en rotation. Le système admet la solution triviale  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  et  $\Theta = 0$  qui correspond à une distribution linéaire de température dans la direction z. Dans la suite, nous considèrerons ce problème muni de conditions aux limites de glissement de la forme  $w = \partial_z u = \partial_z v = 0$  le long des deux surfaces z = 0, 1.

L'analyse de stabilité linéaire de la solution conductive a été menée pour la première fois par Chandrasekhar [21, 23, 22]<sup>4</sup>. Cette analyse a été reprise récemment par Kloosterziel et Carnevale [35] afin de pouvoir exprimer des relations analytiques simples sur les seuils d'instabilité. Les résultats de ces analyses montrent en particulier que pour des nombres de Prandtl  $Pr \geq 0.67659$ , la solution conductive perd sa stabilité par une bifurcation stationnaire pour :

$$T^2 = Ra\left(\sqrt{\frac{Ra}{Ra_{\rm RB}}} - 1\right),\tag{1.30}$$

<sup>3.</sup> On utilise cette notation afin d'éviter toute confusion avec le nombre de Taylor noté T dans la suite.

<sup>4.</sup> Les équations y sont adimensionalisées par le temps visqueux. Il apparaît alors un nombre de Taylor défini comme le carré de celui que nous utilisons ici.



FIGURE 1.11 – Diagramme stabilité pour différentes valeurs du nombre de Prandtl Pr indiquées sur le graphe. Sont représentés en traits pleins les points de bifurcation stationnaire, et en traits pointillés, les points de bifurcation instationnaire. Les points de bifurcation stationnaire ne dépendent pas de Pr. Les courbes sont obtenues à partir des relations (1.30-1.32) issues de [35].

où  $Ra_{\rm RB} = 27\pi^4/4$  est le seuil d'instabilité de Rayleigh-Bénard de la même configuration (en absence de rotation). Lorsque Pr < 0.67659, le seuil d'instabilité reste le même tant que la courbe (1.30) ne coupe pas la courbe de stabilité associée aux bifurcations instationnaires donnée par :

$$T^{2} = R \left[ \left( \frac{1+Pr}{8Pr^{4}} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{\frac{Ra}{Ra_{\rm RB}}} - \frac{1+Pr}{2Pr^{2}} \right].$$
 (1.31)

Le point d'intersection des deux courbes est alors donné par :

$$Ra = (1+\gamma)^2 Ra_{\rm RB}, \quad T^2 = \gamma (1+\gamma)^2 Ra_{\rm RB}, \quad \gamma = \frac{\sqrt{2}(1+Pr) - \sqrt{1+Pr}}{\sqrt{1+Pr} - \sqrt{2}^3 Pr^2}.$$
 (1.32)

Pour fixer les idées, nous avons représenté sur la figure 1.11 les variations du nombre de Rayleigh critique en fonction du nombre de Taylor T. On le voit, ce diagramme est très voisin de celui obtenu pour la double diffusion en couche horizontale (figure 1.7) et met en évidence l'effet stabilisant de la rotation.

Ce que ne renseigne pas l'analyse de stabilité linéaire est la nature (supercritique ou sous-critique) des bifurcations stationnaires ni la structure des solutions instationnaires émergeant au-delà du seuil instationnaire. Cette analyse sera menée dans le chapitre 6 consacré à ce problème. Une analyse faiblement non-linéaire montrera en particulier que lorsque  $Pr < 1/\sqrt{3}$  la bifurcation stationnaire est supercritique à l'exception de l'intervalle de valeurs  $T \in [T_{-}^{per}, T_{+}^{per}]$  avec :

$$T_{\pm}^{per} = \frac{\sqrt{3}Pr\pi^2 \left(2 \pm \sqrt{1 - 3Pr^2}\right)}{\left(1 \pm \sqrt{1 - 3Pr^2}\right)^2},\tag{1.33}$$

où  $T_{\pm}^{per}$  est appelé point tricritique. Cette analyse pemettra également de mettre en évidence (et c'est d'ailleurs son objectif principal) une bifurcation secondaire apparaissant (pour des périodes  $\Gamma$  grandes devant la longueur d'onde critique  $\lambda_c$  des couches infinies) au voisinage du seuil d'instabilité primaire. Cette branche correspond en fait à la formation d'états spatialement localisés ce que nous démontrerons dans ce chapitre. Plus précisément, notre travail portera sur l'analyse de la formation de ces structures, leur évolution dans un régime fortement non-linéaire et leur condition d'existence dans les régimes où la bifurcation est sous-critique comme super-critique.

Cette partie du travail reconsidère donc du point de vue de la formation de structures spatialement localisées, un problème ancien, assez académique, introduit par Veronis [77] et présenté en détail dans [22]. Dans une première approche, ce problème est pertinent pour modéliser la convection de couches atmosphériques au voisinage des pôles (l'abscisse x représente la latitude, la côte z l'altitude et la coordonnée transverse y la longitude), la convection dans les océans (comme l'océan arctique) [58], dans le noyau terrestre ainsi que dans certaines planètes gazeuses géantes [32], ou dans la couche extérieure du soleil [84]. Il est bien sûr très clair que le modèle doit être considérablement enrichi pour approcher ces réalités mais la convection en présence de rotation y joue un rôle important.

A la suite des travaux de Chandrasekhar, Rossby a conduit en 1969 des expériences sur la convection de Rayleigh-Bénard avec et sans rotation [59]. Ces résultats confirment globalement les seuils d'instabilité obtenus par Chandrasekhar à l'exception des configurations présentant de forts taux de rotation dans les quelles la convection apparaît à des valeurs très inférieures. Cette différence est imputée aux effets de taille finie inhérents aux expériences de laboratoires. Au voisinage des parois se forment des couches visqueuses associées à des modes dits de parois qui physiquement affaiblissent aux forts taux de rotation la stabilisation par effet Taylor-Proudman [61]. Dans la même année, Küppers et Lortz [43] s'intéressent à la stabilité de rangées infinies de rouleaux parallèles. Ils mettent en évidence une instabilité apparaissant pour des taux de rotation suffisamment élevés et conduisant à une réorientation des rouleaux à environ 59 degrés des précédents. Cette instabilité dite de Küppers et Lortz conduit à un régime instationnaire chaotique dit de chaos de domaine très proche de l'instabilité [29, 30]. Délaissée pendant quelques décennies, l'instabilité de Küppers et Lortz fait depuis peu l'objet d'un regain d'attention principalement parce qu'elle représente un système amenant vers un chaos spatio-temporel par le biais d'une bifurcation super-critique d'un état homogène (la solution conductive) et pour lequel les théories faiblement non-linéaires pourraient trouver un champ d'application privilégié. Nous renvoyons le lecteur au récent article de Rubio, Lopez et Marques [62] et au manuscript de thèse de Rubio [60] pour plus de références ainsi qu'une discussion approfondie de l'effet des modes de paroi et des forces centrifuges sur l'instabilité.

Dans ce travail, on ne considère que des domaines infinis dans l'approximation où les effets centrifuges sont négligés (devant les effets de gravité) et pour des taux de rotation modérés. Plus précisément, on s'intéresse à une gamme de paramètres dans laquelle se produit la transition d'une bifurcation supercritique à une bifurcation sous-critique. Ceci nous place dans la gamme de nombres de Prandtl entre 0.1 et 1. Ces valeurs correspondent à des mélanges gazeux [46, 47] (à de rares exceptions, comme l'hélium liquide, les nombres de Prandtl des liquides purs sont en ordre de grandeur supérieurs). Les taux de rotation (nombre de Taylor) que nous considèrerons seront dans une gamme de 10 à 100 ce qui correspond à des valeurs expérimentalement accessibles (voir par exemple [3]).

L'intérêt de considérer ces gammes de paramètres est tout d'abord de se placer dans le régime où la première bifurcation stationnaire est sous-critique. Suivant les travaux de Burke et Knobloch [15], l'existence d'une région de bistabilité est en apparence l'une des conditions pour observer la formation d'états spatialement localisés. L'une des surprises de notre travail est précisément de montrer que dans ce problème, cette hypothèse n'est pas nécessaire. Nous montrerons en particulier que (i) le mécanisme de formation de ces états localisés donne naissance à une région dite de *slanted snaking* dans laquelle les branches d'états spatialement localisés serpentent obliquement et (ii) que ces branches persistent dans le régime supercritique. Les raisons de cette propriété seront analysées dans les chapitres 2 et 6 au regard d'un mécanisme tout à fait similaire observé en magnétohydrodynamique [48, 49].

## Bibliographie

- T. Ackemann, W. J. Firth, and G. L. Oppo. Fundamentals and applications of spatial dissipative solitons in photonic devices. *Advances in Atomic, Molecular* and Optical Physics, 57:324–421, 2009.
- [2] P. Assemat, A. Bergeon, and E. Knobloch. Spatially localized states in Marangoni convection in binary mixtures. *Fluid Dyn. Res.*, 40:852–876, 2008.
- [3] K. M. S. Bajaj, J. Liu, B. Naberhuis, and G. Ahlers. Square patterns in Rayleigh-Bénard convection with rotation about a vertical axis. *Phys. Rev. Lett.*, 81:806–809, 1998.
- [4] N. J. Balmforth, S. A. Ghadge, A. Kettapun, and S. D. Mandre. Bounds on double-diffusive convection. J. Fluid Mech., 569:29–50, 2006.
- [5] G. Bardan, A. Bergeon, E. Knobloch, and A. Mojtabi. Nonlinear doubly diffusive convection in vertical enclosures. *Physica D*, 138:91–113, 2000.
- [6] O. Batiste, E. Knobloch, A. Alonso, and I. Mercader. Spatially localized binary fluid convection. J. Fluid Mech., 560:149–158, 2006.
- [7] A. Bergeon, K. Ghorayeb, and A. Mojtabi. Double diffusive instability in an inclined cavity. *Phys. Fluids*, 11:549–559, 1999.
- [8] A. Bergeon and E. Knobloch. Natural doubly diffusive convection in threedimensional enclosures. *Phys. Fluids*, 14:3233–3250, 2002.
- [9] A. Bergeon and E. Knobloch. Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection. *Physica D*, 237:1139–1150, 2008.
- [10] A. Bergeon and E. Knobloch. Spatially localized states in natural doubly diffusive convection. *Phys. Fluids*, 20:034102, 2008.
- [11] A. Bergeon and E. Knobloch. Dynamics and formation of localized states in flowing thin films: Bound states of solitary waves. J. Phys.: Conf. Ser., 216:012001, 2010.
- [12] H. A. Bethe. Supernova mechanisms. Rev. Mod. Phys., 62:801–866, 1990.
- [13] S. Blanchflower. Magnetohydrodynamic convectons. *Phys. Lett. A*, 261:74–81, 1999.

- [14] J. Burke, S. M. Houghton, and E. Knobloch. Swift-Hohenberg equation with broken reflection symmetry. *Phys. Rev. E*, 80:036202, 2009.
- [15] J. Burke and E. Knobloch. Localized states in the generalized Swift-Hohenberg equation. *Phys. Rev. E*, 73:056211, 2006.
- [16] J. Burke and E. Knobloch. Homoclinic snaking: structure and stability. Chaos, 17:037102, 2007.
- [17] J. Burke and E. Knobloch. Snakes and Ladders: Localized states in the Swift-Hohenberg equation. *Phys. Lett. A.*, 360:681–688, 2007.
- [18] J. Burke and E. Knobloch. Multipulse states in the Swift-Hohenberg equation. Proc. 7th AIMS Conference, Arlington, TX, 2009.
- [19] J. Burke, A. Yochelis, and E. Knobloch. Classification of spatially localized oscillations in periodically forced dissipative systems. SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 7:651–711, 2008.
- [20] A. R. Champneys. Homoclinic orbits in reversible systems and their applications in mechanics, fluids and optics. *Physica D*, 112:158–186, 1998.
- [21] S. Chandrasekhar. The instability of a layer of fluid heated from below and subject to Coriolis forces. Proc. R. Soc. London A, 217:306–417, 1953.
- [22] S. Chandrasekhar. Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability. International Series of Monographs on Physics. Dover Publications, 1961.
- [23] S. Chandrasekhar and D. Elbert. The instability of a layer of fluid heated from below and subject to Coriolis forces. II. Proc. R. Soc. London A, 231:198–210, 1955.
- [24] P. Coullet, C. Riera, and C. Tresser. Stable static localized structures in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 84:3069–3072, 2000.
- [25] A. E. Deane, E. Knobloch, and J. Toomre. Traveling waves in large-aspect-ratio thermosolutal convection. *Phys. Rev. A*, 37:1817–1820, 1988.
- [26] K. Ghorayeb. Etude des écoulements de convection thermosolutale en cavité rectangulaire. Thèse de Doctorat de l'Université de Toulouse, 1997.
- [27] K. Ghorayeb and A. Mojtabi. Double diffusive convection in a vertical rectangular cavity. *Phys. Fluids*, 6:2339–2348, 1997.
- [28] S. R. De Groot and P. Mazur. Non-Equilibrium Thermodynamics. Dover Books on Physics. Dover Publications, 1962.
- [29] Y. Hu, R. E. Ecke, and G. Ahlers. Convection under rotation for Prandtl numbers near 1: Linear stability, wave-number selection, and pattern dynamics. *Phys. Rev. E*, 55:6928–6949, 1997.
- [30] Y. Hu, R.E. Ecke, and G. Ahlers. Convection under rotation for Prandtl numbers near 1: Küppers–Lortz instability. *Phys. Rev. E*, 58:5821–5833, 1998.

- [31] H. E. Huppert and R. S. J. Sparks. Double diffusive convection due to crystallization in magmas. Ann. Rev. Earth Planet. Sci., 12:11–37, 1984.
- [32] A. Ingersoll and D. Pollard. Motion in the interiors and atmospheres of Jupiter and Saturn: scale analysis, anelastic equations, barotropic stability criterion. *Icarus*, 52:62–80, 1982.
- [33] Woods Hole Oceanographic Institution. Salt finger tracer release experiment: http://hrp.whoi.edu/hrpgrp/sftre/stairs1.html, January-February 2001.
- [34] D. E. Kelley, H. J. S. Fernando, A. E. Gargett, J. Tanny, and E. Ozsoy. The diffusive regime of double diffusive convection. *Progress in Oceanography*, 56:461– 481, 2003.
- [35] R. C. Kloosterziel and C. F. Carnevale. Closed-form linear stability conditions for rotating Rayleigh–Bénard convection with rigid stress-free upper and lower boundaries. J. Fluid Mech., 480:25–42, 2003.
- [36] E. Knobloch. Convection in binary fluids. Phys. Fluids, 23:1918–1920, 1980.
- [37] E. Knobloch. Spatially localized structures in dissipative systems: open problems. *Nonlinearity*, 21:T45–T60, 2008.
- [38] J. Knobloch and T. Wagenknecht. Homoclinic snaking near a heteroclinic cycle in reversible systems. *Physica D*, 206:82–93, 2005.
- [39] P. Kolodner. Stable and unstable pulses of traveling-wave convection. Phys. Rev. A, 43:2827–2832, 1991.
- [40] P. Kolodner. Extended states of nonlinear traveling-wave convection. I. The Eckhaus instability. *Phys. Rev. A*, 46:6431–6451, 1992.
- [41] P. Kolodner. Extended states of nonlinear traveling-wave convection. II. Fronts and spatiotemporal defects. *Phys. Rev. A*, 46:6452–6468, 1992.
- [42] P. Kolodner, H. Williams, and C. Moe. Optical measurement of the Soret coefficient of ethanol/water solutions. J. Chem. Phys, 88:6512-6524, 1988.
- [43] G. Küppers and D. Lortz. Transition from laminar convection to thermal turbulence in a rotating fluid layer. J. Fluid Mech., 35:609–620, 1969.
- [44] C. W. Lan. Recent progress of crystal growth modeling and growth control. Chem. Eng. Sci., 7:1437–1457, 2004.
- [45] O. Lioubashevski, Y. Hamiel, A. Agnon, Z. Reches, and J. Fineberg. Oscillons and propagating solitary waves in a vertically vibrated colloidal suspension. *Phys. Rev. Lett.*, 83:3190–3193, 1999.
- [46] J. Liu and G. Ahlers. Spiral-defect chaos in Rayleigh–Bénard convection with small Prandtl numbers. *Phys. Rev. Lett.*, 77:3126–3129, 1996.

- [47] J. Liu and G. Ahlers. Rayleigh–Bénard convection in binary-gas Mixtures: 1. Thermophysical properties and the onset of convection. *Phys. Rev. E*, 55:6950– 6968, 1997.
- [48] D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch. Magnetohydrodynamic convectons. J. Fluid Mech., 687:595–605, 2011.
- [49] D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch. Spatially localized magnetoconvection. *Fluid Dyn. Res.*, 44:031411, 2012.
- [50] L. A. Lugiato and R. Lefever. Spatial dissipative structures in passive optical systems. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2209–2221, 1987.
- [51] F. Marques, I. Mercader, O. Batiste, and J. M. Lopez. Centrifugal effects in rotating convection: axisymmetric states and three-dimensional instabilities. J. Fluid Mech., 590:303–318, 2007.
- [52] B. Martin and X. L. Wu. Double diffusive convection in freely suspended soap films. *Phys. Rev. Lett.*, 80:1892–1895, 1998.
- [53] E. Meron, H. Yizhaq, and E. Gilad. Localized structures in dryland vegetation: forms and functions. *Chaos*, 17:037109, 2007.
- [54] D. M. Mueth, J. C. Crocker, S. E. Esipov, and D. G. Grier. Origin of stratification in creaming emulsions. *Phys. Rev. Lett.*, 77:578–581, 1996.
- [55] J. E. Pearson. Complex patterns in a simple system. Science, 261:189–192, 1993.
- [56] Y. Pomeau. Front motion, metastability and subcritical bifurcations in hydrodynamics. *Physica D*, 23:3–11, 1986.
- [57] T. Radko. What determines the thickness of layers in a thermohaline staircase? J. Fluid Mech., 523:79–98, 2005.
- [58] P. Rhines. Vorticity dynamics of the oceanic general circulation. Ann. Rev. Fluid Mech, 18:433–497, 1986.
- [59] H. T. Rossby. A study of Bénard convection with and without rotation. J. Fluid Mech., 36:309–335, 1969.
- [60] A. Rubio. Onset of Küppers–Lortz-like dynamics in finite rotating thermal convection. *PhD thesis, Arizona State University*, 2009.
- [61] A. Rubio, J. M. Lopez, and F. Marques. Interacting oscillatory boundary layers and wall modes in modulated rotating convection. J. Fluid Mech., 625:75–96, 2009.
- [62] A. Rubio, J. M. Lopez, and F. Marques. Onset of Küppers–Lortz-like dynamics in finite rotating thermal convection. J. Fluid Mech., 644:337–357, 2010.
- [63] R. W. Schmitt. Double diffusion in oceanography. Annu. Rev. Fluid Mech., 26:255–285, 1994.
- [64] T. M. Schneider, J. F. Gibson, and J. Burke. Snakes and ladders: Localized solutions of plane Couette flow. *Phys. Rev. Lett.*, 104:104501, 2010.
- [65] I. Sezai and A. A. Mohamad. Double diffusive convection in a cubic enclosure with opposing temperature and concentration gradients. *Phys. Fluids*, 12:2210– 2223, 2000.
- [66] E. A. Spiegel. Convection in stars II. Special effects. Ann. Rev. of Astron. Astrophys., 10:261–304, 1972.
- [67] M. E. Stern. The salt-fountain and thermohaline convection. *Tellus*, 12:172– 175, 1960.
- [68] M. E. Stern. Collective instability of salt fingers. J. Fluid Mech., 35:209–218, 1969.
- [69] N. Tsitverblit. Bifurcation phenomena in confined thermosolutal convection with lateral heating: Commencement of the double-diffusive region. *Phys. Fluids*, 7:718–736, 1995.
- [70] N. Tsitverblit. On the nature of direct instabilities in double-component convection with different boundary conditions. *Phys. Fluids*, 9:2458–2461, 1997.
- [71] N. Tsitverblit. Finite-amplitude double-component convection due to different boundary conditions for two compensating horizontal gradients. *Phys. Rev. E*, 62:7591–7594, 2000.
- [72] N. Tsitverblit. Double-component convection due to different boundary conditions in an infinite slot diversely oriented to the gravity. Ann. Phys., 322(8):1727–1770, 2007.
- [73] J. S. Turner. Double diffusive phenomena. Ann. Rev. Fluid Mech., 6:37–54, 1974.
- [74] J. S. Turner. Buoyancy effects in fluids. Cambridge University, Cambridge, England, 1979.
- [75] J. S. Turner. Multicomponent convection. Ann. Rev. Fluid Mech., 17:11–44, 1985.
- [76] P. B. Umbanhowar, F. Melo, and H. L. Swinney. Localized excitations in a vertically vibrated granular layer. *Nature*, 382:793–796, 1996.
- [77] G. Veronis. Cellular convection with finite amplitude in a rotating fluid. J. Fluid Mech., 5:401–435, 1959.
- [78] G. Veronis. On finite amplitude instability in thermohaline convection. J. Mar. Res., 23:1–17, 1965.
- [79] J. von Hardenberg, E. Meron, M. Shachak, and Y. Zarmi. Diversity of vegetation patterns and desertification. *Phys. Rev. Lett.*, 87:198101, 2001.

- [80] P. Welander. A new type of double diffusive instability? Tellus, 41:66–72, 1989.
- [81] W. R. Wilcox. Transport phenomena in crystal growth from solution. Prog. Cryst. Growth Charact. Mater., 26:153–194, 1993.
- [82] P. D. Woods and A. R. Champneys. Heteroclinic tangles and homoclinic snaking in the unfolding of a degenerate Hamiltonian–Hopf bifurcation. *Physica* D, 129:147–170, 1999.
- [83] S. Xin, P. Le Quéré, and L. S. Tuckerman. Bifurcation analysis of double diffusive convection with opposing horizontal thermal and solutal gradients. *Phys. Fluids*, 10:850–858, 1998.
- [84] T. Zurbuchen. A new view of the coupling of the Sun and heliosphere. Ann. Rev. Astronomy & Astrophys., 45:297–338, 2007.

# Chapitre 2

## Etats spatialement localisés

On définit par état spatialement localisé, toute solution stationnaire ou non, formée d'une structure spatiale d'un certain type localisée en une région de l'espace entourée par un environnement structuré différemment [30, 13]. De telles solutions ont été mises en évidence et étudiées en détail à partir d'équations modèles. Les travaux de Knobloch et son équipe sur l'équation de Swift-Hohenberg sont à ce jour les plus complets. C'est à partir de ces résultats que nous analyserons la formation d'états spatialement localisés dans des systèmes de double-diffusion et de convection thermique en présence de rotation. Une telle démarche peut paraître surprenante notamment au regard du fait que l'équation de Swift-Hohenberg est une équation conservative, une propriété que ne partagent pas les systèmes fluides que nous allons étudier. Malgré cela, nous verrons que ces systèmes présentent de très fortes similarités.

Dans ce chapitre, nous présentons donc dans un premier temps un ensemble de propriétés des états spatialement localisés obtenus par l'étude de l'équation de Swift-Hohenberg. En fin de chapitre, nous proposons une courte excursion vers des systèmes fluides dissipatifs, autres que ceux que nous étudions dans ce travail, et dans lesquels ces états ont été observés.

## 2.1 Description théorique

Originellement dérivée à partir des équations de la convection thermique par Swift & Hohenberg [35] pour prédire la formation de structures au voisinage de l'instabilité, l'équation de Swift-Hohenberg a permis de considérables avancées dans la compréhension des états localisés [23, 5, 26]. Bien que moins étudiées pour leurs états localisés, d'autres équations modèles ont permis de les mettre en évidence comme l'équation de Korteweg-de Vries [15], de Ginzburg-Landau [18, 40, 25] ou de Schrödinger [41].

### 2.1.1 Equation de Swift–Hohenberg

Pour décrire théoriquement les états localisés, on considère l'équation de Swift-Hohenberg mono-dimensionnelle :

$$\partial_t u = ru - \left(\partial_x^2 + q_c^2\right)^2 u + \nu u^2 - gu^3,$$
 (2.1)

où  $u(x) \in \mathbb{R}$  est la solution réelle définie pour  $x \in \mathbb{R}$ , et  $r, q_c, \nu$  et g sont des paramètres réels. Munie de conditions aux limites périodiques en  $x = \pm \Gamma$ , cette équation est invariante par translation en x et par la réflexion spatiale par rapport à un point  $x_0$  arbitraire. On pose  $x_0 = 0$  pour simplifier les écritures. L'invariance par la réflexion spatiale R s'écrit alors :

$$R: x \longrightarrow -x, \quad u \longrightarrow u. \tag{2.2}$$

L'équation possède en outre une structure variationnelle associée à une fonctionnelle de Lyapunov :

$$F = \frac{1}{2\Gamma} \int_{-\Gamma}^{+\Gamma} \left( -\frac{1}{2} r u^2 + \frac{1}{2} \left[ (\partial_x^2 + q_c^2) u \right]^2 - \frac{1}{3} \nu u^3 + \frac{1}{4} g u^4 \right) dx,$$
(2.3)

telle que :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\frac{\delta F}{\delta u}.\tag{2.4}$$

La fonctionnelle F est nécessairement décroissante dans le temps  $(\partial_t F = -(\partial_t u)^2 \leq 0)$  de sorte que les solutions évoluent dans le temps vers un point fixe stationnaire situé à un minimum local de F.

L'équation admet une solution (triviale) stationnaire u(x) = 0 ainsi que deux autres solutions constantes :

$$u(x) = u_{\pm} = \frac{\nu}{2g} \left( 1 \pm \sqrt{1 + \frac{4g}{\nu^2}(r - q_c^4)} \right).$$
(2.5)

Ces solutions sont produites par une bifurcation transcritique le long de la branche u = 0 en  $r_{trans} = q_c^4$  (une partie de cette branche labelisée  $u_+$  apparaît sur la figure 2.9).

On introduit par la suite  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3, y_4)^t$  avec  $y_1 = u$  et  $y_2, y_3$  et  $y_4$  les dérivées successives de u par rapport à x. Les solutions stationnaires de (2.1) vérifient :

$$\partial_x y_1 = y_2, \tag{2.6}$$

$$\partial_x y_2 = y_3, \tag{2.7}$$

$$\partial_x y_3 = y_4, \tag{2.8}$$

$$\partial_x y_4 = (r - q_c^4) y_1 - 2q_c^2 y_3 + \nu y_1^2 - g y_1^3.$$
(2.9)

Sur le vecteur  $\mathbf{y}$ , l'invariance par la réflexion R se traduit par :

$$R: x \longrightarrow -x, \quad (y_1, y_2, y_3, y_4) \longrightarrow (y_1, -y_2, y_3, -y_4). \tag{2.10}$$

Pour rechercher d'éventuelles solutions spatialement localisées produites par une bifurcation primaire le long de la branche  $\mathbf{y} = \mathbf{0}$  (ou u = 0), on mène une analyse de stabilité linéaire en espace. En introduisant une perturbation de la forme  $\tilde{\mathbf{y}}e^{ikx}$ où k est le nombre d'onde spatial complexe, l'équation (2.1) linéarisée autour de la solution triviale  $\mathbf{y} = \mathbf{0}$  donne :

$$r - (q_c^2 - k^2)^2 = 0.$$
 (2.11)



FIGURE 2.1 – Répartition des valeurs propres spatiales de l'analyse de stabilité de l'équation de Swift-Hohenberg (2.1) au voisinage de la solution triviale. Pour r < 0, les valeurs propres forment un quartet complexe.



FIGURE 2.2 – Exemple de connexion homocline entre une solution constante et une solution périodique. L'enveloppe de la solution a été tracée pour visualiser les fronts reliant chacune des solutions.

Au voisinage de r = 0, valeur au-delà de laquelle  $\mathbf{y} = \mathbf{0}$  est instable, trois cas apparaissent :

$$r < 0 \implies k = \pm q_c \pm i \frac{\sqrt{-r}}{2q_c} + \mathcal{O}(r),$$
 (2.12)

$$r = 0 \implies k = \pm q_c, \tag{2.13}$$

$$r > 0 \implies k = \pm q_c \pm \frac{\sqrt{r}}{2q_c} + \mathcal{O}(r).$$
 (2.14)

A l'ordre dominant lorsque  $r \ge 0$ , les valeurs propres k sont réelles. Lorsque r < 0, u = 0 est hyperbolique en espace et les valeurs propres forment un quartet dans l'espace complexe du nombre d'onde (figure 2.1).

Par conséquent, si des solutions spatialement localisées se forment par suite d'une bifurcation primaire en r = 0 le long de la branche u = 0, ce sera dans l'intervalle r < 0. En terme de structure, les valeurs propres à partie imaginaire négative correspondent à une croissance exponentielle de u = 0 en  $x = -\infty$  vers une solution  $2\pi/q_c$ -périodique et les valeurs propres à partie imaginaire positive correspondent à une décroissance exponentielle vers 0 en  $x = +\infty$ . Un exemple de structure nonlinéaire que peut produire cette instabilité est représenté sur la figure 2.2.

Au voisinage du seuil, les solutions stationnaires peuvent être approchées 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  $\lambda_c = 2\pi/q_c$ . 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 (2.1) et l'identification des différents ordres amène à une solution périodique de la forme :

$$u_p(x) = 2\left(\frac{-r}{\gamma}\right)^{1/2} \cos(q_c x + \phi) + O(r),$$
 (2.15)

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 :

$$u_l(x) = 2\left(\frac{-2r}{\gamma}\right)^{1/2} \operatorname{sech}\left(\frac{x\sqrt{-r}}{2q_c}\right) \cos(q_c x + \phi) + O(r), \qquad (2.16)$$

qui correspond à une solution spatialement localisée dont l'amplitude tend vers 0 dans les limites  $x \to \pm \infty$  [9]. Le paramètre  $\gamma$  dépend du poids des non-linéarités :  $\gamma = 38\nu^2/9q_c^4 - 3g$ . La phase  $\phi$  est arbitraire. Pour  $u_p$ , elle sélectionne l'une des solutions sur la fourche de révolution en bifurquant en r = 0 et pour  $u_l$  elle détermine la phase dans l'enveloppe en sech. Comme nous ne considérons dans la suite que des solutions *R*-invariantes, la phase est alors soit  $\phi = 0$  soit  $\phi = \pi$  (une analyse plus approfondie permet d'affirmer que seules ces deux phases sont naturellement sélectionnées par le système [9]).

On notera pour finir que le point r = 0 est un point de codimension 2 et l'analyse de cette bifurcation par la théorie des formes normales a été conduite par Burke et Knobloch [9]. Elle confirme notamment l'existence d'états spatialement localisés lorsque  $38\nu^2 > 27gq_c^4$  ( $\gamma > 0$ ), le caractère sous-critique de la bifurcation et la forme (2.15, 2.16) des solutions.

### 2.1.2 Snaking homocline

Pour obtenir plus de détails sur le comportement non-linéaire des états localisés, Burke & Knobloch ont étudié numériquement par méthode de continuation l'équation (2.1) pour  $q_c = 0.5$ ,  $\nu = 0.41$  et g = 1 (valeurs choisies d'après Hilali *et al.* [20]) sur un grand domaine 1D périodique [9]. Le diagramme de bifurcation ainsi que les solutions localisées sont présentés sur la figure 2.3.

Une branche de solutions périodiques en espace bifurque de manière sous-critique en r = 0 puis se restabilise en passant un noeud-col à r = -0.01670. Il en résulte la bistabilité de la solution triviale et de la solution périodique pour -0.01670 < r < 0. En r = 0 deux branches de solutions localisées sous-critiques bifurquent également. Elles diffèrent par leur phase (parité),  $\phi = 0$  pour l'une et  $\phi = \pi$  pour l'autre. Les solutions le long de ces deux branches sont formées d'un nombre restreint d'oscillations confinées dans la région centrale du domaine et entourées par un profil identique à celui de la solution triviale u = 0. Initialement instables et sous-critiques, ces branches n'existent que dans la zone de bistabilité où elles effectuent des allersretours autour de  $r_{M1} = -0.01381$ . Cette valeur correspond au point de Maxwell entre la solution triviale u = 0 et la solution  $2\pi/q_c$ -périodique : en cette valeur, les deux solutions possèdent la même valeur de fonctionnelle F. Les allers-retours effectués par les branches d'états localisés sont bien délimités dans l'espace des paramètres ( $r_{P1} < r < r_{P2}$ ), et sont communément appelés homoclinic snaking (serpentage homocline).



FIGURE 2.3 – Diagramme de bifurcation représentant les variations avec le paramètre r de la norme N des solutions de l'équation (2.1) pour  $q_c = 0.5$ ,  $\nu = 0.41$  et g = 1. L'insert représente les solutions à différents noeuds-cols correspondant aux labels (a) à (f). D'après [9].

La branche  $\phi = 0$  est initialement une fois instable (figure 2.4). Le mode associé correspond à une instabilité d'amplitude héritée du caractère sous-critique de la bifurcation en r = 0. Il a la même parité que la solution (figure 2.5). La branche  $\phi = \pi$ est en revanche deux fois instable. On retrouve l'instabilité en amplitude associée à un mode de même parité et héritée de la branche u = 0 mais aussi une instabilité de phase associée à un mode de parité opposée et liée au fait que l'invariance par translation discrète est brisée. L'effet de ce mode est de briser l'invariance par réflexion en déplaçant la structure oscillatoire dans l'enveloppe. Ce mode existe également pour la branche  $\phi = 0$  mais est associé à une valeur propre négative au voisinage de r = 0. Les valeurs propres d'instabilité de phase sont proches de zéro à ce voisinage car l'enveloppe de la modulation est peu accentuée et permet encore l'existence de solutions proches de la solution périodique. Lorsque r décroît et approche la région de snaking, la largeur de l'enveloppe approche  $2\pi/q_c$  et cette valeur propre devient comparable à celle de l'instabilité d'amplitude. La figure 2.4 montre l'évolution de ces valeurs propres le long des deux branches depuis r = 0 jusqu'à la région de snaking. On remarque que dans cette région, les modes d'instabilité d'amplitude et de phase ont des valeurs propres pratiquement égales pour chacune des branches. Cette propriété est induite par la structure même des modes représentés pour une solution  $\phi = 0$  dans la région de snaking sur la figure 2.5. Le mode  $U_{10}$  est le mode d'instabilité d'amplitude et  $U_{11}$  le mode de phase. Ils sont formés de deux pulses séparés par une large région dans laquelle l'amplitude est nulle. Les deux pulses sont totalement découplés ce qui explique qu'ils soient associés à une même valeur propre. En revanche, les deux instabilités ont des effets différents. Dans la région de snaking, chaque noeud-col correspond au changement de signe de la valeur propre du mode d'amplitude. Ce mouvement s'accompagne de l'ajout d'une oscillation de part et d'autre de la solution. Après chaque aller-retour de la branche dans l'espace



FIGURE 2.4 – Evolution le long de la branche de solutions localisées ( $\phi = 0$  (a) et  $\phi = \pi$  (b)) des valeurs propres temporelles  $\beta$  associées au mode d'instabilité d'amplitude pair "even" et au mode d'instabilité de phase "odd". La variable *s* représente l'abcisse curviligne le long de ces branches. Celles-ci sont d'ailleurs présentées en bas de la figure dans une représentation dans le plan (*s*, *r*). D'après [9].

des paramètres, la solution croît spatialement tout en préservant la même parité. Au voisinage de chaque noeud-col, l'instabilité de phase brise la symétrie des solutions et produit une bifurcation fourche. Ces bifurcations entraînent la création de branches de solutions non-symétriques appelées *ladders* (barreaux) reliant les noeuds-cols des deux branches d'états localisés comme illustré sur la figure 2.6.

Le snaking s'accompagne en outre d'une variation de la longueur d'onde (figure 2.7) qui résulte d'un équilibrage énergétique : au point de Maxwell  $r_{M1}$ , les solutions triviale et périodique qui constituent les états localisés possèdent la même valeur de fonctionnelle. Cependant, pour  $r < r_{M1}$ , la solution triviale a une valeur plus faible que celle de la solution périodique et le système tend naturellement à favoriser la solution triviale ce qui a pour effet de contracter les oscillations de la solution. Le phénomène inverse se produit lorsquer  $r > r_{M1}$ .

Une interprétation géométrique des solutions localisées dans le cas du snaking homocline a été proposée par Avitabile et al. [3] et est illustrée sur la figure 2.8. Le snaking se produit autour du point de Maxwell pour lequel les solutions triviale et périodique ont la même valeur de fonctionnelle F. L'existence de ce point dans notre cas indique qu'il est possible de créer des connexions hétéroclines entre la solution triviale et périodique, c'est-à-dire des fronts reliant ces deux solutions. La réversibilité spatiale du problème indique que la connexion inverse existe. Cet ensemble de connexions hétéroclines forme un cycle hétérocline. Lorsque le paramètre  $(\mu \text{ ici})$  varie, la longueur d'onde de la solution périodique change continuement, ce qui indique que le cycle hétérocline existe dans un ensemble continu du paramètre. Les orbites homoclines résultant de ce cycle hétérocline correspondent à des structures localisées tendant vers 0 en  $\pm \infty$  et possédant une structure périodique localisée au centre du domaine. Ces solutions existent sur un intervalle du paramètre  $\mu$ moyennant un changement continu de longueur d'onde de la structure périodique centrale. Un exemple de connexion homocline est représenté sur la figure 2.8 à droite. Dans l'espace des phases, la trajectoire se rapproche de l'orbite périodique "rolls"



FIGURE 2.5 – En haut : Solution  $u_l$  le long de la branche  $\phi = 0$  au voisinage d'un noeudcol à  $r = r_{P2}$ . En dessous sont représentés les modes propres marginaux liés à l'instabilité d'amplitude  $(\tilde{U}_{10})$ , à l'instabilité de phase  $(\tilde{U}_{11})$  et à l'invariance par translation en x  $(\tilde{U}_{12})$ . Ce dernier mode est toujours marginal. D'après [9].



FIGURE 2.6 – A gauche : représentation des variations avec le paramètre r de la norme N des solutions de l'équation de Swift-Hohenberg avec non-linéarité d'ordre 3 et 5. Cette version de l'équation de Swift-Hohenberg possède des symétries différentes de celle présentée dans ce chapitre et génère des solutions localisées repérées par les phases  $\phi = 0$  et  $\phi = \pi/2$ . Les branches d'états localisés ainsi que les solutions barreaux sont présentées dans la région présentant les premiers noeuds-cols. A droite : représentation des solutions aux points (a) à (f) du diagramme. D'après [10].



FIGURE 2.7 – En traits discontinus : variations avec r et durant le snaking entre  $r_{P1}$  et  $r_{P2}$  de la longueur d'onde L de la structure localisée normalisée par la longueur d'onde critique à l'instabilité primaire  $L_C$ . En trait continu : variations de la longueur d'onde du mode périodique le plus instable de la solution triviale u = 0. Les deux courbes se coupent au point de Maxwell. Les paramètres sont ceux de la figure 2.3. D'après [9].



FIGURE 2.8 – Schéma de l'interprétation géométrique des solutions localisées proposée par Avitabile *et al.* [3]. Le diagramme au centre représente une branche d'états localisés ( $\mu \sim -r$ ), la figure de gauche le principe d'une connexion hétérocline entre la solution triviale 0 et la solution périodique "rolls" et la figure de droite le scénario proposé. Chaque boucle autour de la solution périodique correspond à une oscillation spatiale supplémentaire de la solution. D'après [3].



FIGURE 2.9 – Diagramme de bifurcation représentant les variations avec r de la norme N des solutions de l'équation (2.1) pour  $q_c = 0.5$ ,  $\nu = 0.75$  et g = 1. La branche la plus sous-critique  $u_P$  représente la solution périodique et  $r_{M1}$  son point de Maxwell avec la solution triviale. La solution  $u_+$  est constante et  $r_{M3}$  est son point de Maxwell avec la solution triviale. En r = 0 bifurque une branche d'états localisés qui termine sur  $u_+$  en  $r = r_{M3}$  après une croissance verticale appelée protosnaking. L'insert représente une solution le long de la branche de protosnaking. D'après [9].

puis effectue quelques boucles autour, chaque boucle correspondant à une oscillation spatiale de la solution, puis s'écarte de "rolls" pour tendre vers 0. Ainsi, suivant le nombre de boucles effectuées autour de "rolls", la structure localisée sera plus ou moins large dans l'espace physique. Une interprétation géométrique complémentaire a aussi été proposée par Woods & Champneys [39] mais n'est pas discutée dans le présent manuscrit.

### 2.1.3 Protosnaking homocline

On considère ici les paramètres suivant :  $q_c = 0.5$ ,  $\nu = 0.75$  et g = 1. La figure 2.9 présente le diagramme de bifurcation obtenu. Sur ce diagramme apparaît une branche de solutions spatialement localisées qui bifurque de manière sous-critique en r = 0. Après une oscillation, cette branche croît verticalement. Ce comportement est appelé protosnaking et la solution présente deux fronts : le premier entre la solution triviale  $u_0$  et la solution constante  $u_+$  (cf équation 2.5), et le second entre  $u_+$  et  $u_0$ . Lors de sa croissance, l'état central s'étend jusqu'à remplir le domaine et la branche d'états localisés termine sur  $u_+$ .

Le même type d'interprétation géométrique que pour le snaking homocline a été proposé par Avitabile *et al.* [3] et est illustré sur la figure 2.10. Cette interprétation se base sur la présence de fronts entre 0 et  $\tilde{U}$  représentés sur la sous-figure de gauche dans l'espace des phases. Les deux orbites  $U_{front}$  et  $U_{back}$  forment des cycles hétéroclines qui ne peuvent exister que si les 2 points fixes possèdent la même énergie. Cette dernière condition impose que  $F(\tilde{U}) = 0$  qui à son tour sélectionne une valeur du paramètre  $\mu = \mu_M$ . Ainsi, les fronts ne peuvent se former qu'à une seule valeur



FIGURE 2.10 – Schéma de l'interprétation géométrique des branches verticales proposé par Avitabile *et al.* [3]. Le diagramme au centre représente la branche d'états localisés, la figure de gauche le principe d'une connexion hétérocline entre la solution triviale 0 et la solution constante non-nulle  $\tilde{U}$  et la figure de droite le scénario proposé. D'après [3].

du paramètre et s'accompagnent de la formation d'une famille d'orbites homoclines générant des états localisés comme schématisé sur la sous-figure de droite. Ces solutions n'étant possibles qu'au point de Maxwell  $\mu_M$ , la branche de solutions localisées est verticale et entraîne la formation d'un continuum de solutions homoclines à la même valeur de  $\mu$ . Plus la trajectoire passe près de  $\tilde{U}$ , et plus le pulse s'élargit dans l'espace physique.

### 2.1.4 Effets de taille finie

Dans les expériences comme en simulation numérique, les domaines d'étude possèdent une taille finie. Le principal effet d'un domaine de taille finie est la possibilité de quantifier la taille de la structure localisée par rapport à celle du domaine. Le choix des conditions aux limites va aussi impacter le scénario que nous avons décrit jusqu'ici pour des domaines infinis.

Pour un domaine de taille finie muni de conditions aux limites de type Neumann homogène ou périodique, les branches d'états localisés et la branche périodique ne bifurquent plus simultanément de la solution triviale. Les solutions spatialement localisées sont dorénavant issues d'une bifurcation secondaire le long de la branche des solutions périodiques (figure 2.11). Plus le domaine est grand, plus la bifurcation vers les états localisés se rapproche du point de bifurcation primaire. Un second effet de taille finie est lié à une instabilité d'Eckhaus et concerne la reconnexion des branches d'états localisés après le snaking. Cette reconnexion est sensible à la taille du domaine et les branches d'états localisés peuvent se reconnecter soit sur la même branche, soit sur des branches différentes, soit ne pas se reconnecter du tout et partir vers les grandes valeurs du paramètre en créant un défaut dans une solution presque spatialement périodique (figure 2.12). Une discussion plus approfondie a été menée par Bergeon *et al.* [6].

Alternativement, si l'on munit le domaine de conditions aux limites de Dirichlet homogènes, il y a disparition des branches de solutions périodiques. En conséquence, les états localisés bifurquent seuls de la solution triviale. Après remplissage du domaine lors du snaking, les branches de solutions localisées passent un dernier noeudcol pour poursuivre vers les grandes valeurs du paramètre [27] ou peuvent se rediri-



FIGURE 2.11 – Diagramme de bifurcation pour l'équation (2.1) munie de conditions aux limites périodiques représentant les variations avec le paramètre r de la norme de la solution  $||u||_{L^2}$  pour  $q_c = 1$ ,  $\nu = 1.8$  et g = 1 et un domaine de taille  $\Gamma = 56.54$ . Les branches d'états localisés bifurquent de  $P_9$  et ne sont donc pas issues d'une bifurcation primaire. D'après [6].

ger vers des solutions à faible énergie (norme) en effectuant un snaking retour pour évoluer vers des solutions multi-pulses [21].

#### 2.1.5 Couplage avec un mode à grande échelle

Considérons maintenant la formation des structures dans un système monodimensionnel portant sur l'amplitude u(x,t) dont la dynamique est régie par une équation de type Swift-Hohenberg couplée à un mode à grande échelle B(x,t). On considère le système invariant par translation spatiale et par la réflexion  $x \to -x$ . On impose également l'invariance par changement de signe de B. Le système proposé par Dawes [14] s'écrit :

$$\partial_t u = ru - (\partial_x^2 + 1)^2 u - u^3 - QB^2 u, \qquad (2.17)$$

$$\partial_t B = \epsilon \partial_x^2 B + \frac{c}{\epsilon} \partial_x^2 (Bu^2), \qquad (2.18)$$

avec r le paramètre de bifurcation, Q et c des constantes et  $\epsilon$  un petit paramètre.

En moyennant (2.18) sur le domaine  $0 \le x \le \Gamma$  et en appliquant des conditions aux limites périodiques, on obtient  $\Gamma^{-1} \int_0^{\Gamma} B(x,t) dx = \langle B \rangle$  qui est une constante que l'on ramène à 1 en redéfinissant *B*. En se restreignant aux solutions stationnaires et en résolvant (2.18), on trouve *B*:

$$B = \frac{P}{1 + cu^2/\epsilon^2},\tag{2.19}$$



FIGURE 2.12 – (a) Diagramme de bifurcation obtenu dans la configuration verticale 2D de la convection de double diffusion. L'énergie cinétique de la solution  $\mathcal{E}$  est tracée en fonction du nombre de Grashof Gr. La branche d'états localisés  $L_0$  ne se reconnecte pas sur une branche périodique tandis que la branche d'états localisés  $L_{\pi}$  se reconnecte sur  $P_8$ . Le tracé de  $L_0$  et  $L_{\pi}$  est isolé des branches périodiques en (b) et (c). En (d) sont représentées les isovaleurs de la fonction de courant associée à une solution sur  $L_0$  pour Gr = 900. Les paramètres sont Pr = 1, Sc = 11 et le domaine est pris d'extension  $\Gamma = 10.5\lambda_c$ , avec  $\lambda_c$ la longueurs d'ondes critiques. D'après [7].



FIGURE 2.13 – (a) Diagramme de bifurcation pour l'équation (2.21) représentant la norme 2 des solutions en fonction de r pour un domaine périodique de taille  $\Gamma = 20\pi$  avec Q = c = 1 et  $\epsilon = 0.1$ . Sont représentées les branches périodiques 8 et 10 associées à des solutions périodiques formées de 8 et 10 longueurs d'ondes ainsi que les deux branches d'états localisés produisant le snaking incliné. Les états barreaux ne sont pas tracés pour plus de clarté. (b) Zoom autour des premiers noeuds-cols du snaking. Les solutions aux points (a) à (d) sont représentées sur la figure 2.14. D'après [14].

qui à son tour permet de déterminer la constante d'intégration P en moyennant sur le domaine :

$$\frac{1}{P} = \left\langle \frac{1}{1 + cu^2/\epsilon^2} \right\rangle. \tag{2.20}$$

Le système (2.17-2.18) pour des solutions stationnaires se ramène ainsi après substitution de *B* et *P* à l'équation de Swift-Hohenberg *non-locale* :

$$0 = ru - (\partial_x^2 + 1)^2 u - u^3 - \frac{Qu}{(1 + cu^2/\epsilon^2)^2} \left\langle \frac{1}{1 + cu^2/\epsilon^2} \right\rangle^{-2}.$$
 (2.21)

La présence d'un mode à grande échelle a donc dans ce cas deux implications majeures : elle induit la conservation de l'intégrale de B sur le domaine, et implique une dynamique non-locale ce dont témoigne la relation (2.21).

En fixant Q = c = 1 et  $\epsilon = 0.1$  sur un domaine périodique de taille  $\Gamma =$  $20\pi$ , Dawes [14] a obtenu le diagramme de bifurcation de la figure 2.13. Quelques solutions aux noeuds-cols de gauche sont représentées sur la figure 2.14. La première instabilité sur la solution triviale  $u \equiv 0$  se produit à r = 1 et crée la branche 10 constituée de solutions spatialement périodiques présentant 10 longueurs d'onde. Le long de cette branche, bifurquent très rapidement deux branches d'états localisés, un comportement induit par la taille finie du domaine. Ces branches sous-critiques passent un noeud-col à  $r \approx 0.21$  et s'enchevêtrent. Cependant, au fur et à mesure de leurs oscillations, l'inclinaison globale des branches augmente. Ce comportement a été baptisé slanted snaking et permet la présence de solutions spatialement localisées dans une large gamme de paramètres (ici jusqu'à r = 3.8). Comme dans le cas du snaking homocline, la longueur d'onde dans la structure localisée croît avec r. Cette caractéristique devient plus importante ici, puisque le snaking est incliné et les solutions localisées subissent une forte variation de longueur d'onde avant de se reconnecter sur une branche périodique à plus grande longueur d'onde, ici la branche 8.



FIGURE 2.14 – Représentation des solutions aux points  $a \ge d$  de la figure 2.13.b. D'après [14].

Ce type de système, couplant une équation de Swift-Hohenberg sur u et l'évolution d'un champ B à grande échelle se dérive naturellement en magnétoconvection pour étudier la formation de structures au voisinage de l'instabilité [12] auquel cas, u représente l'amplitude de la convection, B la fluctuation du champ magnétique, Q le nombre de Chandrasekhar quantifiant le rapport entre la force de Lorenz et les effets visqueux,  $\epsilon$  le (petit) rapport d'échelle entre les variations de u et celles de B et c un coefficient obtenu après développement asymptotique en  $\epsilon$ . Il est enfin intéressant de noter que lorsque  $\epsilon$  décroît (et donc que le découplage d'échelle est plus important), la localisation devient plus marquée et la région de présence de solutions localisées s'élargit [14].

## 2.2 Exemples physiques

### 2.2.1 Convection thermique en mélange binaire

Un mélange fluide binaire possédant un coefficient de séparation négatif et chauffé par dessous développe un gradient de concentration vertical stabilisant par effet Soret. Il en résulte la présence d'un régime sous-critique de convection stationnaire consistant en des paires de rouleaux de convection contra-rotatifs. Dans le cas d'une couche horizontale de période spatiale égale à 7 fois la longueur d'onde critique, ces solutions sont représentées par la branche  $P_7$  (figure 2.15). Elles sont spatialement périodiques, sous-critiques et coexistent avec l'état conductif où le fluide est au repos. La coexistence de ces 2 états favorise, à l'instar des solutions bistables de l'équation de Swift-Hohenberg, l'apparition de connexions homoclines. Les solutions localisées impaires sont portées par la branche  $L_{odd}$  tandis que les solutions localisées paires sont portées par L<sub>even</sub>. Ces deux branches décrivent un snaking bien délimité mais dont les bornes sont différentes, puis se reconnectent sur  $P_7$  proche du noeud-col. La raison pour laquelle le snaking des deux branches d'états localisés ne se fait pas



FIGURE 2.15 – Diagramme de bifurcation montrant l'échange thermique représenté par le nombre de Nusselt normalisé Nu–1 en fonction du nombre de Rayleigh R pour la convection thermique d'un fluide binaire avec effet Soret dans un domaine horizontalement périodique de rapport d'aspect 14. Sont présentées la branche de convection P<sub>7</sub> constituée de 7 paires de rouleaux contra-rotatifs de convection (représentée à droite en haut) ainsi que les branches de solutions localisées impaires (resp. paires)  $L_{odd}$  (resp.  $L_{even}$ ) dont une solution est montrée sur la figure de droite au milieu (resp. en bas). Les snapshots montrent les isovaleurs de la déviation  $\theta$  de la température au profil conductif ainsi que les isovaleurs de la concentration C. D'après Mercader *et al.* [27, 28].

dans la même région est la présence d'un gradient de concentration horizontal pour les solutions impaires [27]. Proche des noeuds-cols de droite, les solutions impaires sont constituées d'un train de rouleaux isolés dont le premier et le dernier tournent dans le même sens. Ils engendrent de fait un gradient de concentration horizontal dépendant de leur sens de rotation [4]. Ce pompage est responsable du déplacement de la limite de droite des noeuds-cols du snaking vers de plus petits nombres de Rayleigh du snaking pour les solutions localisées impaires. La limite de gauche n'est pas affectée par cet effet car les rouleaux de convection y sont moins intenses et le pompage insignifiant.

Pour conforter cette explication, on compare les résultats précédents avec ceux présentés sur la figure 2.16 tracés dans les mêmes conditions mais avec une condition d'adhérence pour la vitesse et de non-flux pour les autres champs au lieu des conditions aux limites périodiques dans la direction horizontale. Les nouvelles conditions aux limites empêchent les solutions spatialement périodiques de se former et seules les branches d'états spatialement localisés sont donc présentes sur ce diagramme. La branche d'états localisés pairs ( $L_{even}$  sur la figure 2.15 et LC sur la figure 2.16 à gauche) demeure sensiblement identique jusqu'à son dernier noeud-col. A ce niveau, à cause des conditions aux limites, elle passe par un dernier noeud-col et se dirige vers les grands nombres de Rayleigh, la solution produisant un défaut par rapport au train de rouleaux périodique de  $P_7$ . La même évolution est observée pour la branche d'états localisés impairs. Enfin, aucun flux de concentration à grande échelle n'est permis, et donc il n'y a pas de pompage et le snaking des deux branches d'états localisés se fait entre les mêmes limites. L'utilisation de ce type de conditions aux limites



FIGURE 2.16 – Diagrammes de bifurcation similaires à celui de la figure 2.15 mais pour des conditions aux limites d'adhérence et de non-flux. A gauche, la branche de solutions localisées paires et à droite celle des solutions localisées impaires. A chaque fois, une solution est représentée pour la marque la plus basse du diagramme en utilisant les mêmes champs que pour la figure 2.15. D'après Mercader *et al.* [28].

entraîne aussi l'apparition d'un nouveau type de solutions localisées : les convectons latéraux. La figure 2.17 permet de visualiser cette branche d'états localisés LW ainsi que sa bifurcation de la branche de solutions localisées paire LC. Les solutions la constituant sont des connexions hétéroclines entre l'état conductif et celui convectif et produisent aussi du snaking dans la même gamme de paramètres. Lors du snaking elles parcourent deux fois plus d'allers-retours que les branches d'états localisés précédentes, ceci s'expliquant par leur symétrie : à chaque aller-retour, les convectons latéraux ne rajoutent qu'un rouleau de convection contre deux pour les états localisés homoclines. La branche de convectons latéraux se reconnecte, une fois le domaine rempli, à la branche paire d'états localisés.

Les solutions précédentes représentent des fronts reliant un état conductif à un état convectif, et ont été présentées dans leur forme la plus simple, c'est-à-dire avec une ou deux connexions. La présence de ces fronts n'altérant pas la stabilité physique des solutions, il existe aussi des solutions présentant plus de connexions que l'on appelle multi-pulses. De telles solutions ont été mises en évidence dans le même problème par Mercader *et al.* [28], sans effet Soret [8] ainsi que dans un milieu poreux par Lo Jacono *et al.* [24]. En parallèle à cette zoologie d'états stationnaires, des solutions spatialement localisées stables mais non stationnaires existent. Elles peuvent prendre la forme de paquets de rouleaux de convection localisés se déplaçant au sein d'un milieu conductif [1] comme la solution figurant sur la figure 2.18.a, de rouleaux de convection stationnaires localisés au sein d'un milieu convectif oscillant [2] comme sur la figure 2.18.b, ou encore de comportements plus complexes [34].



FIGURE 2.17 – A gauche, diagramme de bifurcation montrant la branche LC de solutions paires (*cf* figure 2.16) ainsi que la branche d'états localisés latéraux LW. A droite, représentation des solutions localisées latérales marquées sur le diagramme par la déviation  $\theta$  thermique par rapport au profil conductif et la concentration *C*. D'après Mercader *et al.* [28].



FIGURE 2.18 – Diagrammes spatio-temporels représentant (a) la température sur le plan médian pour la convection d'un fluide binaire sujet à l'effet Soret dans un domaine périodique [1] et (b) la vitesse verticale dans le plan médian pour la convection de Marangoni dans un domaine périodique [2].



FIGURE 2.19 – (a) Solution frontalière de l'écoulement de Couette à Re = 400 représentée par la vitesse en x sur le plan médian en y [33]. Des solutions similaires ont été trouvées dans [16]. (b) Solution frontalière de l'écoulement en conduite cylindrique à Re = 4000représentée par la vorticité axiale à deux différents temps. Seulement 2/5 du domaine de calcul est représenté [38].

### 2.2.2 Ecoulements cisaillés

Dans les écoulements cisaillés tels que l'écoulement de Couette ou celui dans une conduite cylindrique, l'état laminaire (profil de vitesse linéaire pour l'écoulement de Couette et profil parabolique de Poiseuille pour l'écoulement en conduite cylindrique) est linéairement stable. Cependant, il peut coexister avec un état turbulent présentant un profil de vitesse multi-dimensionnel à fortes variations. Ces écoulements sont paramétrés par le nombre adimensionnel de Reynolds  $Re = UL/\nu$ où U représente la vitesse caractéristique du fluide par rapport à la paroi, L une longueur caractéristique typiquement transverse à l'écoulement et  $\nu$  la viscosité cinématique du fluide. Pour les faibles nombres de Reynolds, l'état laminaire est le seul à être stable, tandis que pour les nombres de Reynolds élevés, il coexiste avec un état turbulent qui tend à attirer toute perturbation d'amplitude finie de l'état laminaire.

Plusieurs solutions exactes instables sont d'ores et déjà connues [29, 17]. Elles forment un réseau susceptible de générer une dynamique chaotique, et la turbulence peut être interprétée comme une trajectoire attirée par ce réseau et approchant ces solutions instables [19]. De plus, certaines solutions exactes possèdent une variété instable de codimension 1, et donc toute perturbation à projection non-nulle sur cette variété amène soit à la turbulence soit à la relaminarisation. Ces solutions forment localement une frontière entre l'état laminaire et la turbulence et sont appelés états frontaliers. Lorsque de grands domaines sont considérés, plusieurs études ont montré que ces solutions se localisent fortement dans l'espace [38, 33]. Deux exemples d'états frontaliers calculés dans de grands domaines sont présentés sur la figure 2.19.



FIGURE 2.20 – Représentation schématique de l'écoulement de Couette. L'écoulement est généré par le mouvement en sens opposé des parois confinant le fluide dans la direction y. Cette configuration entraîne la présence d'un état laminaire dont la vitesse est linéaire avec y.



FIGURE 2.21 – Diagramme de bifurcation D(Re) où D représente le taux de dissipation volumique  $D = (L_x L_y L_z)^{-1} \int_{\Omega} (\nabla \times \mathbf{u})^2 d\Omega$  avec  $\Omega$  le domaine et Re le nombre de Reynolds. La branche  $u_P$  représente la solution stationnaire périodique de Nagata,  $u_{EQ}$  la branche de solutions localisées stationnaires et  $u_{TW}$  celle d'ondes progressives localisées. A noter que les cercles ouverts représentent les points où  $u_{TW}$  est stationnaire. D'après [32].

Contrairement aux écoulements en conduite cylindrique, l'écoulement de Couette présente une dynamique stationnaire permettant d'utiliser plus simplement des méthodes de type point fixe pour la recherche de nouvelles solutions. C'est ce que Schneider *et al.* [32] ont fait en mettant en évidence dans l'écoulement de Couette plan l'existence de solutions localisées et de snaking. La figure 2.20 représente un schéma de la configuration physique avec un fluide confiné dans la direction y par deux parois bougeant dans la direction x à des vitesses opposées. La figure 2.21 montre aussi le diagramme de bifurcation obtenu lorsque le domaine est périodique dans les directions x et z et d'extension  $L_x \times L_y \times L_z = 4\pi \times 2 \times 16\pi$ . Sont représentées la solution spatialement périodique de Nagata  $u_P$  [29] ainsi que les solutions spatialement localisées  $u_{EQ}$  et  $u_{TW}$ . L'état laminaire étant linéairement stable, les solutions montrées ici n'en bifurquent pas. La solution  $u_{EQ}$  est une solution stationnaire localisée perpendiculairement à l'écoulement de base et invariante par la symétrie centrale [u, v, w](x, y, z) = [-u, -v, -w](-x, -y, -z), tandis que  $u_{TW}$ 



FIGURE 2.22 – Solutions au second noeud-col de (a)  $u_{TW}$  et (b)  $u_{EQ}$ . Sous-figures du haut : sont représentés dans plan médian en y le champ de vitesse (en vecteurs) et les isovaleurs de la composante en x de la vitesse. Sous-figures du bas : vitesse en x moyennée sur toute la longueur  $L_x$  du domaine. Les vecteurs imprimés sur la figure représentent la vitesse dans le plan de coupe. D'après [32].



FIGURE 2.23 – Solutions labelisées  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$  sur la figure 2.21. La représentation est identique à celle de la figure précédente. D'après [32].

est une onde progressive, elle aussi localisée perpendiculairement à l'écoulement de base, se déplaçant suivant x et invariante par la symétrie [u, v, w](x, y, z, t) = $[u, v, -w](x + L_x/2, y, -z, t)$ . Ces deux solutions sont constituées de paires de rouleaux contra-rotatifs imprimées sur un fond laminaire dont le profil de vitesse est linéaire. Une solution le long de chacune de ces branches est représentée sur la figure 2.22. Les branches correspondantes effectuent un snaking dans une gamme de nombres de Reynolds 169 < Re < 177 produisant ainsi une grande multiplicité de solutions localisées. Comme dans le scénario lié à l'équation de Swift-Hohenberg, à chaque paire de noeuds-cols s'ajoute une paire de rouleaux de part et d'autre de la structure existante, tout en préservant les symétries. Il est aussi intéressant de noter que la solution d'ondes progressives localisées possède une vitesse de déplacement nulle à plusieurs endroits lors de son snaking. Enfin, Schneider *et al.* [32] ont aussi calculé les solutions du type *barreau* reliant chacune des branches proches de leurs noeuds-cols (figure 2.23).

### 2.2.3 Etudes expérimentales

Les fluides magnétiques sont des dispersions de nanoparticules magnétiques. Lorsque de tels fluides sont soumis à un champ magnétique uniforme perpendiculaire à leur surface, une instabilité dite de Rosensweig [11] se produit au cours de



FIGURE 2.24 – (a) Surface du fluide magnétique dans la partie supercritique de l'instabilité de Rosensweig pour une induction magnétique B = 10.407mT. (b) Energie surfacique du fluide  $E_s$  en fonction de l'induction magnétique. Un hystéresis est clairement visible pour 8.09mT < B < 9.025mT. A B = 8.91mT, plusieurs solutions localisées ont été identifiées en cercles pleins. D'après [31].

laquelle se forme un réseau hexagonal de pics (figure 2.24.a). Dans le cadre de leur expérience, Richter & Barashenkov [31] ont utilisé le fluide magnétique EMG 901, Lot F121901 AX de Ferrotec. Disposé sur un disque horizontal circulaire et soumis à un champ magnétique vertical uniforme, la surface du fluide reste uniforme jusqu'à B = 9.025 mT puis subit l'instabilité de Rosensweig. Lorsque l'induction magnétique est diminuée, la structure hexagonale perdure jusqu'à B = 8.09 mT puis s'évanouit, témoignant de l'hystéresis associé à la sous criticalité de la bifurcation de Rosensweig pour ce fluide (figure 2.24.b). Pour étudier la stabilité du profil surfacique uniforme vis à vis de perturbations locales, Richter & Barashenkov ont placé une bobine petite devant la taille du disque en son centre, permettant de créer localement un pulse magnétique de 0.68 mT s'ajoutant au champ uniforme B fixé dorénavant à 8.91 mT. A cette valeur de B, le profil surfacique n'est expérimentalement pas uniforme et présente une couronne de pics à son bord. Cette couronne est due à la discontinuité du champ magnétique au bord du disque et n'influence pas la création de pics au centre du domaine. L'ajout de ce pulse permet de créer un pic localisé au centre du domaine et qui perdure plusieurs jours après avoir retiré la bobine. Dû à son interaction avec ses homologues de la couronne, le pic solitaire, baptisé soliton, se déplace avant de trouver une position d'équilibre. Si d'autres pulses sont ajoutés à partir de ce moment, de nouveaux solitons sont créés et perdurent. Une solution à 9 solitons est montrée sur la figure 2.25. Ces solutions spatialement localisées sont représentées sur la figure 2.24.b par les cercles pleins et témoignent de la richesse de solutions stables dans la région de bistabilité.

D'autres expériences ont aussi permis de mettre en évidence la présence d'états localisés dans différents problèmes physiques comme en optique [36] ou dans les problèmes de Faraday en milieu granulaires [37] et suspensions colloïdales [22]. Des solutions spatialement localisées périodiques empruntées à ces deux derniers



FIGURE 2.25 – Photographie d'une solution constituée de 9 solitons pour une induction magnétique uniforme de 8.91mT. D'après [31].



FIGURE 2.26 – a) Un, deux et trois états localisés oscillant (appelés oscillons) à la surface d'une suspension colloïdale vibrant à 14Hz, 20Hz et 25Hz. Le temps va du haut vers le bas. D'après [22]. b) Photographies d'un oscillon composé de sphères de bronze recouvrant un disque vibrant à 26Hz. Deux temps différant d'une demi période sont montrés. D'après [37].

problèmes ont été reportées sur la figure 2.26.

# Bibliographie

- A. Alonso, O. Batiste, E. Knobloch, and I. Mercader. Convectons. In O. Descalzi, M. Clerc, S. Residori, and G. Assanto, editors, *Localized States in Physics: Solitons and Patterns*, pages 109–125. Springer Berlin Heidelberg, 2011.
- [2] P. Assemat, A. Bergeon, and E. Knobloch. Spatially localized states in Marangoni convection in binary mixtures. *Fluid Dyn. Res.*, 40:852–876, 2008.
- [3] D. Avitabile, D. J. B. Lloyd, J. Burke, E. Knobloch, B. Sandstede, R. Richter, and I. V. Barashenkov. To snake or not to snake in the planar Swift-Hohenberg equation. SIAM J. App. Dyn. Syst., 9:704–733, 2010.
- [4] C. Beaume, A. Bergeon, and E. Knobloch. Homoclinic snaking of localized states in doubly diffusive convection. *Phys. Fluids*, 23:094102, 2011.
- [5] M. Beck, J. Knobloch, D. J. B. Lloyd, B. Sandstede, and T. Wagenknecht. Snakes, ladders and isolas of localized patterns. *SIAM J. Math. Anal.*, 41:936– 972, 2009.
- [6] A. Bergeon and E. Knobloch. Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection. *Physica D*, 237:1139–1150, 2008.
- [7] A. Bergeon and E. Knobloch. Spatially localized states in natural doubly diffusive convection. *Phys. Fluids*, 20:034102, 2008.
- [8] A. Bergeon and E. Knobloch. Spatially localized states in natural doubly diffusive convection. *Phys. Fluids*, 20:034102, 2008.
- [9] J. Burke and E. Knobloch. Localized states in the generalized Swift–Hohenberg equation. *Phys. Rev. E*, 73:056211, 2006.
- [10] J. Burke and E. Knobloch. Snakes and ladders: Localized states in the Swift-Hohenberg equation. *Phys. Lett. A*, 360:681–688, 2007.
- [11] M. D. Cowley and R. E. Rosensweig. The interfacial stability of a ferromagnetic fluid. J. Fluid Mech., 30:671–688, 1967.
- [12] S. M. Cox, P. C. Matthews, and S. L. Pollicott. Swift-Hohenberg model for magnetoconvection. *Phys. Rev. E*, 69:066314, 2004.
- [13] T. Dauxois and M. Peyrard. *Physics of solitons*. Cambridge University Press, 2006.

- [14] J. H. P. Dawes. Localized pattern formation with a large-scale mode: slanted snaking. SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 7:186–206, 2008.
- [15] P. G. Drazin and R. S. Johnson. Solitons: an introduction. Cambridge University Press, 1989.
- [16] Y. Duguet, P. Schlatter, and D. S. Henningson. Localized edge states in plane Couette flow. *Phys. Fluids*, 21:111701, 2009.
- [17] H. Faisst and B. Eckhardt. Traveling waves in pipe flow. Phys. Rev. Lett., 91:22-25, 2003.
- [18] S. Fauve and O. Thual. Solitary waves generated by subcritical instabilities in dissipative systems. *Phys. Rev. Lett.*, 64:282–284, 1990.
- [19] J. F. Gibson, J. Halcrow, and P. Cvitanović. Equilibrium and travelling-wave solutions of plane Couette flow. J. Fluid Mech., 638:243–266, 2009.
- [20] M. F. Hilali, S. Métens, P. Borckmans, and G. Dewel. Pattern selection in the generalized Swift-Hohenberg model. *Phys. Rev. E*, 51:2046–2052, 1995.
- [21] S. M. Houghton and E. Knobloch. Homoclinic snaking in bounded domains. *Phys. Rev. E*, 80:026210, 2009.
- [22] O. Lioubashevski, Y. Hamiel, A. Agnon, Z. Reches, and J. Fineberg. Oscillons and propagating solitary waves in a vertically vibrated colloidal suspension. *Phys. Rev. Lett.*, 83:3190–3193, 1999.
- [23] D. J. B. Lloyd, B. Sandstede, D. Avitabile, and A. R. Champneys. Localized hexagon patterns of the planar Swift-Hohenberg equation. SIAM J. Applied Dynamical Systems, 7:1049–1100, 2008.
- [24] D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch. Spatially localized binary fluid convection in a porous medium. *Phys. Fluids*, 22:073601, 2010.
- [25] Y-P. Ma, J. Burke, and E. Knobloch. Defect-mediated snaking: A new growth mechanism for localized structures. *Physica D*, 239:1867–1883, 2010.
- [26] S. McCalla and B. Sandstede. Snaking of radial solutions of the multidimensional Swift-Hohenberg equation: a numerical study. *Physica D*, 239:1581–1592, 2010.
- [27] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch. Localized pinning states in closed containers: Homoclinic snaking without bistability. *Phys. Rev. E*, 80:025201, 2009.
- [28] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch. Convectons, anticonvectons and multiconvectons in binary fluid convection. J. Fluid Mech., 667:586– 606, 2011.
- [29] M. Nagata. Three-dimensional finite-amplitude solutions in plane Couette flow: bifurcation from infinity. J. Fluid Mech., 217:519–527, 1990.

- [30] M. Remoissenet. Waves called solitons: concepts and experiments. Springer, 1999.
- [31] R. Richter and I. V. Barashenkov. Two-dimensional solitons on the surface of magnetic fluids. *Phys. Rev. Lett.*, 94:184503, 2005.
- [32] T. M. Schneider, J. F. Gibson, and J. Burke. Snakes and ladders: Localized solutions of plane Couette flow. *Phys. Rev. Lett.*, 104:104501, 2010.
- [33] T. M. Schneider, D. Marinc, and B. Eckhardt. Localized edge states nucleate turbulence in extended plane Couette cells. J. Fluid Mech., 646:441–451, 2010.
- [34] A. Spina, J. Toomre, and E. Knobloch. Confined states in large-aspect-ratio thermosolutal convection. *Phys. Rev. E*, 57:524–545, 1998.
- [35] J. Swift and P. C. Hohenberg. Hydrodynamic fluctuations at the convective instability. *Phys. Rev. A*, 15:319–328, 1977.
- [36] V. B. Taranenko, K. Staliunas, and C. O. Weiss. Spatial soliton laser: localized structures in a laser with a saturable absorber in a self-imaging resonator. *Phys. Rev. A*, 56:1582–1591, 1997.
- [37] P. B. Umbanhowar, F. Melo, and H. L. Swinney. Localized excitations in a vertically vibrated granular layer. *Nature*, 382:793–796, 1996.
- [38] A. P. Willis and R. R. Kerswell. Turbulent dynamics of pipe flow captured in a reduced model: puff relaminarization and localized 'edge' states. J. Fluid Mech., 619:213–233, 2009.
- [39] P. D. Woods and A. R. Champneys. Heteroclinic tangles and homoclinic snaking in the unfolding of a degenerate Hamiltonian–Hopf bifurcation. *Physica* D, 129:147–170, 1999.
- [40] A. Yochelis, J. Burke, and E. Knobloch. Reciprocal oscillons and nonmonotonic fronts in forced nonequilibrium systems. *Phys. Rev. Lett.*, 97:254501, 2006.
- [41] W. P. Zhong, M. R. Belić, and Y. Xia. Special soliton structures in the (2+1)dimensional nonlinear Schrödinger equation with radially variable diffraction and nonlinearity coefficients. *Phys. Rev. E*, 83:036603, 2011.

# Chapitre 3

# Méthodes numériques

Dans ce chapitre nous présentons succintement les principales techniques numériques utilisées dans ce travail. Dans un premier temps, notre choix de discrétisation temporelle des équations est présenté avec le schéma d'Euler utilisé pour les équations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques et la méthode de *splitting* pour le problème de Navier–Stokes incompressible basée sur le schéma de Karniadakis, Israeli & Orszag [14]. La discrétisation spatiale par méthode aux éléments spectraux est ensuite abordée. Une attention particulière est donnée à la résolution du problème de Helmholtz. La méthode de continuation qui est l'outil que nous exploitons majoritairement dans ce travail est ensuite décrite.

### 3.1 Discrétisation temporelle

Nous présentons ici la discrétisation temporelle des équations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques dans un premier temps puis des équations de Navier Stokes incompressibles dans un second temps.

### 3.1.1 Equations de conservation

Dans les problèmes que nous traiterons, les équations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques s'écrivent :

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla)T = \frac{1}{\tau_d} \nabla^2 T,$$
(3.1)

où t est le temps, T un champ scalaire pouvant être la température ou la fraction massique (concentration), **u** la vitesse d'advection et  $\tau_d$  un nombre sans dimension. Le terme instationnaire est discrétisé par un schéma d'Euler retardé qui s'écrit à l'ordre q:

$$(\partial_t T)^{(n)} \approx \frac{\alpha_0}{\Delta t} T^{(n)} - \sum_{i=1}^q \frac{\alpha_i}{\Delta t} T^{(n-i)}, \qquad (3.2)$$

où  $T^{(n)}$  est l'approximation numérique du champ  $T(\mathbf{x}, t)$  à l'instant  $t_n = n\Delta t$  avec  $\Delta t$  le pas de temps et  $n \in \mathbb{N}$ . Les coefficients  $\{\alpha_i\}_{0 \le i \le q}$  sont issus du développement en série de Taylor de la dérivée temporelle (tableau 3.1). Le terme non-linéaire est

Coefficients	1 <sup>er</sup> ordre	2 <sup>nd</sup> ordre	3 <sup>ème</sup> ordre
$\alpha_0$	1	3/2	11/6
$\alpha_1$	1	2	3
$\alpha_2$	0	-1/2	-3/2
$\alpha_3$	0	0	1/3
$\beta_1$	1	2	3
$\beta_2$	0	-1	-3
$\beta_3$	0	0	1

TABLE 3.1 - Coefficients utilisés lors de la discrétisation temporelle. D'après Karniadakis *et al.* [14].

extrapolé à l'instant  $t_n$  par un schéma d'ordre r ce qui donne :

$$(\mathbf{u}^{(n)} \cdot \nabla) T^{(n)} \approx \left[ (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right]_{r}^{(n)} = \sum_{j=1}^{r} \beta_{j} \left[ (\mathbf{u} \cdot \nabla) T \right]^{(n-j)}.$$
(3.3)

Les coefficients  $\{\beta_i\}_{1 \le i \le r}$  sont consignés dans le tableau 3.1. Le terme de diffusion de l'équation (3.1) est évalué implicitement. Au final, l'équation discrétisée s'écrit :

$$\left(\partial_t T\right)^{(n)} + \left[\left(\mathbf{u} \cdot \nabla\right)T\right]_r^{(n)} = \frac{1}{\tau_d} \nabla^2 T^{(n)},\tag{3.4}$$

soit encore :

$$T^{(n)} = \left(I - \frac{\Delta t}{\alpha_0 \tau_d} \nabla^2\right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^q \frac{\alpha_i}{\alpha_0} T^{(n-i)} - \frac{\Delta t}{\alpha_0} \sum_{j=1}^r \beta_j [(\mathbf{u} \cdot \nabla)T]^{(n-j)}\right), \quad (3.5)$$

avec I l'opérateur identité. Les conditions aux limites sont prises en compte lors de l'inversion de l'opérateur de Helmoltz  $I - \gamma \nabla^2$  (ici  $\gamma = \Delta t / \alpha_0 \tau_d$ ) que nous détaillerons plus loin dans ce chapitre.

### 3.1.2 Equation de Navier–Stokes pour un écoulement incompressible

L'équation de Navier–Stokes pour un écoulement incompressible s'écrit une fois adimensionnalisée sous la forme :

$$\frac{1}{\tau_u} \left[ \partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} \right] = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}, \qquad \nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \qquad (3.6)$$

où  $\tau_u$  est un nombre sans dimension, **u** le champ de vitesse, p la pression et **F** le terme de force volumique.

Suivant le type de problème que nous considèrerons, on utilisera soit une formulation en variables primitives (vitesse-pression) soit une formulation fonction de courant - vorticité. Pour l'étude de la double-diffusion, on traitera des cavités parallélépipédiques et des couches fluides bidimensionnelles (géométries rectangulaires) munies de conditions aux limites d'adhérence sur la vitesse sur au moins l'un des bords. Dans ces cas, nous utiliserons une formulation en variables primitives. En revanche, pour la convection en présence de rotation, on considèrera des couches fluides bidimensionnelles munies de conditions aux limites de glissement sur la vitesse. Nous préfèrerons alors une formulation fonction de courant - vorticité. Nous présentons dans la suite la discrétisation temporelle adoptée avec chacune des formulations.

#### Formulation en variables primitives : schéma KIO

La difficulté majeure de l'intégration de l'équation de Navier–Stokes pour les écoulements incompressibles en variables primitives vient du couplage vitesse - pression par le biais de l'incompressibilité. Plusieurs techniques ont été développées pour contourner cette difficulté parmi lesquelles l'utilisation des maillages décalés pour la vitesse et la pression (schéma Marker And Cell (MAC) de Harlow & Welch [12]) ou l'algorithme d'Uzawa (Arrow, Hurwicz & Uzawa [1]). La méthode que nous utilisons ici fait partie des méthodes dites de splitting [11] qui reposent sur le fractionnement d'un pas de temps conduisant au découplage des problèmes en vitesse et en pression. Dans cette approche, une première famille appelée méthodes de correction en pression consiste à prédire une vitesse en utilisant un schéma d'évolution pour la pression, puis à calculer la pression pour satisfaire l'incompressibilité de l'écoulement. Divers types de schéma pour le traitement de la pression existent comme celui de Chorin [6], de Goda [9], de Kim & Moin [16] ou de Timmermans, Minev & Van de Vosse [23]. Cette famille de méthodes garantit l'incompressibilité de l'écoulement mais ne permet pas de vérifier exactement l'intégralité des conditions aux limites sur la vitesse. Une seconde famille de méthodes de splitting dites de correction en vitesse consiste à d'abord évaluer la pression en tenant compte de la condition d'incompressibilité de l'écoulement, puis à l'introduire dans le calcul de la vitesse. Ces méthodes, comme le schéma de Karniadakis, Israeli et Orszag [14] noté KIO ne permettent pas à l'écoulement de vérifier exactement la condition d'incompressibilité mais permettent de satisfaire les conditions aux limites.

Pour des raisons de mise en oeuvre et de préconditionnement lors de l'utilisation de la méthode de point fixe que nous exploiterons, c'est cette méthode que nous avons choisie. Dans les deux configurations de convection thermosolutale considérées, les champs de température et de concentration sont calculés en amont du calcul de la vitesse et de la pression. Le terme de forçage  $\mathbf{F}^{(n)}$  pour l'équation de Navier–Stokes est donc connu. La forme discrète de l'équation (3.6) s'écrit :

$$\frac{\alpha_0}{\Delta t}\mathbf{u}^{(n)} - \sum_{i=1}^q \frac{\alpha_i}{\Delta t}\mathbf{u}^{(n-i)} + \left[ \left(\mathbf{u} \cdot \nabla\right) \mathbf{u} \right]_r^{(n)} = \tau_u \left( -\nabla p^{(n)} + \nabla^2 \mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{F}^{(n)} \right), \quad (3.7)$$

où q est l'ordre de la discrétisation temporelle et r celui de l'extrapolation du terme d'advection. Le schéma KIO comporte 3 étapes. La première permet de prédire une vitesse  $\hat{\mathbf{u}}$  prenant en compte le terme de convection et de force de volume :

$$\frac{1}{\Delta t} \left( \hat{\mathbf{u}} - \sum_{i=1}^{q} \alpha_i \mathbf{u}^{(n-i)} \right) = -\left[ \left( \mathbf{u} \cdot \nabla \right) \mathbf{u} \right]_r^{(n)} + \tau_u \mathbf{F}^{(n)}.$$
(3.8)

La deuxième étape définit une vitesse intermediaire  $\hat{\mathbf{u}}$  vérifiant la condition d'in-

compressibilité  $\nabla \cdot \hat{\hat{\mathbf{u}}} = \mathbf{0}$  par :

$$\frac{1}{\Delta t} \left( \hat{\hat{\mathbf{u}}} - \hat{\mathbf{u}} \right) = -\tau_u \nabla p^{(n)}, \qquad (3.9)$$

qui amène à résoudre un problème de Poisson sur la pression obtenu en prenant la divergence de (3.9):

$$\nabla^2 p^{(n)} = \nabla \cdot \left(\frac{\hat{\mathbf{u}}}{\tau_u \Delta t}\right). \tag{3.10}$$

Il est muni de la condition aux limites d'ordre élevé pour les parois rigides introduite par Karniadakis *et al.* [14] :

$$\partial_n p^{(n)} = \left( \mathbf{F}^{(n)} - \tau_u^{-1} [(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}]_r^{(n)} - [\nabla \times \nabla \times \mathbf{u}]_s^{(n)} \right) \cdot \mathbf{e_n},$$
(3.11)

où le terme de diffusion a été extrapolé par le schéma (3.3) à l'ordre *s* après simplification en tenant compte de l'incompressibilité à l'instant  $t_n : [\nabla^2 \mathbf{u}]_s^{(n)} =$  $[\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla \times \nabla \times \mathbf{u}]_s^{(n)} = -[\nabla \times \nabla \times \mathbf{u}]_s^{(n)}$ . Enfin, connaissant la pression, on évalue  $\hat{\mathbf{u}}$  par l'équation (3.9) et l'on calcule la vitesse à l'instant  $t_n$  en résolvant le problème de Helmholtz :

$$\frac{1}{\Delta t} \left( \alpha_0 \mathbf{u}^{(n)} - \hat{\mathbf{u}} \right) = \tau_u \nabla^2 \mathbf{u}^{(n)}, \qquad (3.12)$$

muni des conditions aux limites du problème physique.

#### Formulation fonction de courant - vorticité

Dans le problème de la convection de Rayleigh-Bénard en présence de rotation traité dans le chapitre 6, nous considèrerons une couche fluide rectangulaire munie dans une direction de conditions aux limites périodiques et dans l'autre direction de conditions aux limites de glissement. Dans ces conditions, la résolution peut être menée en formulation fonction de courant/vorticité. Pour le domaine plan (x, z)considéré, l'équation de Navier-Stokes pour un écoulement incompressible s'écrit :

$$\frac{1}{\tau_u} \left( \partial_t \omega + J(\psi, \omega) \right) = \nabla^2 \omega + \nabla \times \mathbf{F}, \tag{3.13}$$

$$\nabla^2 \psi = \omega, \tag{3.14}$$

où la vorticité est définie par  $\omega = \mathbf{e}_{\mathbf{y}} \cdot \nabla \times \mathbf{u}$ , la fonction de courant par  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{x}} = -\partial_z \psi$ et  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{e}_{\mathbf{z}} = \partial_x \psi$  et  $J(\psi, \omega) = \partial_x \psi \partial_z \omega - \partial_x \omega \partial_z \psi$ .

Une première étape consiste à résoudre (3.14) pour obtenir la fonction de courant  $\psi$  en extrapolant  $\omega$  à l'ordre r par le schéma (3.3) :

$$\nabla^2 \psi^{(n)} = [\omega]_r^{(n)}, \tag{3.15}$$

muni de conditions aux limites de Dirichlet homogène. Le terme de force de volume est ensuite évalué à l'instant  $t_n$ . Enfin, l'équation (3.13) est résolue de la même façon que les équations de conservation de l'énergie et des espèces chimiques ce qui amène à :

$$\omega^{(n)} = \left(I - \frac{\Delta t \tau_u}{\alpha_0} \nabla^2\right)^{-1} \\ \left(\sum_{i=1}^q \frac{\alpha_i}{\alpha_0} \omega^{(n-i)} - \frac{\Delta t}{\alpha_0} \sum_{j=1}^r \beta_j [J(\psi, \omega)]^{(n-j)} + \frac{\tau_u \Delta t}{\alpha_0} \nabla \times \mathbf{F}^{(n)}\right). \quad (3.16)$$



FIGURE 3.1 – Exemple de maillage utilisé dans le problème de la double diffusion 2D et de la convection d'une couche fluide tournante 2D. Le domaine est découpé en 8 éléments de taille identique et chaque élément est discrétisé par les points de Gauss-Lobatto-Legendre avec  $N_x = 22$  et  $N_z = 16$ .

### 3.2 Discrétisation spatiale

#### **3.2.1** Discrétisation par éléments spectraux

Dans ce travail, deux configurations sont considérées :

- une couche fluide 2D d'extension infinie dans la direction horizontale x et confinée dans la direction verticale z par deux surfaces z = 0 et z = 1. Dans la direction x, on suppose également que les structures convectives qui y prennent forme sont  $\Gamma$ -périodiques avec l'hypothèse  $\Gamma \gg 1$ . Les équations seront donc résolues dans un domaine rectangulaire  $\Omega = [0, \Gamma] \times [0, 1]$  et munies, pour tous les champs, de conditions aux limites périodiques dans la direction x,
- un domaine parallélépipédique pour la convection thermosolutale 3D.

Pour discrétiser spatialement les champs, nous avons choisi une méthode aux éléments spectraux [8, 5]. Le choix de la distribution des éléments spectraux tient compte du fait que dans chacune des configurations, le domaine  $\Omega$  est plus étendu dans l'une des directions. Pour un domaine bidimensionnel, il est alors fractionné en éléments spectraux égaux en surface :  $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 ... \cup \Omega_{N_e}$  et  $\Omega_l = [(l-1)\Gamma/N_e, l\Gamma/N_e] \times [0, 1]$  où  $1 \leq l \leq N_e$  et  $N_e$  est le nombre total d'éléments spectraux. Un exemple est représenté sur la figure 3.1. Pour les domaines 3D, le fractionnement est identique à la différence près que chaque élément  $\Omega_k$  est maintenant un élément 3D. Un exemple de géométrie 3D étendue dans la direction x est représenté sur la figure 3.2. Dans chaque direction et pour chaque élément, les noeuds sont les points de Gauss-Lobatto-Legendre redistribués par une transformation affine sur les intervalles [0, 1] où  $[(l-1)\Gamma/N_e, l\Gamma/N_e]$  suivant la direction. On notera  $N_x$ ,  $N_y$  et  $N_z$  le degré polynomial de l'approximation dans chacune des directions x, y et z. Pour des raisons de simplicité de mise en oeuvre, ce degré est identique pour chaque élément. Pour l'élément e  $(1 \leq e \leq N_e)$ , les points de maillage sont notés  $\{x_{i,e}\}_{0 \leq i < N_x}, \{y_j\}_{0 < j < N_y}$  et  $\{z_k\}_{0 < k < N_z}$ .

### 3.2.2 Inversion des opérateurs de Helmoltz

Lors de l'intégration temporelle des équations, le coût principal réside dans l'inversion des opérateurs de Helmoltz dont nous allons détailler la mise en oeuvre sur un domaine  $3D : \Omega = [0, \Gamma] \times [0, 1] \times [0, 1]$ . On considère d'abord le problème de Poisson suivant :

$$-\nabla^2 u = f \quad \text{dans} \quad \Omega \quad \text{et} \quad u \in H^0_1(\Omega), \tag{3.17}$$



FIGURE 3.2 – Exemple de maillage utilisé dans le problème de la double diffusion 3D. La même discrétisation que pour le domaine 2D est étendue à des éléments 3D. Ici, 8 éléments ont été utilisés pour fractionner le domaine et chacun des éléments a été discrétisé avec  $N_x = N_y = N_z = 16$ .

où  $H_1^0(\Omega)$  est un espace de Sobolev d'ordre 1 sur  $\Omega$  dont les éléments sont nuls sur la frontière  $\partial\Omega$ . Les cas de conditions aux limites de type Neuman, périodiques ou de conditions aux limites mixtes seront discutés en fin de paragraphe. On note  $\partial\Omega_{k,k+1}$  l'interface entre les deux éléments  $\Omega_k$  et  $\Omega_{k+1}$  avec  $1 \leq k < N_e$ . On introduit également l'espace d'approximation  $X = \{w \in Y \mid w = 0 \text{ sur } \partial\Omega \text{ et } w_k|_{\partial\Omega_{k,k+1}} = w_{k+1}|_{\partial\Omega_{k,k+1}}$  quel que soit  $1 \leq k < N_e\}$  où  $w_k$  est la restriction de w à  $\Omega_k$  et Y est l'ensemble des fonctions w telles que w soit dans l'espace  $\mathbb{P}_{N_x,N_y,N_z}$  des polynômes de degré inférieur ou égal respectivement à  $N_x$ ,  $N_y$  et  $N_z$  dans les directions x, y et z. Le problème discret consiste à trouver une approximation  $u_N \in X$  de u telle que quel que soit  $v_N \in X$  on ait :

$$\int_{\Omega} \nabla u_N \cdot \nabla v_N \ d\Omega = \int_{\Omega} f v_N \ d\Omega. \tag{3.18}$$

Par la suite, la restriction de  $u_N$  à l'élément  $\Omega_e$  est notée  $u_e$  et cherchée sous la forme d'un produit tensoriel de fonctions polynômiales :

$$u_e(x, y, z) = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} u_{ijk,e} \ h_{i,e}^x(x) \ h_j^y(y) \ h_k^z(z),$$
(3.19)

où  $h_{i,e}^x(x)$  est le *i*-ième interpolant de Lagrange dans la direction x au travers des points  $\{x_{i,e}\}_{0 \le i \le N_x}$  et  $h_j^y(y)$ ,  $h_k^z(z)$  respectivement les *j*-ième et *k*-ième interpolants de Lagrange au travers des points  $\{y_j\}_{0 \le j \le N_y}$  et  $\{z_k\}_{0 \le k \le N_z}$ . De la même façon, on définit :

$$v_e(x, y, z) = \sum_{i=0}^{N_x} \sum_{j=0}^{N_y} \sum_{k=0}^{N_z} h_{i,e}^x(x) \ h_j^y(y) \ h_k^z(z).$$
(3.20)

En notant  $\{\rho_i^x\}_{0 \le i \le N_x}$ ,  $\{\rho_j^y\}_{0 \le j \le N_y}$  et  $\{\rho_k^z\}_{0 \le k \le N_z}$  les poids associés à la formule de quadrature de Gauss-Lobatto-Legendre et en approximant chacune des intégrales,
le système linéaire devient :

$$\sum_{e=1}^{N_e} \sum_{i,j,k=0}^{N_x,N_y,N_z} \rho_i^x \rho_j^y \rho_k^z \ \nabla u_e(x_{i,e}, y_j, z_k) \cdot \nabla v_e(x_{i,e}, y_j, z_k)$$
$$= \sum_{e=1}^{N_e} \sum_{i,j,k=0}^{N_x,N_y,N_z} \rho_i^x \rho_j^y \rho_k^z \ f_{ijk,e} \ v_e(x_{i,e}, y_j, z_k), \qquad (3.21)$$

où l'on a noté  $f_{ijk,e} = f(x_{i,e}, y_j, z_k)$ . A noter que le terme  $v_e(x_{i,e}, y_j, z_k)$  du membre de droite est évalué aux points de maillage et vaut 1. Il peut donc se simplifier mais est retenu par cohérence.

Pour résoudre ce système linéaire, nous allons combiner une méthode de diagonalisation dans les directions y et z et une méthode de Schur pour chacun des systèmes linéaires produits. On définit  $\{U_e\}_{1 \le e \le N_e}$  et  $\{F_e\}_{1 \le e \le N_e}$  où  $U_e$  et  $F_e$  sont des tableaux à 3 indices contenant l'ensemble des valeurs de  $u_e$  et  $f_e$  aux noeuds du maillage de l'élément e. On introduit les matrices de dérivations  $D^x$ ,  $D^y$  et  $D^z$  de dimensions respectives  $(N_x+1) \times (N_x+1), (N_y+1) \times (N_y+1)$  et  $(N_z+1) \times (N_z+1)$ et de terme général :

$$D_{ij}^{x} = \frac{dh_{j}^{x}}{dx}(x_{i,e}), \quad D_{ij}^{y} = \frac{dh_{j}^{y}}{dy}(y_{i}), \quad D_{ij}^{z} = \frac{dh_{j}^{z}}{dz}(z_{i}).$$
(3.22)

On remarque que puisque tous les éléments sont identiques en taille et en nombre de points, les termes  $(dh_j^x/dx)(x_{i,e})$  sont égaux quelque soit l'élément e. On introduit de la même manière les matrices de masse  $M^x$ ,  $M^y$  et  $M^z$  formées des poids sur leur diagonale :

$$M_{ij}^x = \rho_i^x \delta_{ij}, \quad M_{ij}^y = \rho_i^y \delta_{ij}, \quad M_{ij}^z = \rho_i^z \delta_{ij}, \tag{3.23}$$

avec  $\delta_{ij}$  le symbole de Kronecker, égal à 1 si i = j et 0 sinon. Le système linéaire (3.21) peut s'écrire :

$$\sum_{e=1}^{N_e} \left( M^z \otimes M^y \otimes A^x \otimes U_e + M^z \otimes A^y \otimes M^x \otimes U_e + A^z \otimes M^y \otimes M^x \otimes U_e \right)$$
$$= \sum_{e=1}^{N_e} \left( M^z \otimes M^y \otimes M^x \otimes F_e \right). \quad (3.24)$$

où les matrices  $A^x$ ,  $A^y$  et  $A^z$  sont de la forme :

$$A_{ij}^{x} = \sum_{k=0}^{N_{x}} \rho_{k}^{x} D_{ki}^{x} D_{kj}^{x}, \quad A_{ij}^{y} = \sum_{k=0}^{N_{y}} \rho_{k}^{y} D_{ki}^{y} D_{kj}^{y}, \quad A_{ij}^{z} = \sum_{k=0}^{N_{z}} \rho_{k}^{z} D_{ki}^{z} D_{kj}^{z}.$$
(3.25)

La somme sur e exprime ici le fait que pour un point de l'interface entre deux éléments, la contribution est double. Dans la relation (3.24), c'est une facilité de notation car les contributions ne forment une somme effective qu'aux interfaces. Le système peut se simplifier sous la forme :

$$\sum_{e=1}^{N_e} \left( I \otimes I \otimes (M^x)^{-1} A^x \otimes U_e + I \otimes (M^y)^{-1} A^y \otimes I \otimes U_e + (M^z)^{-1} A^z \otimes I \otimes I \otimes U_e \right) = \sum_{e=1}^{N_e} I \otimes I \otimes I \otimes F_e.$$
(3.26)

où I est l'identité. On introduit  $\Gamma_y$  et  $\Gamma_z$  les matrices diagonales formées des valeurs propres  $\lambda_j^y$  et  $\lambda_k^z$  des matrices  $(M^y)^{-1}A^y$  et  $(M^z)^{-1}A^z$ . Les matrices de passage formées des vecteurs propres de chacune des matrices sont notées  $P_y$  et  $P_z$  respectivement. Le système (3.26) peut alors se réécrire :

$$\sum_{e=1}^{N_e} \left( I \otimes I \otimes (M^x)^{-1} A^x \otimes \hat{U}_e + I \otimes \Gamma_y \otimes I \otimes \hat{U}_e + \Gamma_z \otimes I \otimes I \otimes \hat{U}_e \right)$$
$$= \sum_{e=1}^{N_e} \left( I \otimes I \otimes I \otimes \hat{F}_e \right), \quad (3.27)$$

où  $\hat{U}_e = P_z^{-1} \otimes P_y^{-1} \otimes I \otimes U_e$  et  $\hat{F}_e = P_z^{-1} \otimes P_y^{-1} \otimes I \otimes F_e$ . Dans la pratique, cette relation s'écrit encore plus simplement sous la forme de  $(N_y + 1)(N_z + 1)$  systèmes linéaires découplés de dimensions  $N_e(N_x + 1) \times N_e(N_x + 1)$ :

$$\sum_{e=1}^{N_e} \left[ \left( (M^x)^{-1} A^x + (\lambda_j^y + \lambda_k^z) I \right) \hat{U}_{e,jk} \right] = \sum_{e=1}^{N_e} \hat{F}_{e,jk},$$
(3.28)

pour tout  $0 \leq j \leq N_y$  et  $0 \leq k \leq N_z$  et où  $\hat{U}_{e,jk}$  et  $\hat{F}_{e,jk}$  sont les restrictions de  $\hat{U}_e$  et  $\hat{F}_e$  aux indices j et k fixés  $(\hat{U}_{e,jk}, \hat{F}_{e,jk} \in \mathbb{R}^{Ne(N_x+1)})$ .

On résoud chaque système linéaire par une méthode de Schur. La résolution doit tenir compte du fait que les points des interfaces dans les ensembles de champs  $\{\hat{U}_{e,jk}\}_{1\leq e\leq N_e}$  et  $\{\hat{F}_{e,jk}\}_{1\leq e\leq N_e}$  sont présents deux fois *i.e.* présents dans chaque paire d'éléments adjacents. La mise en oeuvre de la méthode consiste d'abord à les isoler. Les variables  $\{\hat{U}_{e,jk}\}_{1\leq e\leq N_e}$  et  $\{\hat{F}_{e,jk}\}_{1\leq e\leq N_e}$  sont donc réarrangées sous la forme :

$$V_{j,k} = \left(\hat{U}_{1,jk}^{R}, \hat{U}_{2,jk}^{R}, ..., \hat{U}_{N_{e},jk}^{R}, \hat{U}_{jk}^{I}\right)^{t}, \quad F_{j,k} = \left(\hat{F}_{1,jk}^{R}, \hat{F}_{2,jk}^{R}, ..., \hat{F}_{N_{e},jk}^{R}, \hat{F}_{jk}^{I}\right)^{t}, \quad (3.29)$$

où  $\hat{U}_{e,jk}^R$  et  $\hat{F}_{e,jk}^R$  contiennent en ligne les valeurs de  $\hat{U}_{e,jk}$  et  $\hat{F}_{e,jk}$  réduites aux points intérieurs au domaine y compris les points de la frontière  $\partial\Omega$  du domaine. Les champs  $\hat{U}_{jk}^I, \hat{F}_{jk}^I$  contiennent en ligne les  $N_e - 1$  valeurs des points des interfaces. Si, pour simplifier, l'on note  $B_{e,jk}$  la matrice  $(M^x)^{-1}A^x + (\lambda_j^y + \lambda_k^z)I$  et

- $B_{e,jk}^{RR}$ ,  $B_{e,jk}^{RI}$  les deux parties de la matrice contribuant aux valeurs des points intérieurs à l'élément e à partir respectivement des valeurs aux points intérieurs à l'élément e et aux points de l'interface,
- $B_{e,jk}^{IR}$  la partie de la matrice contribuant aux points de l'interface à partir des valeurs aux points intérieurs à l'élément e,
- $B_{e,jk}^{II}$  la partie de la matrice contribuant aux points de l'interface à partir des valeurs aux points de l'interface,

le système se réécrit :

$$\begin{pmatrix} B_{1,jk}^{RR} & & B_{1,jk}^{RI} \\ & B_{2,jk}^{RR} & & B_{2,jk}^{RI} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & B_{N_e,jk}^{RR} & B_{N_e,jk}^{RI} \\ & & & & B_{N_e,jk}^{RR} & B_{N_e,jk}^{RI} \\ & & & & B_{N_e,jk}^{RR} & B_{N_e,jk}^{RI} \\ & & & & B_{N_e,jk}^{IR} & B_{jk}^{II} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{U}_{1,jk}^{R} \\ \hat{U}_{2,jk}^{R} \\ \vdots \\ \hat{U}_{N_e,jk}^{R} \\ \hat{U}_{jk}^{I} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{F}_{1,jk}^{R} \\ \hat{F}_{2,jk}^{R} \\ \vdots \\ \hat{F}_{N_e,jk}^{R} \\ \hat{F}_{jk}^{I} \end{pmatrix}.$$
(3.30)

La résolution procède à partir de la dernière ligne. Par substitution, elle se réécrit :

$$\left(B_{jk}^{II} - \sum_{e=1}^{N_e} B_{e,jk}^{IR} (B_{e,jk}^{RR})^{-1} B_{e,jk}^{RI}\right) \hat{U}_{jk}^{I} = \hat{F}_{jk}^{I} - \sum_{e=1}^{N_e} B_{e,jk}^{IR} (B_{e,jk}^{RR})^{-1} \hat{F}_{e,jk}^{R}, \quad (3.31)$$

où la matrice du membre de gauche, constituée des éléments entre parenthèses, appelée matrice de Schur  $S_{ij}$  est inversée par factorisation LU. Une fois obtenues les valeurs  $\hat{U}_{jk}^{I}$  aux points de l'interface, on reconstruit les valeurs  $\hat{U}_{e,jk}^{R}$  aux points intérieurs en inversant pour e variant de 1 à  $N_e$ :

$$B_{e,jk}^{RR}\hat{U}_{e,jk}^{R} = \hat{F}_{e,jk}^{R} - B_{e,jk}^{RI}\hat{U}_{jk}^{I}.$$
(3.32)

On obtient ainsi le champ  $\hat{U}_e$ . On procède ensuite à un retour dans l'espace physique grâce à la relation :

$$U_e = P^z \otimes P^y \otimes I \otimes \hat{U}_e \tag{3.33}$$

Dans la mise en oeuvre, toutes les matrices dont l'inverse est requise (matrices de Schur  $S_{ij}$ , matrice  $B_{e,jk}^{RR}$ , produit  $B_{e,jk}^{IR}(B_{e,jk}^{RR})^{-1}$ ) font bien entendu l'objet d'un calcul préalable lors de l'initialisation des champs avant la première résolution du problème de Poisson.

Les conditions aux limites de Dirichlet devraient en principe être imposées dans l'inversion de la matrice de Schur en modifiant les lignes et le membre de droite des points sur lesquels ces conditions s'appliquent. Cependant, dans le cas présent le champ est déjà partiellement dans l'espace spectral pour les directions y et z. La méthode consiste donc à calculer la représentation spectrale dans les directions y et z des conditions aux limites seules, à retrancher le résultat au membre de droite et modifier la matrice de Schur et le membre de droite de (3.30) pour que les valeurs aux bords n'interviennent pas dans l'inversion de (3.30). L'image des conditions aux limites sera réimposée une fois  $\hat{U}$  obtenu avant le retour dans l'espace physique. Quant aux conditions aux limites de Neuman, elles ne posent pas de problème particulier. Elles sont responsables d'une intégrale de bord qui modifie le membre de droite (3.18) préalablement à la résolution qui reste inchangée. Des conditions aux limites périodiques dans la direction x peuvent également être implantées facilement. Il suffit de considérer que les bords du domaine x = 0 et  $x = \Gamma$  forment une interface entre les deux éléments spectraux e = 1 et  $e = N_e$ . Techniquement, cela ne nécessite que de changer l'identification des points intérieurs au domaine préalablement à l'inversion par méthode de Schur, les points du bord du domaine faisant dorénavant partie de l'interface entre éléments et n'étant plus sujet à une condition aux limites.

Enfin, le passage d'un problème de Poisson à un problème de Helmoltz du type  $(I - \gamma \nabla^2)u = f$  s'obtient directement. Il suffit de multiplier le membre de gauche de la relation (3.28) par  $\gamma$  puis de remplacer le terme  $\gamma(\lambda_j^y + \lambda_k^z)$  par  $\gamma(\lambda_j^y + \lambda_k^z) + 1$ . La méthode présentée ici dans le cas 3D est semblable à celle appliquée aux problèmes 2D.

## 3.3 Méthode de continuation

Les méthodes de continuation sont des méthodes particulières de calcul des racines d'une équation que nous utilisons ici pour la recherche de solutions stationnaires d'équations différentielles non-linéaires. Pour fixer les idées, considérons le système dynamique suivant :

$$\frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x}, \lambda), \tag{3.34}$$

où  $\mathbf{x}(t) \in \mathbb{R}^n$ ,  $\lambda \in \mathbb{R}$  est le paramètre et  $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^n$  est une fonction non-linéaire. Les méthodes de continuation reposent sur l'idée d'homotopie. Si l'on connait une solution à  $\lambda = \lambda_0$  et que l'on cherche une solution à  $\lambda = \lambda_1$ , on construit une suite discrète de problèmes intermédiaires paramétrés par  $\lambda$  [21]. La résolution successive de ces problèmes intermédiaires permet d'obtenir une courbe dans le plan  $(\lambda, \mathbf{x})$  appelée branche de solutions. Cette approche permet d'obtenir des diagrammes de bifurcation et ainsi de cartographier les solutions dans certaines gammes de  $\lambda$ . Génériquement, la résolution des problèmes intermédiaires est réalisée par une méthode de point fixe donnant accès aux solutions stationnaires linéairement stables ou instables. Ces méthodes peuvent également s'appliquer à l'étude de solutions instationnaires périodiques en les reformulant comme la recherche de points fixes d'une application de Poincaré. Cela dit, elles ne renseignent pas sur les régimes transitoires et ne sont pas conçues pour l'étude de solutions instationnaires. En ce sens, elles restent complémentaires des méthodes d'intégration en temps.

La principale difficulté pour suivre une branche de solutions est liée au fait que  $\mathbf{x}$ n'est pas nécessairement une fonction de  $\lambda$ ; la branche peut par exemple passer un point de rebroussement ou *noeud-col*. Pour surmonter cette difficulté, il convient de reparamétrer le problème en introduisant artificiellement un paramètre dont on sera certain que la solution en sera une fonction. C'est l'idée que Keller a proposée au travers d'une paramétrisation dite *pseudo arc length* [15] reposant sur la recherche d'une solution étendue  $\mathbf{X}$  incluant le paramètre  $\lambda : \mathbf{X}(s) = (\mathbf{x}(s), \lambda(s))$ . Ici, la variable *s* est le paramètre de continuation et représente l'abscisse curviligne le long de la branche. Il est clair que dans cette perspective,  $\mathbf{X}$  reste toujours une fonction de *s* même si la branche de solutions passe un point de rebroussement.

Généralement, à ces méthodes est associée une stratégie de parcours de la courbe de solutions dont l'objectif est de diminuer le temps de calcul sans perdre d'information. Le calcul d'une solution se fait ainsi en deux étapes. A partir d'une solution précédemment calculée  $\mathbf{X}(s_{j-1})$ , on construit par extrapolation une prédiction  $\hat{\mathbf{X}}$  de la solution  $\mathbf{X}(s_{j-1} + \Delta s)$  de sorte que  $\Delta s = |\hat{\mathbf{X}} - \mathbf{X}(s_{j-1})|_2$ . La seconde étape est l'étape de correction qui met en jeu une méthode itérative de type point fixe utilisant la prédiction comme valeur initiale. La correction se fait toujours à une distance  $\Delta s$  de  $\mathbf{X}(s_{j-1})$  en résolvant :  $f(\mathbf{X}(s_j)) = 0$  munie de la contrainte



FIGURE 3.3 – Exemple schématique de méthode de continuation sur le paramètre  $\lambda$ , xétant la solution (ici de dimension 1) du système. La phase de prédiction a lieu avec un pas  $\Delta s$  vers  $(\hat{x}, \hat{\lambda})$  et la correction se fait en arc de cercle vers  $(x(s_j), \lambda(s_j))$ . La variable s représente l'abcisse curviligne et  $\lambda$  le paramètre de continuation.

 $\Delta s - |\mathbf{X}(s_j) - \mathbf{X}(s_{j-1})|_2 = 0$  (figure 3.3). L'objectif de l'étape de prédiction est évidemment de réduire le temps de calcul de la nouvelle solution voire tout simplement de permettre à la méthode de point fixe de converger. La stratégie d'optimisation du temps de calcul ne s'arrête cependant pas là. Le choix de l'avancement  $\Delta s$ est lui aussi contrôlé de sorte à avancer plus vite ( $\Delta s$  plus grand) lorsque la solution varie peu avec s ou à ralentir ( $\Delta s$  plus petit) lorsque la branche traverse de multiples noeud-cols ou que le calcul de la correction est évalué comme trop coûteux.

Ces méthodes bénéficient aujourd'hui de plus de 30 ans de développement et sont de plus en plus utilisées [13]. Des logiciels open-sources ont même été développés permettant d'aborder des systèmes modérés en nombre d'équations  $(n = \mathcal{O}(10^2))$  [7]. On notera toutefois que leur emploi dans le domaine de la mécanique des fluides reste marginal en raison principalement des difficultés inhérentes à leur mise en oeuvre sur des systèmes à nombre de degrés de liberté élevé. Plus exactement, c'est l'inversion des systèmes linéaires mis en jeu dans l'étape de correction par la méthode de point fixe (Newton-Raphson dans notre cas) qui pose problème. C'est pourtant dans ce domaine que nous avons exploité ces méthodes sur des géométries 2D et 3D. En nombre de degrés de liberté, nos systèmes mettent en jeu de l'ordre de 10<sup>5</sup> inconnues dans les cas 3D. Le succès de la mise en oeuvre de ce travail repose principalement sur l'utilisation d'un préconditionneur proposé par Tuckerman [24, 20]

### 3.3.1 Algorithme de continuation

La méthode de continuation utilisée dans notre travail diffère de la continuation *pseudo arc length.* Elle contient toujours les deux étapes, prédiction et correction, mais celles-ci ne sont pas réalisées avec la contrainte que nous avons présentée.

La prédiction est construite par extrapolation (linéaire ou quadratique) de solutions antérieures. Le paramètre sur lequel elle est menée n'est pas l'abscisse curviligne mais soit le paramètre adimensionnel retenu pour les diagrammes de bifurcation (par exemple le nombre de Rayleigh  $\lambda \equiv Ra$ ) soit la valeur en un point (la *l*-ième coordonnée  $x_l$  du vecteur  $\mathbf{x}$ ). Le deuxième choix est préféré à proximité d'un point de rebroussement pour lequel la solution cesse d'être une fonction du paramètre  $\lambda$  mais reste une fonction de  $x_l$ . Cette proximité éventuelle est détectée par l'algorithme soit en évaluant la pente de la courbe  $\mathbf{x}(\lambda)$  aux points précédents, soit parce que le nombre d'itérations de correction aux points précédents a augmenté de manière significative témoignant de l'approche d'un point singulier.

La correction procède de même avec deux choix possibles. Soit le calcul du point fixe est mené à paramètre  $\lambda$  fixé (les inconnues sont alors les *n* composantes de **x**) soit le paramètre est inclus dans les inconnues et l'une des composantes de **x** est maintenue fixée (les inconnues sont alors toutes les n - 1 autres composantes de **x** et le paramètre  $\lambda$ ).

### 3.3.2 Méthode de point fixe

La méthode proposée par Mamum et Tuckerman [20] est ici mise en oeuvre aussi bien avec une formulation des équations en variables primitives qu'avec une formulation fonction de courant - vorticité. Il s'agit d'une méthode de Newton dans laquelle un préconditionneur est utilisé pour l'inversion des systèmes linéaires à chaque itération.

La méthode exploite le schéma d'intégration en temps des équations à l'ordre 1. Les équations (Navier-Stokes incompressible, conservation de l'énergie et des espèces chimiques) peuvent schématiquement s'écrire, une fois discrétisées en temps et en espace :

$$\mathbf{U}^{(n)} = (I - \Delta t \, L)^{-1} \left( \mathbf{U}^{(n-1)} + \Delta t \, \mathbf{N}(\mathbf{U}^{(n-1)}) \right), \tag{3.35}$$

où **U** est l'ensemble des valeurs des champs  $((\mathbf{u}, T, C)$  pour un problème de doublediffusion) aux noeuds du maillage. Dans l'écriture, L est la partie linéaire et  $N(\mathbf{U})$ la partie non-linéaire. L'examen des schémas présentés dans la section 1 montre que L est au facteur multiplicatif près un opérateur de diffusion agissant sur chacune des composantes du champ **U**. L'équation (3.35) peut aussi s'écrire :

$$\mathbf{U}^{(n)} - \mathbf{U}^{(n-1)} = \Delta t \left( I - \Delta t \, L \right)^{-1} \left( L \mathbf{U}^{(n-1)} + \mathbf{N}(\mathbf{U}^{(n-1)}) \right).$$
(3.36)

La recherche d'une solution stationnaire  ${\bf U}$  du problème est la recherche d'une solution de :

$$L \mathbf{U} + \mathbf{N}(\mathbf{U}) = \mathbf{0}. \tag{3.37}$$

Une méthode de Newton à paramètre constant ( $\lambda$  fixé) appliquée à cette équation consiste à calculer une suite de valeurs  $\mathbf{U}^{[k]}$  ( $k \ge 0$ ) telle que  $\mathbf{U}^{[k+1]} = \mathbf{U}^{[k]} - \delta \mathbf{U}^{[k]}$ où  $\delta \mathbf{U}^{[k]} \equiv \delta \mathbf{U}$  est solution de :

$$L \mathbf{U}^{[k]} + N(\mathbf{U}^{[k]}) = \left(L + D_{\mathbf{U}}\mathbf{N}(\mathbf{U}^{[k]})\right)\delta\mathbf{U}, \qquad (3.38)$$

où  $D_{\mathbf{U}}N(\mathbf{U}^{[k]})$  est la dérivée de Fréchet de l'opérateur N évaluée en  $\mathbf{U}^{[k]}$ . En multipliant les deux membres par  $\Delta t(I - \Delta tL)^{-1}$ , on obtient de manière équivalente :

$$\Delta t (I - \Delta t L)^{-1} \left( L \mathbf{U}^{[k]} + \mathbf{N}(\mathbf{U}^{[k]}) \right) = \Delta t (I - \Delta t L)^{-1} \left( L + D_{\mathbf{U}} \mathbf{N}(\mathbf{U}^{[k]}) \right) \delta \mathbf{U}.$$
(3.39)

La comparaison avec (3.36) montre que si l'on connait  $\mathbf{U}^{[k]}$  et  $\delta \mathbf{U}$  les deux membres de l'équation peuvent être évalués par le schéma d'intégration en temps. Pour le membre de gauche c'est immédiat avec une itération en temps en utilisant  $\mathbf{U}^{(n-1)} = \mathbf{U}^{[k]}$ . Le membre de droite peut aussi être évalué de la même manière en linéarisant le schéma d'intégration temporelle (ce qui nécessite un changement du calcul des termes mettant en jeu N et la linéarisation des conditions aux limites). Pour exploiter cette observation, nous utilisons une méthode itérative pour inverser ce système linéaire (la méthode fixe seule les valeurs successives de  $\delta \mathbf{U}$  et l'évaluation du membre de droite est menée par le biais d'une itération du schéma d'intégration en temps linéarisé). Dans le cas présent, nous avons utilisé un gradient biconjugué carré de la bibliothèque NSPCG [17].

Outre le fait de pouvoir mettre en oeuvre simplement une méthode de Newton à l'aide du schéma d'intégration en temps, la méthode proposée par Tuckerman offre un avantage décisif : la relation (3.39) montre que  $(I - \Delta tL)^{-1}$  peut être un préconditionneur du système (3.38). Si  $\Delta t \gg 1$ ,  $\Delta t(I - \Delta tL)^{-1} \approx L^{-1}$ . Si les termes diffusifs dominent dans l'opérateur  $(L + D_{\mathbf{U}}N(\mathbf{U}^{[k]}))$ , alors la méthode a le double intérêt de présenter une facilité de mise en oeuvre et de faciliter l'inversion en implémentant du même coup un bon préconditionneur. Dans la pratique nous avons utilisé  $\Delta t \approx 10^5$  pour obtenir des convergences quadratiques entre 2 et 5 itérations de Newton.

La même approche peut être utilisée dans le cas du calcul d'un point fixe à paramètre variable en maintenant l'une des composantes du champ U fixée à une valeur prescrite. Il convient alors de dériver  $L \mathbf{U} + N(\mathbf{U})$  par rapport au paramètre adimensionnel choisi (par exemple Ra). Le résultat dépend bien sûr de l'adimensionnement *i.e.* de l'endroit où apparaît ce paramètre.

### 3.3.3 Analyse de stabilité linéaire

L'analyse de stabilité linéaire des solutions stationnaires complète les informations du diagramme de bifurcation et est également utilisée dans l'accrochage des branches aux points de bifurcation. Le vecteur propre marginal (sa norme peut être ajustée) additionné à la solution stationnaire forme un prédicteur qui est utilisé à l'itération zéro de l'étape de correction pour tenter d'accrocher la branche.

En notant  $\delta \mathbf{U} = \delta \tilde{\mathbf{U}} e^{\sigma t}$  (avec  $\delta \tilde{\mathbf{U}}$  indépendant de t) une perturbation infinitésimale d'une solution stationnaire  $\mathbf{U}$ , le système linéaire vérifié par  $\delta \mathbf{U}$  s'écrit :

$$\sigma \delta \mathbf{U} = J(\mathbf{U}) \,\delta \mathbf{U} \tag{3.40}$$

où  $\sigma$  est la valeur propre (taux de croissance temporel) de  $J(\mathbf{U})$ , Jacobienne du système qui n'est autre que la linéarisation de F autour de  $\mathbf{U} : J(\mathbf{U}) = L + D_{\mathbf{U}}N(\mathbf{U})$ . La stabilité est donc liée au signe de la partie réelle des valeurs propres de  $J(\mathbf{U})$ .

Etant donnée la dimension du système linéaire mis en jeu dans nos problèmes, il est préférable de ne pas calculer le spectre complet de J. Par ailleurs, seule la partie du spectre associée aux valeurs propres à partie réelle positive ou proche de zéro nous intéresse. Les méthodes d'Arnoldi sont un outil de choix pour extraire une partie du spectre. De nature itérative, elles ne nécessitent que de savoir évaluer l'action de J sur un vecteur donné ce qui est appréciable comparé à l'explicitation complète de la matrice J. Toujours sur une idée de Mamun et Tuckerman, on va utiliser le schéma d'intégration en temps dans sa version linéarisée pour calculer l'action de J.

La méthode consiste à reprendre la relation (3.35) dans sa version linéarisée, ce qui donne :

$$\delta \mathbf{U}^{(n)} = (I - \Delta t L)^{-1} (I + \Delta t D_{\mathbf{U}} N(\mathbf{U})) \,\delta \mathbf{U}^{(n-1)}, \qquad (3.41)$$

où U est une solution stationnaire autour de laquelle les équations sont linéarisées. En prenant  $\Delta t \ll 1$ , on obtient facilement à l'ordre 1 que :

$$\delta \mathbf{U}^{(n)} \approx e^{\Delta t \, J(\mathbf{U})} \delta \mathbf{U}^{(n-1)} \tag{3.42}$$

Il est donc préférable de calculer par une méthode d'Arnoldi les valeurs propres de  $\exp(\Delta t J(\mathbf{U}))$  plutôt que celles de  $J(\mathbf{U})$  pour deux raisons. La première est que l'on dispose d'un moyen simple d'évaluer l'action de  $\exp(\Delta t J(\mathbf{U}))$  sur un vecteur arbitraire donné (il suffit de faire un pas en temps avec un schéma d'ordre 1 linéarisé). La seconde est que les valeurs propres de  $\exp(\Delta t J(\mathbf{U}))$  les plus grandes correspondent à celles à partie réelle positive, c'est à dire celles qui nous intéressent. Et les méthodes d'Arnoldi convergent naturellement vers cette partie du spectre. Bien entendu, une fois les valeurs propres de  $\exp(\Delta t J(\mathbf{U}))$  obtenues, il est aisé d'en déduire celles de  $J(\mathbf{U})$ . La stabilité est calculée régulièrement le long des branches de solutions à l'aide de la librairie ARPACK [19]. Il faut noter que cette partie est extrêmement coûteuse, pouvant représenter l'équivalent d'une centaine de calculs de points fixes par la méthode de Newton dans les cas 3D les plus difficiles. De fait, le calcul de stabilité n'est pas mené à chaque solution et des méthodes de dichotomie ont été mises en place pour localiser avec plus de précision les points de bifurcation.

## 3.4 Validations

Trois codes numériques distincts sont utilisés dans ce travail. Ils ont été validés séparément et entre eux. Plus précisément, nous avons exploité :

– Un code 2D par éléments spectraux pour le problème de double-diffusion dans une couche horizontale périodique dans cette direction (chapitre 4). Une formulation en variables primitives est utilisée pour la continuation et l'intégration en temps. Le développement de ce code a été mené dans l'esprit de modéliser des cavités inclinées d'un angle  $\alpha$  par rapport à l'horizontale. La validation du code a été effectuée en comparant le diagramme de bifurcation pour une cavité verticale avec celui de la figure 4 de l'étude de Bergeon & Knobloch [4]. Le passage à une configuration horizontale a été validé par la comparaison des résultats de stabilité linéaire avec ceux de Spina et al. [22]. L'intégration temporelle a été validé par des simulations au voisinage de solutions stables/instables. Lors de ces simulations, la comparaison entre les taux de décroissance/croissance temporelle donnés par l'analyse de stabilité linéaire et ceux observés dans les simulations ont permis de valider le code d'intégration en temps à l'ordre 2 et 3. Les diagrammes de bifurcation présentés dans le chapitre 4 ont été calculés avec un maillage convergé dans le régime fortement non-linéaire. Les calculs d'intégration temporelle ont été réalisés avec le même maillage et des tests ont été effectués en diminuant le pas de temps jusqu'à convergence des résultats.

- Un code 2D par éléments spectraux pour le problème de la convection de Rayleigh-Bénard en présence de rotation dans une couche horizontale périodique dans cette direction (chapitre 6). Une formulation en fonction de courant/vorticité est utilisée pour la continuation et l'intégration en temps. Le code a été développé en parallèle des calculs analytiques présentés dans le chapitre 6. Une fois développé, les seuils d'instabilités ont été confrontés à ceux de la littérature [10, 18] puis aux comportements non-linéaires obtenus analytiquement dans le chapitre 6. Une comparaison a aussi été faite en configuration Rayleigh-Bénard (avec des conditions aux limites de glissement sur les parois horizontales) avec le code de double diffusion dans lequel la contribution solutale a été enlevée. Toutes les branches non-linéaires tracées ont été obtenues à l'identique sur les deux codes. Les diagrammes présentés dans le chapitre 6 ont été obtenus après une étude de convergence de maillage portant sur la branche périodique principale, branche comportant les plus forts gradients locaux, ainsi que sur les branches d'états localisés.
- Un code 3D par éléments spectraux pour le problème de double-diffusion dans une couche verticale ou horizontale dans une cavité d'extension finie (chapitre 5). Une formulation en variables primitives est utilisée pour la continuation et l'intégration en temps. Les validations ont été menées dans le régime linéaire sur les résultats présentés dans [25, 2], puis dans le régime pleinement nonlinéaire par comparaison avec le diagramme en figure 5 de [3]. Enfin, la même procédure de validation que pour le code 2D a été employée pour valider le schéma d'intégration en temps à l'ordre 2. Tous les calculs présentés dans le chapitre 5 ont été effectués avec le même maillage et les intégrations temporelles ont été effectuées avec un pas de temps convergé.

# Bibliographie

- [1] K. Arrow, L. Hurwicz, and H. Uzawa. *Studies in Nonlinear Programming*. Stanford University Press.
- [2] A. Bergeon, K. Ghorayeb, and A. Mojtabi. Double diffusive instability in an inclined cavity. *Phys. Fluids*, 11:549–559, 1999.
- [3] A. Bergeon and E. Knobloch. Natural doubly diffusive convection in threedimensional enclosures. *Phys. Fluids*, 14:3233–3250, 2002.
- [4] A. Bergeon and E. Knobloch. Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection. *Physica D*, 237:1139–1150, 2008.
- [5] C. Canuto, M. Hussaini, A. Quarteroni, and T. Zang. Spectral Methods. Fundamentals in Single Domains. Springer Verlag, 2006.
- [6] A. J. Chorin. Numerical solution of the Navier–Stokes equations. Math. Comput., 22:745–762, 1968.
- [7] E. J. Doedel and B. E. Oldeman. AUTO-07p: continuation and bifurcation software for ordinary differential equations. Concordia University, Montreal, Canada, 2007.
- [8] D. Funaro. Polynomial Approximation of Differential Equations. Springer, New York, 1991.
- [9] K. Goda. A multistep technique with implicit difference scheme for calculating two- or three-dimensional cavity flows. J. Comput. Phys., 3:76–95, 1979.
- [10] J. Guckenheimer and E. Knobloch. Nonlinear convection in a rotating layer: Amplitude expansions and normal forms. *Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics*, 23(4):247–272, 1983.
- [11] J. L. Guermond, P. Minev, and J. Shen. An overview of projection methods for incompressible flows. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195:6011–6045, 2006.
- [12] F. H. Harlow and J. E. Welch. Numerical calculation of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. *Phys. Fluids*, 8:2182–2189, 1965.
- [13] D. Henry and A. Bergeon (Eds.). Continuation methods in fluid dynamics. Notes on numerical Fluid Mechanics. Vieweg, Wiesbaden, 2000.

- [14] G. E. Karniadakis, M. Israeli, and S. A. Orszag. High-order splitting methods for the incompressible Navier–Stokes equations. J. Comp. Phys., 97:414–443, 1991.
- [15] H. B. Keller. Numerical Solutions of Bifurcation and Non-linear Eigenvalue Problems: Application of Bifurcation Theory. Academic Press New York.
- [16] J. Kim and P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible Navier–Stokes equations. J. Comput. Phys., 58:308–323, 1985.
- [17] D. R. Kincaid, T. C. Oppe, and W. D. Joubert. An introduction to the NSPCG software package. Int. J. for Num. Meth. in Eng., 27:589–608, 1989.
- [18] E. Knobloch and M. Silber. Travelling wave convection in a rotating layer. Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics, 51(1):195–209, 1990.
- [19] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, and C. Yang. ARPACK users' Guide: Solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods. 1997.
- [20] C. K. Mamun and L. S. Tuckerman. Asymmetry and Hopf bifurcation in spherical Couette flow. *Phys. Fluids*, 7:80–91, 1995.
- [21] R. Seydel. Practical Bifurcation and Stability Analysis. From Equilibrium to Chaos. IAM 5 Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer Verlag.
- [22] A. Spina, J. Toomre, and E. Knobloch. Confined states in large-aspect-ratio thermosolutal convection. *Phys. Rev. E*, 57:524–545, 1998.
- [23] L. Timmermans, P. Minev, and F. van de Vosse. An approximate projection scheme for incompressible flows using spectral elements. *Num. Meth. Fluids*, 22:673–688, 1996.
- [24] L. S. Tuckerman. Steady-state solving via Stokes preconditioning: Recursion relations for elliptic operators. In D. Dwoyer, M. Hussaini, and R. Voigt, editors, 11th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, volume 323 of Lecture Notes in Physics, pages 573–577. Springer, Berlin, 1989.
- [25] S. Xin, P. Le Quéré, and L. S. Tuckerman. Bifurcation analysis of double diffusive convection with opposing horizontal thermal and solutal gradients. *Phys. Fluids*, 10:850–858, 1998.

# Chapitre 4

# Convection de double diffusion 2D

Dans ce chapitre, on étudie la formation d'états spatialement localisés dans la convection de double diffusion d'une couche horizontale périodique en présence de gradients de température et de concentration verticaux. La formation de ces structures a déjà été étudiée en présence d'effet Soret [14, 16, 15] et on se propose ici de l'étudier en l'absence d'effet Soret.

## 4.1 Introduction

#### 4.1.1 Formulation du problème

On considère un mélange fluide binaire dans une couche d'extension horizontale L confinée verticalement entre deux parois adhérentes en z = 0 et z = h. La paroi en z = 0 est maintenue à une température et une concentration constantes  $T_r^* + \Delta T$ et  $C_r^* + \Delta C$  et celle en z = h à  $T_r^*$  et  $C_r^*$ . On considère la situation dans laquelle le fluide est chauffé par le bas c'est-à-dire stratifié instable en température mais stratifié stable en concentration ce qui correspond au cas  $\Delta T > 0$ ,  $\Delta C > 0$ , C étant la concentration du composant le plus lourd. La couche fluide est supposée infinie dans la direction horizontale x et on s'intéresse aux solutions périodiques de période  $L \gg h$ . On considère donc que pour les champs de concentration, température, vitesse et pression s'appliquent des conditions aux limites périodiques en  $x = \pm L/2$ .

On se place dans l'approximation de Boussinesq de sorte que la densité est constante dans tous les termes à l'exception du terme de force volumique dans lequel elle s'écrit :  $\rho(T^*, C^*) = \rho_0 + \rho_T(T^* - T_r^*) + \rho_C(C^* - C_r^*)$ , où  $T^*$  et  $C^*$  sont respectivement la température et la concentration au sein du fluide et  $\rho_T < 0$  et  $\rho_C > 0$  sont les coefficients d'expansion thermique et solutale à la température et à la concentration de référence  $T_r^*$  et  $C_r^*$ . On ne considère pas dans la suite les effets de diffusion croisée (effets Dufour et Soret).

Les équations sont adimensionalisées en utilisant h comme unité de longueur et le temps caractéristique de diffusion thermique  $h^2/\kappa$  comme unité de temps où  $\kappa$ est la diffusivité thermique. Les températures et concentrations adimensionalisées Tet C sont définies par  $T = (T^* - T_r^*)/\Delta T$  et  $C = (C^* - C_r^*)/\Delta T$ . Les équations s'écrivent :

$$Pr^{-1}\left(\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}\right) = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + (Ra \ T - Ra_S \ C)\mathbf{e_z},\tag{4.1}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{4.2}$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla^2 T, \tag{4.3}$$

$$\partial_t C + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = \tau \nabla^2 C, \tag{4.4}$$

où  $\mathbf{u} \equiv (u, w)$  est le champ bidimensionnel de vitesse dans les directions (x, z), p la pression et T et C les valeurs adimensionées des déviations de température et de concentration par rapport à leur valeur de référence. Les nombres sans dimension sont le nombre de Prandtl Pr, l'inverse du nombre de Lewis  $\tau$  et les nombres de Rayleigh thermique et solutal Ra > 0 et  $Ra_S > 0$  définis par :

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa}, \qquad \tau = \frac{D}{\kappa}, \qquad Ra = \frac{g|\rho_T|\Delta Th^3}{\rho_0 \kappa \nu}, \qquad Ra_S = \frac{g\rho_C \Delta Ch^3}{\rho_0 \kappa \nu}, \qquad (4.5)$$

où  $\nu$  est la viscosité cinématique, D le coefficient de diffusion solutale et g l'accélération gravitationnelle. Les conditions aux limites s'écrivent :

en 
$$z = 0$$
:  $u = w = T - 1 = C - 1 = 0,$  (4.6)

en 
$$z = 1$$
:  $u = w = T = C = 0,$  (4.7)

et sont accompagnées de conditions aux limites périodiques en  $x = \pm L/2h = \pm \Gamma/2$ . Dans la suite on associera à  $\Gamma$  à la fois la périodicité spatiale et le rapport d'aspect du domaine de calcul, la hauteur du domaine servant à l'adimensionnement de toutes les longueurs.

#### 4.1.2 Propriétés de symétrie

Les équations (4.1-4.4) munies des conditions aux limites (4.6,4.7) admettent une solution spatialement homogène :

$$u = 0,$$
  $w = 0,$   $T = 1 - z,$   $C = 1 - z,$  (4.8)

correspondant à l'état conductif. Il sera également appelé solution triviale ou solution conductive. On définit  $\Theta$  et  $\Sigma$  les écarts à la solution conductive :  $T = 1 - z + \Theta$  et  $C = 1 - z + \Sigma$ .

Les symétries du problème sont les symétries du groupe  $O(2) \times Z_2$ . Le groupe O(2) est généré par les translations continues dans la direction x et la réflexion  $R_1$  par rapport à l'axe  $x = x_0$  où  $x_0$  est arbitraire dans le domaine. On choisit  $x_0 = 0$  de sorte que l'action de  $R_1$  s'écrive :

$$R_1: (x,z) \to (-x,z), (u,w,\Theta,\Sigma) \to (-u,w,\Theta,\Sigma).$$

$$(4.9)$$

L'invariance par la réflexion  $R_1 \in O(2)$  est appelée réversibilité en x. Le groupe  $Z_2$  est généré par la réflexion par rapport à l'axe z = 1/2:

$$R_2: (x, z) \to (x, 1 - z), (u, w, \Theta, \Sigma) \to (u, -w, -\Theta, -\Sigma).$$
(4.10)

La présence du groupe de symétries  $O(2) \times Z_2$  a un certain nombre d'implications. L'invariance par translation en x implique notamment que toute bifurcation de la solution conductive est une fourche de révolution produisant des solutions spatialement périodiques [1].

Les propriétés de symétrie du problème impliquent aussi que toute bifurcation de Hopf de la solution conductive crée simultanément des branches d'ondes progressives (traveling waves, TW) et d'ondes stationnaires (standing waves, SW), dont au plus une peut être stable [7]. La théorie linéaire révèle en outre la présence de ce type de bifurcation pour  $\tau < 1$  et  $Ra_S$  suffisamment grand [11]. Les SW et TW résultant de conditions aux limites de glissement ont été largement étudiées [9, 10, 8] et sont le siège d'instabilités de modulation d'amplitude amenant à une dynamique spatiotemporelle complexe [5].

## 4.2 Résultats

Dans ce paragraphe, on présente d'abord les solutions spatialement localisées stationnaires que nous avons découvertes, puis des solutions instationnaires présentant une localisation spatiale. Les paramètres utilisés dans la suite sont Pr = 1,  $\tau = 1/15$ et  $Ra_S = 500$ . Les méthodes numériques employées ont nécessité un maillage de 20 éléments spectraux égaux constitués de 17 points dans la direction horizontale et 25 dans la direction verticale. Les simulations numériques directes (intégration en temps) ont été effectuées avec un schéma d'ordre 2 et un pas de temps fixé à  $10^{-5}$ .

### 4.2.1 Solutions localisées stationnaires

Pour étudier la présence de solutions localisées stationnaires, on procède d'abord à une analyse de stabilité linéaire spatiale de l'état conductif dans une couche horizontale infinie.

Pour ce faire, on linéarise les équations stationnaires autour de la solution conductive et on étudie les conditions d'existence de perturbations de la forme :

$$(\tilde{u}(z), \tilde{w}(z), \tilde{p}(z), \tilde{\Theta}(z), \tilde{\Sigma}(z)) \ e^{i(kx+\omega t)},$$

$$(4.11)$$

où  $k \equiv k_R + ik_I$  est le nombre d'onde complexe et  $\omega$  la pulsation temporelle. Les perturbations associées à  $k_I < 0$  correspondent à des modes qui croissent exponentiellement de  $\tilde{u} = \tilde{w} = \tilde{p} = \tilde{\Theta} = \tilde{\Sigma} = 0$  en  $-\infty$  vers une structure convective  $2\pi/k_R$ périodiques et celles  $k_I > 0$  à des modes qui décroissent vers 0 en  $+\infty$ . La combinaison de ces deux modes est donc susceptible de produire des états spatialement localisés. Les modes  $k_I = 0$  correspondent à des modes  $2\pi/k_R$  invariants en x. Les champs  $\tilde{u}, \tilde{w}, \tilde{p}, \tilde{\Theta}$  et  $\tilde{\Sigma}$  sont développés en variables complexes et les équations (4.1–4.4) discrétisées dans la direction verticale par des points de Gauss-Lobatto-Legendre. Le système est muni de conditions aux limites de Dirichlet homogènes pour les champs  $\tilde{u}, \tilde{w}, \tilde{\Theta}$  et  $\tilde{\Sigma}$  ainsi que de conditions supplémentaires fixant la phase  $\tilde{u}(0, z = 0.5) = 0$ . En fixant  $k_R$  et  $k_I$  avant chaque calcul, on obtient un problème aux valeurs propres non-linéaire pour le vecteur inconnu ( $\tilde{u}, \tilde{w}, \tilde{p}, \tilde{\Theta}, \tilde{\Sigma}, Ra, \omega$ ) que l'on inverse par une méthode de Newton. La recherche de conditions d'existence de solutions spatialement localisées est menée autour du seuil d'instabilité stationnaire



FIGURE 4.1 – Valeurs propres spatiales  $k \equiv k_R + ik_I$  calculées par l'analyse de stabilité linéaire (spatiale) de la solution conductive dans la région sous-critique  $Ra < Ra_c \approx 9207.76$ . La partie réelle  $k_R$  du nombre d'onde varie linéairement avec l'écart au seuil alors que sa partie imaginaire  $k_I$  varie comme  $\sqrt{Ra_c - Ra}$ . Seul  $k_I > 0$  est tracé ( $-k_I$  est aussi solution).

en  $Ra_c = 9207.76$ , valeur que nous avons déterminée par une analyse de stabilité linéaire en temps<sup>1</sup>. Les variations de  $k_R$  et  $k_I$  avec l'écart au seuil  $r = Ra_c - Ra$ sont représentées sur la figure 4.1. Les résultats montrent qu'au seuil r = 0 la valeur propre  $k = k_c = 3.1163$  a une multiplicité de 2, une conséquence de la reversibilité spatiale du système. Pour  $Ra > Ra_c$ , les valeurs propres k sont réelles alors que pour  $Ra < Ra_c$ , elles forment un quartet  $k \sim k_R + i\sqrt{r}$ . Par conséquent, si des états spatialement localisés existent, ils se forment par le biais d'une bifurcation sous-critique en r = 0 et n'existent au voisinage du seuil que dans la région  $Ra < Ra_c$ .

On étudie maintenant la formation de solutions  $\Gamma$ -périodiques dans un domaine infini. L'étude est menée par la méthode de continuation numérique décrite dans le chapitre 3. Ces calculs sont réalisés sur un domaine périodique de rapport d'aspect  $\Gamma = 10\lambda_c$  où  $\lambda_c = 2\pi/k_c \approx 2.0162$  est la longueur d'onde critique associée à la première bifurcation stationnaire dans une couche horizontale infinie. Avec ce choix, la première bifurcation stationnaire est associée à la formation dans le domaine  $[-\Gamma/2, \Gamma/2] \times [0, 1]$  de solutions spatialement périodiques présentant 10 longueurs d'onde (1 longueur d'onde = 1 paire de rouleaux contra-rotatifs). En raison de la périodicité imposée, à la différence de la couche infinie, les états localisés ne bifurquent pas simultanément avec la branche périodique, mais par le biais d'une bifurcation secondaire le long de celle-ci [4]. Dans la suite, on notera  $P_n$  la branche de solutions périodiques possédant n longueurs d'ondes et  $L_n^{m\pm}$  la branche d'états localisés produite par la m-ième bifurcation secondaire le long de  $P_n$ . L'indice + (resp. -) est présent lorsque la solution est invariante par la symétrie  $R_1$  (resp.  $R_1 \circ R_2$ ).

Les résultats sont présentés sur la figure 4.2 sous la forme d'un diagramme de bifurcation. Les branches de solutions  $P_{10}$ ,  $P_{11}$  et  $L_{10}^{1\pm}$  sont matérialisées par les variations de l'énergie cinétique  $E \equiv (1/2) \int_0^{\Gamma} \int_0^1 |\mathbf{u}|^2 dx dz$  avec le nombre de Rayleigh

<sup>1.</sup> La même analyse révèle également que ce seuil est précédé d'une bifurcation instationnaire en  $Ra_H = 2239.67$ .



FIGURE 4.2 – Diagramme de bifurcation représentant l'énergie cinétique E en fonction du nombre de Rayleigh thermique Ra pour Pr = 1 et  $Ra_S = 500$ . Seules sont montrées les branches correspondant à la solution conductive (E = 0), aux solutions périodiques (branches de bifurcation primaire  $P_{10}$  et  $P_{11}$  associées à des solutions formées de 10 et 11 paires de rouleaux contra-rotatifs) et aux solutions spatialement localisées (branches  $L_{10}^{1\pm}$  émergeant d'une bifurcation secondaire le long de  $P_{10}$  voir figure 4.3 — pour lesquelles  $\pm$  fait référence à la parité des solutions).

thermique Ra. Nous nous sommes limités aux deux premières bifurcations primaires ainsi qu'aux premières bifurcations secondaires pour des raisons qui deviendront claires dans la suite.

La branche  $P_{10}$  bifurque de manière sous-critique en  $Ra \approx 9207.76$  et passe par un noeud col en  $Ra_{SN_{10}} \approx 2416$ . En raison de la valeur de  $\tau$  relativement faible, cette branche est fortement sous-critique. Le long de  $P_{10}$ , deux branches d'états localisés indicées  $L_{10}^{1+}$  et  $L_{10}^{1-}$  bifurquent au voisinage du seuil. Elles sont composées respectivement de solutions invariantes par  $R_1$  (solutions paires) et de solutions invariantes par  $R_1 \circ R_2$  (solutions impaires). Bien que bifurquant simultanément, ces branchent reconnectent deux branches périodiques différentes :  $L_{10}^{1+}$  termine sur  $P_{10}$  alors que  $L_{10}^{1-}$  termine sur  $P_{11}$  (figure 4.3).

La figure 4.2 montre aussi que les branches  $L_{10}^{1\pm}$  passent une série de noeudscols alignés verticalement et définissant une région appelée région de snaking entre  $Ra_{left} \approx 2700$  et  $Ra_{right} \approx 2760$ . Ce comportement est semblable à celui observé avec l'équation de Swift-Hohenberg (chapitre 2). Ces deux branches sont effectivement associées à la formation de structures spatialement localisées représentées aux différents noeuds-cols sur les figures 4.4 et 4.5.

En ce qui concerne la branche  $L_{10}^{1+}$ , la figure 4.4.c montre un panache de concentration ascendant en x = 0 entouré d'une alternance de panaches descendants et



FIGURE 4.3 – Diagrammes de bifurcation représentant l'énergie cinétique E en fonction du nombre de Rayleigh thermique Ra pour Pr = 1 et  $Ra_S = 500$ . Il s'agit de grossissements de certaines régions de la figure précédente. (a) Voisinage des bifurcations primaires vers  $P_{10}$  et  $P_{11}$ . La bifurcation secondaire vers les branches  $L_{10}^{1\pm}$  y est clairement visible. A faible amplitude les deux branches  $L_{10}^{1+}$  et  $L_{10}^{1-}$  sont indiscernables. La figure montre aussi les bifurcations secondaires vers les branches  $L_{10}^{2\pm}$ et  $L_{11}^{1\pm}$  associées à des solutions spatialement localisées multi-pulses. (b) Voisinage de la reconnection des branches d'états localisés  $L_{10}^{1\pm}$  sur les branches périodiques  $P_{10}$  et  $P_{11}$ . Par souci de clarté, les branches  $L_{10}^{2\pm}$  et  $L_{11}^{1\pm}$  ne sont pas représentées.

ascendants, le tout entouré par un fluide au repos. L'extension spatiale de la structure localisée obéit à un comportement bien défini lorsque l'on suit  $L_{10}^{1+}$  des petites aux grandes énergies cinétiques. Aux noeuds-cols de gauche (notés 1, 3, ...), les rouleaux aux extrémités de la structure sont faibles et se renforcent à mesure que l'on progresse vers les noeuds-cols de droite (notés 2, 4, ...) où ils atteignent leur amplitude maximale. Puis, entre les noeuds-cols de droite et ceux de gauche, un rouleau de convection s'ajoute de part et d'autre de la structure localisée, la faisant croître tout en préservant ses symétries. Le mécanisme se reproduit entre chaque paire de noeud-col jusqu'à ce que l'extension de la structure approche la taille du domaine. A ce stade, le mécanisme ne peut continuer car l'espace laissé à l'ajout d'un rouleau de part et d'autre est insuffisant. La branche  $L_{10}^{1+}$  quitte alors la région de snaking et se dirige vers les faibles Ra avant de terminer sur  $P_{10}$  (figure 4.3.b). La solution au point de reconnection est représentée sur la figure 4.4 par le label 19.

La figure 4.5 est l'homologue de la figure 4.4 pour  $L_{10}^{1-}$ . Chaque solution possède la symétrie centrale  $R_1 \circ R_2$  et possède donc un panache vertical ascendant à droite de x = 0 et un panache vertical descendant à gauche de x = 0 (ou vice versa). A l'instar de  $L_{10}^{1+}$ , la nucléation se crée aux deux extrémités de la structure localisée lorsque l'on se déplace des noeuds-cols de droite vers les noeuds-cols de gauche dans le sens des énergies cinétiques croissantes. Des noeud-cols de gauche vers ceux de droite, les rouleaux croissent pour atteindre leur amplitude maximale. De la même manière que pour la branche  $L_{10}^{1+}$ , la branche  $L_{10}^{1-}$  quitte la région de snaking dans le sens des Ra décroissants dès que l'espace laissé vacant de part et d'autre de la structure localisée n'est plus suffisant pour ajouter un rouleau. Dans cette dernière phase, la longueur d'onde des rouleaux s'ajuste afin de permettre la reconnection à la branche périodique  $P_{11}$ .

Contrairement au snaking visualisé sur l'équation de Swift-Hohenberg dans le chapitre 2, la variation de longueur d'onde entre les noeuds-cols de gauche et de



FIGURE 4.4 – (a) Série de snapshots représentant les solutions (au travers des isovaleurs de la fonction de courant) aux différents noeuds-cols le long de la branche  $L_{10}^{1+}$ . (b) Diagramme de bifurcation montrant l'énergie cinétique E en fonction de Ra pour les branches  $L_{10}^{1\pm}$  et indiquant la correspondance entre les noeuds-cols et les solutions de (a). (c) Intégrale verticale de la déviation en concentration aux mêmes points que (a). Les maxima (minima) locaux correspondent à un écoulement vertical ascendant (descendant). La ligne verticale représente l'axe vertical médian du domaine (x = 0).

droite est quasiment imperceptible. C'était déjà le cas dans la convection de double diffusion naturelle [3] ainsi que dans la convection dans une couche horizontale formée d'un milieu poreux saturé par un mélange binaire sujet à l'effet Soret [12].

Comme on l'a vu dans le chapitre 2, la région de snaking s'accompagne aussi d'états localisés à un pulse ne possédant pas de symétrie. Ces états se forment sur des branches liant  $L_{10}^{1\pm}$  au voisinage de leurs noeuds-cols successifs. La symétrie O(2) implique qu'ils se déplacent de manière périodique dans la direction x et correspondent donc à des pulses progressifs instationnaires non montrés ici.

Les résultats présentés ici sont très similaires à ceux obtenus dans la convection d'un fluide binaire sujet à l'effet Soret [2]. Cependant, les deux systèmes ont une différence essentielle liée aux conditions aux limites sur les surfaces horizontales z = 0 et z = 1 qui se répercute sur certaines propriétés de la région de snaking. En présence d'un mélange fluide binaire sujet à l'effet Soret, le flux de masse  $\mathbf{J}_c$  est une combinaison linéaire des gradients thermique  $\nabla T$  et solutal  $\nabla C$ :

$$\mathbf{J}_c = -\rho C(1-C)D'\nabla T - \rho D\nabla C, \qquad (4.12)$$

où D est le coefficient de diffusion de masse et D' le coefficient Soret. Dans cette expression, T et C sont des variables dimensionnées. Si l'on admet que C varie peu,  $D_s = C(1-C)D'$  est constant et est appelé le coefficient de diffusion Soret. Cette relation indique qu'un flux de chaleur induit un flux de masse qui se traduit par une séparation des espèces chimiques au sein du mélange.

Considérons alors la configuration d'un mélange fluide chauffé par le bas et pour lequel le coefficient Soret  $D_s$  est négatif. A l'équilibre  $(\mathbf{u} = \mathbf{0})$ , les différences de



FIGURE 4.5 – Représentation identique que pour la figure 4.4, mais pour  $L_{10}^{1-}$ .

température et de concentration entre z = 0 et z = 1 vérifient :  $\Delta C = -D_s \Delta T/D$  ce qui place l'état conductif dans une configuration instable thermiquement et stable solutalement. En ce sens, cette configuration est analogue à celle que nous avons étudiée à la différence que le gradient de concentration y est imposé explicitement via la condition aux limites. Les conditions aux limites sont donc différentes dans les deux systèmes. En présence d'effet Soret, la condition à la limite sur la concentration en z = 0 et z = 1 exprime l'imperméabilité des parois et se traduit par une condition du type Neumann de la forme  $\mathbf{J}_c \cdot \mathbf{n} = 0$  où  $\mathbf{n}$  est le vecteur normal à la paroi. La quantité de chaque espèce chimique dans le volume  $\Omega$  est donc constante dans le temps. Ce n'est évidemment plus vrai dès lors que, comme c'est notre cas, la concentration est imposée le long de ces parois. De fait, dans un mélange avec effet Soret, un courant ascendant transportant du soluté en provenance de la paroi inférieure pourra plus difficilement le transmettre au-delà de la paroi supérieure ce qui induit un flux horizontal au voisinage de cette paroi. Dans le cas de solutions impaires, les deux extrémités de la structure localisée sont formées de rouleaux identiques (tournant dans le même sens) et produisent donc un transport de soluté dans la même direction. A l'échelle de la structure convective, ce transport s'assimile à un pompage de soluté dans une direction et de solvant dans l'autre. Dans le problème que nous étudions ici, les conditions aux limites de Dirichlet ne contraignent pas le flux à la paroi. Il en résulte que les courants ascendants peuvent transporter le soluté vers la paroi supérieure et induire un flux de concentration au travers de celle-ci. Ce mécanisme ne génère donc pas de pompage horizontal. C'est à la présence de pompage horizontal qu'est imputée la différence dans la limite super-critique du snaking des branches de solutions paires et impaires en présence d'effet Soret (cf figure 4.6).

La limite sous-critique du snaking n'est pas touchée par cet effet car les rouleaux présents aux extrémités y sont faibles et ne génèrent donc pas de pompage [2]. Dans notre cas, le pompage horizontal ne s'établissant pas, les bornes en Rayleigh du snaking sont les mêmes pour les deux branches.

Comme dans les autres problèmes à localisation stationnaire, la région de snaking



FIGURE 4.6 – Diagramme de bifurcation représentant le nombre de Nusselt normalisé Nu - 1 en fonction du nombre de Rayleigh pour un domaine  $\Gamma$ -périodique avec  $\Gamma = 14$ . La configuration est celle d'un mélange binaire sujet à l'effet Soret et placé entre deux surfaces maintenues à température constante (chauffage pas le bas). Le coefficient Soret du mélange est négatif. Les branches  $L_{\text{even}}$  et  $L_{\text{odd}}$  font référence aux branches que nous avons notées  $L^+$  et  $L^-$ . La branche  $P_7$  correspond aux solutions périodiques formées de 7 paires de rouleaux contra-rotatifs. On remarque que les noeuds-cols de droite des branches paire et impaire ne sont pas alignés, une différence avec notre cas imputée à un effet de pompage au travers des convectons. D'après [14].

possède aussi une grande quantité de solutions localisées multi-pulses, c'est-à-dire possédant plusieurs régions de convection chacune reliant des zones conductives. On peut distinguer deux familles d'états multi-pulses :

- celles dont les convectons sont équidistants dans la direction horizontale. Les branches associées bifurquent de branches périodiques,
- celles dont les convectons ne sont pas espacés identiquement. Les branches associées forment des isolas dans l'espace des paramètres [6]. Ces branches ont été mises en évidence par Lo Jacono *et al.* dans l'étude bi-dimensionnelle de la convection d'un mélange binaire sujet à l'effet Soret et saturant un milieu poreux [12].

C'est la première famille qui va nous intéresser. La figure 4.3.a montre la formation de quatre branches d'états multi-pulses. Ceux identifiés sur  $L_{10}^{2\pm}$  bifurquent le long de  $P_{10}$  et sont formés d'une paire de convectons identiques dont les centres sont séparés de  $\Gamma/2$ . Ces solutions ne sont rien d'autre que la réplique d'états localisés à un pulse suceptibles de se former sur un domaine de périodicité  $\Gamma/2$  (figure 4.7). Il n'est donc pas surprenant de les voir décrire un snaking dans la même gamme de paramètres que  $L_{10}^{1\pm}$ . La figure 4.8.a montre en outre que ces branches décrivent deux fois moins d'allers-retours que les branches  $L_{10}^{1\pm}$  lors du snaking ce qui est naturel puisqu'à chaque aller-retour, du fait que la structure comporte 2 convectons, elle croît deux fois plus vite. Contrairement à  $L_{10}^{1\pm}$ , les branches  $L_{10}^{2\pm}$  finissent toutes deux sur  $P_{10}$ . La seconde famille de solutions multi-pulses notée  $L_{11}^{1\pm}$  est représentée sur la

La seconde famille de solutions multi-pulses notée  $L_{11}^{1\pm}$  est représentée sur la figure 4.8.b. Les branches correspondantes sont formées lors de la première bifurcation secondaire de  $P_{11}$  (figure 4.3.a) et les solutions associées sont composées de deux convectons également espacés qui produisent une région de snaking dans



FIGURE 4.7 – Snapshots représentant les solutions (isovaleurs de la fonction de courant) aux noeuds-cols des branches  $L_{10}^{2+}$ ,  $L_{10}^{2-}$ ,  $L_{11}^{1+}$  et  $L_{11}^{1-}$ . Ces branches sont représentées sur la figure 4.8. Le dernier snapshot (en haut) représente la solution au point de reconnection sur la branche périodique. Les branches  $L_{10}^{2\pm}$  se reconnectent sur  $P_{10}$  tandis que les branches  $L_{11}^{1\pm}$  se reconnectent sur  $P_{11}$ . Les solutions  $L_{10}^{2+}$  et  $L_{11}^{1-}$  sont paires au regard de la réflexion par rapport à x = 0 tandis que  $L_{10}^{2-}$  et  $L_{11}^{1+}$  sont impaires.

la même gamme de paramètres que  $L_{10}^{1\pm}$  (figures 4.7.b et 4.8.b). La solution  $L_{11}^{1\pm}$  consiste en une paire de convectons pairs équidistants et de signe opposé. La structure résultante est antisymétrique par rapport à x = 0 (conséquence de l'invariance par la réflexion  $R_1 \circ R_2$ ). De la même façon,  $L_{11}^{1-}$  consiste en une paire de convectons impairs équidistants et de signe opposé formant une structure invariante par  $R_1$ . Ces deux branches terminent elles-aussi sur la même branche périodique  $P_{11}$ .

### 4.2.2 Solutions localisées instationnaires

Les solutions stationnaires spatialement localisées que nous avons calculées jusqu'ici sont toutes linéairement instables. La présence de bifurcations de Hopf avant la bifurcation stationnaire  $Ra_c$  est bien sûr à l'origine de cette instabilité puisque celles-ci bifurquent de branches périodiques  $P_{10}$  et  $P_{11}$  qui héritent de l'instabilité de la solution conductive. On s'intéresse dans cette partie aux solutions instationnaires et à leurs interactions éventuelles avec les solutions stationnaires spatialement localisées.

La première bifurcation de Hopf apparaît pour  $Ra = Ra_H \approx 2239.67$ . Deux branches de solutions en émergent correspondant à des ondes progressives et des ondes stationnaires. Les premières peuvent être calculées par une méthode de point fixe en reformulant le problème dans le référentiel en mouvement comme celui de la recherche d'une solution stationnaire. Les ondes stationnaires ne peuvent être calculées par une procédure identique et nécessitent la mise en oeuvre d'outils numériques spécifiques (recherche de point fixe d'une application de Poincaré) que



FIGURE 4.8 – Parties du diagramme de bifurcation représentant l'énergie cinétique *E* en fonction du nombre de Rayleigh thermique *Ra* pour Pr = 1 et  $Ra_S = 500$ . Sont représentées en (a) les branches  $L_{10}^{2\pm}$  associées aux solutions à deux-pulses  $L_{10}^{2\pm}$ (en trait continu) superposées aux branches  $L_{10}^{1\pm}$  associées aux solutions à un pulse (en trait discontinu). Ces branches bifurquent de  $P_{10}$ . (b) Idem mais pour  $L_{11}^{1\pm}$  qui émergent de  $P_{11}$ .



FIGURE 4.9 – Diagramme de bifurcation représentant l'énergie cinétique E en fonction du nombre de Rayleigh thermique Ra pour Pr = 1 et  $Ra_S = 500$ . Il reprend celui de la figure 4.2 en y ajoutant la branche associée aux ondes progressives TW issues de la première bifurcation primaire de Hopf. Les solutions stables sont représentées en trait continu et les solutions instables en pointillés. La première bifurcation de Hopf ainsi que la reconnection de TW sur  $P_{10}$  sont indiquées par des carrés. Les traits gris verticaux localisent les valeurs de Ra pour lesquelles les simulations sont présentées sur les figures 4.10 et 4.11.

nous n'avons pas développés. En d'autres termes, dans ce travail, elles ne nous sont accessibles que par simulation numérique directe lorsqu'elles sont stables.

La branche d'ondes progressives (notées TW pour traveling waves) est représentée sur la figure 4.9. Elle émerge en  $Ra_H$  d'une bifurcation sous-critique et passe rapidement un noeud-col à l'issue duquel elle gagne sa stabilité. Elle disparaît ensuite sur la branche périodique  $P_{10}$  en  $Ra = Ra_{PB} \approx 2665$ , transmettant ainsi sa stabilité à la branche périodique. La direction de propagation de ces ondes est bien entendu arbitraire en raison de la réflexion  $R_1$ . La théorie prédit que lorsque TW est souscritique, la branche de bifurcation des ondes stationnaires (notées SW pour standing waves) est nécessairement instable à faible amplitude vis à vis de perturbations en ondes progressives [7]. C'est en tout cas ce que confirment nos calculs.

La figure 4.10.a montre l'évolution temporelle à Ra = 2300 (première ligne verticale sur la figure 4.9) dans un domaine périodique de taille  $\Gamma = 10\lambda_c$  d'une solution initialisée par une perturbation symétrique spatialement localisée une fois passé un régime transitoire. A cette valeur de Ra, il faut noter qu'aucune convection stationnaire n'existe et la perturbation évolue vers une paire d'ondes progressives localisées dont la propagation se fait en des sens opposés. Ces ondes collisionnent au bord du domaine (spatialement périodique), et forment une onde stationnaire qui



FIGURE 4.10 – (a) Diagramme spatio-temporel de la vitesse verticale dans le plan médian w(x, z = 1/2, t) à Ra = 2300 tracé pour t entre t = 55 (en bas) et t = 80(en haut). La condition initiale est la solution triviale à laquelle on a ajouté une perturbation spatialement localisée et symétrique. La solution évolue vers une paire d'ondes progressives se déplaçant en des sens opposés. En raison de la périodicité spatiale du domaine, ces ondes collisionnent au "bord" du domaine et laissent place à une onde stationnaire, qui, à son tour, reforme des ondes progressives de sens de propagation opposé. La simulation suggère que ce comportement est une orbite stable. (b) Même type de diagramme obtenu à Ra = 2690 entre  $800 \le t \le 830$ . La condition initiale est le convecton impair noté e sur la figure 4.5. Le convecton produit rapidement des ondes progressives de sens opposés qui collisionnent au centre du domaine. Ces ondes sont en opposition de phase et la position de leur point de rencontre oscille dans le temps.

perdure pendant quelques unités de temps avant de reformer des ondes progressives. Celles-ci vont à leur tout collisionner au centre du domaine, puis reformer une onde stationnaire et ainsi boucler un processus que la simulation numérique directe suggère périodique en temps. Des solutions similaires apparaissent notamment lors de l'interaction entre deux ondes se propageant dans des directions opposées [13].

La figure 4.10.b montre une portion  $(800 \le t \le 830)$  d'une simulation numérique directe effectuée proche du snaking, à Ra = 2690 (troisième ligne verticale sur la figure 4.9), initialisée par un convecton impair (la solution utilisée est celle portant le label *e* sur la figure 4.5). La solution prend la forme d'ondes progressives se propageant en des sens opposés et collisionnant vers x = 0. Contrairement à la simulation sur la figure 4.10.a, les ondes progressives sont ici en opposition de phase et créent une oscillation du point de rencontre. La structure obtenue est robuste et se déplace très lentement vers la droite (à t = 800, ce déplacement est à peine perceptible). Le comportement obtenu n'est pas périodique mais une analyse de Fourier sur un échantillon de plus grande taille permet de voir apparaître les fréquences associées au déplacement des ondes progressives ( $\omega \approx 0.49$ ) et à l'alternance entre les ondes de droite et de gauche ( $\omega \approx 0.245$ ). Ce type de solution a aussi été observé pour des conditions initiales paires et persiste au delà de t = 2000, ce qui suggère sa stabilité temporelle.

Si l'on décroît Ra, des comportements plus complexes peuvent être observés. La figure 4.11 montre le résultat d'une simulation effectuée à Ra = 2550 (deuxième ligne verticale sur la figure 4.9). Le diagramme de gauche révèle que la condition initiale se développe rapidement en une source chaotique oscillante en x = 0 générant des ondes progressives se déplaçant vers la droite et la gauche accompagnée d'un puits en  $x = \pm \Gamma/2$ . Cette solution conserve la réflexion spatiale, contrairement à celle de la figure 4.10.b. Le diagramme du centre montre que cette solution a ensuite évolué en échangeant la position de la source et du puits tout en préservant ses symétries. Puis, peu de temps après cette transition, une deuxième transition se produit, brisant la réflexion spatiale. La solution forme ainsi un paquet d'ondes localisé se déplaçant vers la droite et constitué d'ondes progressives de même direction (diagramme de droite).

D'autres simulations numériques directes initialisées] par des solutions localisées (ou une pondération entre ces solutions et la solution conductive) ont été menées dans la région du snaking et à des Ra supérieurs. Elles ont toutes conduit à la formation d'une rangée spatialement périodique de rouleaux de convection stationnaires associés à la partie stable de la branche  $P_{10}$ .

## 4.3 Publication

On a rapporté dans ce chapitre les principales solutions spatialement localisées obtenues dans la convection de double diffusion d'une couche fluide horizontale. L'article qui suit (C. Beaume C., A. Bergeon A. E. Knobloch : "Homoclinic snaking of localized states in doubly diffusive convection", *Phys. Fluids*, **23**, 094102, 2011) complète cette présentation. On peut notamment y trouver une discussion plus approfondie des simulations numériques directes des régimes instationnaires.



FIGURE 4.11 – Diagramme spatio-temporel de la vitesse verticale dans le plan médian w(x, z = 1/2, t) pour Ra = 2550. Le temps est croissant vers le haut. Les trois figures représentent des tranches différentes : avec de gauche à droite  $5 \le t \le 35$ ,  $45 \le t \le 75$  et  $85 \le t \le 115$ . La condition initiale est la solution conductive à laquelle on a ajouté une perturbation de la forme de la solution localisée 5 de la figure 4.4. La solution approche tout d'abord une orbite symétrique instable (figure de gauche) possédant une source stationnaire d'ondes progressives en x = 0 et un puits en  $x = \pm \Gamma/2$ . La source se transforme ensuite en puits et le puits en source (figure du milieu). Enfin, la symétrie se brise créant un paquet d'ondes chaotiques constitué d'ondes progressives à vitesse horizontale positive et se déplaçant vers la droite (figure de droite).

## Homoclinic snaking of localized states in doubly diffusive convection

Cédric Beaume,<sup>1,2,a)</sup> Alain Bergeon,<sup>1,2,b)</sup> and Edgar Knobloch<sup>3,c)</sup>

<sup>1</sup>Université de Toulouse, INPT, UPS, IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse),

Allée Camille Soula, F-31400 Toulouse, France

<sup>2</sup>CNRS, IMFT, F-31400 Toulouse, France

<sup>3</sup>Department of Physics, University of California, Berkeley, California 94720, USA

(Received 27 April 2011; accepted 14 July 2011; published online 6 September 2011)

Numerical continuation is used to investigate stationary spatially localized states in two-dimensional thermosolutal convection in a plane horizontal layer with no-slip boundary conditions at top and bottom. Convectons in the form of 1-pulse and 2-pulse states of both odd and even parity exhibit homoclinic snaking in a common Rayleigh number regime. In contrast to similar states in binary fluid convection, odd parity convectons do not pump concentration horizontally. Stable but time-dependent localized structures are present for Rayleigh numbers below the snaking region for stationary convectons. The computations are carried out for (inverse) Lewis number  $\tau = 1/15$  and Prandtl numbers Pr = 1 and  $Pr \gg 1$ . © 2011 American Institute of Physics. [doi:10.1063/1.3626405]

#### I. INTRODUCTION

The term doubly diffusive convection refers to convective motions in which density variations are caused by two competing components with different rates of diffusion such as temperature and solute concentration. In oceanography, when warm salty water overlies cold and fresh water, the convective instability is responsible for the presence of salt fingers.<sup>1,2</sup> In contrast, when cold fresh water overlies warm salty water, the instability manifests itself as an oscillatory instability that sets in once the imposed temperature difference exceeds a critical threshold. Similar phenomena are found during crystal growth and solidification<sup>3</sup> or in geophysics, where it plays an important role in magma chamber dynamics as well as in the layer above the core-mantle boundary.<sup>4</sup> Many instabilities arising in astrophysics, such as the Goldreich-Schubert-Fricke instability, are also doubly diffusive in nature.<sup>5</sup> Doubly diffusive convection has been extensively studied in the past and the literature covers a wide range of configurations. These include both horizontal layers in which the imposed temperature and/or concentration gradients are parallel to the buoyancy force and vertical configurations in which the gradients are perpendicular to the buoyancy force. Natural convection in a vertically stratified layer driven by a horizontal temperature gradient also exhibits doubly diffusive behavior.

The present paper focuses on doubly diffusive convection in a horizontal layer of bottom-heavy fluid that is heated from below. This configuration is the classic configuration in which convection sets in via overstability<sup>6</sup> and the resulting oscillations may coexist with strongly subcritical but steady convection.<sup>7</sup> Recent work of Batiste *et al.*<sup>8</sup> and Bergeon and Knobloch<sup>9</sup> showed that steady subcritical convection favors the presence of spatially localized convective structures

1070-6631/2011/23(9)/094102/13/\$30.00

23, 094102-1

ent in a well-defined parameter interval called the snaking or pinning region. The snaking region contains two or four branches of time-independent localized states that grow in length by nucleating additional cells on either side when the convectons are numerically followed. The new cells are nucleated at the left edge of the snaking region and reach full strength by the time the right edge is reached, where the convecton branch turns back towards smaller Rayleigh numbers and the process repeats. These back and forth oscillations of the convecton branches are referred to as homoclinic snaking.<sup>10</sup> The resulting structures may be thought of as bound states of a pair of fronts each of which is pinned to the periodic structure in between. These fronts connect the periodic state to the spatially homogeneous conduction state and represent heteroclinic orbits between a fixed point and a periodic orbit in a spatial-dynamics interpretation of these structures.<sup>11</sup> Both binary mixture convection in a horizontal layer heated from below<sup>8,12</sup> and natural doubly diffusive convection driven by competing horizontal gradients<sup>9</sup> exhibit such localized structures, and the resulting structures may be stable even when the fronts connect the state to an unstable background state, provided the instability is only convective.<sup>8</sup>

called convectons and revealed that such structures are pres-

In the present work, we study standard doubly diffusive convection in two dimensions from this point of view. We are indeed able to find time-independent spatially localized structures of odd and even parity in this system and show that both one-pulse and two-pulse localized states are organized in the same type of snaking structure as in binary fluid convection or natural doubly diffusive convection. However, we find two significant differences. In contrast to binary fluid convection in which the vertical flux of the concentration necessarily vanishes along the horizontal boundaries,<sup>8,12</sup> in the doubly diffusive system it is the concentration that is maintained at the boundaries, and it is this fact that is responsible for decreasing the effects of horizontal concentration pumping that are responsible for marked differences between odd and even parity convectons in binary fluid convection.

<sup>&</sup>lt;sup>a)</sup>Electronic mail: cedric.beaume@imft.fr.

<sup>&</sup>lt;sup>b)</sup>Electronic mail: alain.bergeon@imft.fr.

<sup>&</sup>lt;sup>c)</sup>Electronic mail: knobloch@berkeley.edu.

In addition, we find that for the parameter values we use the snaking region lies inside the region of absolute instability of the conduction state so that all time-independent convectons are unstable. We use direct numerical simulations to identify a variety of spatially localized but time-dependent states in regions of both convective and absolute instability and speculate about their relation to the unstable convectors present at larger Rayleigh numbers. Some of these states resemble structures found in earlier simulations<sup>13</sup> and in experiments.<sup>14</sup>

This paper is organized as follows. In Sec. II, we summarize the basic equations and their properties. In Sec. III, we present our results on one-pulse and two-pulse convectons. Section IV is devoted to time-dependent states. Brief conclusions follow in Sec. V.

#### **II. FORMULATION**

We consider a miscible fluid mixture, such as salt dissolved in water, in a horizontal layer  $0 \le z \le h$  confined between a pair of no-slip horizontal boundaries, with the boundary at z=0 maintained at a constant temperature  $T_r^* + \Delta T$  and concentration  $C_r^* + \Delta C$ , while the boundary at z=h is maintained at  $T_r^*$  and  $C_r^*$ , and focus on the case  $\Delta T > 0$ ,  $\Delta C > 0$ . Here, *C* is the concentration of the heavier molecular weight component. Periodic boundary conditions with period  $L \gg h$  in the horizontal are imposed. The governing equations are nondimensionalized using *h* as the unit of length and the thermal diffusion time in the vertical,  $h^2/\kappa$ , as the unit of time;  $\Delta T$  and  $\Delta C$  are used to nondimensionalize the temperature and concentration. The resulting dimensionless equations take the form

$$Pr^{-1}(\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + (Ra \ T - Ra_S \ C)\mathbf{e}_{\mathbf{z}},$$
(1)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{2}$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla^2 T, \tag{3}$$

$$\partial_t C + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = \tau \nabla^2 C, \tag{4}$$

where  $\mathbf{u} \equiv (u, w)$  is the two-dimensional velocity field in (x, z) coordinates, p is the pressure, and T and C refer to the temperature and concentration departures from their reference values. In writing these equations, we have ignored cross-diffusion (i.e., the Soret and Dufour effects) and used the Boussinesq approximation with the fluid density  $\rho$  given by

$$\rho(T^*, C^*) = \rho_0 + \rho_T(T^* - T^*_r) + \rho_C(C^* - C^*_r),$$

where  $T^*$  and  $C^*$  are, respectively, the dimensional temperature and concentration, and  $\rho_T < 0$  and  $\rho_C > 0$  denote the thermal and solutal "expansion" coefficients at the reference temperature  $T_r^*$  and concentration  $C_r^*$ . The Prandtl number Pr, the (inverse) Lewis number  $\tau$ , and the thermal and solutal Rayleigh numbers Ra > 0 and  $Ra_S > 0$  are defined by

$$\begin{aligned} Pr &= \frac{\nu}{\kappa}, \qquad \tau = \frac{D}{\kappa}, \qquad Ra = \frac{g|\rho_T|\Delta Th^3}{\rho_0 \kappa \nu}, \\ Ra_S &= \frac{g\rho_C \Delta Ch^3}{\rho_0 \kappa \nu}, \end{aligned}$$

where  $\nu$  is the kinematic viscosity,  $\kappa$  is the thermal diffusivity, *D* is the solutal diffusivity, and *g* is the gravitational acceleration. These equations are to be solved subject to the boundary conditions

a

t 
$$z = 0$$
:  $u = w = T - 1 = C - 1 = 0$ , (5)

at 
$$z = 1$$
:  $u = w = T = C = 0$ , (6)

together with periodic boundary conditions with period  $\Gamma$  in x;  $\Gamma \equiv L/h$  is the aspect ratio of the computational domain. The above equations constitute perhaps the simplest realization of doubly diffusive convection.

The equations possess a spatially homogeneous solution

$$u = 0,$$
  $w = 0,$   $T = 1 - z,$   $C = 1 - z,$ 

corresponding to the conduction state. In the following, we write  $T = 1 - z + \Theta$ ,  $C = 1 - z + \Sigma$  to describe the effects of convection and examine the properties of the equations for *u*, *w*,  $\Theta$ , and  $\Sigma$ . These equations are equivariant under translations in *x* as well as under two distinct reflections

$$\begin{split} R_1 &: (x,z) \to (-x,z), \quad (u,w,\Theta,\Sigma) \to (-u,w,\Theta,\Sigma), \\ R_2 &: (x,z) \to (x,1-z), \quad (u,w,\Theta,\Sigma) \to (u,-w,-\Theta,-\Sigma), \end{split}$$

where x = 0 is an arbitrarily chosen origin, hereafter the center of the domain. It follows that the equations possess the symmetry  $O(2) \times Z_2$ , where O(2) is the symmetry group of a circle under rotations (translations in  $x \mod \Gamma$ ) together with the reflection  $R_1$ , while  $Z_2$  is the symmetry group  $\{1, R_2\}$ corresponding to symmetry under midplane reflections. The symmetry  $R_1 \in O(2)$  implies that the system is spatially *reversible*.

The presence of the symmetry  $O(2) \times Z_2$  has a number of implications. It allows steady state bifurcations from the conduction state as Ra increases and forces these bifurcations to be pitchforks of revolution producing spatially periodic states. The symmetry also implies that any Hopf bifurcation from the conduction state leads simultaneously to branches of spatially periodic standing (SW) and traveling (TW) waves, at most one of which can be stable.<sup>15</sup> Linear theory reveals that Hopf bifurcations are present whenever  $\tau < 1$  and  $Ra_S$  is sufficiently large  $(Ra_S > Ra_S^c)$ . The resulting SW and TW with stress-free boundaries have been studied extensively by a number of authors.<sup>6,16–18</sup> In large domains, these waves are in turn subject to modulational instability leading to complex spatiotemporal dynamics.<sup>19</sup>

In the present work, we are interested in dynamics in large domains with no-slip boundary conditions, focusing on spatially localized structures. These are most easily studied on the real line  $-\infty < x < \infty$ . On this domain, the conduction state loses stability with respect to steady state perturbations at  $Ra = Ra_c$ . This bifurcation generates steady but subcritical periodic solutions with wavenumber  $k_c$  obtained by minimizing the onset Rayleigh number with respect to the wavenumber k of the perturbation. However, in addition to these much studied states, general theory for spatially reversible systems<sup>11</sup> reveals the presence of a pair of (distinct) steady spatially *localized* states that bifurcate at  $Ra_c$ 





FIG. 1. The spatial eigenvalue  $k \equiv k_R + ik_I$  of the steady state linear stability problem in the subcritical region near  $Ra_c \approx 9207.76$ . The real part of the wavenumber,  $k_R$ , varies linearly near the bifurcation point while its imaginary part varies as  $\sqrt{Ra_c - Ra}$ .

#### **III. RESULTS: TIME-INDEPENDENT STATES**

simultaneously with the periodic states. These states are either  $R_1$ -symmetric, viz.  $(u(-x, z), w(-x, z), \Theta(-x, z),$  $\Sigma(-x, z)) = (-u(x, z), w(x, z), \Theta(x, z), \Sigma(x, z))$  or  $R_1 \circ R_2$ symmetric, viz.  $(u(-x,1-z), w(-x,1-z), \Theta(-x, 1-z),$  $\Sigma(-x,1-z)) = -(u(x, z), w(x, z), \Theta(x, z), \Sigma(x, z))$ . In the following, we refer to these two solution types as *even* and *odd*, respectively. Even and odd representatives of the periodic state exist also and can be obtained by suitable translation. It should be mentioned that each of these states can also be reflected in the midplane of the layer generating a new solution of the equations. This is a consequence of the fact that  $R_2$  acts by -1, i.e., that each solution breaks the midplane reflection symmetry.

On a domain of finite spatial period  $\Gamma$ , the localized states no longer bifurcate from the conduction state. Instead, these states now bifurcate from the primary branch of periodic states in a *secondary* pitchfork bifurcation and do so at *finite* amplitude; this amplitude is small when  $\Gamma \gg 1$  and decreases monotonically as  $\Gamma \rightarrow \infty$ .

In order to compute steady solutions of the above problem as a function of the Rayleigh number Ra, we use a numerical continuation method based on a Newton solver for the time-independent version of Eqs. (1)-(4) and boundary conditions (5)-(6). The implementation of the method follows that of Tuckerman<sup>20</sup> and Mamun and Tuckerman<sup>21</sup> and uses the first order time-stepping scheme proposed by Karniadakis et al.<sup>22</sup> Details of the method in a three-dimensional context are described elsewhere.<sup>23</sup> To discretize the equations in space, we use a spectral element method in which the domain  $[0, \Gamma] \times [0, 1]$  is decomposed into N<sub>e</sub> macro-elements of size  $[(i - 1)\Gamma/N_e, i\Gamma/N_e] \times [0, 1]$ , where  $i \in \{1, ..., N_e\}$ . In each element, the fields are approximated by a high order interpolant through the Gauss-Lobatto-Legendre points.<sup>24</sup> Each time step requires the inversion of four Helmholtz problems and a Poisson problem for the pressure. The resulting linear systems are solved using a Schur decomposition method by separating the matrix elements acting on the nodes inside each element from those acting on nodes located along the interface between two adjacent elements.<sup>25–28</sup> Convergence tests indicate that for our parameters calculations with  $N_e = 20$  elements, each with 17 points in the horizontal direction and 25 in the vertical direction, are well resolved. A second-order time-stepping scheme with a time step of  $10^{-5}$  is used for all temporal simulations.

Below, we present the results for Pr = 1,  $\tau = 1/15$ , and  $Ra_S = 500$ , and compare the results with the corresponding results for  $Pr = \infty$ . This choice of parameters brackets typical parameter values for experiments on double diffusion and provides a good guide to the behavior of systems destabilized by an adverse thermal gradient for which  $\tau \approx 10^{-2}$ . A complementary approach, with  $N \equiv Ra_S/Ra$  fixed, is commonly used in studies of natural doubly diffusive systems.<sup>29</sup> It should be emphasized that for yet smaller Lewis numbers experiments reveal the formation of solutal boundary layers that may become unsteady at larger Rayleigh numbers. On the other hand, Lewis numbers close to unity are relevant to double diffusion in isothermal salt-sugar solution.

In Figure 1, we show the result of solving the steady state linear stability problem for the conduction solution. For this purpose, the time-independent equations are linearized about this state and solutions sought that are proportional to exp *ikx*, where  $k \equiv k_R + ik_I$  is *complex*. The figure shows that at  $Ra = Ra_c \approx 9207.76$ , the wavenumber k is purely real ( $k = k_c \approx 3.11632$ ) as in standard linear analysis, but that for



FIG. 2. Bifurcation diagram showing the kinetic energy *E* as a function of the thermal Rayleigh number *Ra* for Pr = 1 (solid line) and  $Pr = \infty$  (dashed line). Only branches of interest are shown: conduction state E = 0, periodic states  $P_{10}$  and  $P_{11}$ , and spatially localized states  $L_{10}^{1\pm}$  of even and odd parity, respectively. Inset shows a zoom of the upper part of the snaking region. Further details are shown in Figure 3.



FIG. 3. (a) The vicinity of the primary bifurcation to  $P_{10}$  in Figure 2 showing the secondary bifurcation from  $P_{10}$  to single-pulse localized states  $L_{10}^{1\pm}$ . The  $L_{10}^{1\pm}$  branches are not distinguishable on the scale of the figure. The figure also shows two families of two-pulse states  $L_{10}^{2\pm}$  and  $L_{11}^{1\pm}$  emerging from  $P_{10}$  and  $P_{11}$ , also in secondary bifurcations. (b) The termination of  $L_{10}^{1\pm}$  on the periodic states  $P_{10}$  and  $P_{11}$  once the domain  $\Gamma$  is filled with convection cells.

 $Ra < Ra_c$ , it acquires an imaginary part that increases as  $\pm \sqrt{Ra_c - Ra}$ , resulting in exponential growth ( $k_I < 0$ ) and decay  $(k_I > 0)$  of the eigenfunction as  $x \to \infty$ . The presence of both growing and decaying eigenfunctions is a consequence of the spatial reversibility of the system, and both are required in order to construct time-independent exponentially localized solutions that asymptote to the conduction state as  $x \to \pm \infty$ . To do so, nonlinear terms must be retained. The resulting analysis reveals that, up to symmetry, there are two distinct families of such solutions, characterized by their parity: even and odd.<sup>11</sup> The bifurcation at  $Ra_c$ corresponds to the classical exchange of stabilities in the time domain; the classical analysis shows that this exchange of stabilities point is preceded by a Hopf bifurcation at  $Ra \equiv$  $Ra_H \approx 2239.67$ . As already mentioned, this bifurcation generates branches of both SW and TW. Of these only the latter are computed (see Sec. IV), since the SW are expected to be always unstable.

In the following, we discuss the results of numerical continuation of both the periodic steady states and the spatially localized steady states identified in the above analysis. The calculations are carried out in a periodic domain of aspect ratio  $\Gamma = 10\lambda_c$ , where  $\lambda_c = 2\pi/k_c \approx 2.0162$  is the wavelength corresponding to the critical wavenumber  $k_c$  in an infinite horizontal layer. This spatial period, therefore, accommodates ten wavelengths of the primary unstable

steady mode. Because  $\Gamma$  is finite the localized states no longer bifurcate directly from the conduction state but instead bifurcate from the primary branch  $P_{10}$  of periodic states in a secondary bifurcation, albeit at small amplitude. Here and in the following, we use the notation  $P_n$  to refer to a periodic state with *n* wavelengths within  $\Gamma$  and employ the notation of Lo Jacono *et al.*<sup>12</sup> to label the localized structures we find. Thus, the label  $L_n^{m\pm}$  refers to a branch of localized solutions bifurcating from the *m*th secondary bifurcation on the periodic state  $P_n$ , with the superscript + (resp. –) indicating solutions invariant with respect to  $R_1 \circ R_2$ ).

Figure 2 shows the branches  $P_{10}$  and  $P_{11}$  in terms of the kinetic energy  $E \equiv (1/2) \int_0^{\Gamma} \int_0^1 |\mathbf{u}|^2 dx dz$ , as a function of the thermal Rayleigh number Ra. Because of the small value of  $\tau$  both branches bifurcate strongly subcritically. The figure also shows a pair of intertwined branches of localized states labeled  $L_{10}^{1+}$  and  $L_{10}^{1-}$  with solutions that are invariant with respect to  $R_1$  (even parity states) and the symmetry  $R_1 \circ R_2$  (odd parity states), respectively. As shown in Figure 3, these states bifurcate together from  $P_{10}$ , but terminate on different periodic states at large amplitude:  $L_{10}^{1+}$  terminates on  $P_{10}$ , while  $L_{10}^{1-}$  terminates on  $P_{11}$ . Thus,  $L_{10}^{1\pm}$  terminate on different branches at large amplitude although they bifurcate together at small amplitude. This behavior is a consequence of wavenumber selection across the pinning region and occurs in natural doubly diffusive convection,<sup>30</sup> among other



FIG. 4. (a) Detail of Figure 2 for Pr = 1 with the saddle-node bifurcations on  $L_{10}^{1+}(L_{10}^{1-})$  labeled using numbers (letters). (b) Vertically integrated concentration at the saddle-nodes of the  $L_{10}^{1+}$  branch numbered as in (a). Local maxima (minima) correspond to upflow (downflow). The vertical line represents the axis of symmetry.



FIG. 5. Series of snapshots representing isovalues of the streamfunction at the saddle-nodes of the  $L_{10}^{1+}$  branch numbered as in Figure 4(a). The structure grows by symmetrically nucleating new cells, one on each side, at  $Ra \approx Ra_{left}$ , until the domain is filled with 20 rolls. Snapshot 19 is taken near the termination point of the branch (Figure 3(b)) on  $P_{10}$ , where the kinetic energy is lower.

systems. The details of the mechanism whereby the termination point of the branches of localized states switches is elucidated elsewhere.<sup>30</sup> However, in all cases, the termination points coincide with the location of Eckhaus instability on the  $P_n$  branches.<sup>30</sup>

Figure 2 shows that the branches  $L_{10}^{1\pm}$  of localized states oscillate back and forth across the interval  $Ra_{left} \approx$  $2700 < Ra < Ra_{right} \approx 2760$ . In the following, we refer to this interval as the snaking or pinning region as in other problems, where spatially localized states are created by the

same mechanism. In particular, we conjecture that  $Ra = Ra_{left}$  corresponds to a tangency between the unstable manifold of the conduction state in space and the corresponding center-stable manifold of the periodic states, viewed as a periodic orbit in an infinite-dimensional phase space.<sup>31,32</sup> Likewise,  $Ra = Ra_{right}$  corresponds to the location of a tangency between the center-unstable manifold of the periodic states and the stable manifold of the conduction state. General considerations<sup>11,33</sup> suggest that this region also contains single-pulse states with no symmetry, found on secondary branches linking  $L_{10}^{1\pm}$  and constituting the "snakes-and-ladders" structure of the single-pulse states within this region. The O(2) symmetry implies that these asymmetric states drift in the x-direction and so correspond to traveling pulses instead of steady states; we have not computed such states.

Figures 4(b) and 5 take a closer look at the even parity states  $L_{10}^{1+}$ . The figures show, respectively, the vertically integrated concentration  $\int_0^1 \Sigma(x, z) dz$ , and the streamfunction (a pseudoscalar) as functions of x at the locations indicated in Figure 4(a). The figures reveal a rising plume at the center x = 0 with descending plumes on either side, embedded in a background conduction state. Each solution is reflectionsymmetric in x=0 and the width of the localized state increases in a well-defined manner as one follows  $L_{10}^{1+}$  from small amplitude to large amplitude. In particular, at the leftmost saddle-nodes, labeled 1,3,..., the cells at either end of the localized structure are weak, and these strengthen as one traverses  $L_{10}^{1+}$  to the next saddle-node at the right, 2,4,..., etc., where they reach maximum amplitude. Thus, the localized structure grows along  $L_{10}^{1+}$  by repeatedly nucleating new cells symmetrically at both ends until the domain is almost filled. At this point, the snaking terminates and  $L_{10}^{1+}$  exits the snaking region in the direction of decreasing Ra and terminates on  $P_{10}$  (Figure 3(b)). Snapshot 19 shows that the branch terminates on an even  $P_{10}$  state. Note that once created each cell remains in place. Figures 6(b) and 7 show the



FIG. 6. (a) Detail of Figure 2 for Pr = 1 with the saddle-node bifurcations on  $L_{10}^{1+}(L_{10}^{1-})$  labeled using numbers (letters). (b) Vertically integrated concentration at the saddle-nodes of the  $L_{10}^{1-}$  branch labeled as in (a). Local maxima (minima) correspond to upflow (downflow). The vertical line represents the axis of symmetry. The convectons are antisymmetric with respect to this line.



FIG. 7. Series of snapshots representing isovalues of the streamfunction at the saddle-nodes of the  $L_{10}^{1-}$  branch labeled as in Figure 6(a). This time the cells nucleated on each side of the structure at  $Ra \approx Ra_{left}$  rotate in the same direction, either clockwise (e.g., panels *a*, *e*) or counterclockwise (e.g., panels *c*, *g*) until the domain is filled with 22 rolls. Snapshot *u* is taken near the termination point of the branch (Figure 3(b)) on  $P_{11}$ , where the kinetic energy is lower.

corresponding results for  $L_{10}^{1-}$ . This time each solution has point symmetry  $R_1 \circ R_2$ , with a rising plume to the right of x=0 and a descending plume to the left. Once again the outer cells are weak at the left saddle-nodes labeled  $a, c, \ldots$ and strengthen as one follows  $L_{10}^{1-}$  to the next saddle-node at  $Ra_{right}$ , labeled b, d,.... Thus, the odd parity localized states again grow by nucleating cells at either end, but this time, the new cells both rotate in the same direction, for example clockwise at location b (a three-cell state) and counter-clockwise at location d (a five-cell state). This time, the domain fills with 11 pairs of cells since the 21 cell state labeled t needs an additional cell in order to terminate on a branch of periodic state, here  $P_{11}$ . As shown in states u, termination occurs on an odd parity  $P_{11}$  state. Note that in contrast to other problems of this kind, the variation in cell size or wavelength across the snaking region is almost invisible, although for both  $L_{10}^{1+}$  and  $L_{10}^{1-}$ , the cells are slightly larger at  $Ra = Ra_{right}$  than at  $Ra = Ra_{left}$ . This type of behavior is observed in both natural doubly diffusive convection<sup>29</sup> and in binary fluid convection in a horizontal layer.<sup>8,12</sup>

The above results resemble corresponding results obtained for binary fluid convection in a horizontal layer.<sup>8,12</sup> This system, while closely related to that studied here,<sup>34</sup> differs from it in a subtle but important way. In binary fluid convection, the stabilizing concentration distribution is the result of a separation between the heavier and lighter components of the mixture in an applied temperature gradient. This effect, called the Soret effect, is important in liquids and leads to a larger concentration of the heavier component near

the cold boundary (positive Soret effect) or the hot boundary (negative Soret effect). In the latter case, much studied in laboratory experiments,<sup>35,36</sup> the destabilizing temperature gradient generates a competing stabilizing concentration gradient, much as in the present problem, where the stabilizing concentration gradient  $(Ra_S > 0)$  is imposed externally, through the concentration boundary conditions. However, in binary fluids, the corresponding boundary condition is that the mass flux vanishes (impermeable boundaries), and this boundary condition imposes a condition on the concentration gradient at the boundary instead of the concentration itself. As a result a rising plume carrying solute from the lower boundary is forced to carry it horizontally when deflected by the upper boundary and conversely at the lower boundary. In contrast, in the doubly diffusive problem studied here, the rising plume collides with the boundary, decreasing the concentration length scale to such a degree that its solute content can be transported diffusively into the constant concentration reservoir used to impose the boundary condition on the concentration at the upper boundary. Thus, near the boundaries, the dominant solute transport is vertical and diffusive, while in binary fluid convection it is horizontal and advective.<sup>8,12</sup> This fact is responsible for the absence in the present problem of horizontal pumping of concentration by odd parity convectons and explains in turn why odd and even parity convectons are found in the same snaking region. In contrast, in binary fluid convection, odd convectors at  $Ra_{right}$  are bounded by fully developed cells rotating in the same sense and pumping concentration from left to right (clockwise rolls) or right to left (counterclockwise rolls). This pumping is in turn responsible for shifting the right boundary of the snaking region for odd parity states towards smaller Ra. No such shift occurs at  $Ra_{left}$ , where the bounding cells are weak and no effective pumping takes place. As a result in binary fluid convection, the snaking region for odd parity convectons is narrower than the corresponding region for even convectons.<sup>8,12</sup> In this sense the behavior of the doubly diffusive problem is closer to that observed in classical snaking scenarios such as that observed in the Swift-Hohenberg equation.<sup>11,37</sup>

To confirm this picture, we have computed the horizontal and vertical gradients of the concentration fluctuation  $\Sigma$ . The result, shown in Figure 8 for state *e* in Figures 6 and 7, confirms that the horizontal gradients at the location of the bounding fronts are very weak compared to the vertical gradients and that any solute pumped horizontally from the convecton leaks out almost immediately via the top and bottom



FIG. 8. The solution *e* on the  $L_{10}^{1-}$  branch. From bottom to top: isovalues of the streamfunction, the concentration *C*, and the horizontal and vertical gradients of the concentration perturbation  $\Sigma$ . The vertical gradients at the location of the fronts greatly exceed the horizontal gradients and any concentration pumped out of the structure immediately leaks into the constant concentration reservoirs above and below.



FIG. 9. (a) Snaking of the two-pulse states  $L_{10}^{2\pm}$  (bold) compared with the single-pulse states  $L_{10}^{1\pm}$  (dashed). Both sets of branches bifurcate from  $P_{10}$ . (b) Snaking of the two-pulse states  $L_{11}^{1\pm}$  (bold) emerging from  $P_{11}$ , also compared with the single-pulse states  $L_{10}^{1\pm}$  (dashed).

boundaries. As a result, no large scale solute gradient is present outside the structure. Instead, the concentration is transported preferentially in the vertical direction, through the boundaries, and this is so both within the convecton and at the fronts. Thus, most of the solute brought up from the lower boundary is deposited into the lower concentration reservoir above the upper boundary and vice versa.

As in other problems of this type, the snaking region also contains numerous bound states of convectons. There are two classes of such states: states in which the convectons are equidistant when periodically replicated in the horizontal direction and states in which the convectons are clumped in groups. The former fall on solution branches that also bifurcate from periodic states and snake within the same snaking region. The latter fall on isolas as discussed further in Ref. 38 and so are harder to locate numerically. In the present work, we compute two-pulse states of the former type only.

Figure 3(a) shows two branches of two-pulse states at small amplitude. Of these, the states labeled  $L_{10}^{2\pm}$  consist of pairs of identical convectons a distance  $\Gamma/2$  apart. The convectons in  $L_{10}^{2+}$  have even parity, while the convectons comprising  $L_{10}^{2-}$  have odd parity, and are arranged in such a way that the resulting bound state is also even and odd. In other words, these states are nothing but a single convecton on the half domain, and it is, therefore, not surprising that  $L_{10}^{2\pm}$ branch together from  $P_{10}$  just like  $L_{10}^{1\pm}$ , with the  $L_{10}^{2\pm}$ branches bifurcating at a larger amplitude than the singlepulse states  $L_{10}^{1\pm}$ . Figure 9(a) shows that both branches snake within the same snaking region as  $L_{10}^{1\pm}$  and that the snaking terminates after half as many folds as that for  $L_{10}^{1\pm}$ . This is because the domain fills up twice as fast as for a single convecton. However, this time, the two  $L_{10}^{2\pm}$  branches terminate together on  $P_{10}$  in contrast to  $L_{10}^{1\pm}$ . Figure 10, top panels, shows snapshots of the corresponding solution profiles at successive saddle-nodes within the snaking region; these snapshots should be compared with the corresponding snapshots for the single-pulse states in Figures 5 and 7. Note that the width of the snaking region for  $L_{10}^{2-}$  is the same as that for  $L_{10}^{2+}$ , once again owing to the absence of horizontal pumping. Moreover, this region is identical to that for  $L_{10}^{1\pm}$  indicating a common origin for both sets of states.<sup>33</sup>

The snaking of the second set of spatially localized states,  $L_{11}^{1\pm}$  is shown in Figure 9(b). These branches are the product of the first secondary bifurcation on  $P_{11}$  (Figure 3(a)) and again snake within the same snaking region. Figure 10, bottom panels, shows snapshots of the corresponding solution profiles at successive saddle-nodes within the snaking region. The solution  $L_{11}^{1+}$  consists of a pair of equidistant even parity convectons, but this time with opposite sign, resulting in overall structure that is antisymmetric with respect to x = 0. The presence of this configuration is a consequence of the midplane reflection symmetry of the system. Likewise,  $L_{11}^{1-}$  consists of a pair of equidistant odd parity convectons of opposite sign, arranged back to back so that the resulting configuration is reflection-symmetric with respect to x = 0. Like the  $L_{10}^{2\pm}$  states, the  $L_{11}^{1\pm}$  also terminate together, this time on  $P_{11}$ .

To explore the effect of the Prandtl number, we have recomputed the above results for  $Pr = \infty$ . Figure 2 shows that the Prandtl number has only a very slight effect on the branches of localized states. In particular, the width of the snaking region is essentially independent of Pr. This is in accord with the expectation that the width of this region is controlled primarily by the subcriticality of the time-independent periodic states and, hence, by the parameters  $\tau$  and  $Ra_S$ . This is so in binary fluid convection,<sup>39</sup> where the width is a strong function of the separation ratio *S*, i.e., of the Soret coefficient of the mixture.

$L_{10}^{2+}$	$\circ \circ $	$\bigcirc \bigcirc $
		$\odot$
l		
ĺ		
$L_{10}^{2-}$		
	0000000	0000000
		$\mathbf{O}$
	$\odot$	$\odot$
l		
$L_{11}^{1+}$		
l	$\odot \odot \odot \odot$	000
ſ		
		0000000000000
$L_{11}^{1-}$		
l		

FIG. 10. Series of snapshots representing isovalues of the streamfunction at the saddle-nodes of (from top to bottom) the  $L_{10}^{2+}$ ,  $L_{10}^{2-}$ ,  $L_{11}^{1+}$ , and  $L_{11}^{1-}$  branches. The last snapshot on each branch is taken near its termination point. The states  $L_{10}^{2+}$  and  $L_{11}^{1-}$  are even with respect to x = 0, while  $L_{10}^{2-}$ ,  $L_{11}^{1+}$  are odd.

#### **IV. RESULTS: TIME-DEPENDENT STATES**

In this section, we examine the stability of the convectors computed in Sec. III and study the dynamics of Eqs. (1)–(6), all for Pr = 1,  $\tau = 1/15$ , and  $Ra_S = 500$ .

As already mentioned, the primary steady state bifurcation at  $Ra_c \approx 9207.76$  is preceded by a number of Hopf bifurcations of which the first takes place at  $Ra_H \approx 2239.67$ . Figure 11 shows the resulting TW branch computed using numerical continuation. The figure shows that the TW bifurcate subcritically but quickly turn around towards larger Raand thereafter increase monotonically in amplitude and terminate in a parity-breaking bifurcation on the  $P_{10}$  branch at  $Ra = Ra_{PB} \approx 2665$ . Near this point, the phase speed of the TW decreases as  $\sqrt{Ra_{PB} - Ra}$  as predicted by theory.<sup>15</sup> Theory also predicts that when the TW bifurcate subcritically, the small amplitude SW are necessarily unstable with respect to TW perturbations. Numerical simulations confirm this prediction: small amplitude spatially homogeneous SW can be found for  $Ra > Ra_H$  by imposing Neumann boundary conditions on small domains but are found to decay (on a long time scale) into left- or right-traveling waves once the boundary conditions are changed into periodic boundary conditions. The direction of propagation of the resulting TW is of course arbitrary, and in the simulations is determined by numerical perturbations.

Figure 12 shows the time evolution at Ra = 2300 in a periodic domain with  $\Gamma = 10\lambda_c$ , starting from a symmetric but spatially *localized* perturbation as initial condition, after transients have died out. Since this Ra value falls below the  $P_{10}$  saddle-node evolution towards steady convection is precluded. Instead, the solution evolves into a localized standing wave which subsequently breaks up into a pair of identical counter-propagating traveling waves, as expected from theory.<sup>15</sup> Owing to the spatial periodicity of the domain, these waves necessarily collide at  $x = \pm \Gamma/2$ , restoring the localized standing wave. The breakup then repeats restoring the localized SW at x = 0. In Figure 12, this process appears to be periodic and represents a periodic attractor of Eqs. (1)–(6). Similar states have been observed in other systems as well.<sup>40</sup>

The presence of the oscillatory instability destabilizes the localized structures computed in Sec. III However, their presence appears to be responsible for a particular type of complex oscillation observed in the numerical simulations. Figure 13 shows a portion ( $800 \le t \le 830$ ) of a long time series computed at Ra = 2690 with periodic boundary conditions, starting from an odd parity one-pulse steady solution at Ra = 2699.5292 (labeled *e* in Figures 6 and 7). The solution takes the form of counterpropagating waves colliding near x = 0. This time the left- and right-traveling waves are  $180^{\circ}$  out of phase, leading to slow zig-zag-like motion of the

3 350 2 300 c $\Gamma W$ 1 250 0 2200 2450 2700 200 ERa150 100 TW50 0 2100 2200 2300 2400 2500 2600 2700 2800 2900 Ra

FIG. 11. The TW branch in relation to the steady states computed in Figure 2. The TW are stable between the fold at  $Ra \approx 2230$  and the termination point at  $Ra_{PB} \approx 2665$ . The inset shows the phase speed *c* along the TW branch for right traveling waves (c > 0); at the Hopf bifurcation at  $Ra_H = 2239.67$ ,  $c = \omega_c/k_c \approx 2.75$ , while c = 0 when the TW connects to the periodic branch  $P_{10}$ .

Ra = 2300 in the time interval  $55 \le t \le 80$  with time increasing upward, starting from a symmetric spatially localized perturbation as initial condition. The perturbation decays into a pair of small amplitude counter-propagating traveling waves which slowly grow as they propagate. Owing to the periodicity of the domain these waves subsequently collide and reform the localized standing wave. The simulation suggests that this breakup/makeup process occurs periodically and represents a stable solution of Eqs. (1)–(6).

standing wave defect created by their collision. The resulting oscillation is nonperiodic but appears to be stable. Fourier analysis reveals the presence of frequencies associated with TW translation ( $\omega \approx 0.49$ ) and the switching between left and right TW ( $\omega \approx 0.245$ ). The same behavior is found if the computation is initialized with an even parity one-pulse state.

When *Ra* is decreased more complex dynamical behavior is found. Figure 14 shows a space-time plot of a solution obtained when *Ra* = 2550. The figure reveals a solution that is apparently chaotic. The left panel shows a chaotically oscillating (pulsating) source of left and right TW at x = 0that develops from a small amplitude spatially symmetric initial condition, together with a symmetric sink at  $x = \Gamma/2$ . Because of its symmetry, the latter differs from the sink in Figure 13. The middle panel shows details of the evolution at a later time and reveals that the time-dependent source has transformed into a pulsating but still symmetric sink are



FIG. 13. Space-time plot of the midplane vertical velocity w(x, z = 1/2, t) at Ra = 2690 in the time interval  $800 \le t \le 830$  with time increasing upward, starting from a time-independent odd parity localized state at Ra = 2699.5292, labeled *e* in Figures 6 and 7.

stable structures at this Rayleigh number, and on a longer timescale, the reflection symmetry of the solution is lost, and the solution evolves into a localized wave packet consisting of right-traveling waves that drifts slowly to the right (right panel). The space-time plot thus suggests the presence of a chaotic oscillation between a symmetric source and a symmetric sink that is stable if reflection symmetry is imposed on the solution (Figure 15) but unstable with respect to infinitesimal (i.e., numerically generated) symmetry-breaking perturbations when symmetry is not imposed.






FIG. 14. Space-time plot with time increasing upward of the midplane vertical velocity w(x, z=1/2, t) at Ra = 2550 in the time intervals  $5 \le t \le$ 35,  $45 \le t \le 75$ , and  $85 \le t \le 115$ , respectively, starting from a perturbation of the trivial state resembling the localized state labeled 5 in Figures 4 and 5. The solution first approaches an unstable symmetric orbit (left panel) with a source of left and right TW in the center x=0 and a sink at  $x=\Gamma/2$ . The source turns into a sink and vice versa with increasing time (middle panel), followed by a symmetry-breaking transition leading to a stable but chaotic wave packet (right panel) consisting of right-traveling waves that drifts slowly to the right.

In contrast, time evolution of amplitude-stable convectons within the snaking region always leads to instability. The instability originates in the wings of the convectons and takes the form of growing traveling wave disturbances. The spatial inhomogeneity in the wings selects the propagation direction of the disturbance, resulting in waves that propagate towards the structure, growing as they do so. Since no fully developed TW are present at the Rayleigh numbers corresponding to the pinning region, the TW slow down as their amplitude approaches the amplitude of steady convection, and the system gradually settles into spatially periodic steady convection. Figure 16(a) shows the evolution at Ra = 2732.0857 of an unstable convecton located between solutions 2 and 3 on the  $L_{10}^{1+}$  branch (see Figure 5), triggered by numerical perturbation only. Figure 16(b) shows the corresponding time series of the kinetic energy E during the same time period. Although the kinetic energy increases it does not do so monotonically. The behavior shown is insensitive to the parity and width of the initial state. Similar evolution is observed to the right of the snaking region, i.e., for  $Ra > Ra_{right}$ , as well. These results suggest that for the parameter values employed, the conduction state is *absolutely* unstable. This hypothesis is confirmed by the stability analysis in Figure 17 which demonstrates, following Batiste et al.,<sup>8</sup> that the absolute instability threshold occurs at  $Ra = Ra_{abs} \approx 2540.2$ . It follows that the conduction state is absolutely unstable with respect to traveling wave perturbations for Ra > 2540.2, a parameter range that includes the snaking region. Thus, all time-independent convectons located in the snaking region are expected to be unstable with respect to TW perturbations in their wings. As we have seen this does not mean that localized structures are absent, only that they cannot be time-independent. We remark that the convectors identified in binary mixture convection<sup>8</sup> are located below the onset of absolute instability and, hence, in a parameter regime, where the instability of the conduction state is only convective. In this regime, any TW disturbance in the wings propagates away faster than it can grow and is absorbed by the convectons.<sup>8</sup> Our study of the parameter dependence of  $Ra = Ra_{abs}$  reveals that  $Ra = Ra_{abs}$  decreases with decreasing  $\tau$  but increases with increasing  $Ra_S$ . Since the width of the snaking region increases with increasing  $Ra_S$ (i.e., with increasing subcriticality of periodic convection<sup>39</sup>), the possibility remains that for appropriate parameter values the snaking region may extend across  $Ra = Ra_{abs}$ , thereby dramatically changing the stability properties of the convectons in this system.

#### V. DISCUSSION

In this paper, we have identified various types of spatially localized structures in doubly diffusive convection. In particular, we have computed both one-pulse and two-pulse states and showed that these are organized in parameter



FIG. 15. Same as Figure 14 but with reflection symmetry imposed at x = 0.

space within a snaking or pinning region, precisely as occurs in other fluid systems such as binary fluid convection,<sup>8,12</sup> natural doubly diffusive convection,<sup>29</sup> and plane Couette flow.<sup>41</sup> In contrast to binary fluid convection where concentration pumping in the horizontal by odd parity convectons modifies the width of the snaking region relative to that for the even parity convectons, both convecton types occupy the same pinning region and, hence, behave more like model systems such as the 35 Swift-Hohenberg equation.<sup>37</sup> We have related this observation to the absence of horizontal concentration pumping in the problem studied, a consequence of the different concentration boundary conditions imposed along the horizontal boundaries. We have also shown that for the parameter values used these states are unstable and attributed this observation to the fact that the pinning region lies in a parameter regime in which the conduction state is absolutely unstable. We have not, however, been able to perform our calculations for Lewis numbers of order  $10^{-2}$ , a value that is more representative of systems driven by parallel gradients of temperature and concentration, for which the threshold for absolute instability shifts to higher Rayleigh numbers. We have, in addition, computed several time-dependent but localized states, for Rayleigh numbers below the pinning region. Closer to the onset of the convective instability at  $Ra_{H_i}$  these states are dominated by advection at the group velocity. However, for  $Ra > Ra_{abs}$ , the structures are dominated by the growth rate of the

instability and, hence, by nonlinear effects. The structures identified differ from the dispersive chaos<sup>19</sup> present close to  $Ra_H$  and represent spatially localized but chaotic traveling waves. Similar waves have been seen in direct numerical simulations in a closed large-aspect-ratio two-dimensional container at larger supercriticality<sup>42</sup> and resemble the traveling wave packets observed in experiments.<sup>43</sup> In periodic domains, these nonlinear wave packets drift in the direction of the phase velocity ( $s_0 > 0$ , as confirmed below) but much more slowly.<sup>44</sup> We mention that different types of localized waves, nonlinear compression waves traveling on a background of traveling waves, have also been identified in doubly diffusive convection.<sup>45</sup>

We have also found structures of source and sink type. Sources are localized structures that emit waves, while sinks arise at locations, where waves traveling in opposite directions collide. Such structures have been extensively studied in binary fluid convection.<sup>46</sup> To the extent that they are representative of the behavior of doubly diffusive convection beyond the onset of convective instability our results suggest that sinks are more robust (see, e.g., Figure 13) than sources (see, e.g., Figure 14). These conclusions agree qualitatively with predictions using a pair of (supercritical) coupled complex Ginzburg-Landau (hereafter CCGL) equations,<sup>47</sup> despite the fact that our traveling waves bifurcate weakly subcritically. We believe that this is because the TW branch turns around quickly towards larger Rayleigh numbers and,



Phys. Fluids 23, 094102 (2011)

FIG. 16. (a) Space-time plot of the midplane vertical velocity w(x, z = 1/2,t) at Ra = 2732.0857 starting from a state between solutions 2 and 3 on the  $L_{10}^{1+}$ convecton branch in Figure 5. (b) Evolution of the kinetic energy *E* with time over the same time period as in (a).

hence, comes to resemble the supercritical states considered in Ref. 47. The theory based on the CCGL equations reveals that as  $\epsilon \equiv (Ra - Ra_H)/Ra_H$  decreases steady sources lose stability and become time-dependent and potentially chaotic. A telling example illustrating the fragility of a source is provided in Fig. 23 of Ref. 46. In order to compare this prediction with our numerical simulations, we have evaluated the predicted critical value of  $\epsilon$  for this instability,<sup>47,48</sup>

$$\epsilon^* = \frac{s_0^2}{4(1+c_1^2)},$$

using the group speed  $s_0$  and the dispersion coefficient  $c_1$  computed from the solution of the full linear stability problem by performing a suitable Taylor series expansion of both the critical Rayleigh number and the associated frequency about the critical wavenumber  $k_H$  and critical frequency  $\omega_H$ at the onset of the Hopf bifurcation. Scaled appropriately, we find that for our parameter values  $s_0 \approx 0.7862 > 0$ , while  $c_1 \approx 0$  to the same accuracy, a result that is consistent with Figure 14 (right panel). Thus  $\epsilon^* \approx 0.1545$ , implying that (symmetric) sources should be unstable for  $Ra < Ra^* \approx 2586$ . This prediction is consistent with our simulations which find an unstable source at Ra = 2550 (Figure 14).

In contrast, the sinks form by collision and if the fully developed TW are not modulationally unstable the sink may be a stable structure that must persist all the way down to  $Ra = Ra_H$ . Such sinks will be stationary if the incoming waves are related by reflection or will drift due to wavenumber and/or frequency mismatch between the incoming wave-trains. Of course, the CCGL description eliminates the basic wavetrains from the description, but it is clear that if these are reinstated and their interaction fully described there will be two types of sources and sinks between identical wave-trains traveling in opposite directions: a symmetric source, in which the waves are emitted simultaneously in both



FIG. 17. The solution of the linear stability problem of the conduction state in complex wavenumber space  $k \equiv k_R + ik_l$ . The pinching that takes place between panels (a) and (b) identifies  $Ra = Ra_{abs} \approx$ 2540.2. Panels (c) and (d) show the corresponding wave frequency  $\omega$ .

directions (i.e., in phase) and an antisymmetric source in which the waves are emitted exactly out of phase, with a wave emitted in one direction in the first half-period and in the opposite direction in the second half-period. States of the latter type resemble one-dimensional spiral waves. The same dichotomy arises for sinks. It is of interest, therefore, to remark that the source in Figure 14 is unsteady and symmetric, while the sink in Figure 13 is not only stable but also antisymmetric. The same is true of a similar sink computed a number of years ago,<sup>13,49</sup> for different parameter values and stress-free lateral and as well as horizontal boundaries, indicating robustness of this type of sink (see also Ref. 50, Fig. 12). We mention that with stress-free boundary conditions, the bifurcation at  $Ra_H$  to TW is degenerate<sup>17–19</sup> and the application of the CCGL description<sup>47</sup> in the nonlinear regime is not rigorous. In view of the subcritical instability of the TW this is so in the present problem as well.

#### ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported in part by the National Science Foundation under grant DMS-0908102 (E. K.) and by CNES under GdR MFA 2799 "Micropesanteur Fondamentale et Appliquée" (C. B. & A. B.).

- <sup>1</sup>J. S. Turner, "The coupled turbulent transports of salt and heat across a sharp density interface," Int. J. Heat Mass Transfer **8**, 759 (1965).
- <sup>2</sup>R. W. Schmitt, "Double diffusion in oceanography," Annu. Rev. Fluid Mech. **26**, 255 (1994).
- <sup>3</sup>W. R. Wilcox, "Transport phenomena in crystal growth from solution," Prog. Cryst. Growth Charact. Mater. **26**, 153 (1993).
- <sup>4</sup>U. Hansen and D. A. Yuen, "Nonlinear physics of double-diffusive convection in geological systems," Earth-Sci. Rev. **29**, 385 (1990).
- <sup>5</sup>E. Knobloch, "Nonlinear diffusive instabilities in differentially rotating stars," Geophys. Astrophys. Fluid Dyn. **22**, 133 (1982).
- <sup>6</sup>H. E. Huppert and D. R. Moore, "Nonlinear double-diffusive convection," J. Fluid Mech. **78**, 821 (1976).
- <sup>7</sup>D. R. Moore, J. Toomre, E. Knobloch, and N. O. Weiss, "Period doubling and chaos in partial differential equations for thermosolutal convection," Nature 303, 663 (1983).
- <sup>8</sup>O. Batiste, E. Knobloch, A. Alonso, and I. Mercader, "Spatially localized binary-fluid convection," J. Fluid Mech. **560**, 149 (2006).
- <sup>9</sup>A. Bergeon and E. Knobloch, "Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection," Physica D 237, 1139 (2008).
- <sup>10</sup>G. W. Hunt, M. A. Peletier, A. R. Champneys, P. D. Woods, M. A. Wadee, C. J. Budd, and G. J. Lord, "Cellular buckling in long structures," Nonlinear Dyn. **21**, 3 (2000).
- <sup>11</sup>J. Burke and E. Knobloch, "Homoclinic snaking: structure and stability," Chaos 17, 037102 (2007).
- <sup>12</sup>D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch, "Spatially localized binary fluid convection in a porous medium," Phys. Fluids **22**, 073601 (2010).
- <sup>13</sup>A. E. Deane, E. Knobloch, and J. Toomre, "Traveling waves in largeaspect-ratio thermosolutal convection," Phys. Rev. A 37, 1817 (1988).
- <sup>14</sup>A. A. Predtechensky, W. D. McCormick, J. B. Swift, A. G. Rossberg, and H. L. Swinney, "Traveling wave instability in sustained double-diffusive convection," Phys. Fluids 6, 3923 (1994).
- <sup>15</sup>J. D. Crawford and E. Knobloch, "Symmetry and symmetry-breaking bifurcations in fluid mechanics," Annu. Rev. Fluid Mech. 23, 341 (1991).
- <sup>16</sup>E. Knobloch, D. R. Moore, J. Toomre, and N. O. Weiss, "Transitions to chaos in two-dimensional double-diffusive convection," J. Fluid Mech. **166**, 409 (1986).
- <sup>17</sup>E. Knobloch, A. E. Deane, J. Toomre, and D. Moore, "Doubly diffusive waves," Contemp. Math. 56, 203 (1986).
- <sup>18</sup>A. E. Deane, E. Knobloch, and J. Toomre, "Traveling waves and chaos in thermosolutal convection," Phys. Rev. A 36, 2862 (1987).
- <sup>19</sup>C. S. Bretherton and E. A. Spiegel, "Intermittency through modulational instability," Phys. Lett. A 96, 152 (1983).

- <sup>20</sup>L. S. Tuckerman, "Steady-state solving via Stokes preconditioning: Recursion relations for elliptic operators," in *11th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics*, edited by D. Dwoyer, M. Hussaini, and R. Voigt, Lecture Notes in Physics Vol. 323 (Springer, Berlin, 1989), p. 573.
- <sup>21</sup>C. K. Mamun and L. S. Tuckerman, "Asymmetry and Hopf bifurcation in spherical Couette flow," Phys. Fluids 7, 80 (1995).
- <sup>22</sup>G. E. Karniadakis, M. Israeli, and S. A. Orszag, "High-order splitting methods for the incompressible Navier–Stokes equations," J. Comp. Phys. 97, 414 (1991).
- <sup>23</sup>A. Bergeon and E. Knobloch, "Natural doubly diffusive convection in three-dimensional enclosures," Phys. Fluids 14, 92 (2002).
- <sup>24</sup>D. Funaro, *Polynomial Approximation of Differential Equations* (Springer, New York, 1991).
- <sup>25</sup>M. Deville, P. F. Fischer, and E. Mund, *High-order Methods for Incompressible Fluid Flow* (Cambridge University Press, New York, 2002).
- <sup>26</sup>R. Peyret, Spectral Methods for Incompressible Viscous Flow, Applied Mathematical Sciences Vol. 148 (Springer, New York, 2002).
- <sup>27</sup>A. Quarteroni and A. Valli, *Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations* (Oxford Science Publications, 1999).
- <sup>28</sup>C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T. A. Zang, Spectral Methods in Fluid Dynamics (Springer, New York, 1988).
- <sup>29</sup>A. Bergeon and E. Knobloch, "Spatially localized states in natural doubly diffusive convection," Phys. Fluids **20**, 034102 (2008).
- <sup>30</sup>A. Bergeon, J. Burke, E. Knobloch, and I. Mercader, "Eckhaus instability and homoclinic snaking," Phys. Rev. E 78, 046201 (2008).
- <sup>31</sup>P. D. Woods and A. R. Champneys, "Heteroclinic tangles and homoclinic snaking in the unfolding of a degenerate Hamiltonian–Hopf bifurcation," Physica D **129**, 147 (1999).
- <sup>32</sup>P. Coullet, C. Riera, and C. Tresser, "Stable static localized structures in one dimension," Phys. Rev. Lett. 84, 3069 (2000).
- <sup>33</sup>M. Beck, J. Knobloch, D. J. B. Lloyd, B. Sandstede, and T. Wagenknecht, "Snakes, ladders and isolas of localized patterns," SIAM J. Math. Anal. 41, 936 (2009).
- <sup>34</sup>E. Knobloch, "Convection in binary fluids," Phys. Fluids **23**, 1918 (1980).
- <sup>35</sup>P. Kolodner, C. M. Surko, and H. Williams, "Dynamics of traveling waves near the onset of convection in binary fluid mixtures," Physica D 37, 319 (1989).
- <sup>36</sup>V. Steinberg, J. Fineberg, E. Moses, and I. Rehberg, "Pattern selection and transition to turbulence in propagating waves," Physica D 37, 359 (1989).
- <sup>37</sup>J. Burke and E. Knobloch, "Snakes and ladders: localized states in the Swift–Hohenberg equation," Phys. Lett. A 360, 681 (2007).
- <sup>38</sup>J. Burke and E. Knobloch, "Multipulse states in the Swift–Hohenberg equation," Discrete Contin. Dyn. Syst. (Suppl.), 109 (2009).
- <sup>30</sup>A. Alonso, O. Batiste, E. Knobloch, and I. Mercader, "Convectons," in *Localized States in Physics: Solitons and Patterns*, edited by O. Descalzi, M. Clerc, S. Residori, and G. Assanto (Springer, Berlin, 2010), p. 109.
- <sup>40</sup>C. Martel, E. Knobloch, and J. M. Vega, "Dynamics of counterpropagating waves in parametrically forced systems," Physica D 137, 94 (2000).
- <sup>41</sup>T. M. Schneider, J. F. Gibson, and J. Burke, "Snakes and ladders: Localized solutions of plane Couette flow," Phys. Rev. Lett. **104**, 104501 (2010).
- <sup>42</sup>O. Batiste and E. Knobloch, "Simulations of oscillatory convection in <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He mixtures in moderate aspect ratio containers," Phys. Fluids **17**, 064102 (2005).
- <sup>43</sup>P. Kolodner, "Stable and unstable pulses of traveling-wave convection," Phys. Rev. A 43, 2827 (1991).
- <sup>44</sup>W. Barten, M. Lücke, M. Kamps, and R. Schmitz, "Convection in binary fluid mixtures. II. Localized traveling waves," Phys. Rev. E 51, 5662 (1995).
- <sup>45</sup>A. Spina, J. Toomre, and E. Knobloch, "Confined states in large-aspectratio thermosolutal convection," Phys. Rev. E **57**, 524 (1998).
- <sup>46</sup>P. Kolodner, "Extended states of nonlinear traveling-wave convection. II. Fronts and spatiotemporal defects," Phys. Rev. A 46, 6452 (1992).
- <sup>47</sup>M. van Hecke, C. Storm, and W. van Saarloos, "Sources, sinks and wavenumber selection in coupled CGL equations and experimental implications for counter-propagating wave systems," Physica D 134, 1 (1999).
- <sup>48</sup>P. Coullet, T. Frisch, and F. Plaza, "Sources and sinks of wave patterns," Physica D 62, 75 (1993).
- <sup>49</sup>A. E. Deane, E. Knobloch, and J. Toomre, "Erratum: Traveling waves in large-aspect-ratio thermosolutal convection [Phys. Rev. A 37, 1817 (1988)]," Phys. Rev. A 38, 1661 (1988).
- <sup>50</sup>L. Pastur, M.-T. Westra, and W. van der Water, "Sources and sinks in 1d traveling waves," Physica D 174, 71 (2003).

# Bibliographie

- [1] P. Assemat, A. Bergeon, and E. Knobloch. Spatially localized states in Marangoni convection in binary mixtures. *Fluid Dyn. Res.*, 40:852–876, 2008.
- [2] O. Batiste, E. Knobloch, A. Alonso, and I. Mercader. Spatially localized binary fluid convection. J. Fluid Mech., 560:149–158, 2006.
- [3] A. Bergeon and E. Knobloch. Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection. *Physica D*, 237:1139–1150, 2008.
- [4] A. Bergeon and E. Knobloch. Spatially localized states in natural doubly diffusive convection. *Phys. Fluids*, 20:034102, 2008.
- [5] C. S. Bretherton and E. A. Spiegel. Intermittency through modulational instability. *Phys. Lett. A*, 96:152–156, 1983.
- [6] J. Burke and E. Knobloch. Multipulse states in the Swift-Hohenberg equation. Proc. 7th AIMS Conference, Arlington, TX, 2009.
- [7] J. D. Crawford and E. Knobloch. Symmetry and symmetry-breaking bifurcations in fluid mechanics. Annu. Rev. Fluid Mech., 23:341–387, 1991.
- [8] A. E. Deane, E. Knobloch, and J. Toomre. Traveling waves and chaos in thermosolutal convection. *Phys. Rev. A*, 36:2862–2869, 1987.
- [9] H. E. Huppert and D. R. Moore. Nonlinear double diffusive convection. J. Fluid Mech., 78:821–854, 1976.
- [10] E. Knobloch, A. E. Deane, J. Toomre, and D. Moore. Doubly diffusive waves. Contemp. Math., 56:203–216, 1986.
- [11] E. Knobloch, D. R. Moore, J. Toomre, and N. O. Weiss. Transitions to chaos in two-dimensional double-diffusive convection. J. Fluid Mech., 166:409–448, 1986.
- [12] D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch. Spatially localized binary fluid convection in a porous medium. *Phys. Fluids*, 22:073601, 2010.
- [13] C. Martel, E. Knobloch, and J. M. Vega. Dynamics of counterpropagating waves in parametrically forced systems. *Physica D*, 137:94–123, 2000.
- [14] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch. Localized pinning states in closed containers: Homoclinic snaking without bistability. *Phys. Rev. E*, 80:025201, 2009.

- [15] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch. Convectons in periodic and bounded domains. *Fluid Dyn. Research*, 42:025505, 2010.
- [16] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch. Convectons, anticonvectons and multiconvectons in binary fluid convection. J. Fluid Mech., 667:586– 606, 2011.

# Chapitre 5 Convection de double diffusion 3D

Ce chapitre présente les résultats de l'étude de la structuration de l'écoulement induit par l'instabilité de double diffusion dans des géométries tridimensionnelles. Les géométries considérées sont des cavités parallélépipédiques dont l'une des dimensions sera plus grande que les deux autres. Deux surfaces verticales sont maintenues à des températures et concentrations différentes et séparées d'une longueur adimensionnée égale à l'unité. Les deux autres directions définissent les rapports d'aspect dans la direction verticale et horizontale (figure 5.1). A la différence des études précédentes, nous ne considérons pas de domaines  $\Gamma$ -périodiques mais des cavités d'extension finie dans les 3 directions. En d'autres termes, des conditions aux limites de non-glissement seront imposées sur *tous* les bords du domaine.

Dans une première partie consacrée aux cavités plus étendues dans la direction verticale (figure 5.1.a), nous discutons les mécanismes conduisant à la formation d'états spatialement localisés et comment ces états sont impactés par une instabilité purement tridimensionnelle (mise en évidence dans des géométries identiques de petits rapports d'aspect [2]). Nous montrerons que cette instabilité conduit à l'apparition de nouvelles branches d'états spatialement localisés décrivant un snaking secondaire. La seconde partie concerne une cavité plus étendue horizontalement (figure 5.1.b) c'est-à-dire dans une direction perpendiculaire à la gravité. Nous mettrons en évidence la formation de solutions spatialement localisées par un mécanisme appelé *protosnaking*.

# 5.1 Domaines étendus verticalement

# 5.1.1 Formulation du problème et symétries

On considère une cavité parallélépipédique contenant un mélange fluide binaire. La direction verticale est notée x et les deux directions horizontales y et z (figure 5.1.a). La géométrie considérée est un parallélépipède à section horizontale carrée de dimensions  $[0, L] \times [0, h] \times [0, h]$  où  $L \gg h$ . Les deux surfaces z = 0 et z = h sont maintenues aux températures et concentrations  $T^* = T_r$ ,  $C^* = C_r$  et  $T^* = T_r + \Delta T$ ,  $C^* = C_r + \Delta C$  respectivement avec  $\Delta T > 0$  et  $\Delta C > 0$ . Les autres surfaces x = 0, L et y = 0, h sont supposées adiabatiques et imperméables de sorte que le flux de chaleur et le flux d'espèces chimiques au travers de ces surfaces sont nuls. Le long de toutes les surfaces définissant la géométrie, des conditions aux limites de



FIGURE 5.1 – (a) Représentation du domaine étendu dans la direction verticale. (b) Représentation du domaine étendu dans la direction horizontale. Les parois grisées sont celles sur lesquelles la température et la concentration sont imposées. Le changement des axes et notamment de l'axe de la gravité (direction x en (a) et direction z en (b)) est lié au codage numérique. Dans le code numérique, les éléments spectraux sont alignés dans la direction x. Pour passer de (a) à (b), seule l'orientation numérique de la gravité est changée.

non-glissement sont imposées.

De la même manière que pour le cas bidimensionnel, on se place dans l'approximation de Boussinesq de sorte que la densité  $\rho$  est constante dans tous les termes à l'exception du terme de force de volume (poussée d'Archimède) dans lequel  $\rho = \rho_0 + \rho_T (T^* - T_r^*) + \rho_c (C^* - C_r^*)$  où  $T_r^*$  et  $C_r^*$  sont les températures et concentrations de référence (choisies égales à celles imposées sur l'une des surfaces) et  $\rho_c = \partial \rho / \partial C > 0$ ,  $\rho_T = \partial \rho / \partial T < 0$ .

En choisissant la distance h pour adimensionaliser les distances, le temps caractéristique  $h^2/\kappa$  pour les temps et en considérant les température et concentration adimensionnelles  $(T^* - T_r^*)/\Delta T$  et  $(C^* - C_r^*)/\Delta C$ , les équations adimensionalisées s'écrivent :

$$Pr^{-1}\left(\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}\right) = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + Ra(T + N C)\mathbf{e}_{\mathbf{x}},\tag{5.1}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{5.2}$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla^2 T, \tag{5.3}$$

$$\partial_t C + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = \tau \nabla^2 C, \tag{5.4}$$

où les variables adimensionnées sont **u** pour la vitesse, p pour la pression, T pour la température et C pour la concentration. Les paramètres sans dimension sont le nombre de Prandtl Pr, l'inverse du nombre de Lewis  $\tau = Le^{-1}$ , le nombre de Rayleigh (thermique) Ra et le rapport N des forces de volume d'origine thermique et solutale définis par :

$$Pr = \frac{\nu}{\kappa}, \qquad \tau = \frac{D}{\kappa}, \qquad Ra = \frac{g|\rho_T|\Delta Th^3}{\rho_0 \kappa \nu}, \qquad N = \frac{\rho_C \Delta C}{\rho_T \Delta T} = -\frac{Ra_S}{Ra}, \quad (5.5)$$

е



FIGURE 5.2 – Représentation de la cavité et de ses symétries : la symétrie  $S_y$  est une réflexion par rapport au plan y = 0.5,  $S_{\Delta}$  est une réflexion par rapport à la droite  $\Delta$  et  $S_C = S_y \circ S_{\Delta} = S_{\Delta} \circ S_y$  celle par rapport au point C.

où  $Ra_S$  est le nombre de Rayleigh solutal défini par  $Ra_S = g\rho_C \Delta Ch^3 / \rho_0 \kappa \nu$ ,  $\nu$  est la viscosité cinématique,  $\kappa$  la diffusivité thermique et g la pesanteur ( $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_x$ ). Les conditions aux limites s'écrivent :

en 
$$x = \{0, L\}, y = \{0, 1\}$$
:  $u = v = w = \partial_n T = \partial_n C = 0,$  (5.6)

en 
$$z = 0$$
:  $u = v = w = T = C = 0,$  (5.7)

n 
$$z = 1$$
:  $u = v = w = T - 1 = C - 1 = 0,$  (5.8)

où  $\mathbf{u} = (u, v, w)$ , L représente maintenant la longueur adimensionnée du domaine dans la direction verticale x et n est la coordonnée normale aux surfaces.

Dans la suite et comme nous l'avons expliqué dans l'introduction (chapitre 1), on ne considère que le cas N = -1 pour lequel les forces d'origine thermique et solutale sont opposées et de même magnitude. Dans ces conditions, la configuration admet une solution triviale (dite conductive) qui s'écrit  $\mathbf{u} = 0$  et T = C = z et dont la stabilité linéaire dépend du nombre de Lewis et du nombre de Rayleigh.

Afin de faciliter l'écriture des propriétés de symétrie du système, on pose  $\Theta \equiv T - z$  et  $\Sigma \equiv C - z$ . Le système (5.1–5.4, 5.6–5.8) est équivariant par rapport aux réflexions (figure 5.2) :

$$S_y: (x, y, z) \to (x, 1 - y, z), \qquad (u, v, w, \Theta, \Sigma) \to (u, -v, w, \Theta, \Sigma), \tag{5.9}$$
$$S_{\Delta}: (x, y, z) \to (L - x, y, 1 - z), \qquad (u, v, w, \Theta, \Sigma) \to -(u, -v, w, \Theta, \Sigma). (5.10)$$

De fait, les équations possèdent les symétries du groupe  $D_2$ , où  $D_2 = \{I, S_y, S_{\Delta}, S_c\}$ avec I l'identité et  $S_c = S_y \circ S_{\Delta} = S_{\Delta} \circ S_y$  la symétrie centrale par rapport au point milieu de la cavité (figure 5.2). Il en résulte que suivant les propriétés de symétrie du mode marginal, les bifurcations primaires de la solution conductive sont soit des bifurcations fourches (lorsqu'une ou plusieurs symétries du groupe sont brisées) soit des bifurcations transcritiques. Dans la suite, nous n'étudierons que les branches issues des deux premières bifurcations primaires, l'une résultant d'une bifurcation fourche et l'autre d'une bifurcation transcritique [7]. En raison du fait que  $L \gg 1$ , ces deux bifurcations successives sont très proches l'une de l'autre (dans les cas que nous allons étudier, la bifurcation fourche précède la bifurcation transcritique).

## 5.1.2 Résultats

On considère une géométrie de hauteur adimensionnée L = 19.8536. Cette valeur a été choisie de manière à être approximativement égale à 8 fois la longueur d'onde critique d'une couche bi-dimensionnelle infinie [6, 14]. Dans les simulations numériques que nous présentons, le maillage comprend 16 éléments spectraux discrétisés par  $21 \times 19 \times 19$  points de Gauss-Lobatto-Legendre. Le nombre de Rayleigh Ra est le paramètre de continuation et les nombres de Prandtl et de Lewis sont respectivement Pr = 1 et  $Le = \tau^{-1} = 11$ .

Le premier point de bifurcation primaire apparaît pour  $Ra \approx 850.78$ . La structure du mode marginal (figure 5.3.a) indique que la bifurcation est une fourche. La branche de solution associée se termine presque immédiatement en un point de bifurcation secondaire le long de la branche issue de la seconde bifurcation primaire en  $Ra \approx 850.86$ . Des comportements identiques sont reportés dans des domaines de plus petits rapports d'aspect [2]. La structure du mode marginal (figure 5.3.b) associé à la deuxième bifurcation primaire révèle qu'il s'agit d'une bifurcation transcritique. La partie sous-critique de la branche est notée  $L^-$  et la partie super-critique  $L^+$ . Parce que  $L \gg 1$ , la partie supercritique  $L^+$  de cette branche passe rapidement un noeud-col à l'issue duquel elle se prolonge dans le régime sous-critique jusqu'à des valeurs inférieures au seuil d'instabilité linéaire de la même manière que  $L^-$ .

A mesure que Ra décroît, la structure des solutions le long des branches  $L^{\pm}$ évolue d'un ensemble de rouleaux contra-rotatifs vers un ensemble de rouleaux corotatifs dont le sens de rotation du fluide correspond à un mouvement ascendant du fluide le long de la paroi chaude z = 1 [13]. En raison de la taille finie du domaine dans la direction verticale x, l'amplitude de ces rouleaux est modulée et plus faible à proximité des bords x = 0 et x = L [11, 12]. Pour chacune des branches, à mesure que Ra décroît, l'enveloppe de cette modulation devient devient de plus en plus brutale pour créer des fronts et finalement former des structures fortement localisées spatialement (figure 5.3.b). A la branche  $L^+$  sont alors associées des solutions formées d'un unique rouleau de convection au centre du domaine, alors qu'à  $L^-$  sont associées des solutions formées de deux rouleaux co-rotatifs (figure 5.3.b1 et 5.3.b2).

A la différence du problème considéré dans le chapitre précédent ou du même problème dans sa version bidimensionnelle [3], les branches d'états spatialement localisés sont produites par une bifurcation primaire et non une bifurcation secondaire. Cette différence est induite par les conditions aux limites dans la direction de plus grande extension. La présence de parois rigides dans cette direction ne permet pas la formation d'un ensemble de rouleaux identiques et donc de structures spatialement périodiques. Munies de conditions d'adhérence, ces parois induisent des couches limites freinant l'écoulement et conduisant aux modulations d'amplitude que nous avons décrites.

La figure 5.4 présente le diagramme de bifurcation sous la forme énergie cinétique



FIGURE 5.3 – (a) Représentation du mode marginal associé à la première bifurcation primaire de type fourche. Sont représentées les isosurfaces de  $w = \pm W$  avec W choisi de manière appropriée (noir pour la valeur négative et gris pour la valeur positive) et la fonction de courant dans le plan y = 1/2 (noir pour des rouleaux tournant dans le sens direct et blanc pour des rouleaux indirects). (b1) Représentation similaire du mode marginal  $\tilde{f}_t$  responsable de la bifurcation transcritique. Les deux derniers shapshots montrent l'évolution de la solution non-linéaire le long de  $L^+$  via les isovaleurs de la fonction de courant dans le plan y = 1/2 à  $Ra \approx 810$  et  $Ra \approx 740$ . (b2) Idem que (b1) pour la branche  $L^-$  et le mode propre correspondant  $-\tilde{f}_t$ .

en fonction de Ra. Les deux branches  $L^{\pm}$  sont représentées sur deux graphes différents pour plus de clarté. Les solutions représentées sur les figures 5.3.b1 et 5.3.b2 correpondent à des solutions situées sur la partie de la branche entre le point de bifurcation primaire et le premier noeud-col au voisinage duquel elles ont une structure spatialement localisée.

La figure 5.4.a révèle que la branche  $L^+$  effectue une série de 3 allers-retours dans l'intervalle 703 < Ra < 807 avant de poursuivre vers de plus grandes valeurs de Ra. La figure 5.5.a, présente la structure des solutions au voisinage de chaque noeudcol. Elle montre que les allers-retours sont associés à la croissance spatiale de la structure localisée. A chaque noeud-col de gauche, une paire de rouleaux co-rotatifs est nucléée, les rouleaux ainsi créés se positionnant aux extrémités de la structure déjà formée. A l'issue de 3 allers-retours, les rouleaux de convection occupent tout le domaine et la branche quitte la région de snaking vers des nombres de Rayleigh plus grands. A la différence des conditions aux limites périodiques, elles ne reconnectent pas une branche existante [5, 4]. Les solutions aux grandes valeurs de Ra ressemblent toutefois à des solutions périodiques mais avec des défauts induits par la présence des parois rigides supérieures et inférieures. La branche  $L^+$  se comporte de manière proche de la branche correspondante dans le problème de la convection d'un fluide binaire sujet à l'effet Soret dans une cavité horizontale [9, 10].

La branche  $L^-$  a initialement le même type de comportement que  $L^+$ . Cependant, une fois la cavité remplie par les rouleaux de convection, la branche rebrousse chemin. Au noeud-col le plus énergétique, la solution consiste en 6 rouleaux de convection (snapshot 6 de la figure 5.5.b). A mesure que la branche décroît en énergie, les rouleaux se séparent en deux trains de 3 rouleaux proches des extrémités du domaine en laissant une zone faiblement convective au centre du domaine Cette transition se produit lors du passage de deux noeuds-cols à environ Ra = 745. Au noeud-col suivant ( $Ra \approx 703$ ), la solution ressemble à un état à deux-pulses, puis elle part vers les grands nombres de Rayleigh tout en augmentant l'intensité des 4 rouleaux extrémaux tandis que les deux rouleaux centraux disparaissent.

Le comportement décrit ci-dessus possède des similitudes avec celui observé dans l'équation de Swift-Hohenberg (avec non-linéarités d'ordre 2 et 3) définie sur un intervalle de taille finie et munie de conditions aux limites de Robin. Lorsque ces conditions aux limites respectent la réflection  $x \to -x$ , le mécanisme classique de formation des structures spatialement localisées est altéré de façon similaire à celui de la convection thermosolutale 3D présentée ici [8]. Plus précisément, la figure 7 de [8] montre une bifurcation faiblement transcritique similaire à la bifurcation transcritique analysée ici. La branche sous-critique produite appelée  $S_{6,0}$  correspond à des solutions à 6 longueurs d'onde. Elle peut être identifiée à  $L^+$  (figure 6 de [8]). Aux fortes amplitudes, elle conduit à la formation de solutions ressemblant à des solutions périodiques. Les figures 7 et 9 de [8] montrent également la branche supercritique, noté<br/>é ${\rm S}_{6.\pi}.$  Au voisinage du seuil, elle passe un noeud-col et s'étend dans le régime sous-critique. Son comportement ressemble à celui de  $L^-$ : la branche  $S_{6,\pi}$ revient effectivement vers les faibles amplitudes en continuant à effectuer des allersretours, et évolue en deux-pulse avant de se reconnecter à la solution triviale. Dans le cas présent,  $L^-$  se sépare également en une solution à deux pulses à mesure que la solution décroît en amplitude. A la différence avec l'équation de Swift-Hohenberg, après cette transition, la solution garde sa structure et quitte la région de snaking en



FIGURE 5.4 – Diagramme de bifurcation représentant les variations de l'énergie cinétique E en fonction du nombre de Rayleigh Ra pour les branches (a)  $L^+$  et (b)  $L^-$ . Les solutions à chaque noeud-col sont représentées sur la figure 5.5. La branche  $L^+$  est associée à des solutions possédant un nombre impair de rouleaux de convection. A l'issue de chaque aller-retour, les solutions croissent spatialement en nucléant un nouveau rouleau de part et d'autre de ceux déjà formés. La région des allers-retours est appelée région de snaking. Lorsque le domaine est rempli par 5 rouleaux, la branche quitte cette région et croît en énergie avec Ra. La branche  $L^$ est associée à des solutions ayant un nombre pair de rouleaux. La solution croît dans la région de snaking mais ne réussit pas à remplir le domaine. En conséquence, la branche  $L^-$  décroît en énergie au sein de la région de snaking et évolue en deux-pulses avant de partir vers les rands Ra.



FIGURE 5.5 – Solutions aux noeuds-cols des branches  $L^+$  (a) et  $L^-$  (b) du diagramme de la figure 5.4. Les solutions sont classées de la gauche vers la droite à mesure que l'on s'éloigne de la bifurcation primaire à  $Ra \approx 850.88$ . Les solutions sont représentées par les isosurfaces de vitesse verticale  $u = \pm U$  avec U choisi de manière appropriée (noir pour la valeur positive et gris pour la valeur négative). La dernière solution a été obtenue pour  $Ra \approx 841$  pour  $L^+$  et  $Ra \approx 840$  pour  $L^-$ .

formant deux pulses de deux rouleaux chacun. Les résultats obtenus dans l'équation de Swift-Hohenberg indiquent que lorsque l'on change de manière continue les conditions aux limites périodiques pour celles de Robin, la branche  $S_{6,\pi}$  et une branche de solutions à deux pulses se coupent et forment une bifurcation imparfaite changeant qualitativement le diagramme. La branche  $S_{6,\pi}$  et la partie inférieure de la branche d'états deux pulses ne forment plus qu'une branche. Dans notre cas,  $L^-$  connecte la partie supérieure de la branche deux-pulses et continue donc à croître en amplitude lorsque Ra augmente.

Les solutions présentées jusqu'à présent sont  $S_y$ -invariantes et en ce sens sont analogues à celles obtenues dans une version bi-dimensionnelle du problème (Ghorayeb & Mojtabi [6]). Cependant, la présence de la troisième direction (y) est responsable d'une instabilité pleinement tridimensionnelle [2] dont la conséquence remarquable est d'induire un snaking secondaire que nous allons présenter.

La figure 5.6 représente le diagramme de bifurcation montrant à la fois les branches de bifurcation primaires  $L^{\pm}$  et les branches de bifurcation secondaires. La figure 5.7 présente les modes propres marginaux responsables des bifurcations secondaires. Elles sont toutes associées à des modes marginaux qui brisent au moins la symétrie  $S_y$  et sont donc à relier à la bifurcation secondaire observée dans de petits domaines [2] et qui a pour effet d'incliner autour de l'axe vertical les rouleaux de convection du domaine. Dans la région de snaking où les branches primaires effectuent des allers-retours, cette instabilité apparaît plusieurs fois le long des branches  $L^{\pm}$ .

La figure 5.6 révèle que des bifurcations secondaires apparaissent le long des branches  $L^+$  et  $L^-$ . La première bifurcation secondaire le long de  $L^+$  produit la branche labellisée  $L_1^+$  et la première bifurcation secondaire le long de  $L^-$ , la branche  $L_1^-$ . Le mode propre marginal associé à  $L_1^+$  (figure 5.7.a) brise les symétries  $S_y$  et  $S_{\Delta}$ et produit des solutions  $S_c$ -symétriques. Inversement, celui responsable de  $L_1^-$  (figure 5.7.b) brise  $S_y$  et  $S_c$  et produit des solutions  $S_{\triangle}$ -symétriques. La seconde bifurcation secondaire le long de  $L^+$  est associée à une valeur propre nulle de multiplicité 2. Les deux vecteurs propres marginaux sont représentés sur les figures 5.7.c et 5.7.d. Le premier prérseve  $S_{\Delta}$ , brise  $S_y$  et  $S_c$  et produit la branche labellisée  $L_{2\Delta}^+$ . Le second préserve  $S_c$ , brise  $S_y$  et  $S_{\Delta}$  et produit la branche labellisée  $L_{2c}^+$ . Les deux branches sont superposées lorsqu'on les représente en terme d'énergie cinétique versus Ra. De la structure des vecteurs propres (figure 5.7), on remarquera que cette instabilité secondaire n'agit que sur les rouleaux qui forment les bords du convecton. Les mêmes caractéristiques lient les bifurcations secondaires suivantes de  $L^-$  et produisent les branches  $L^-_{2\triangle}$  et  $L^-_{2c}$  dont les solutions ne respectent que la symétrie  $S_\Delta$  pour  $L^-_{2\triangle}$ et  $S_c$  pour  $L_{2c}^-$ .

Les branches de bifurcation secondaire produisent ce que nous appelons un snaking secondaire et qui consiste en une série d'allers-retours dans l'intervalle 745 < Ra < 819, défini comme l'intervalle vers lequel les oscillations des branches tendent. La première bifurcation secondaire de  $L^+$  se produit à  $Ra \approx 751$ , avant le premier noeud-col. Elle est super-critique et génère la branche  $L_1^+$  qui consiste initialement en des solutions formées d'un unique rouleau de convection de faible amplitude localisé au centre du domaine (figure 5.8.a). A mesure que Ra augmente le long de  $L_1^+$ , le rouleau s'amplifie, augmente sa taille et s'incline brisant à la fois  $S_y$  et  $S_{\Delta}$  mais préservant  $S_c$ . Après le premier noeud-col, la branche  $L_1^+$  repart vers des



FIGURE 5.6 – Diagramme de bifurcation représentant les variations de l'énergie cinétique E en fonction du nombre de Rayleigh Ra pour les branches associées au snakings secondaires issus de bifurcations secondaires le long des branches de bifurcation primaire  $L^+$  et  $L^-$ . Pour des raisons de clarté, les branches (a)  $L^+$ et (b)  $L^-$  (dont la partie descendante n'a pas été représentée) sont représentées séparément (figures (a) et (b)). Les bifurcations secondaires se produisent le long des parties sous-critiques des branches  $L^{\pm}$  et conduisent à la formation de structures localisées dont les rouleaux sont inclinés par rapport à l'axe vertical. Les solutions à chaque noeud-col de ces branches de solutions labelisées  $L_1^+$ ,  $L_{2\Delta}^+$ ,  $L_{2c}^+$  et  $L_1^-$  sont représentées sur la figure 5.8 et celles aux noeuds-cols de  $L_{2\Delta}^-$ ,  $L_{2c}^-$  sur la figure 5.9.

valeurs de Ra décroissantes et deux nouveaux rouleaux sont créés, un de chaque côté du rouleau central. Durant la nucléation, la taille et l'inclinaison du rouleau central décroissent jusqu'au noeud-col de gauche de manière à obtenir 3 rouleaux de taille et d'intensité sensiblement identiques mais légèrement inclinés les uns par rapport aux autres. L'intensité des rouleaux et leur longueur recroissent après le noeud-col et à mesure que Ra augmente. En plus de ces effets, les rouleaux s'inclinent alternativement dans des directions opposées. Ce snaking se poursuit jusqu'à former une solution comprenant 7 cellules de convection. La branche  $L_1^+$  quitte alors la région du snaking secondaire et poursuit vers les grandes valeurs de Ra.

Le scénario est identique pour la seconde bifurcation secondaire (le long du second segment sous-critique de  $L^+$ ) produisant simultanément en  $Ra \approx 742$  les deux branches  $L_{2\Delta}^+$  et  $L_{2c}^+$ . Ces deux branches sont associées initialement à une structure formée d'une cellule centrale de forte amplitude entourée par deux cellules de plus faible intensité (figure 5.8.c,d). Cette caractéristique est une conséquence du fait que ces branches secondaires bifurquent d'un état intermédiaire du processus de nucléation le long de la branche  $L^+$  dans lequel les cellules fraîchement nuclées n'ont pas atteint leur amplitude maximum. Cette propriété (une cellule forte au sein de cellules plus faibles) est héritée par les solutions des branches  $L_{2\Delta}^+$  et  $L_{2c}^+$ .

Les solutions associées à ces deux branches (figure 5.8.c,d) ne diffèrent que par l'orientation des rouleaux sur un demi-domaine. Les branches  $L_{2\Delta}^+$  et  $L_{2c}^+$  se superposent donc dans le diagramme de bifurcation de la figure 5.8. Durant le snaking secondaire, le rouleau central reste droit (il ne s'incline pas) bien que son extension dans la direction verticale varie. Le comportement des faibles rouleaux évolue



FIGURE 5.7 – Modes marginaux responsables des bifurcations vers (a)  $L_1^+$  ( $S_c$ -symétrique), (b)  $L_1^-$  ( $S_{\Delta}$ -symétrique), (c)  $L_{2\Delta}^+$  ( $S_{\Delta}$ -symétrique) et (d)  $L_{2c}^+$   $S_c$ -symétrique). Ces modes sont représentés par deux iso-valeurs opposées de la vitesse verticale (à gauche) et de la composante en z de la vorticité (à droite). Pour rendre visible l'inclinaison caractéristique de ces modes, les axes ont été tournés par rapport aux figures précédentes.



FIGURE 5.8 – Snapshots des solutions à chaque noeud-col des branches de bifurcation secondaire de la figure 5.6 :  $L_1^+$  (a),  $L_1^-$  (b),  $L_{2\Delta}^-$  (c) et  $L_{2c}^-$  (d). Les solutions sont représentées par les isosurfaces de vitesse verticale  $u = \pm U$  avec U choisi de manière appropriée (noir pour la valeur positive, gris pour la valeur négative).



FIGURE 5.9 – Idem que pour la figure 5.8 mais pour  $L^{-}_{2\Delta}$  (a) et  $L^{-}_{2c}$  (b).

suivant le même processus que celui de la branche  $L_1^+$ , par nucléation de cellules supplémentaires s'inclinant en alternance à mesure que Ra augmente. Les branches  $L_{2\triangle}^+$  et  $L_{2c}^+$  quittent la région de snaking secondaire dès que le domaine est rempli ce qui correspond à une cellule de convection forte au centre et 6 petites cellules. Les branches poursuivent alors vers les grands nombres de Rayleigh.

La première bifurcation secondaire le long de  $L^-$  est présentée sur la figure 5.6 et la structure de l'écoulement le long de la branche  $L_1^-$  produite, sur la figure 5.8.b. Cette bifurcation secondaire se produit à  $Ra \approx 744$ . La branche  $L_1^-$  suit également un snaking secondaire dans le même intervalle que les autres branches secondaires. La seule différence avec  $L_1^+$ ,  $L_{2\Delta}^+$  et  $L_{2c}^+$  est que la branche  $L_1^-$  comporte un nombre pair de cellules et sort de la zone de snaking secondaire lorsque la structure est formée de 6 cellules. De la même façon que pour  $L_{2\Delta}^+$  et  $L_{2c}^+$ , deux branches bifurquent à  $Ra \approx 743$  lors du second aller-retour de  $L_1^-$ . Ces branches,  $L_{2\Delta}^-$  et  $L_{2c}^-$ , sont les analogues des branches  $L_{2\Delta}^+$  et  $L_{2c}^+$ , à ceci près qu'elle produisent des rouleaux inclinés autour de deux rouleaux centraux de forte intensité. Ces deux nouvelles branches font un aller-retour dans la zone de snaking avec comme composition deux intenses rouleaux centraux et 4 petits rouleaux inclinés latéraux. Les solutions le long des noeuds-cols des branches  $L_{2\Delta}^-$  et  $L_{2c}^-$  sont représentées sur la figure 5.9.

# 5.2 Domaine d'extension horizontale

## 5.2.1 Formulation du problème et symétries

On reprend ici le problème précédent mais en considérant une cavité parallélépipédique plus étendue dans la direction horizontale parallèle aux surfaces verticales maintenues à températures et concentrations constantes. Ces deux surfaces correspondent en variables dimensionnées à y = 0 et y = h. La verticale est suivant z et la direction la plus étendue est la direction x de longueur dimensionnée égale à L. La section verticale de la cavité est carrée. La géométrie est représentée en variables adimensionnées sur la figure 5.1.b. Une fois adimensionalisées, les équations adimensionnées s'écrivent :

 $\nabla$ 

$$Pr^{-1}\left(\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}\right) = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} + Ra(T - C) \mathbf{e}_z, \tag{5.11}$$

$$\cdot \mathbf{u} = 0, \tag{5.12}$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla^2 T, \qquad (5.13)$$

$$\partial_t C + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = \tau \nabla^2 C, \qquad (5.14)$$

et sont munies des conditions aux limites :

à 
$$x = \{0, L\}, z = \{0, 1\}:$$
  $u = v = w = \partial_n T = \partial_n C = 0,$  (5.15)

à 
$$y = 0$$
:  $u = v = w = T = C = 0,$  (5.16)

à 
$$y = 1$$
:  $u = v = w = T - 1 = C - 1 = 0$ , (5.17)

où *n* est la coordonnée perpendiculaire à la surface considérée. Le système (5.11– 5.14, 5.15–5.17) admet une solution triviale dite conductive u = v = w = 0 et T-y = C-y = 0 quelque soit le nombre de Rayleigh *Ra*. Les symétries du problème sont celles du groupe  $D_2$  défini par  $D_2 = \{I, S_x, S_{\Delta'}, S_c\}$ , où *I* est l'identité et  $S_x$ ,  $S_{\Delta'}$  sont les deux réflections par rapport au plan x = L/2 et par rapport à la droite horizontale  $\Delta'$  d'équation y = z = 1/2 définies par :

$$S_x : (x, y, z) \to (L - x, y, z), \qquad (u, v, w, \Theta, \Sigma) \to (-u, v, w, \Theta, \Sigma), \quad (5.18)$$
$$S_{\Delta'} : (x, y, z) \to (x, 1 - y, 1 - z), \quad (u, v, w, \Theta, \Sigma) \to -(-u, v, w, \Theta, \Sigma), (5.19)$$

où l'on a noté  $\Theta = T - y$  et  $\Sigma = C - y$ . La symétrie  $S_c$  est la symétrie centrale par rapport au point milieu C = (L/2, 1/2, 1/2) de la cavité définie par  $S_c = S_x \circ S_{\Delta'} = S_{\Delta'} \circ S_x$ .

#### 5.2.2 Résultats

On choisit ici L = 21. Il s'agit d'une valeur arbitraire grande devant les dimensions caractéristiques des structures convectives observées dans le problème précédent. Les simulations numériques ont été effectuées avec 21 éléments constitués chacun de  $13 \times 17 \times 17$  points. Les autres paramètres sont toujours Pr = 1 et  $\tau = 1/11$ .

La première bifurcation primaire apparaît pour une valeur du nombre de Rayleigh  $Ra_c \approx 1719$  qui est voisine de celle obtenue par Bergeon *et al.* [1] dans l'étude des cavités bidimensionnelles de rapports d'aspects égaux à 1 (typiquement,  $Ra_c = 17172/(Le - 1)$  soit  $Ra_c = 1717.2$  pour  $Le = \tau^{-1} = 11$ ). La figure 5.10 présente le diagramme de bifurcation au voisinage du seuil d'instabilité et révèle que cette bifurcation est transcritique. La branche produite est notée  $L_0$ . La figure 5.11.a présente l'évolution de la partie sous-critique de cette branche dans le régime pleinement non-linéaire et la figure 5.12 représente des solutions pour différentes valeurs de Ra. Ces figures révèlent que cette branche est associée à la formation



FIGURE 5.10 – Diagramme de bifurcation au voisinage de la bifurcation primaire en  $Ra \approx 1719$  représentant les variations de l'énergie cinétique E en fonction du nombre de Rayleigh Ra. La bifurcation primaire est transcritique et produit deux branches de solutions. La branche sous-critique labellisée  $L_0$  est à l'origine de solutions spatialement localisées. La partie super-critique est associée à des solutions formées de cellules de convection occupant toute la cavité. Les snapshots de droite et de gauche représentent, respectivement, les isovaleurs de la vitesse verticale wdans la section centrale x = L/2 le long de la branche sous-critique  $L_0$  à  $Ra \approx 1649$ et de la partie super-critique à  $Ra \approx 1771$ . Les couleurs foncées représentent des valeurs positives et les couleurs claires des valeurs négatives.

d'états localisés. Plus précisément, l'instabilité de la solution conductive conduit tout d'abord à la formation d'un rouleau longitudinal que les conditions aux limites en x = 0, L modulent. Cette modulation s'amplifie à mesure que Ra décroît pour former un rouleau fortement localisé à Ra = 752. A cette valeur, la structure commence à croître spatialement. La branche croît en énergie mais aucun snaking n'est produit. En raison de l'orientation relative des forces de volume et de la direction y, aucune longueur d'onde n'est privilégiée. L'homogénéité spatiale de la structure lui permet de croître continuement contrairement au snaking de la partie 5.1 dans lequel la croissance s'accompagne de nucléations de cellules de convection. Ce type de comportement est appelé *protosnaking*. Une fois que la structure a envahi le domaine, la branche termine sa croissance quasi-verticale pour croître vers les grandes valeurs du nombre de Rayleigh. La solution ressemble alors à un rouleau spatialement uniforme présentant des défauts au voisinage des parois x = 0, L (figure 5.12).

Afin de comprendre l'origine et le comportement de la branche  $L_0$ , il est intéressant de comparer cette géométrie (cavité de dimension finie) aux couches infinies Lpériodiques dans la direction x. Pour ce faire, on substitue aux conditions aux limites en x = 0, L des conditions aux limites périodiques sur tous les champs  $\mathbf{u}, T$  et C. Le système conserve les mêmes symétries mais s'y s'ajoute l'invariance par translation continue dans la direction x, direction de grand allongement. Dans ces conditions, les solutions du problème bidimensionnel (écrit dans un plan x=constante) sont solutions du problème 3D. Le système produit donc des solutions convectives invariantes dans la direction x et qui ne sont rien d'autres que les solutions du problème



FIGURE 5.11 – Diagramme de bifurcation représentant les variations de l'énergie cinétique E en fonction du nombre de Rayleigh Ra pour (a) la branche de bifurcation primaire  $L_0$  et (b) les branches de bifurcation secondaire  $L_0^-$  et  $L_0^+$  bifurquant de  $L_0$  à  $Ra \approx 1224$  et  $Ra \approx 1226$ , respectivement.



FIGURE 5.12 – Snapshots des solutions spatialement localisées le long de la branche  $L_0$ . De bas en haut sont représentés successivement le mode marginal, la solution à  $Ra \approx 752$ , les solutions à chacun des 3 noeuds-cols et la solution sur la partie haute de la branche à  $Ra \approx 851$ . Les solutions sont représentées au travers de deux isovaleurs de la vitesse v : v = +V en noir et v = -V en gris. Ces isovaleurs diffèrent pour le mode marginal.

2D. Le diagramme de bifurcation est présenté sur la figure 5.13.a. Sur cette figure, pour comparaison, est également représentée la branche  $L_0$  obtenue précédemment (cavité de rapport d'aspect L). La solution triviale perd sa stabilité à  $Ra \approx 1716.2$ via une bifurcation transcritique produisant la branche  $P_0^x$  associée à des solutions typiquement bidimensionnelles ((v, w, T, C) sont des fonctions de y et z avec u = 0). Elle est l'analogue de la branche  $L_0$ , la modulation d'amplitude au voisinage de x = 0, L en moins. La partie sous-critique de  $P_0^x$  passe un noeud-col en  $Ra \approx 676$ . Le long de cette branche, à faible amplitude se produit une bifurcation secondaire de type fourche qui forme la branche labellisée  $L_0^x$ . Les solutions le long de cette branche sont initialement identiques à celles de  $L_0$  et ne sont donc plus invariantes par translation dans la direction x (figure 5.13.b). La branche  $L_0^x$  a un comportement identique à la branche  $L_0$  jusqu'à son dernier noeud-col où, au lieu de partir vers les grands Ra, elle continue vers des valeurs de Ra plus petites pour reconnecter la branche  $P_0^x$  de laquelle elle a émergé.

Dans le cas de la cavité de taille finie, l'étude de stabilité linéaire de la branche  $L_0$  révèle la présence de deux bifurcations secondaires le long de la partie souscritique à  $Ra \approx 1224$  et  $Ra \approx 1226$ . Les branches issues de ces fourches, labelisées  $L_0^-$  et  $L_0^+$ , sont représentées sur la figure 5.11.b. Les modes marginaux associés à ces bifurcations fourches brisent tous deux  $S_{\Delta'}$ . L'un d'eux, produisant la branche  $L_0^-$  brise  $S_c$  mais est invariant par la symétrie  $S_x$  tandis que celui produisant  $L_0^+$ brise  $S_x$  tout en préservant  $S_c$ . Ces branches produisent un snaking entre  $Ra \approx 1360$ and  $Ra \approx 1380$  de manière analogue aux branches secondaires de la partie 5.1. La figure 5.14 montre la solution au point de bifurcation le long de  $L_0$  ainsi que les solutions aux noeuds-cols successifs des branches  $L_0^-$  et  $L_0^+$ . Comme cette instabilité prend place le long de la partie sous-critique de  $L_0$ , la solution le long des branches secondaires a initialement la forme d'un rouleau de convection de faible amplitude fortement localisé au centre de la cavité (l'écoulement étant ascendant au voisinage de y = 1 et descendant au voisinage de y = 0). A mesure que le nombre de Rayleigh Ra augmente, le rouleau se divise. Le long de  $L_0^-$ , la région de fluide ascendant se divise en deux régions de fluide ascendant séparées par une zone où le fluide est faiblement ascendant alors que la région de fluide descendant reste sensiblement identique. Il se forme ainsi deux rouleaux inclinés par rapport à l'axe vertical, comme représenté par le deuxième snapshot de la figure 5.14.a montrant la solution au premier noeud-col. Par la suite, la structure va nucléer un rouleau de part et d'autre en alternant l'inclinaison à chaque succession de paires de noeud-col en Ra jusqu'au remplissage du domaine. Chaque solution le long de  $L_0^-$  est composée d'un nombre pair de rouleaux de convection. La seconde instabilité secondaire, produisant  $L_0^+$ , amène le même type de structures, excepté qu'elles sont formées d'un nombre impair de rouleaux (figure 5.14.b). Une fois la cavité remplie (par 18 rouleaux pour  $L^-_0$  et 17 pour  $L_0^+$ ) les deux branches quittent la région de snaking et continuent vers les grands Ra. Elles forment alors une structure quasiment périodique dans la direction x moyennant des défauts au voisinage des parois x = 0, L.



FIGURE 5.13 – (a) : Diagramme de bifurcation représentant les variations de l'énergie cinétique E en fonction du nombre de Rayleigh Ra. Sont représentées en traits discontinus la branche  $L_0$  pour une cavité de rapport d'aspect L dans la direction x et en traits continus les branches  $P_0^x$  et  $L_0^x$  pour une couche infinie L-périodique dans la direction x. La branche  $P_0^x$  bifurque de la solution conductive (E = 0) et est formée de solutions invariantes dans la direction x. La branche  $L_0^x$  bifurque de  $P_0^x$  et est associée aux mêmes types de solutions localisées que  $L_0$ . La branche  $L_0^x$  se reconnecte après le protosnaking sur la branche  $P_0^x$  au voisinage proche du noeudcol. (b) Représentation des solutions avec de bas en haut : le long de  $P_0^x$  à Ra = 1485(partie sous-critique basse de  $P_0^x$ ), le long de  $P_0^x$  à Ra = 1462 (après le noeud col) et le long de  $L_0^x$  à Ra = 685. Les sections de gauche représentent les isovaleurs de la vitesse verticale dans le plan x = L/2, et les snapshots de droite, les isosurfaces associées à deux valeurs opposées de la vitesse v (les valeurs positives sont en foncé et les négatives en clair).

• <b>60 60 60 60 60 60 6</b> 0 <b>6</b> 0 <b>6</b> 0 <b>6</b> 0 <b></b>	
	•••••••••••••••••••••••••••••••••••••••
6000000	
	• • •
x	
a)	b)

FIGURE 5.14 – Snapshots des états localisés de (a)  $L_0^-$  et (b)  $L_0^+$ . De bas en haut : solution au point de bifurcation avec  $L_0$ , solutions à chaque noeud-col et solution après le snaking à  $Ra \approx 1380$ . L'écoulement est représenté par 2 valeurs de la vitesse verticale  $w = \pm W'$  (en noir la valeur positive et en gris la valeur négative).

# 5.3 Publication

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude des solutions stationnaires spatialement localisées issues dans une cavité (domaine fermé). L'article que nous présentons est une version provisoire en cours de soumission au journal *Physics of Fluids*. En plus des résultats que nous avons introduits, il présente également une discussion sur la stabilité des solutions appuyée par des simulations numériques directes. Un autre article, en cours d'écriture quant à lui, traite de la configuration horizontale et n'est pas présenté ici.

# Three-dimensional instability and secondary snaking in natural doubly diffusive convection

Cédric Beaume<sup>\*</sup> and Alain Bergeon<sup>†</sup>

Université de Toulouse; INPT; UPS; IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse); Allée Camille Soula, F-31400 Toulouse, France CNRS; IMFT; F-31400 Toulouse, France

Edgar Knobloch<sup>‡</sup>

Department of Physics, University of California, Berkeley CA 94720, USA (Dated: October 6, 2012)

Natural doubly diffusive convection in a three-dimensional vertical enclosure with square cross-section in the horizontal is studied. Convection is driven by imposed temperature and concentration differences between two opposite vertical walls. These are chosen such that a pure conduction state exists. No-flux boundary conditions are imposed on the remaining four walls, with no-slip boundary conditions on all six walls. Numerical continuation is used to compute branches of spatially localized convection. Such states are referred to as convectons. Two branches of three-dimensional convectons with full symmetry bifurcate simultaneously from the conduction state and undergo homoclinic snaking. Secondary bifurcations on the primary snaking branches generate secondary snaking branches of convectons with reduced symmetry. The results are complemented with direct numerical simulations of the three-dimensional equations.

<sup>\*</sup> cedric.beaume@imft.fr

<sup>&</sup>lt;sup>†</sup> alain.bergeon@imft.fr

 $<sup>^{\</sup>ddagger}$  knobloch@berkeley.edu

#### I. INTRODUCTION

Doubly diffusive convection arises when two different fields diffuse at different rates. In the classic configuration a horizontal layer containing a two-component fluid is heated from below and cooled from above. Different concentrations of the heavier component may be imposed at the boundaries or maintained by the Soret effect in response to the imposed temperature difference. Since heat diffuses more rapidly than concentration diffusion-driven instabilities may occur in configurations which would otherwise be stable. Systems of this type are known to exhibit a wealth of behavior ranging from stationary and time-periodic patterns to chaotic solutions.<sup>1–5</sup> The case in which the concentration is destabilizing while the temperature field is stabilizing gives rise to the salt finger instability that is of considerable interest in oceanography,<sup>6–9</sup> geophysics<sup>10</sup> and in the form of the Goldreich-Schubert-Fricke instability in astrophysics as well.<sup>11</sup> The opposite case, with destabilizing temperature and stabilizing concentration, also arises in oceanography and typically generates oscillations.<sup>1,3</sup>

In the above configurations the driving gradients are parallel to the buoyancy force. In many situations of geophysical and astrophysical interest these gradients are not aligned, however, and the case in which the gradients are orthogonal is often considered as representative.<sup>12–14</sup> The resulting configuration arises not only in oceanography<sup>9</sup> but also in a variety of solidification processes<sup>15</sup> and is referred to as natural doubly diffusive convection.

In doubly diffusive convection, the relative influence of the imposed temperature and concentration gradients is quantified via the buoyancy ratio  $N = \rho_C \Delta C / \rho_T \Delta T$ , where  $\rho$  is the fluid density,  $\rho_T \equiv \partial \rho / \partial T < 0$ ,  $\rho_C \equiv \partial \rho / \partial C > 0$ , and  $\Delta T > 0$ ,  $\Delta C > 0$  are, respectively, the differences in the temperature and the concentration between a pair of opposite walls, both maintained at fixed temperature and concentration. Thus N > 0 implies that both contributions to the buoyancy force cooperate, while N < 0 indicates competing contributions. The latter case generally produces richer dynamics and is the case of interest here.

The present study is motivated by the recent discovery of convectors, i.e., spatially isolated convection rolls, in two-dimensional (2D) spatially extended natural doubly diffusive convection.<sup>16,17</sup> We extend here this work to three-dimensional (3D) enclosures in order to study the effect of the third dimension on the form and stability of the existing solutions, and to identify new types of localized fully three-dimensional patterns. Our work builds on earlier work on 3D states in small enclosures<sup>18</sup> as explained further below. Throughout the paper we find it useful to compare our results with those obtained for the much simpler Swift-Hohenberg equation. This nonlinear equation is of fourth-order in one spatial variable, and exhibits in appropriate situations bistability between a spatially periodic state and the trivial state. This bistability region in turn contains a "pinning" region with coexisting spatially localized states of different spatial extent, as well as bound states of such localized states. The term 'localized' is used here to describe solutions consisting in a few oscillations, typically located in the center of the domain, that are embedded in a spatially uniform background, much as convectons consist of localized convection rolls embedded in a background conduction state. The localized states in the pinning region are organized in a snakes-and-ladders structure comprising a pair of intertwined branches of symmetric states connected by "rungs" consisting of asymmetric states, as described by Burke and Knobloch<sup>19–21</sup> and Beck *et al.*<sup>22</sup> Localized solutions have also been found in buckling of slender structures where the prefered buckling mode may be localized in space,<sup>23</sup> in a variety of systems arising in nonlinear optics,<sup>24</sup> as well as in magnetoconvection<sup>25,26</sup> and shear flow.<sup>27</sup> Remarkably, many of these systems share the same mathematical characteristics as the Swift–Hohenberg equation. This is so for doubly diffusive convection as well.<sup>5,17,28,29</sup>

Following the approach in Ref.<sup>18</sup>, we study the case N = -1, which admits a trivial conduction state as well as the subcritical bifurcation to periodic states required for the presence of bistability. With the realistic closed container boundary conditions used here this picture is necessarily modified<sup>30</sup> since periodic states are no longer present. To determine the resulting bifurcation diagram in three spatial dimensions we compute stationary solutions of the equations via a continuation algorithm based on a Newton solver for the time-independent version of the equations of motion with the same boundary conditions, as first described by Tuckerman,<sup>31</sup> and Mamun and Tuckerman.<sup>32</sup> The equations are solved using the first-order scheme proposed by Karniadakis *et al.*<sup>33</sup> based on a spectral element spatial discretization. Further details of the numerical method can be found in Ref.<sup>18</sup>

In the following section we formulate the problem and in section III we describe our continuation results. Section IV describes the results of direct numerical simulations of the governing equations and compares them with the continuation results. Brief conclusions follow in section V.

#### **II. MATHEMATICAL FORMULATION**

We consider a two-component fluid in competing horizontal gradients of temperature and concentration. These gradients are imposed via Dirichlet-type boundary conditions applied on vertical walls at z = 0, l: the left wall (z = 0) is maintained at fixed temperature  $T^* = T_r$ and concentration  $C^* = C_r$  while the right wall (z = l) is maintained at temperature  $T^* =$  $T_r + \Delta T$  and concentration  $C^* = C_r + \Delta C$ , with  $\Delta T > 0, \Delta C > 0$ . We nondimensionalize the equations using l for lengths,  $\Delta T$  for the temperature,  $\Delta C$  for the concentration and  $l^2/\kappa$  for time, where  $\kappa$  is the thermal diffusivity. We do not take into account cross-diffusion effects and use the Boussinesq approximation to expand the fluid density about the reference values  $T_r$  and  $C_r$ ,

$$\rho(T^*, C^*) = \rho_0 + \rho_T(T^* - T_r) + \rho_C(C^* - C_r), \qquad (1)$$

where  $T^*$  and  $C^*$  are, respectively, the dimensional temperature and concentration of the heavier fluid component,  $\rho_0$  is the fluid density at the reference temperature  $T_r$  and concentration  $C_r$ , and  $\rho_T < 0$  and  $\rho_C > 0$  denote the thermal and solutal "expansion" coefficients, also at  $T_r$  and  $C_r$ . The mathematical model consists of the incompressible Navier–Stokes equation coupled to equations for the temperature and concentration. The nondimensionalized equations read

$$Pr^{-1}[\partial_t \mathbf{u} + (\mathbf{u} \cdot \nabla)\mathbf{u}] = -\nabla p + Ra(T - C)\hat{\mathbf{x}} + \nabla^2 \mathbf{u},$$
(2)

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \tag{3}$$

$$\partial_t T + (\mathbf{u} \cdot \nabla) T = \nabla^2 T, \tag{4}$$

$$\partial_t C + (\mathbf{u} \cdot \nabla) C = \tau \nabla^2 C, \tag{5}$$

where  $\mathbf{u} \equiv (u, v, w)$  is the velocity field, p is the pressure and we have written  $T = (T^* - T_r)/\Delta T$ ,  $C = (C^* - C_r)/\Delta C$ . The symbol  $\hat{\mathbf{x}}$  denotes the unit vector in the vertical direction. Three parameters have been defined: the Rayleigh number  $Ra = g|\rho_T|\Delta T l^3/\nu\kappa$ , the Prandtl number  $Pr = \nu/\kappa$ , and the (inverse) Lewis number  $\tau = D/\kappa$ . Here g is the gravitational acceleration while  $\nu$  is the kinematic viscosity and D is the solutal diffusivity.

In this section we consider the vertically extended enclosure sketched in fig. 1. The



FIG. 1. Sketch of the vertically extended enclosure. The boundary conditions are no-slip for the velocity everywhere, no-flux for the temperature and concentration on all walls except for T = C = 0 at z = 0 (section represented in light gray) and T = C = 1 at z = 1 (section represented in dark gray).

enclosure is taken to be a closed container with square cross-section in the horizontal, and no-slip boundary conditions on the velocity are imposed on all six walls. The z = 0 wall is maintained at lower temperature and concentration T = C = 0 while the z = 1 wall is maintained at the higher values T = C = 1. These boundary conditions are responsible for setting up the gradients of temperature and concentration that drive the fluid motion. Boundary conditions on the temperature and concentration in the x and y directions are taken to be of no-flux type.

The system (2)–(5) admits the trivial solution  $\mathbf{u} = 0$ , T = C = z, hereafter the conduction state. The equations for the perturbations  $\mathbf{u}$ ,  $\Theta \equiv T - z$  and  $\Sigma \equiv C - z$  of this state are equivariant with respect to the following two symmetries:

$$S_y: (x, y, z) \to (x, 1 - y, z), \quad (u, v, w, \Theta, \Sigma) \to (u, -v, w, \Theta, \Sigma), \tag{6}$$

$$S_{\Delta}: (x, y, z) \to (L - x, y, 1 - z), (u, v, w, \Theta, \Sigma) \to -(u, -v, w, \Theta, \Sigma), \tag{7}$$

where L is the dimensionless aspect ratio of the container. As a result, the equations for the perturbations  $(\mathbf{u}, \Theta, \Sigma)$  possess  $D_2$  symmetry, where  $D_2 = \{1, S_y, S_{\Delta}, S_c\}$ . Here  $S_c = S_y \circ S_{\Delta} = S_{\Delta} \circ S_y$  represents center symmetry, i.e., reflection with respect to the center of the enclosure. The conduction state has the full symmetry  $D_2$ . Instabilities of this state may either respect this symmetry or break it. One finds that there are two types of primary instabilities, those that respect  $D_2$  and those that break the symmetry  $S_{\Delta}$  of the conduction state. The former bifurcate from the conduction state in a transcritical bifurcation, while the latter bifurcate in a pitchfork bifurcation. The neutral curves corresponding to these instabilities are intertwined as a function of the aspect ratio L. As a result for certain intervals of L the transcritical bifurcation.<sup>18</sup> Instabilities breaking the symmetry  $S_y$ occur at much larger Rayleigh numbers and are not of interest in the present work.

#### III. RESULTS

In the following, we present results obtained for the physical parameters used by Bergeon and Knobloch:<sup>18</sup> Pr = 1 and  $\tau = 1/11$ , but choose the aspect ratio L such that the enclosure contains 8 critical wavelengths of the 2D linear problem, L = 19.8536, see Xin *et al.*<sup>14</sup> We use the Rayleigh number Ra as a continuation parameter. All solutions have been computed with a spatial discretization that uses 16 spectral elements with  $21 \times 19 \times 19$  points each.

#### A. Primary snaking

The conduction state remains stable until Ra reaches the value  $Ra_p \approx 850.78$  at which a steady-state pitchfork bifurcation takes place. The marginal mode  $\tilde{f}_p \equiv (\tilde{u}_p, \tilde{v}_p, \tilde{w}_p, \tilde{T}_p, \tilde{C}_p)$ related to this bifurcation is shown in fig. 2(a). The eigenfunction satisfies  $S_y f_p = f_p$ ,  $S_{\Delta}\tilde{f}_p = -\tilde{f}_p$ . Because of this symmetry the two branches of the pitchfork are related by symmetry and hence appear as a single branch in the bifurcation diagram (not shown). As suggested by linear stability theory and confirmed by Bergeon and Knobloch,<sup>18</sup> the extent of this branch is very narrow and the branch terminates almost immediately on a subcritical branch of  $D_2$  symmetric states emanating from the next primary bifurcation, a transcritical bifurcation. Moreover, as the aspect ratio changes the bifurcations remain close although their order may change.<sup>34</sup> The transcritical bifurcation takes place at  $Ra = Ra_t \approx 850.86$ . The mode responsible for this instability,  $\tilde{f}_t \equiv (\tilde{u}_t, \tilde{v}_t, \tilde{w}_t, \tilde{T}_t, \tilde{C}_t)$ , is represented in fig. 2(b) and satisfies  $S_y \tilde{f}_t = \tilde{f}_t$ ,  $S_{\triangle} \tilde{f}_t = \tilde{f}_t$ , i.e., the instability at  $Ra_t$  does not break the symmetry of the conduction state. The resulting bifurcation must therefore be transcritical<sup>18</sup> although here it is only very weakly so because of the large aspect ratio of the domain. Consequently the supercritical branch turns towards smaller values of Ra almost immediately and the bifurcation at  $Ra_t$  looks like a pitchfork bifurcation. However, at larger amplitude the two branches  $L^{\pm}$  that result are manifestly unrelated by symmetry (fig. 2).



FIG. 2. Representation of the eigenmodes responsible for the first two instabilities. (a) Marginal eigenmode  $\tilde{f}_p$  at the pitchfork bifurcation represented by isosurfaces  $w = \pm W$  with W chosen appropriately (light indicates w = W > 0 while dark indicates w = -W < 0) and by the isovalues of the streamfunction in the plane y = 1/2 (light indicates clockwise motion while dark indicates counterclockwise motion). (b1) Similar representation of the marginal eigenmode  $\tilde{f}_t$  at the transcritical bifurcation. The last two panels show the evolution of the corresponding nonlinear solution along the branch  $L^+$  using isovalues of the streamfunction in the plane y = 1/2 at  $Ra \approx 810$  and  $Ra \approx 740$ . (b2) As in (b1) but showing the branch  $L^-$  corresponding to the eigenfunction  $-\tilde{f}_p$ .

As one follows the branches  $L^{\pm}$  to larger amplitude the solution changes rapidly from counter-rotating rolls<sup>35,36</sup> that vanish at the boundaries of the domain to one favoring rolls with upward flow near the hotter wall, i.e., a solution consisting of corotating rolls. This nonlinear effect, described by Thangam *et al.*,<sup>37</sup> is a consequence of the fact that heat diffuses faster than concentration. In addition, the presence of the lower and upper walls weakens the flow near these boundaries resulting finally in a modulated array of corotating rolls. The amplitude of this modulation increases rapidly with the roll strength as measured by the (total) kinetic energy *E* resulting in strongly spatially localized structures. Of these,  $L^+$ consists of a single roll at the center of the enclosure while  $L^-$  consists of a pair of corotating rolls, also at the center of the enclosure (figs. 2(b1) and (b2)). Observe that in contrast to the situation with periodic boundary conditions in the vertical direction the branches of localized states are no longer secondary branches that bifurcate from a branch of periodic states<sup>30,38</sup> but are now *primary* branches that connect directly to the primary bifurcation. This is a consequence of the boundary layers at the top and bottom of the enclosure.

Figure 3 shows the subsequent evolution of the  $L^{\pm}$  branches. The localized states shown

in figs. 2(b1) and (b2) correspond to solutions on the lowest part of each branch and reveal increasing localization with increasing amplitude (decreasing Rayleigh number); with further increase in amplitude as measured by the kinetic energy E both branches undergo snaking, but the details are quite different. Figure 3(a) shows that the  $L^+$  branch executes three back and forth oscillations in a well-defined interval of Rayleigh numbers, 703 < Ra < 807, before reaching larger Ra values. As shown in fig. 4(a) the oscillations are a consequence of the growth of the localized structure: near each left saddle-node the structure nucleates a pair of corotating rolls, one roll on either side of the existing structure, and these rolls then strengthen as Ra increases. At the same time their wavelength increases substantially. Once the structure fills the enclosure the back and forth oscillations of the branch cease and the branch continues to larger values of Ra, instead of terminating in a secondary bifurcation on a branch of periodic states as in the case with periodic boundary conditions.<sup>17,39</sup> The localized states along the large Ra part of the branch resemble a periodic structure with defects due to the top and bottom boundaries, and play the role of the large amplitude periodic states present with periodic boundary conditions. Overall the  $L^+$  branch behaves much like the corresponding branch in binary fluid convection in a closed horizontal container.<sup>30,40</sup>



FIG. 3. Bifurcation diagrams representing the kinetic energy E as a function of the Rayleigh number Ra along the (a)  $L^+$  branch and (b)  $L^-$  branch. The solutions at each saddle-node are represented in figs. 4(a,b). The  $L^+$  branch consists of solutions with an odd number of convection rolls. The oscillations in the branch are associated with nucleation of new rolls at either side of the structure (left edge of the snaking region) and their growth towards full amplitude (right edge). The repeated nucleation of rolls ends when five rolls are present and the container is full after which the energy E increases monotonically with Ra. The  $L^-$  branch consists of solutions with an even number of rolls but instead of increasing monotonically after the container is full the  $L^$ branch turns back towards smaller energies and the solution splits into a two-pulse state with a defect in the center of the domain before leaving the snaking region.

The behavior of the  $L^-$  branch initially follows that of the  $L^+$  branch (fig. 3(b)) but once the enclosure is filled with six large rolls (snapshot 6 in fig. 4(b)) the branch instead turns back towards smaller Ra and the rolls begin to weaken again. Near  $Ra \sim 745$  the branch passes through a pair of nearby folds (omitted from fig. 4) near which the solution begins to



8



FIG. 4. Solutions at successive saddle-nodes in the bifurcation diagrams in fig. 3. (a)  $L^+$  branch, (b)  $L^-$  branch. The solutions are ordered from left to right in terms of increasing distance from the primary bifurcation at  $Ra_t \approx 850.86$ . The solutions are shown in terms of surfaces of constant vertical velocity,  $u = \pm U$ , with U chosen appropriately (light indicates u = -U < 0 while dark indicates u = U > 0). The last snapshot in (a) is taken at  $Ra \approx 841$  and that in (b) at  $Ra \approx 840$ . In each roll the flow is upwards near the z = 1 wall and downwards near z = 0.

split into a pair of three-roll states separated by a conduction region, i.e., into a two-pulse state.<sup>5,26</sup> Snapshot 7 in fig. 4(b) shows the solution that results at the next left-most saddle-node. Beyond this fold the solution strengthens monotonically with increasing Ra, with the outer pair of cells in each pulse growing at the expense of the cells nearest the center (snapshot 8 in fig. 4(b),  $Ra \approx 840$ ); with further increase in Ra these two inner cells vanish leaving a pair of two-cell states. This transition is not associated with additional folds and the two-pulse branch exits the snaking region in a monotonic fashion.

The behavior just described bears some similarity with that observed in the Swift-Hohenberg equation with a quadratic-cubic nonlinearity when this equation is posed on a finite interval with Robin boundary conditions at either end. When these boundary conditions are chosen to respect the reflection symmetry  $x \to -x$  of the equation one finds that the standard snakes-and-ladders structure of the pinning region breaks up<sup>38</sup> in a way that is similar to that observed in the present 3D hydrodynamics problem. Specifically, fig. 7 of Ref.<sup>38</sup> shows a weakly transcritical bifurcation that also looks like a pitchfork on a slighly larger scale just as in the present system. The bifurcation produces a branch labeled S<sub>6,0</sub> containing six basic wavelengths that bifurcates subcritically and plays the role of  $L^+$ . Indeed, fig. 6 of Ref.<sup>38</sup> shows that this branch behaves at large amplitude in an identical manner to that shown in fig. 3(a). In particular, the localized states bifurcate directly from the trivial state and transition smoothly and continuously into large amplitude defect states, exactly as here. In addition, figs. 7 and 9 of Ref.<sup>38</sup> show that the supercritical branch labeled S<sub>6, $\pi$ </sub> becomes subcritical almost immediately and thereafter behaves much like the  $L^$ branch in the present work. In particular, the branch S<sub>6, $\pi$ </sub> also starts to snake back towards small amplitude and exhibits a pair of nearby folds (figs. 9 and 13 of Ref.<sup>38</sup>) responsible for a transition from a single pulse localized state to a two-pulse state. The one qualitative difference between the Swift-Hohenberg equation and the present system lies in the ultimate fate of the two-pulse state. In the Swift-Hohenberg equation this state reconnects with the trivial state in a subsequent primary bifurcation. In the present system the two-pulse does not reconnect to the conduction state and instead exits the snaking region as shown in fig. 3(b). We conjecture that, just as in the Swift-Hohenberg equation, the continuous transition from a one-pulse solution to a two-pulse solution is a consequence of the no-slip boundary conditions at x = 0, L.

#### B. Secondary snaking

The solutions described in the previous section are 3D analogues of the 2D localized states studied by Bergeon and Knobloch<sup>17</sup> in periodic domains with a large spatial period in the xdirection. However, the presence of the third direction allows new types of behavior to take place, as well as changing the stability characteristics of the 2D solutions.

The most prominent and the most interesting consequence of the third dimension is the presence of secondary snaking. Secondary snaking arises from secondary bifurcations on the  $L^{\pm}$  branches that break the  $D_2$  symmetry of the localized states computed in the preceding section. These bifurcations always break the  $S_y$  symmetry and either  $S_c$  or  $S_{\Delta}$  while respecting the remaining reflection symmetry. The presence of secondary symmetry-breaking bifurcations was noted already in earlier work on smaller enclosures<sup>18</sup> and their presence in the larger enclosure studied here is therefore not unexpected. Since such instabilities afflict each roll they are inherited by all localized states, regardless of their length. Consequently symmetry-breaking secondary bifurcations are expected to occur on every back and forth segment of the snaking branch. Figure 5 shows the eigenmodes responsible for these bifurcations.

Figure 6 shows the secondary branches we have computed. The branch  $L_1^+$  in fig. 6(a) is the result of a secondary instability with the eigenfunction shown in fig. 5(a). This instability breaks the  $S_y$  and  $S_{\Delta}$  symmetries of the  $L^+$  branch and produces solutions with  $S_c$  symmetry. Likewise, instability with the eigenfunction in fig. 5(b) breaks the symmetries  $S_y$  and  $S_c$  of the primary branch  $L^-$  and generates the secondary branch  $L_1^-$  of solutions with symmetry  $S_{\Delta}$  (fig. 6(b)). Subsequent secondary bifurcations (fig. 5(c,d)) on the branch  $L_1^+$  lead to the branches  $L_{2\Delta}^+$  and  $L_{2c}^+$  of  $S_{\Delta}$ -symmetric and  $S_c$ -symmetric solutions, respectively, and similarly for the  $L_1^-$  branch (fig. 6(b)). We also see that all secondary snaking branches bifurcate supercritically from the  $L^{\pm}$  branches and that a secondary snake is present on every back-and-forth segment of  $L^{\pm}$ . The snakes originate from the lower part of each such segment, as expected from the location of the corresponding bifurcation in small enclosures.<sup>18</sup> Figures 7 and 8 show snapshots of the resulting solutions at successive saddle-nodes along each of the six secondary branches shown in fig. 6.

The first secondary bifurcation on  $L^+$  is present at  $Ra \approx 751.35$ , before the branch passes the first saddle-node. This supercritical bifurcation generates the branch labeled  $L_1^+$ which evolves into secondary snaking within the interval 745 < Ra < 819. At the secondary



FIG. 5. Representation of the marginal eigenmode generating the branches (a)  $L_1^+$  ( $S_c$ -symmetric), (b)  $L_1^-$  ( $S_{\Delta}$ -symmetric), (c)  $L_{2\Delta}^+$  ( $S_{\Delta}$ -symmetric) and (d)  $L_{2c}^+$  ( $S_c$ -symmetric) using a pair of equal and opposite isovalues of the vertical velocity (left panels) and of the z component of the vorticity (right panels). To reveal the twisting nature of the eigenmodes, the coordinate axes have been rotated with respect to earlier figures.

bifurcation point, the solution consists of one small convection roll in the center of the domain (with a pair of weak rolls on either side) but since the branch bifurcates supercritically the resulting increase in Ra strengthens and enlarges this central roll. At the same time the roll twists around the vertical axis breaking both  $S_y$  and  $S_c$  symmetries but preserving the  $S_{\Delta}$ symmetry (fig. 7(a)). After the first saddle-node at  $Ra \approx 819$ , the branch  $L_1^+$  turns towards lower Rayleigh numbers and the solution nucleates two new rolls, one on either side of the existing roll. During the nucleation, the size and twist of the rolls decreases down to the left saddle-node but once the branch turns back towards higher Rayleigh numbers the roll size increases again while the rolls twist alternately in opposite directions. This type of snaking continues until the solution consists of seven rolls (fig. 7(a)), where the branch transitions towards large amplitude defect-like states, just like  $L^+$ . In fact, there are two such secondary snaking branches, with solutions of opposite twist. This sequence is repeated on the next subcritical segment, where two branches originates at  $Ra \approx 742$  and are called  $L_{2\Delta}^+$  and  $L_{2c}^+$ . This time, however, the central roll is larger than the rolls on either side (figs. 7(c,d)). This is a consequence of the fact that the secondary branch bifurcates from a state consisting of a


FIG. 6. Secondary snaking on the primary branches of localized states in terms of the kinetic energy E as a function of the Rayleigh number Ra. (a)  $L^+$ , (b)  $L^-$ . Secondary bifurcations occur on the subcritical parts of the primary branches and lead to the formation of localized twisted solutions represented by the secondary branches  $L_1^+$ ,  $L_{2\Delta}^+$ ,  $L_{2c}^-$ ,  $L_1^-$ ,  $L_{2\Delta}^-$  and  $L_{2c}^-$ . Snapshots of these solutions are available in fig. 7 and 8.

single roll that is in the process of nucleating side rolls. Consequently, all states on the  $L_{2\Delta}^+$ and the  $L_{2c}^+$  branches have a dominant central roll, followed by smaller rolls on either side as the structure nucleates additional rolls to fill the enclosure. During the snaking process, the large central roll remains untwisted but its size varies as expected: the roll is larger at the right saddle-nodes and smaller at the left saddle-nodes. However, the nucleated rolls at each back and forth oscillation twist and untwist in the same way as those on the  $L_1^+$ branch. The  $L_{2\Delta}^+$  and the  $L_{2c}^+$  branches exit the snaking region once the solution consists of one large untwisted roll and six smaller twisted rolls.

We also computed the first secondary bifurcation on the other primary branch of localized states,  $L^-$ . This bifurcation takes place at  $Ra \approx 744$  and generates a secondary snaking branch referred to as  $L_1^-$ . This branch also bifurcates supercritically before undergoing a series of saddle-node bifurcations in the same Rayleigh number interval as  $L_1^+$ ,  $L_{2\Delta}^+$  and  $L_{2c}^+$ . This time, however, the localized structures contain an even number of rolls, starting with two rolls and exiting the snaking region when the structure consists of six rolls, but the same alternate twisting takes place along the structure (fig. 7(b)) as takes place along the  $L_1^+$  branch. Additional secondary branches bifurcating from  $L^-$  have also been computed:  $L_{2\Delta}^-$  and  $L_{2c}^-$ . These solutions possess two large untwisted rolls in the center of the domain instead of one but otherwise behave like the  $L_{2\Delta}^+$  and  $L_{2c}^+$  states described above (fig. 8).

It is possible to understand the dominant features of both the bifurcation diagrams and of the associated solution snapshots. The key is provided by the eigenmodes shown in fig. 5. Figure 5(a) shows that the instability to  $L_1^+$  is associated with the loss of the symmetries  $S_y$  and  $S_{\triangle}$ . The remaining panels in the figure reveal that the secondary instabilities to  $L_1^-$ ,  $L_{2\triangle}^+$  and  $L_{2c}^+$  take a similar form but that the instability is always confined to the two outermost rolls of the localized structure. The secondary instability therefore preserves the



FIG. 7. Snapshots of the secondary branches of solutions shown in fig. 6. The snapshots are taken at each saddle-node, beginning at the bifurcation point and ending at a point on the right of the bifurcation diagram. The same representation as in fig. 4 is employed. (a) Solutions on the  $L_1^+$ branch ( $S_c$  symmetric, last snapshot at  $Ra \approx 837$ ). (b) Solutions on the  $L_1^-$  branch ( $S_{\Delta}$  symmetric, last snapshot at  $Ra \approx 845$ ). (c) Solutions on the  $L_{2\Delta}^+$  branch ( $S_{\Delta}$  symmetric, last snapshot at  $Ra \approx 862$ ). (d) Solutions on the  $L_{2c}^+$  branch ( $S_c$  symmetric, last snapshot at  $Ra \approx 864$ ).

 $D_2$ -symmetric middle segment on the  $L^{\pm}$  branches, and only twists the outermost rolls. As one proceeds up the  $L^{\pm}$  branches the instabilities associated with the outermost cells become more and more independent, and we can write the critical eigenmode in the form  $\mathcal{U}(x + \ell/2) \pm \mathcal{U}(x - \ell/2)$ , where  $\mathcal{U}(x)$  is strongly peaked at x = 0 and  $\ell$  is the length of the



FIG. 8. As in fig. 7 but for  $L_{2\Delta}^-$  (a) and  $L_{2c}^-$  (b). Last snapshots are taken at  $Ra \approx 836$  and  $Ra \approx 832$ , respectively.

 $D_2$ -symmetric convecton. The localization of the instability at  $x = \pm \ell/2$  implies that the instabilities at opposite ends of the structure decouple to within exponentially small terms of order  $\exp(-|\ell - 2x|/2\lambda)$ , where  $\lambda$  is a constant of order the roll wavelength, cf. Ref.<sup>41</sup> It follows that the bifurcation to  $L_{2\Delta}^+$  and  $L_{2c}^+$  will occur at essentially the same Ra despite the different symmetries of these states. Indeed, our numerical simulations are unable to detect the exponentially small splitting of these bifurcations expected from the form of the associated eigenfunctions (fig. 6). In addition, because the twisted state grows from the outermost rolls the energies of the  $L_{2\Delta}^+$  and  $L_{2c}^+$  states are expected to be identical, again to within exponentially small terms, explaining why our computations do not detect a difference in energy between these two states (fig. 6), despite the fact that they are not symmetry-related. In addition, we expect the secondary instabilities of  $L^{\pm}$  to occur at essentially identical values of Ra, a consequence of the fact that the unstable mode is insensitive to the length of the structure. This fact is also borne out in fig. 6. Moreover, only  $L_1^+$  and  $L_1^-$  occur singly, a consequence of the fundamental difference in the eigenmodes in figs. 5(a,b).

The snapshots in fig. 7 allow us to make further predictions about the behavior of the associated solution branches. Figures 7(a,d) share the same symmetries but differ only in the presence of the central roll which is substantially larger and stronger in the  $L_{2c}^+$  solution than in the  $L_1^+$  solution. The remaining rolls evolve in a very similar way along both branches (once the roll numbers are equal), while the central roll does not change. We expect therefore the two branches to look very similar in the bifurcation diagram, with the  $L_{2c}^+$  displaced vertically by a fixed amount. This prediction works well at the left boundary of the snaking region, but less well at the right boundary. This is a consequence of the

larger size of the central roll along  $L_{2c}^+$  at this boundary; this increase in size implies that the outermost rolls are pushed closer to the no-slip endwalls at x = 0, L. Such rolls are therefore weaker and the Rayleigh number has therefore to be increased above and beyond that required to generate similar behavior in  $L_1^+$ , again in excellent qualitative agreement with figs. 7(a,d). A similar discussion applies to the  $S_{\Delta}$  states shown in figs. 7(b,c) – these states only differ in the presence of the broad roll in the center of the localized structure in  $L_{2\Delta}^+$  and its absence in  $L_1^-$ . Similar arguments apply to the solutions along the  $L_{2\Delta}^-$  and  $L_{2c}^$ branches (figs. 8(a,b)).

#### IV. TIME-DEPENDENT DYNAMICS

In the classic snaking scenario, the solutions switch stability at successive saddle-nodes. However, the loss of stability of the primary quasi-two-dimensional structures with respect to fully three-dimensional disturbances creating the secondary snaking branches of twisted states implies that none of the primary states is likely to be stable. Moreover, the secondary branches bifurcate from unstable primary states and hence inherit their instability. As a result, no stable steady solutions have been found along either set of branches.

For this reason we present here the results of typical time evolution computations for Rayleigh numbers beyond the primary transcritical bifurcation. We use a second order version of the time-stepping scheme used in our continuation code, with a timestep of  $10^{-3}$  and confirm the results using a timestep of  $10^{-4}$ .



FIG. 9. (a) Time evolution at Ra = 900 of the maximum vertical velocity  $u^{max}$  from a small perturbation of the conduction state proportional to the eigenvector responsible from the transcritical bifurcation at Ra = 850.86. The dashed line shows the corresponding result with imposed  $S_y$  symmetry. (b) Solutions at several different times. (c) Solution at t = 150 and t = 250 from the DNS with imposed  $S_y$  symmetry. All snapshots show isovalues of u as in fig. 4.

The solution shown in figs. 9(a,b), computed at Ra = 900, was initialized using a perturbation of the conduction state equal to  $10^{-3}$  times the eigenvector associated with the transcritical bifurcation at  $Ra_t \approx 850.86$ . At this value of the Rayleigh number, the perturbation first creates a pair of rolls in the center of the container. As the amplitude of this roll pair grows, new rolls are added at either side, preserving the symmetries  $S_{\Delta}$ ,  $S_y$  and  $S_c$  of the solution. This nucleation and growth process continues until the solution fills the container with six rolls. However, the evolution does not stop. At t = 110, the 6-roll state is destabilized and the  $S_y$  and  $S_{\Delta}$  symmetries are broken. The instability destroys the central rolls and the penultimate rolls on either side begin to twist. At t = 130, the solution no longer possesses any symmetry and evolves into an apparently chaotic state consisting of roll-like structures on various scales that repeatedly appear, spread and twist in an irregular manner before fading away again (fig. 9(b)).

The loss of the  $S_y$  symmetry is crucial to the transition to the chaotic state. Figure 9(c) shows that when the  $S_y$  symmetry is imposed the 6-roll state is stabilized and the final state (depicted at t = 250) persists to the end of the simulation (dashed line in fig. 9(a)). This state forms when the nonuniform roll sizes depicted at t = 150 finally equalize. This readjustment is abrupt and takes place at  $t \approx 175$ . The resulting steady solution resembles the  $L^-$  state, and we conjecture that it lies on a disconnected part of the  $L^-$  branch as in Ref.<sup>29,38</sup> In contrast, if we instead impose one of the other reflection symmetries a chaotic final state remains. Simulations initiated by perturbing the conduction state with the eigenmode associated with the pitchfork bifurcation also result in a chaotic final state.

To examine the impact of the  $S_y$  symmetry, we also ran direct numerical simulations at Ra = 810 with and without imposing the  $S_y$  symmetry, in each case taking as initial condition a solution close to the second saddle-node along  $L^+$  ( $Ra \approx 804$ ). The results are reported in fig. 10. With no symmetry imposed the initial roll starts to twist, breaking the  $S_y$  symmetry before decaying and spawning two untwisted rolls at  $t \approx 40$ . Figure 10(a) provides details of this evolution. These untwisted rolls subsequently decay and the twisted central roll is regenerated albeit smaller in size and weaker. After a further bounce the solution decays to the conduction state which is stable for  $Ra \leq 850.78$ . It is significant that the solution to the right of the pinning region decays to the conduction state instead of evolving to a spatially extended state as occurs in systems with gradient structure.

In contrast, when the symmetry  $S_y$  is imposed the dynamics is much slower (dashed lines in fig. 10) with nucleation of new rolls taking place at  $t \approx 40$  and  $t \approx 105$  (fig. 10(a)). This time the final state that is reached is a steady solution with five rolls lying on the  $L^+$ branch. The imposed symmetry stabilizes this state against the growth of perturbations breaking the  $S_y$  symmetry. In this case the system behaves as expected of a gradient system to the right of the snaking region and the observed dynamics resemble those present in two dimensions.<sup>17</sup> Thus the three-dimensionality of the structures studied here has a profound effect on the dynamics of doubly diffusive convection in a vertical cavity.



FIG. 10. (a) Time evolution at Ra = 810 of the maximum vertical velocity  $u^{max}$  starting from a solution at  $Ra \approx 804$  close to the second saddle-node of  $L^+$ . The dashed line shows the corresponding result with imposed  $S_y$  symmetry. The lower panel shows the evolution of the asymmetry with respect to  $S_y$  using the  $L^2$  norm  $r_{S_y} \equiv ||\mathbf{f_y}||_2$ , where  $\mathbf{f_y} \equiv (u, v, w, T, C) - S_y(u, v, w, T, C)$ , measuring the difference between the solution and its image under  $S_y$ . When the symmetry  $S_y$  is not imposed the solution decays to the conduction state. This is not the case when  $S_y$  imposed. Panels (b) and (c) show snapshots of the solution in these two cases. All snapshots show isovalues of u as in fig. 4.

#### V. DISCUSSION

In this paper we have computed for the first time fully three-dimensional localized states in natural doubly diffusive convection in a vertically extended enclosure with square crosssection. Like the 3D localized states computed recently for plane Couette flow<sup>27</sup> our states are linearly unstable although we expect that they play a similar role in the transition to complex flow in this system. Indeed, the analog of the 3D instability studied here is responsible for the presence of complex time-dependence at onset even in small domains.<sup>18</sup> In the larger domains studied here the quasi 2D states computed in Ref.<sup>18</sup> correspond to spatially localized states but continue to bifurcate directly from the conduction state. We have seen that these states are organized into a pair of snaking branches consisting of states with odd and even numbers of cells, and rather remarkably these behave very much like the corresponding states in the much simpler 1D Swift-Hohenberg equation on a finite interval with Robin boundary conditions.

We have also identified secondary instabilities on the snaking branches, analogous to those identified in Ref.<sup>18</sup>, and showed that each of these leads to *secondary* snaking consisting of fully 3D spatially localized states. To our knowledge this type of behavior has not been seen elsewhere although the instability of target states in the 2D Swift-Hohenberg equation with respect to perturbations with  $D_6$  symmetry and its subsequent evolution into a snaking branch of time-independent localized hexagons bears some similarity to the present case.<sup>42</sup>

In future work we plan to examine the unbalanced case  $N \neq -1$ . Depending on the sign of N + 1 this case is accompanied by a nontrivial base state with upflow along the hot boundary and downflow along the cold boundary or vice versa.<sup>43,44</sup> We anticipate therefore that the localized structures we have computed may be advected by the base flow resulting in new types of time-dependent behavior.

#### ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by Action Thématique de l'Université Paul Sabatier (ATUPS) (CB), by CNES under GdR MFA 2799 "Micropesanteur Fondamentale et Appliquée" (CB & AB) and by the National Science Foundation under Grants DMS-0908102 and DMS-1211953 (EK). EK wishes to acknowledge support from Chaire Pierre de Fermat de la Région Midi-Pyrénées.

- E. Knobloch, D. R. Moore, J. Toomre, and N. O. Weiss, "Transitions to chaos in twodimensional double-diffusive convection", J. Fluid Mech. 166, 409–448 (1986).
- [2] W. Barten, M. Lücke, M. Kamps, and R. Schmitz, "Convection in binary fluid mixtures. II. Localized traveling waves", Phys. Rev. E 51, 5662–5680 (1995).
- [3] A. Spina, J. Toomre, and E. Knobloch, "Confined states in large-aspect-ratio thermosolutal convection", Phys. Rev. E 57, 524–545 (1998).
- [4] O. Batiste and E. Knobloch, "Simulations of oscillatory convection in <sup>3</sup>He-<sup>4</sup>He mixtures in moderate aspect ratio containers", Phys. Fluids 17, 064102 (2005).
- [5] C. Beaume, A. Bergeon, and E. Knobloch, "Homoclinic snaking of localized states in doubly diffusive convection", Phys. Fluids 23, 094102 (2011).
- [6] J. S. Turner, "The coupled turbulent transports of salt and heat across a sharp density interface", Int. J. Heat Mass Transfer 8, 759–760 (1965).
- [7] J. S. Turner, "Double diffusive phenomena", Annu. Rev. Fluid Mech. 6, 37–54 (1974).
- [8] J. S. Turner, "Multicomponent convection", Annu. Rev. Fluid Mech. 17, 11–44 (1985).
- [9] R. W. Schmitt, "Double diffusion in oceanography", Annu. Rev. Fluid Mech. 26, 255–285 (1994).
- [10] U. Hansen and D. A. Yuen, "Nonlinear physics of double-diffusive convection in geological systems", Earth Science Rev. 29, 385–399 (1990).

- [11] E. Knobloch, "Nonlinear diffusive instabilities in differentially rotating stars", Geophys. Astrophys. Fluid Dyn. 22, 133–158 (1982).
- [12] N. Tsitverblit and E. Kit, "The multiplicity of steady flows in confined double-diffusive convection with lateral heating", Phys. Fluids A 5, 1062–1064 (1993).
- [13] N. Tsitverblit, "Bifurcation phenomena in confined thermosolutal convection with lateral heating: Commencement of the double-diffusive region", Phys. Fluids 7, 718–736 (1995).
- [14] S. Xin, P. Le Quéré, and L. S. Tuckerman, "Bifurcation analysis of double-diffusive convection with opposing horizontal thermal and solutal gradients", Phys. Fluids 10, 850–858 (1998).
- [15] W. R. Wilcox, "Transport phenomena in crystal growth from solution", Prog. Cryst. Growth Charact. Mater. 26, 153–194 (1993).
- [16] K. Ghorayeb and A. Mojtabi, "Double diffusive convection in a vertical rectangular cavity", Phys. Fluids 9, 2339–2348 (1997).
- [17] A. Bergeon and E. Knobloch, "Spatially localized states in natural doubly diffusive convection", Phys. Fluids 20, 034102 (2008).
- [18] A. Bergeon and E. Knobloch, "Natural doubly diffusive convection in three-dimensional enclosures", Phys. Fluids 14, 92–98 (2002).
- [19] J. Burke and E. Knobloch, "Localized states in the generalized Swift-Hohenberg equation", Phys. Rev. E 73, 056211 (2006).
- [20] J. Burke and E. Knobloch, "Snakes and ladders: localized states in the Swift-Hohenberg equation", Phys. Lett. A 360, 681–688 (2007).
- [21] J. Burke and E. Knobloch, "Homoclinic snaking: structure and stability", Chaos 17, 1–15 (2007).
- [22] M. Beck, J. Knobloch, D. J. B. Lloyd, B. Sandstede, and T. Wagenknecht, "Snakes, ladders and isolas of localized patterns", SIAM J. Math. Anal. 41, 936–972 (2009).
- [23] G. W. Hunt, M. A. Peletier, A. R. Champneys, P. D. Woods, M. A. Wadee, C. J. Budd, and G. J. Lord, "Cellular buckling in long structures", Nonlinear Dynamics 21, 3–29 (2000).
- [24] D. V. Skryabin, "Instabilities of cavity solitons in optical parametric oscillators", Phys. Rev. E 60, 3508–3511 (1999).
- [25] S. Blanchflower, "Magnetohydrodynamic convectons", Phys. Lett. A 261, 74–81 (1999).
- [26] D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch, "Magnetohydrodynamic convectons", J. Fluid Mech. 687, 595–605 (2011).
- [27] T. M. Schneider, J. F. Gibson, and J. Burke, "Snakes and ladders: Localized solutions of plane Couette flow", Phys. Rev. Lett. 104, 104501 (2010).
- [28] D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch, "Spatially localized binary fluid convection in a porous medium", Phys. Fluids 22, 073601 (2010).
- [29] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch, "Convectons, anticonvectons and multiconvectons in binary fluid convection", J. Fluid Mech. 667, 586–606 (2011).
- [30] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch, "Localized pinning states in closed containers: Homoclinic snaking without bistability", Phys. Rev. E 80, 025201(R) (2009).
- [31] L. S. Tuckerman, "Steady-state solving via Stokes preconditioning: Recursion relations for elliptic operators", in 11th International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics, edited by D. Dwoyer, M. Hussaini, and R. Voigt, volume 323 of Lecture Notes in Physics, 573-

577 (Springer, Berlin) (1989).

- [32] C. K. Mamun and L. S. Tuckerman, "Asymmetry and Hopf bifurcation in spherical Couette flow", Phys. Fluids 7, 80–91 (1995).
- [33] G. E. Karniadakis, M. Israeli, and S. A. Orszag, "High-order splitting methods for the incompressible Navier–Stokes equations", J. Comp. Phys. 97, 414–443 (1991).
- [34] D. Henry and H. Ben Hadid, "Multiple flow transitions in a box heated from the side in low-Prandtl-number fluids", Phys. Rev. E 76, 016314 (2007).
- [35] R. C. Paliwal and C. F. Chen, "Double-diffusive instability in an inclined fluid layer. Part 1. Experimental investigation", J. Fluid Mech. 98, 755–768 (1980).
- [36] R. C. Paliwal and C. F. Chen, "Double-diffusive instability in an inclined fluid layer. Part 2. Stability analysis", J. Fluid Mech. 98, 769–785 (1980).
- [37] S. Thangam, A. Zebib, and C. F. Chen, "Double-diffusive convection in an inclined fluid layer", J. Fluid Mech. 116, 363–378 (1982).
- [38] S. M. Houghton and E. Knobloch, "Homoclinic snaking in bounded domains", Phys. Rev. E 80, 026210 (2009).
- [39] A. Bergeon, J. Burke, E. Knobloch, and I. Mercader, "Eckhaus instability and homoclinic snaking", Phys. Rev. E 78, 1–16 (2008).
- [40] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch, "Convectons in periodic and bounded domains", Fluid Dyn. Res. 42, 025505 (2010).
- [41] J. Burke, S. M. Houghton, and E. Knobloch, "Swift-Hohenberg equation with broken reflection symmetry", Phys. Rev. E 80, 036202 (2009).
- [42] D. J. B. Lloyd, B. Sandstede, D. Avitabile, and A. R. Champneys, "Localized hexagons patterns of the planar Swift-Hohenberg equation", SIAM J. Appl. Dyn. Sys. 7, 1049–1100 (2008).
- [43] G. Bardan, A. Bergeon, E. Knobloch, and A. Mojtabi, "Nonlinear doubly diffusive convection in vertical enclosures", Physica D 138, 91–113 (2000).
- [44] S. A. Suslov and S. Paolucci, "Stability of non-Boussinesq convection via the complex Ginzburg-Landau model", Fluid Dyn. Res. 35, 159–203 (2004).

# Bibliographie

- A. Bergeon, K. Ghorayeb, and A. Mojtabi. Double diffusive instability in an inclined cavity. *Phys. Fluids*, 11:549–559, 1999.
- [2] A. Bergeon and E. Knobloch. Natural doubly diffusive convection in threedimensional enclosures. *Phys. Fluids*, 14:3233–3250, 2002.
- [3] A. Bergeon and E. Knobloch. Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection. *Physica D*, 237:1139–1150, 2008.
- [4] A. Bergeon and E. Knobloch. Periodic and localized states in natural doubly diffusive convection. *Physica D*, 237:1139–1150, 2008.
- [5] A. Bergeon and E. Knobloch. Spatially localized states in natural doubly diffusive convection. *Phys. Fluids*, 20:034102, 2008.
- [6] K. Ghorayeb and A. Mojtabi. Double diffusive convection in a vertical rectangular cavity. *Phys. Fluids*, 6:2339–2348, 1997.
- [7] D. Henry and H. Ben Hadid. Multiple flow transitions in a box heated from the side in low-Prandtl-number fluids. *Phys. Rev. E*, 76:016314, 2007.
- [8] S. M. Houghton and E. Knobloch. Homoclinic snaking in bounded domains. *Phys. Rev. E*, 80:026210, 2009.
- [9] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch. Localized pinning states in closed containers: Homoclinic snaking without bistability. *Phys. Rev. E*, 80:025201, 2009.
- [10] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch. Convectons, anticonvectons and multiconvectons in binary fluid convection. J. Fluid Mech., 667:586– 606, 2011.
- [11] R. C. Paliwal and C. F. Chen. Double diffusive instability in an inclined fluid layer. Part 1. Experimental investigation. J. Fluid Mech., 98:755–768, 1980.
- [12] R. C. Paliwal and C. F. Chen. Double-diffusive instability in an inclined fluid layer. Part 2. Stability analysis. J. Fluid Mech., 98:769–785, 1980.
- [13] S. Thangam, A. Zebib, and C. F. Chen. Double diffusive convection in an inclined fluid layer. J. Fluid Mech., 116:363–378, 1982.

[14] S. Xin, P. Le Quéré, and L. S. Tuckerman. Bifurcation analysis of double diffusive convection with opposing horizontal thermal and solutal gradients. *Phys. Fluids*, 10:850–858, 1998.

# Chapitre 6

# Convection thermique d'une couche fluide en rotation

Dans ce chapitre, on étudie la convection de Rayleigh-Bénard en présence de rotation. Nous démontrerons que dans certaines conditions, l'instabilité de l'état diffusif peut conduire à la formation de solutions spatialement localisées par un mécanisme très similaire à celui mis en évidence dans la convection de Rayleigh-Bénard en présence d'un champ magnétique (magnétohydrodynamique) [7]. Dans une première partie, nous présentons le système physique. La formation d'états spatialement localisés est l'objet de la seconde partie. Un certain nombre de résultats y sont présentés et introduisent un article soumis pour publication et qui fait l'objet de la dernière partie de ce chapitre.

# 6.1 Introduction

### 6.1.1 Formulation du problème

Nous rappelons dans un premier temps la configuration et les hypothèses que nous avions formulées dans le chapitre 1. On considère une couche fluide horizontale confinée verticalement entre deux surfaces rigides z = 0 et z = h maintenues respectivement aux températures  $\Theta_b$  et  $\Theta_h$  avec  $\Theta_b = \Theta_h + \Delta\Theta$ ,  $\Delta\Theta > 0^1$ . Le système est en rotation autour de l'axe vertical  $\mathbf{e}_z$  à vitesse angulaire  $\Omega$  constante. On se place dans une approximation bidimensionnelle ce qui dans ce système conduit à considérer que l'écoulement est invariant dans une direction horizontale (arbitrairement y). La géométrie est représentée sur la figure 6.1. Nous ne considérerons pas dans la suite les effets de courbure. La couche fluide sera supposée infinie dans la seconde direction horizontale x et nous considèrerons des solutions  $\Gamma$ -périodiques dans cette direction.

On se place sous l'hypothèse où les effets centrifuges sont faibles devant les effets gravitationnels ce qui correspond à des petits nombres de Froude  $Fr = \Omega^2 \Gamma/g \ll$ 1 où le nombre de Froude mesure le rapport entre l'accélération due à la force centrifuge  $-\Omega \times \Omega \times \mathbf{r}$  et l'accélération due à la gravité -g. Dans cette situation, le

<sup>1.</sup> La température est noté<br/>é $\Theta$  et non T afin d'éviter la confusion avec le nombre de Taylor noté<br/> T



FIGURE 6.1 – Schéma d'une couche fluide soumise à la gravité  $\mathbf{g}$  et en rotation autour de l'axe Pz à vitesse  $\mathbf{\Omega}$  constante. P représente le pôle et z la verticale ascendante.

fluide subit une force de Coriolis égale à  $2\rho \mathbf{u} \times \mathbf{\Omega}$  induite par la rotation et identique quelque soit la distance à l'axe de rotation (la prise en compte des effets centrifuges ajoute bien sûr en complexité [8, 10, 11]).

Pour adimensionaliser les équations, on utilise l'épaisseur h de la couche pour les longueurs, le temps de diffusion thermique  $h^2/\kappa$  pour les temps ( $\kappa$  est la diffusivité thermique) et la température adimensionnelle  $\Theta$  est définie par  $\Theta = (\Theta^* - \Theta_h)/\Delta\Theta$ où  $\Theta^*$  est la température dimensionnée. On se place à l'approximation de Boussinesq et sous l'hypothèse que la densité dans le terme lié à la poussée d'Archimède varie suivant  $\rho = \rho_0(1 - \alpha \ (\Theta^* - \Theta_b))$  (avec  $\alpha = -\rho_0^{-1}(\partial \rho/\partial \Theta^*) > 0$  et constant dans l'intervalle de température considéré). En variables adimensionnées et en gardant les mêmes notations pour les champs, les équations s'écrivent dans le référentiel en rotation :

$$\sigma^{-1} \left( \partial_t \mathbf{u} + \left( \mathbf{u} \cdot \nabla \right) \mathbf{u} \right) = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{u} - T \mathbf{e}_z \times \mathbf{u} + Ra \Theta \mathbf{e}_z, \qquad (6.1)$$

$$= 0, (6.2)$$

$$\partial_t \Theta + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \Theta = \nabla^2 \Theta, \tag{6.3}$$

où  $\mathbf{u} = (u, v, w)$  et  $\sigma$  est le nombre de Prandtl<sup>2</sup>, Ra le nombre de Rayleigh et T le nombre de Taylor définis respectivement par :

 $\nabla \cdot \mathbf{u}$ 

$$\sigma = \frac{\nu}{\kappa}, \qquad Ra = \frac{g\alpha \Delta \Theta h^3}{\kappa \nu}, \qquad T = \frac{2\Omega h^2}{\nu}, \tag{6.4}$$

où  $\nu$  est la viscosité cinématique. Les conditions aux limites que nous considérons dans cette étude correspondent au glissement le long des surfaces z = 0 et z = 1. Ajoutées aux conditions aux limites thermiques, elles s'écrivent :

en 
$$z = 0$$
,  $\Theta - 1 = w = \partial_z u = \partial_z v = 0$ , (6.5)

en 
$$z = 1$$
,  $\Theta = w = \partial_z u = \partial_z v = 0.$  (6.6)

Le problème admet une solution triviale u = w = 0 et  $\Theta \equiv \Theta_0 = 1 - z$  et v = sx + cquelques soient les paramètres adimensionnels où s qui représente un cisaillement et

<sup>2.</sup> Il est noté Pr dans le chapitre 1 et noté  $\sigma$  ici pour être en conformité avec l'article de ce chapitre

c sont des constantes. Cependant, il est aisé de voir que  $s \neq 0$  est équivalent à un vecteur rotation d'intensité  $\Omega + s$ . La constante c n'a en revanche pas d'effet. Dans la suite, nous considèrerons sans perte de généralité le cas s = c = 0. La solution  $\mathbf{u} = \mathbf{0}$  et  $\Theta = \Theta_0$  sera appelée solution conductive. La composante v de la vitesse (dans le référentiel en rotation) est appelée vitesse zonale en raison de sa direction assimilable à la longitude sur un globe.

Nous avons supposé le problème invariant dans la direction y (axisymétrique par rapport à l'axe des pôles) ce qui implique  $(\mathbf{u}, p, T) = (\mathbf{u}, p, T)(x, z)$ . L'incompressibilité de l'écoulement nous permet alors d'introduire la fonction de courant poloidale  $\psi$  définie par :

$$\mathbf{u} \equiv (-\psi_z, v, \psi_x). \tag{6.7}$$

En introduisant  $\theta = \Theta - \Theta_0$  l'écart en température à la solution conductive, l'utilisation de la fonction de courant permet de réécrire les équations sous la forme :

$$\sigma^{-1} \left[ \nabla^2 \psi_t + J(\psi, \nabla^2 \psi) \right] = Ra\theta_x - Tv_z + \nabla^4 \psi, \qquad (6.8)$$

$$\sigma^{-1} [v_t + J(\psi, v)] = T\psi_z + \nabla^2 v, \qquad (6.9)$$

$$\theta_t + J(\psi, \theta) = \psi_x + \nabla^2 \theta, \qquad (6.10)$$

où  $\nabla^2 = \partial_x^2 + \partial_z^2$  et  $J(\psi, \cdot) = \psi_x(\cdot)_z - (\cdot)_x \psi_z$ . Les conditions aux limites deviennent :

en 
$$z = 0, 1$$
  $\psi = \psi_{zz} = \theta = v_z = 0.$  (6.11)

### 6.1.2 Propriétés de symétrie

Le système (6.8–6.10) muni des conditions aux limites (6.11) possède les symétries du groupe  $O(2) \times Z_2$  où O(2) représente les symétries du cercle générées par les translations  $T_x$  dans la direction x et la réflexion  $R_1$  par rapport à x = 0. Le groupe  $Z_2$ est composé de  $\{I, R_2\}$  où I représente l'identité et  $R_2$  la réflexion par rapport à la ligne horizontale médiane. Les réflexions  $R_1$  et  $R_2$  sont définies par :

$$R_1: (x,z) \to (-x,z), \quad (\psi,\theta,v) \to (-\psi,\theta,-v), \tag{6.12}$$

$$R_2: (x,z) \to (x,1-z), \quad (\psi,\theta,v) \to (-\psi,-\theta,v). \tag{6.13}$$

Ces propriétés de symétrie, identiques à celles du problème de convection de double diffusion 2D (chapitre 4), garantissent que les bifurcations stationnaires de la solution conductive sont des fourches de révolution produisant des solutions spatialement périodiques. Dans la suite, on identifie deux types de solutions localisées : celles qui sont invariantes par  $R_1$ , et qui sont donc paires (branche de solutions notée  $L^+$ ) et celles invariantes par  $R_1 \circ R_2$  et qui sont donc impaires (branche de solutions notée  $L^-$ ).

## 6.1.3 Invariants

Il convient de remarquer que les conditions aux limites de glissement ne définissent v qu'à une constante additionnelle près. De plus, par intégration de (6.9) sur tout le domaine on a :

$$\frac{d}{dt}\bar{V} = 0, \qquad \bar{V} \equiv \int_D v(x, z, t) \, dx \, dz, \tag{6.14}$$

où  $D = [-\Gamma/2, \Gamma/2] \times [0, 1]$ , ce qui traduit que  $\bar{V}$  se conserve dans le temps. Cette caractéristique est commune au problème de convection en présence d'un champ magnétique vertical étudié par Cox & Matthews [1] et Lo Jacono *et al.* [7], problème dans lequel cette propriété est portée par le potentiel magnétique.

# 6.2 Résultats

Dans cette partie, nous démontrons que dans certaines gammes de paramètres, des solutions spatialement localisées stationnaires apparaissent lorsque la bifurcation est sous-critique et super-critique. Nous identifions tout d'abord analytiquement les limites des différents régimes en fonction des nombres de Taylor T et de Prandtl  $\sigma$ . Nous présentons ensuite les états localisés dans les régimes sous-critique puis super-critique.

Les résultats numériques qui suivent sont obtenus avec un maillage possédant 2 éléments spectraux par longueur d'onde critique  $\lambda_c$  (longueur d'onde critique calculée dans un domaine infini). Chaque élément spectral est discrétisé en utilisant 15 points de Gauss-Lobatto-Legendre dans la direction horizontale et 11 dans la direction verticale. Une analyse de maillage a confirmé que les résultats étaient convergés dans cette limite. La période est choisie de sorte à ce que  $\Gamma = n\lambda_c$  où n est un entier. Ce choix garantit que la première bifurcation primaire est associée à un mode à nlongueurs d'onde ce qui correspond dans notre cas à n paires de rouleaux contrarotatifs dans le plan (x, z). Dans les cas que nous considérons, n est de l'ordre de 10.

## 6.2.1 Carte des régimes

#### Stabilité linéaire

Nous cherchons tout d'abord à déterminer le seuil d'instabilité de la solution triviale  $\psi = \theta = v = 0$ . On cherche des perturbations marginales ( $\partial_t = 0$ ) dans le système linéarisé, ce qui donne :

$$\nabla^4 \tilde{\psi} + Ra\partial_x \tilde{\theta} - T\partial_z \tilde{v} = 0, \qquad (6.15)$$

$$\nabla^2 \theta + \partial_x \psi = 0, \qquad (6.16)$$

$$\nabla^2 \tilde{v} + T \partial_z \tilde{\psi} = 0, \qquad (6.17)$$

où  $(\tilde{\psi}, \tilde{\theta}, \tilde{v})$  représente la petite perturbation autour de  $(\psi, \theta, v) = (0, 0, 0)$ . En combinant les 3 équations, on obtient :

$$\nabla^{6}\tilde{\psi} - Ra\partial_{xx}\tilde{\psi} + T^{2}\partial_{zz}\tilde{\psi} = 0.$$
(6.18)

On cherche  $\tilde{\psi} \sim \sin(\pi z) e^{ikx}$  avec k le nombre d'onde spatial. La résolution de (6.18) donne :

$$Ra(k) = \frac{p^3 + \pi^2 T^2}{k^2}, \qquad p \equiv k^2 + \pi^2.$$
(6.19)

En minimisant Ra par rapport à k, on obtient le seuil d'instabilité  $Ra_c$  et le nombre d'onde  $k_c$  associé :

$$Ra_c = 3p_c^2, \qquad p_c^2(2k_c^2 - \pi^2) = T^2\pi^2, \tag{6.20}$$



FIGURE 6.2 – Courbe de stabilité représentant le nombre de Rayleigh critique Ra en fonction du nombre de Taylor T pour  $\sigma = 0.1$  En trait plein, la courbe des points de bifurcation stationnaire et en pointillés, les points de bifurcation de Hopf. Les courbes ont été tracées en utilisant les relations présentées dans [5].

avec  $p_c \equiv k_c^2 + \pi^2$ . Les seuils d'instabilité stationnaire et de Hopf ont été calculés par Knobloch & Silber [6] et Kloosterziel & Carnevale [5]. Ils sont reportés sur la figure 6.2 pour  $\sigma = 0.1$ . Ces résultats sont complétés par un diagramme indiquant également la stabilité des différentes solutions au voisinage de la bifurcation (figure 6.3).

#### Régime faiblement non-linéaire

Pour étudier la dynamique dans le régime faiblement non-linéaire, on mène une analyse aux échelles multiples [1] en introduisant des échelles d'espace et de temps lentes  $X = \epsilon x$  et  $T_2 = \epsilon^2 t$  en posant  $Ra = Ra_c + \epsilon^2 r$  avec  $r = \mathcal{O}(1)$  et  $\epsilon \ll 1$ . Les relations (6.15–6.17) permettent d'écrire :

$$\psi = \frac{\epsilon}{2} \left( a(X, T_2) e^{ik_c x} + c.c. \right) \sin(\pi z) + h.o.t.,$$
(6.21)

$$\theta = \frac{\epsilon k_c}{2p_c} \left( ia(X, T_2)e^{ik_c x} + c.c. \right) \sin(\pi z) + h.o.t., \tag{6.22}$$

$$v = \epsilon V(X, T_2) + \frac{\epsilon T \pi}{2p_c} \left( a(X, T_2) e^{ik_c x} + c.c. \right) \cos(\pi z) + h.o.t, \quad (6.23)$$

où  $a(X, T_2)$  représente l'amplitude de la convection, *c.c.* le complexe conjugué et *h.o.t.* les termes de plus haut degré. La présence du terme de vitesse zonale  $V(X, T_2)$ dans l'expression de v vient du fait que la vitesse v est définie à une fonction de xadditionnelle près. En suivant Cox & Matthews [1], on obtient au troisième ordre :

$$\eta A_{T_2} = rA + A_{XX} - \frac{1-\xi^2}{2} |A|^2 A - \xi A V_X, \qquad (6.24)$$

$$V_{T_2} = V_{XX} + \xi \left( |A|^2 \right)_X, \tag{6.25}$$



FIGURE 6.3 – Courbe des points de bifurcation de codimension 2 (CT) représentant l'intersection des courbes de points de bifurcation stationnaire et de bifurcation de Hopf, dans le plan  $T - \sigma$ . A droite de la courbe (CT), la convection stationnaire est stable. A gauche : dans la région I, les ondes stationnaires (standing waves, SW) sont stables et dans la région II, ce sont les ondes progressives (traveling waves, TW). D'après [6].

où  $\xi \equiv T\pi^2/(\sqrt{3}p_ck_c^2\sigma), \eta \equiv 3k_c^2\sigma - k_c^2 + 2\pi^2/(12k_c^2)$  et où l'on a redimensionné les variables  $(a \to 2A/\sqrt{3}p_ck_c, V \to 2V/\sqrt{p_c}, X \to \sqrt{12}p_cX, T_2 \to 12p_cT_2/\sigma)$ . Pour des solutions stationnaires dans un domaine périodique en X, la seconde relation indique que :

$$V_X = \xi \left( \left\langle |A|^2 \right\rangle - |A|^2 \right), \tag{6.26}$$

où  $\langle \cdot \rangle$  représente la moyenne spatiale sur le domaine. En d'autres termes, lorsque  $|A|^2 < \langle |A|^2 \rangle$ , c'est-à-dire dans les régions où la convection est moins intense que la moyenne,  $V_X > 0$  et vice-versa. Dans le cas d'une solution localisée, le cisaillement sera donc positif à l'extérieur du convecton et négatif à l'intérieur. La vitesse de rotation du fluide dans le référentiel fixe étant la somme de la vitesse de rotation  $\Omega$  et du cisaillement zonal, on observera donc que, dans le référentiel galiléen, les structures localisées tournent moins vite que les zones non convectives. En combinant la relation (6.26) avec les équations (6.24–6.25), on obtient l'équation non-locale suivante :

$$rA + A_{XX} - \frac{1}{2}(1 - 3\xi^2)|A|^2 A - \xi^2 \langle |A|^2 \rangle A = 0.$$
 (6.27)

Pour étudier la bifurcation vers les solutions périodiques, on pose  $A = A_0$  constante réelle. L'équation (6.27) donne  $A_0 = \sqrt{2r/(1-\xi^2)}$ . On en déduit que les solutions périodiques sont super-critiques pour  $\xi^2 < 1$  et sous-critiques pour  $\xi^2 > 1$ . Lorsque  $\xi^2 = 1$ , le système est dit tri-critique. Ce cas particulier est obtenu lorsque les paramètres vérifient la relation :

$$T = \frac{\sqrt{3}\sigma\pi^2 (2 \pm \sqrt{1 - 3\sigma^2})}{(1 \pm \sqrt{1 - 3\sigma^2})^2}.$$
 (6.28)

Pour étudier la présence de bifurcations secondaires amenant à des états modulés en amplitude, on reprend l'approche faiblement non-linéaire de Cox & Matthews [9]. On développe la solution au voisinage de la bifurcation secondaire  $r = r_1$ :

$$A = A_0(1 + \tilde{A}(X, \tau; \epsilon)), \qquad V = \tilde{V}(X, \tau; \epsilon), \tag{6.29}$$

avec  $\tau = \epsilon^2 T_2$ ,  $\tilde{A} = \epsilon \tilde{A}_1 + \epsilon^2 \tilde{A}_2 + \epsilon^3 \tilde{A}_3 + \cdots \in \mathbb{R}$ ,  $\tilde{V} = \epsilon \tilde{V}_1 + \epsilon^2 \tilde{V}_2 + \epsilon^3 \tilde{V}_3 + \cdots \in \mathbb{R}$ et  $r = r_1 + \epsilon^2 r_2$ . Porté dans les équations (6.24–6.25), ce développement permet d'écrire pour des solutions stationnaires à l'ordre 1 :

$$\tilde{A}_{1XX} - 2r_1\tilde{A}_1 - \xi\tilde{V}_{1X} = 0, (6.30)$$

$$\tilde{V}_{1XX} + \frac{4\xi r_1}{1 - \xi^2} \tilde{A}_{1X} = 0.$$
(6.31)

Pour des modes de nombre d'onde l en X, on obtient les solutions  $\tilde{A}_1 = \tilde{A}_{11} \cos(lX)$ ,  $\tilde{V}_1 = \tilde{V}_{11} \sin(lX)$  où :

$$r_1 = \frac{l^2}{2} \left( \frac{1 - \xi^2}{3\xi^2 - 1} \right), \qquad \tilde{V}_{11} = -\frac{4\xi r_1}{l(1 - \xi^2)} \tilde{A}_{11}. \tag{6.32}$$

Si la bifurcation vers les solutions périodiques  $(A_0, 0)$  est sous-critique, alors  $r_1 < 0$ et  $1-\xi^2 < 0$ . On est donc en présence d'une bifurcation secondaire vers des états modulés pour  $\xi^2 > 1/3$ . Cette condition implique que lorsque les solutions périodiques sont sous-critiques  $(\xi^2 > 1)$ , elles s'accompagnent nécessairement d'une bifurcation secondaire vers des états modulés (la condition  $\xi^2 > 1/3$  ne restreint pas l'intervalle définit par  $\xi^2 > 1$ ). Dans le cas où la bifurcation vers les solutions périodiques est super-critique, on a  $r_1 > 0$  et  $1 - \xi^2 > 0$ . Deux cas de figure se présentent : pour  $1 > \xi^2 > 1/3$ , il y a présence d'une bifurcation secondaire créant des solutions modulées en amplitude, et pour  $\xi^2 < 1/3$ , aucune bifurcation secondaire vers des solutions modulées en amplitude n'est attendue.

On s'intéresse à la nature (super- ou sous-critique) de la bifurcation secondaire responsable de l'apparition de solutions spatialement modulées. Pour cela, on poursuit le développement à des ordres plus élevés. A l'ordre 2, on obtient :

$$\tilde{A}_{2XX} - 2r_1\tilde{A}_2 - \xi\tilde{V}_{2X} = 3r_1\tilde{A}_1^2 + \xi\tilde{A}_1\tilde{V}_{1X}, \qquad (6.33)$$

$$\tilde{V}_{2XX} + \frac{4\xi r_1}{1 - \xi^2} \tilde{A}_{2X} = -\frac{2\xi r_1}{1 - \xi^2} \tilde{A}_{1X}^2, \qquad (6.34)$$

qui donne les solutions suivantes :

$$\tilde{A}_2 = \tilde{A}_{20} + \tilde{A}_{22}\cos(2lX), \qquad \tilde{V}_{2X} = \tilde{V}_{22}\cos(2lX), \qquad (6.35)$$

où

$$\tilde{A}_{20} = \frac{7\xi^2 - 3}{4(1 - \xi^2)} \tilde{A}_{11}^2, \quad \tilde{A}_{22} = \frac{1}{4} \tilde{A}_{11}^2, \quad \tilde{V}_{22} = -\frac{2\xi r_1}{1 - \xi^2} \tilde{A}_{11}^2.$$
(6.36)

L'ordre 3 permet d'obtenir le système :

$$\tilde{A}_{3XX} - 2r_1\tilde{A}_3 - \xi\tilde{V}_{3X} = 2r_2\tilde{A}_1 + 6r_1\tilde{A}_1\tilde{A}_2 + r_1\tilde{A}_1^3 
+ \xi\tilde{A}_2\tilde{V}_{1X} + \xi\tilde{A}_1\tilde{V}_{2X},$$
(6.37)

$$\tilde{V}_{3XX} + \frac{4\xi r_1}{1-\xi^2} \tilde{A}_{3X} = -\frac{4\xi r_2}{1-\xi^2} \tilde{A}_{1X} - \frac{4\xi r_1}{1-\xi^2} (\tilde{A}_1 \tilde{A}_2)_X.$$
(6.38)

Condition	Solutions $P$	Solutions $L$	Sur la figure 6.4
$\xi^2 < 1/3$	sous-critiques	sous-critiques	Région 1
$1/3 < \xi^2 < 3/7$	super-critiques	sous-critiques	Région 2
$3/7 < \xi^2 < 1$	super-critiques	super-critiques	Région 3
$1 < \xi^2$	super-critiques		Région 4

TABLE 6.1 – Résumé des différents scénarios de bifurcation en fonction du paramètre  $\xi = T\pi^2/\sqrt{3}p_ck_c^2\sigma$ . La nature des bifurcations primaires (solutions P) et secondaires (solutions L) reportée dans ce tableau correspond à des régions représentées en fonction des nombres de Prandtl  $\sigma$  et de Taylor T sur la figure 6.4.

La condition de solvabilité portant sur les termes résonants proportionnels à  $\cos(lX)$ donne :

$$r_2 = \frac{l^2}{4} \left(\frac{3 - 7\xi^2}{3\xi^2 - 1}\right) \tilde{A}_{11}^2. \tag{6.39}$$

La bifurcation secondaire étant présente pour  $\xi^2 > 1/3$ , la relation (6.39) permet de connaître sa direction. Si  $\xi^2 < 3/7$  alors  $r_2 > 0$  et la bifurcation secondaire amenant les solutions spatialement modulées en amplitude est super-critique. A contrario,  $\xi^2 > 3/7$  entraîne  $r_2 < 0$  et la bifurcation secondaire est sous-critique.

Les différents scénarios sont reportés dans le tableau 6.1 et illustrés sur la figure 6.4 en fonction du nombre de Prandtl  $\sigma$  et du nombre de Taylor T. Lorsque T = 0, on retrouve le comportement de la convection de Rayleigh-Bénard. La convection est super-critique et aucune bifurcation vers des états spatialement localisés n'existe. A  $\sigma$  donné, lorsque l'on augmente T, l'effet Coriolis se fait sentir et rend progressivement la convection sous-critique en favorisant la formation d'états spatialement localisés. Ceux-ci apparaissent aussi bien lorsque la convection est sous-critique (région 1) que super-critique (région 2 et 3). Au delà d'une certaine valeur de T, la convection est super-critique et stable (pas de bifurcation secondaire) jusqu'à des taux de rotation infinis.

## 6.2.2 Régime sous-critique

Dans cette partie, on s'intéresse au régime sous-critique de la région 1 sur la figure 6.4 en considérant des domaines  $\Gamma$ -périodiques. On choisit  $\sigma = 0.1$ . La figure 6.5 représente les variations de l'énergie cinétique poloïdale moyenne  $\mathcal{E}$  des solutions stationnaires en fonction du nombre de Rayleigh Ra pour T = 20. L'énergie  $\mathcal{E}$  est définie par :

$$\mathcal{E} \equiv \frac{1}{2\Gamma} \int_D (\psi_x^2 + \psi_z^2) \, dx \, dz. \tag{6.40}$$

Pour cette valeur de T, les relations (6.20) donnent  $Ra_c \approx 1179.2$  (figure 6.2) et  $k_c \approx 3.1554$ . Les résultats sont présentés pour un domaine de période  $\Gamma = 10\lambda_c$  avec  $\lambda_c = 2\pi/k_c$ . La première bifurcation primaire donne donc naissance à la branche  $P_{10}$  formée de 10 paires de rouleaux contra-rotatifs identiques. Cette branche bifurque de manière sous-critique en  $Ra_c \approx 1179.2$  et traverse un noeud-col à  $Ra \approx 913$ . De cette branche bifurquent à faible amplitude deux branches d'états localisés notées  $L_{10}^{\pm}$ . L'exposant "+" fait référence à des solutions paires ( $R_1$  invariantes) et l'exposant



FIGURE 6.4 – Carte  $T-\sigma$  des différents scénarios de bifurcation. Le nombre de Taylor quantifiant la rotation T est à l'échelle logarithmique en (a) et linéaire en (b). Le nombre de Prandtl  $\sigma$  est gardé à la même échelle. Les différentes régions de convection (voir tableau 6.1) sont notées de 1 à 4. (c) Schéma du scénario de bifurcation dans les 4 régions. La solution triviale conductive est appelée triv, P représente la convection spatialement périodique et L la branche d'états modulés.



FIGURE 6.5 – Diagramme de bifurcation représentant l'énergie cinétique poloïdale moyenne  $\mathcal{E}$  en fonction du nombre de Rayleigh Ra pour le snaking penché à T = 20,  $\sigma = 0.1$  et  $\Gamma = 10\lambda_c$ . Les branches d'états localisés  $L_{10}^{\pm}$  bifurquent de la branche  $P_{10}$  de convection spatialement périodique présentant 10 paires de rouleaux contrarotatifs et reconnectent la branche  $P_5$  constituée de solutions composées de 5 paires de rouleaux. Les solutions à tous les noeuds-cols durant le snaking sont reportées sur la figure 6.6.



FIGURE 6.6 – Solutions aux noeuds-cols successifs des branches (a)  $L_{10}^-$ , (b)  $L_{10}^+$  de la figure 6.5. Les tracés supérieurs montrent les isovaleurs de la fonction de courant. Les tracés inférieurs montrent le profil de  $V(x) \equiv \int_0^1 v(x, z) dz$ . Les solutions du haut ont été prises au voisinage du point de reconnection sur  $P_5$ .

"-" à des solutions impaires  $(R_1 \circ R_2 \text{ invariantes})$ . Ces branches sont représentées plus en détail au voisinage du point de bifurcation sur la figure 6.7. A ces deux branches sont associées des solutions modulées en amplitude. A mesure que Radécroît, la modulation s'amplifie si bien qu'à l'approche du noeud-col de gauche  $(Ra \approx 807)$ , les solutions sont spatialement localisées. Leur structure est représentée sur la figure 6.6 en ce noeud-col et aux différents noeuds-cols qui suivent.

Après le passage du premier noeud-col, les deux branches  $L_{10}^{\pm}$  s'enchevêtrent pour former un snaking incliné (*slanted snaking* [4, 2]). En suivant les branches vers les hautes énergies, on observe sur la figure 6.6 un accroissement de l'étalement de la structure par nucléation de part et d'autre du convecton. Ces nucléations, qui préservent la symétrie de la branche, se produisent à chaque noeud-col de gauche. Entre un noeud-col de gauche et le noeud-col de droite suivant, l'amplitude des nouveaux rouleaux augmente pour atteindre un maximum (local). Le long du snaking, la longueur d'onde croît monotonement avec Ra. Une fois le domaine  $\Gamma$  rempli, le processus cesse et les branches d'états localisés se reconnectent à la branche  $P_5$ assocciée à des solutions périodiques possédant 5 longueurs d'ondes dans  $\Gamma$ .

Les solutions présentées sur la figure 6.6 montrent également les profils de vitesse

zonale intégrée sur la verticale :

$$V(x) \equiv \int_0^1 v(x, z) \, dz.$$
 (6.41)

La présence des convectons donne à V(x) une structure en escaliers dont les marches deviennent de plus en plus raides à mesure que l'on s'approche de la branche  $P_5$  de sorte qu'en son voisinage, V(x) a une structure en dents de scie. Pour comprendre ce profil, il convient d'observer que la symétrie  $R_2$  implique que les rouleaux tournant dans le sens trigonométrique et ceux tournant dans l'autre sens entraînent les mêmes variations de V(x). D'autre part, la symétrie  $R_1$  implique que la réflexion par rapport au plan médian en x ne change pas la pente de V(x). Enfin, on note que par intégration sur z puis x de l'équation (6.9), on obtient :

$$\sigma \frac{dV}{dx} = -\int_0^1 \psi_z v \, dz. \tag{6.42}$$

Cette relation exprime que le profil linéaire décroissant de V(x) dans chaque rouleau (déduit à partir de la relation (6.26) et retrouvé numériquement dans les figures qui suivent) est lié à la valeur moyennée sur la verticale de la tension de Reynolds  $\psi_z v$ . Le fait que les rouleaux tournant dans des sens opposés entraînent les mêmes variations de V provoque un cisaillement de la structure localisée que l'on caractérise par la quantité  $\Delta V \equiv V(x = L/2) - V(x = -L/2)$  où L est la taille du convecton définie comme la distance entre le point où V est maximal et celui où V est minimal. On remarquera que les conditions aux limites périodiques dans la direction ximpliquent la présence d'un cisaillement opposé dans la zone conductive. La valeur  $\Delta V$  permet de calculer la vitesse de rotation locale du fluide dans le référentiel fixe. Le cisaillement induit par  $\Delta V$  est associé à un taux de rotation qui en variables dimensionnées donne  $\Omega' = \Delta V \kappa / Lh^2$ . Ce taux de rotation est à comparer à celui imposé égal à  $\Omega$ . En multipliant par  $h^2/\nu$ , on est amené à comparer le taux de rotation imposé  $T = \Omega h^2 / \nu$  à celui induit par la présence des convectons et égal à  $\Delta V/(\sigma L)$ . En d'autres termes, dans le référentiel fixe, le taux de rotation est mesuré par  $T + \Delta V/(\sigma L)$ . Le cisaillement  $\Delta V/L$  aux frontières du convecton étant négatif, l'écoulement zonal y est donc réduit. A contrario, il est plus fort en dehors de cette zone. En particulier, le ralentissement est le plus fort au voisinage du premier noeudcol où les solutions sont les plus localisées. Dans ces cas,  $|\Delta V|/\sigma LT \approx 0.7$  ce qui donne une réduction en ordre de grandeur de 70% du taux de rotation local.

La figure 6.7 montre l'effet de la taille du domaine  $\Gamma$  pour T = 20. Lorsque l'on augmente  $\Gamma$ , la bifurcation secondaire qui produit les branches d'états localisés se rapproche de la bifurcation primaire. De plus, le noeud-col de gauche des branches d'états localisés se déplace légèrement vers des Rayleigh plus faibles ( $Ra \approx 807$ pour  $L_{10}^{\pm}$ ,  $Ra \approx 798$  pour  $L_{15}^{\pm}$ ,  $Ra \approx 793$  pour  $L_{20}^{\pm}$  et  $Ra \approx 787$  pour  $L_{40}^{\pm}$ ). On remarque également d'une part qu'au-delà du premier noeud-col, la pente moyenne des branches d'états localisés dans la zone de snaking est la même et d'autre part, que le nombre de noeuds-cols augmente proportionnellement à  $\Gamma$ . Ceci signifie que plus le domaine est grand et plus les rouleaux sont nucléés rapidement. Plus précisément, à une valeur donnée de Ra, les convectons occupent une même proportion du domaine si l'on compare un domaine de taille donnée et un dont la taille est le double. La figure



FIGURE 6.7 – Diagramme de bifurcation représentant l'énergie cinétique poloidale moyenne  $\mathcal{E}$  en fonction de Ra pour différentes tailles de domaine  $\Gamma$  à T = 20 et  $\sigma = 0.1$ . (a) Diagramme à faible amplitude : les branches  $P_n$  de convection spatialement périodique se superposent mais les branches d'états localisés  $L_n^{\pm}$  bifurquent de plus en plus proche de la bifurcation primaire lorsque  $\Gamma$  augmente. Pour ces valeurs de Ra, les branches  $L_n^{\pm}$  sont indiscernables. (b) Comparaison des branches d'états localisés pour  $\Gamma = 10\lambda_c$ ,  $15\lambda_c$  et  $20\lambda_c$ . Par souci de clarté, les branches  $\Gamma = 15\lambda_c$  et  $\Gamma = 20\lambda_c$ ont été déplacées à Ra + 50 et Ra + 100 respectivement.



FIGURE 6.8 – (a) Longueur d'onde au sein de la structure localisée en fonction de Ra pour T = 20,  $\sigma = 0.1$  et  $\Gamma = 20\lambda_c$ . Le droite  $\lambda = 1.9912$  matérialise la longueur d'onde de la structure convective de  $P_{20}$ . (b) Fraction du domaine  $L/\Gamma$  occupée par le convecton pour  $\Gamma = 10\lambda_c$  (en trait noir) et  $\Gamma = 20\lambda_c$  (en trait gris).

6.7.b montre aussi que ces noeuds-cols se concentrent plus aux faibles valeurs de Ra qu'aux fortes valeurs. Il s'agit d'une conséquence de l'augmentation de la longueur d'onde avec Ra le long des branches  $L^{\pm}$ : comme la longueur d'onde croît avec Ra, la structure a de moins en moins besoin de nucléation pour absorber l'apport d'énergie associé à l'augmentation du nombre de Rayleigh.

La figure 6.8.a montre l'évolution de la longueur d'onde des structures localisées calculée en mesurant la taille du rouleau central pour un domaine  $\Gamma = 20\lambda_c$  le long des branches d'états localisés. Les branches  $L_{20}^{\pm}$  bifurquent de  $P_{20}$  avec une longueur d'onde  $\lambda \approx 1.9912$ . La branche  $L_{20}^{\pm}$  termine sur  $P_{10}$  avec  $\lambda \approx 3.9825$  et la branche  $L_{20}^{-}$  sur  $P_9$  avec  $\lambda \approx 4.4250$ . La figure nous informe notamment que la longueur d'onde subit un changement important le long de la partie sous-critique passant de  $\lambda \approx 1.9912$  à  $\lambda \approx 3.6$  au noeud-col de gauche. Au-delà du noeud-col, la longueur d'onde varie en moyenne linéairement avec Ra. La figure 6.8.b montre la fraction du domaine  $L/\Gamma$  occupée par le convecton durant le snaking pour  $\Gamma = 20\lambda_c$  et  $\Gamma = 10\lambda_c$ . Les courbes pour  $\Gamma = 10\lambda_c$  (noir) et  $\Gamma = 20\lambda_c$  (gris) sont très proches l'une de l'autre. Ces résultats confirment que les solutions localisées occupent sensiblement la même fraction de domaine à nombre de Rayleigh égal entre deux domaines dont l'un possède une taille double de l'autre.

En l'absence de rotation, le problème se réduit à celui de la convection de Rayleigh-Bénard. Les bifurcations primaires sont super-critiques et il est bien établi que le système ne présente pas d'états localisés. La figure 6.9 montre la façon dont le diagramme change lorsque l'on augmente le nombre de Taylor T.



FIGURE 6.9 – Diagrammes de bifurcation  $\mathcal{E}(Ra)$  représentant les branches d'états localisés  $L_{10}^{\pm}$  ainsi que la branche périodique  $P_{10}$  pour  $\sigma = 0.1$  et  $\Gamma = 10\lambda_c$  pour T = 10 (a), T = 40 (b) et T = 80 (c). Les branches périodiques sur lesquelles  $L_{10}^{\pm}$  terminent ne sont pas entièrement tracées par soucis de clarté. La figure 6.5 correspondant à T = 20 complète ces 3 diagrammes.

A chaque valeur de T correspond un rapport d'aspect différent  $\Gamma = 10\lambda_c$  puisque  $\lambda_c$  est une fonction de T typiquement décroissante avec T. La figure 6.9 montre que lorsque T augmente, en plus de stabiliser l'état conductif et donc de repousser  $Ra_c$ , la sous-criticalité de  $P_{10}$  augmente. A T = 10 (figure 6.9.a),  $P_{10}$  est déjà sous-critique et les noeuds-cols de gauche de  $P_{10}$  et de  $L_{10}^{\pm}$  sont proches. Lorsque T augmente, ces noeuds-cols se déplacent vers la droite, celui de la branche périodique se déplaçant plus rapidement vers les grandes valeurs du nombre de Rayleigh. La région de snaking et donc l'intervalle d'existence de solutions localisées s'agrandit avec le taux de rotation et l'on observe qu'une partie des branches de solutions localisées se retrouve alors en dehors de la région d'existence de la convection stationnaire (figures 6.9.b et c). A l'inverse, la figure 6.9 indique que lorsque T décroît, l'amplitude des oscillations de  $L_{10}^{\pm}$  décroît de sorte que les noeuds-cols finissent par disparaître. Le comportement obtenu à T = 10 est appelé smooth snaking [3, 7].

## 6.2.3 Régime super-critique

On considère maintenant  $\sigma = 0.6$  afin d'étudier le comportement non-linéaire des solutions dans les régions 2 et 3 de la figure 6.4. La figure 6.10 présente le diagramme de bifurcation pour T = 40 dans un domaine  $\Gamma = 10\lambda_c$  avec  $k_c = 2\pi/\lambda_c = 4.0481$ .

Pour ces paramètres, la branche  $P_{10}$  bifurque de manière super-critique en  $Ra = Ra_c \approx 2068$ . Elle perd quasi-immédiatement sa stabilité en  $Ra \approx 2073$  où se produit une bifurcation secondaire associée aux branches d'états spatialement localisés  $L_{10}^{\pm}$ . Ces branches se comportent de la même manière que celles observées dans le cas sous-critique ( $\sigma = 0.1$  et T = 20) à l'exception du fait qu'elles décrivent ici un smooth snaking, sans noeud-col. Les branches  $L_{10}^{\pm}$  terminent ensemble sur la branche  $P_7$  pour  $Ra \approx 2391$ . Malgré l'absence de noeuds-cols, les oscillations des branches d'états localisés restent visibles et la figure 6.11 confirme que les solutions sont



FIGURE 6.10 – Diagramme de bifurcation montrant l'énergie cinétique poloïdale moyenne  $\mathcal{E}$  en fonction du nombre de Rayleigh Ra pour les branches de solutions périodiques  $P_{10}$ ,  $P_7$  et les branches de solutions spatialement localisées  $L_{10}^{\pm}$ . Les paramètres sont T = 40,  $\sigma = 0.6$  et  $\Gamma = 10\lambda_c$ .

qualitativement similaires à celles du régime sous critique (voir figure 6.6).

Sur la figure 6.12 sont tracées les branches  $L_{10}^{\pm}$  pour  $20 \leq T \leq 110$  et  $\Gamma = 10\lambda_c$ . On rappelle que la longueur d'onde critique  $\lambda_c$  dépend de T et donc que le rapport d'aspect  $\Gamma$  est différent dans tous les cas. Pour  $\sigma = 0.6$ , la branche primaire de convection spatialement périodique  $P_{10}$  bifurque toujours de manière super-critique. A T = 20, on remarque que la sous-criticalité des branches secondaires  $L_{10}^{\pm}$  est faible et l'énergie cinétique associée est aussi faible. Lorsque l'on augmente T, les branches d'états localisés se déplacent vers de plus grandes valeurs de Ra (la bifurcation primaire fait de même). Elles deviennent de plus en plus sous-critiques et le maximum d'énergie cinétique atteint augmente. A ces effets s'ajoute l'oscillation des deux branches autour de leur pente moyenne, qui deviennent discernables à T = 40. Le nombre d'oscillations décroît lorsque T augmente pour la raison suivante : la région de snaking s'agrandit avec T et la longueur d'onde au sein des convectons augmente avec Ra. Ainsi, le remplissage du domaine nécessite de moins en moins de rouleaux. Au-delà de T = 40, la taille de la région de snaking commence à décroître à mesure que la sous-criticalité de  $L_{10}^{\pm}$  décroît.

La figure 6.13 permet de visualiser l'intervalle d'existence de la région des convectons dans le plan (Ra, T). Elle confirme que l'intervalle d'existence des états localisés est le plus large pour  $T \approx 40$  et qu'il disparaît à la fois pour les grands et pour les petits taux de rotation. Nous n'avons par exemple pas trouvé de bifurcation secondaire le long de la branche de solutions périodiques à T = 5 et T = 120.

On note aussi sur la figure 6.12 que la pente moyenne du snaking  $d\mathcal{E}/d(Ra)$  est constante et indépendante de T jusqu'à T = 50. Pour  $T \ge 70$ , elle possède une valeur moindre. Pour  $T \le 50$ , les structures localisées croissent par nucléation de rouleaux lors de chaque aller-retour le long du snaking. Pour  $T \ge 70$ , il n'y a plus de snaking et les branches de solutions localisées possèdent une longueur d'onde quasi constante les amenant à se reconnecter sur  $P_{10}$ . Ce comportement suggère que la croissance de la structure ne se fait plus par nucléation, mais progressivement par suite de l'évolution de la modulation d'amplitude.

Pour comprendre ce comportement, on représente, sur la figure 6.14, la branche de convectons pairs  $L_{10}^+$  pour T = 70 et l'on compare ces résultats avec ceux de la figure 6.11 pour T = 40. Dans les deux cas, les solutions sont spatialement localisées au voisinage du noeud-col de gauche. La différence principale réside dans la longueur d'onde de la structure. Sur la figure 6.11, les rouleaux sont initialement relativement larges, comme c'était le cas pour les solutions sous-critiques du paragraphe précédent. Ils le demeurent jusqu'à ce que la branche atteigne son maximum d'énergie. La longueur d'onde décroît ensuite pour permettre à la branche de se reconnecter à  $P_7$ . A contrario, la figure 6.14 montre des solutions localisées dont la longueur d'onde reste quasiment constante. Cette branche décrit un smooth snaking [3] avec l'apparition graduelle et continue de nouveaux rouleaux de convection (au lieu des nucléations brutales observées dans un snaking classique vertical ou incliné). Il y a donc un changement de comportement à  $T \approx 60$  caractérisé par le changement de longueur d'onde le long des branches secondaires. Nous l'interprétons comme une transition entre un régime thermiquement dominé et un régime inertiel. Pour  $T \leq 50$ , la longueur d'onde est principalement sélectionnée par des effets thermiques alors que pour  $T \geq 70$ , la rotation prend de l'importance et favorise les déplacements de fluide dans la direction verticale (théorème de Taylor-Proudman). L'effet est alors



FIGURE 6.11 – Idem que la figure 6.6 mais pour les solutions localisées le long de (a)  $L_{10}^-$  et (b)  $L_{10}^+$  sur la figure 6.10.



FIGURE 6.12 – Diagramme de bifurcation  $\mathcal{E}(Ra)$  pour les branches  $L_{10}^{\pm}$  à différents nombres de Taylor T pour  $\sigma = 0.6$  et  $\Gamma = 10\lambda_c$ . Dans tous les cas,  $L_{10}^{\pm}$  bifurque de  $P_{10}$  (non montré). A partir de T = 70, les deux branches  $L_{10}^{\pm}$  sont indiscernables.



FIGURE 6.13 – Région d'existence des convectons dans le plan (Ra, T). Le trait plein vertical représente le seuil d'instabilité amenant la convection stationnaire. La région d'existence est délimitée par le premier et le dernier noeud-col de la branche de convectons. Dans les cas où il n'y a pas de noeud-col, le point de bifurcation fait office de délimiteur.



FIGURE 6.14 – (a) Diagramme de bifurcation pour la branche de convectons pairs  $L_{10}^+$  à T = 70,  $\sigma = 0.6$  et  $\Gamma = 10\lambda_c$  (voir figure 6.12). La branche  $L_{10}^+$  bifurque et termine sur la même branche :  $P_{10}$ . Les points représentent les solutions tracées en (b). La même représentation que pour la figure 6.11 a été utilisée.

de confiner l'extension spatiale des rouleaux, limitant ainsi la longueur d'onde. Dans le régime thermique, la localisation est forte et la structure croît par nucléation de rouleaux de convection à des valeurs de Ra bien définies. Dans le régime inertiel, la localisation est plus faible et la croissance de la structure se fait continuement.

On remarque enfin sur les figures 6.6 et 6.11 que les convectons possèdent toujours une longueur d'onde plus importante que les branches périodiques desquelles ils bifurquent. Cette propriété peut s'expliquer par l'action du cisaillement induit par la rotation sur le convecton. En faisant l'analyse de stabilité linéaire d'un profil cisaillé  $(\psi, \theta, v) = (0, 0, sx)$  et en la comparant à celle de  $(\psi, \theta, v) = (0, 0, 0)$ , on remarque que la relation (6.20) reste inchangée excepté que  $T^2$  est remplacé par  $T(T + \sigma^{-1}s)$ . Un cisaillement négatif s < 0 va jouer le rôle de réducteur de rotation puisqu'il va favoriser l'instabilité en réduisant le seuil  $Ra_c$  et en augmentant la longueur d'onde critique  $\lambda_c$ . Au voisinage de la bifurcation, le cisaillement va donc engendrer une augmentation de la longueur d'onde du convecton avant que les effets non-linéaires ne se fassent sentir.

# 6.3 Publication

Dans ce chapitre, on a présenté les différents régimes présents dans la convection thermique d'une couche fluide bi-dimensionnelle en rotation. L'ensemble de ces résultats est consigné dans l'article qui suit en cours de révision mineure pour publication dans *Journal of Fluid Mechanics*. L'article présente des résultats complémentaires incluant notamment la dérivation d'une équation de GinzburgLandau permettant de réduire l'ordre du problème et d'en prédire les solutions dans le régime faiblement non-linéaire au voisinage de la transition pour laquelle les solutions localisées aparaissent (transition entre la région 3 et la région 4 sur la figure 6.4).

# Convectons in a Rotating Fluid Layer

### CÉDRIC BEAUME<sup>1</sup><sup>†</sup>, ALAIN BERGEON<sup>1</sup><sup>‡</sup> HSIEN-CHING KAO<sup>2</sup> ¶ and EDGAR KNOBLOCH<sup>2</sup>||

<sup>1</sup>INPT, UPS, IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse), Université de Toulouse, Allée Camille Soula, F-31400 Toulouse, France and CNRS, IMFT, F-31400 Toulouse, France; <sup>2</sup>Department of Physics, University of California, Berkeley CA 94720, USA

(Received ?; revised ?; accepted ?. - To be entered by editorial office)

Two-dimensional convection in a plane layer bounded by stress-free perfectly conducting horizontal boundaries and rotating uniformly about the vertical is considered. Timeindependent spatially localized structures called convectons of even and odd parity are computed. The convectons are embedded within a self-generated shear layer with a compensating shear flow outside of the structure. These states are organized within a bifurcation structure called slanted snaking and may be present even when periodic convection sets in supercritically. These interesting properties are traced to the presence of a conserved quantity and hence to the use of stress-free boundary conditions.

**Key words:** Authors should not enter keywords on the manuscript, as these must be chosen by the author during the online submission process and will then be added during the typesetting process (see http://journals.cambridge.org/data/relatedlink/jfm-keywords.pdf for the full list)

#### 1. Introduction

Convection in a horizontal fluid layer rotating about the vertical provides one of the classical examples of hydrodynamic instability (Veronis 1959; Chandrasekhar 1961). The system is of interest because convection can set in either via an exchange of stability (a steady state bifurcation) or via overstability (a Hopf bifurcation) depending on the Prandtl and Taylor numbers (Veronis 1959; Chandrasekhar 1961; Clune & Knobloch 1993; Bajaj et al. 2002). In the weakly nonlinear regime classical perturbation theory has revealed branches of steady convection (both two and three-dimensional (Veronis 1959; Goldstein et al. 1990, 1992)) near the steady state bifurcation and branches of different types of standing and traveling waves near the Hopf bifurcation (Veronis 1959; Silber & Knobloch 1990, 1993), as reviewed elsewhere (Knobloch 1998). When these bifurcations are near one another (i.e., the rotation rate as measured by the dimensionless Taylor number is near a special value called a codimension-two point) one can study the interaction between steady and oscillatory convection at small amplitude. This study has revealed different ways whereby oscillations, be they in the form of standing or traveling waves, give way to steady convection as the Rayleigh number increases (Guckenheimer & Knobloch 1983).

In this paper we examine this classical problem from a new point of view and study

† Email address for correspondence: ced.beaume@gmail.com

- ‡ Email address for correspondence: abergeon@imft.fr
- $\P$  Email address for correspondence: hckao@berkeley.edu
- $\parallel$  Email address for correspondence: knobloch@berkeley.edu

#### C. Beaume, A. Bergeon, H.-C. Kao and E. Knobloch

steady but spatially *localized* structures. Following Blanchflower (1999) we refer to such states as *convectons*. For this purpose we adopt the two-dimensional formulation and suppose that the horizontal extent of the layer is sufficiently small that the Froude number remains small (i.e., the centrifugal force may be neglected) while at the same time being sufficiently large that well localized structures are permitted.

Classical theory of localized states as exemplified by the Swift-Hohenberg equation (Burke & Knobloch 2007) shows that steady, spatially localized states are found in the region of bistability between the conduction state and spatially periodic convection. These states are organized in the so-called snakes-and-ladders structure consisting of a pair of intertwined branches of states of even and odd parity linked by rung-like branches consisting of asymmetric states. As one follows the branches to larger energy the localized states add cells on either side, maintaining symmetry, and so grow in length until the domain is filled with convection. This type of behavior has now been seen in a large variety of fluid flows (Batiste *et al.* 2006; Assemat *et al.* 2008; Bergeon & Knobloch 2008; Lo Jacono *et al.* 2010; Schneider *et al.* 2010; Beaume *et al.* 2011).

However, with stress-free velocity boundary conditions the equations describing twodimensional rotating convection conserve the integral of the transverse or *zonal* velocity and this special property of the equations allows localized states to be present outside of the region of bistability and indeed when spatially periodic convection sets in supercritically and no bistability is present at all. In this paper we provide numerical evidence backing these conclusions and relate them to the presence of the conserved quantity and the associated modulational instability (Cox & Matthews 2001).

This paper is organized as follows. In §2 we introduce the formulation of the problem. In §3 we compute spatially localized states and show that they exhibit *slanted* snaking. In §4 we use the amplitude equation approach to study the bifurcation to convectons. In §5 we use multiscale perturbation theory to explain various aspects of the numerical results. Brief conclusions follow in §6.

#### 2. Governing Equations

The dimensionless equations governing two-dimensional convection in a Boussinesq layer rotating uniformly about the vertical with angular velocity  $\Omega$  take the form

$$Ra\theta_x - Tv_z + \nabla^4 \psi = \sigma^{-1} \left[ \nabla^2 \psi_t + J(\psi, \nabla^2 \psi) \right], \qquad (2.1)$$

$$\psi_x + \nabla^2 \theta = \theta_t + J(\psi, \theta), \qquad (2.2)$$

$$T\psi_z + \nabla^2 v = \sigma^{-1} [v_t + J(\psi, v)].$$
(2.3)

Here  $\mathbf{u} \equiv (-\psi_z, v, \psi_x)$  is the velocity in the rotating frame with (x, y, z) as coordinates and  $\psi(x, z, t)$  is the poloidal streamfunction. The quantity v(x, z, t) represents the zonal velocity while  $\theta$  represents the departure of the temperature  $\Theta$  from the conduction profile and  $J(\psi, \cdot) \equiv \psi_x(\cdot)_z - (\cdot)_x \psi_z$ . To write these equations, we used the height h of the layer as the unit of length, the thermal diffusion time  $h^2/\kappa$ , where  $\kappa$  is the thermal diffusivity, as the unit of time and the imposed temperature difference  $\Delta\Theta$  as the unit of temperature. The resulting system is specified by the following dimensionless numbers: the Prandtl number  $\sigma$ , the Rayleigh number Ra and the Taylor number T defined by<sup>†</sup>

$$\sigma = \frac{\nu}{\kappa}, \qquad Ra = \frac{g\alpha \triangle \Theta h^3}{\kappa \nu}, \qquad T = \frac{2\Omega h^2}{\nu}.$$
 (2.4)

† In many papers the term Taylor number is used to refer to  $T^2$ .

Here  $\nu$  is the kinematic viscosity, g is the gravitational acceleration and  $\alpha$  is the thermal expansion coefficient in the Boussinesq approximation.

We impose stress-free and fixed temperature boundary conditions at the top and bottom

$$\psi = \psi_{zz} = \theta = v_z = 0 \text{ at } z \in \{0, 1\}$$
(2.5)

with periodic boundary conditions (PBC) in the horizontal with period  $\Gamma$  that is large compared with the onset wavelength  $\lambda_c$  of convection. With these boundary conditions, the system possesses the trivial solution  $\psi = \theta = v = 0$ , corresponding to the conduction state. This solution is present for all values of the Rayleigh number Ra and its instability as Ra increases is responsible for the presence of convection as described by Veronis (1959). The properties of the convecting state that results are in turn affected by the symmetries of Eqs. (2.1)–(2.3) with the boundary conditions (2.5). These include equivariance under horizontal translations,  $x \to x + \ell$ ,  $(\psi, \theta, v) \to (\psi, \theta, v)$ , as well as the following two reflections

$$\begin{aligned} R_1 : (x,z) &\to (-x,z), \quad (\psi,\theta,v) \to (-\psi,\theta,-v), \\ R_2 : (x,z) &\to (x,1-z), \quad (\psi,\theta,v) \to (-\psi,-\theta,v). \end{aligned}$$

Nontrivial solutions invariant under  $R_1$  have even parity under reflection in x = 0 while those invariant under the point symmetry  $R_1 \circ R_2$  have odd parity in the midplane z = 1/2. In the following we refer to localized states with these properties as  $L^+$  and  $L^-$ , respectively.  $R_2$ -symmetric solutions are only present at much larger Rayleigh numbers and will not be considered in this paper.

The stress-free boundary conditions (2.5) play an important role in what follows since with these boundary conditions v is defined only up to a constant, i.e., v is a phase-like variable. Moreover

$$\frac{d}{dt}\bar{V} = 0, \qquad \bar{V} \equiv \int_D v(x, z, t) \, dx \, dz, \qquad (2.6)$$

where D refers to the domain  $[-\Gamma/2, \Gamma/2] \times [0, 1]$ , implying that  $\overline{V}$  remains constant during time evolution. A similar situation arises in convection in a vertical magnetic field where the magnetic vector potential is phase-like and the conserved quantity is the vertical magnetic flux, as emphasized by Cox & Matthews (2001).

In the following, we compute stationary solutions of the equations using a numerical continuation algorithm based on a Newton solver. The implementation of the method follows that of Mamun & Tuckerman (1995) but uses a spectral element discretization in the horizontal. In each element, the fields are approximated by a high-order interpolant through the Gauss-Lobatto-Legendre points. The Newton solver requires a first-order time integration scheme for the equations; we use a scheme in which the diffusive linear part of the equations is treated implicitly and the nonlinear part explicitly. Each time step therefore requires the inversion of four Helmholtz problems. These are inverted by combining a Schur decomposition on the elements and diagonalization in z. We take full advantage of the symmetries of the equations to compute different spatially localized solutions. The computations employ approximately two spectral elements per critical wavelength  $\lambda_c$ , each element being meshed by a 15 × 11 Gauss-Lobatto-Legendre grid. Calculations with this resolution are well converged even at the highest Rayleigh numbers employed. The continuation algorithm has been used to study other systems where convectons are present, including magnetoconvection (Lo Jacono *et al.* 2011).
#### 3. Results

In this section, we discuss time-independent solutions of Eqs. (2.1)–(2.3) with the boundary conditions (2.5) and PBC in the horizontal, focusing on spatially localized states. We first consider the so-called subcritical regime and demonstrate the presence of slanted snaking in this regime. We then proceed to the supercritical regime and reveal that very similar behavior occurs in this regime as well. In both cases we discuss the role played by the Taylor number. Our solutions are computed with  $\overline{V} = 0$  implicitly enforced by imposing the symmetry  $R_1$  or  $R_1 \circ R_2$ . Each choice results in a distinct branch of localized solutions.

#### 3.1. Localized states in the subcritical regime

As Ra increases steady convection sets in at  $Ra_c$  independently of the value of the Prandtl number  $\sigma$ . As the Taylor number increases  $Ra_c$  moves to higher values: rotation stabilizes the conduction state against convection. For small Taylor numbers convection is supercritical but becomes subcritical with increasing Taylor number whenever the Prandtl number is sufficiently small. This is so for both stress-free and no-slip boundary conditions (Goldstein *et al.* 1990; Clune & Knobloch 1993). For yet larger rotation rates the steady onset is preceded by a Hopf bifurcation. In contrast, when  $\sigma > 0.676605$  the onset is steady regardless of the Taylor number and convection is always supercritical (Goldstein *et al.* 1990).

In this section we describe the results for  $\sigma = 0.1$  and several different values of T. Figure 1 shows the average poloidal kinetic energy,

$$\mathcal{E} \equiv \frac{1}{2\Gamma} \int_D (\psi_x^2 + \psi_z^2) \, dx \, dz, \qquad (3.1)$$

as a function of the Rayleigh number Ra when T = 20. For this value of T convection sets in at  $Ra_c \approx 1179.2$  and it does so with critical wavenumber  $k_c \approx 3.1554$ . The results are obtained in a periodic domain of length  $\Gamma = 10\lambda_c$ , where the critical wavelength  $\lambda_c \equiv 2\pi/k_c$  depends on the Taylor number and decreases as T increases. The figure shows the branch of steady periodic convection with 10 wavelengths in the domain, labeled  $P_{10}$ . The branch bifurcates strongly subcritically but turns around at a saddle-node at  $Ra \approx 913$ . The figure also shows a pair of branches of even and odd parity localized states, labeled  $L_{10}^{\pm}$ , that bifurcate from  $P_{10}$  at small amplitude ( $Ra \approx 1175, \mathcal{E} \approx 0.004,$ see Fig. 4). These branches also bifurcate subcritically. Initially both solutions take the form of weakly modulated wavetrains, but as Ra approaches the leftmost saddle-nodes at  $Ra \approx 807$  the modulation becomes strongly nonlinear resulting in the formation of welllocalized convectors of even and odd parity (Fig. 2). Beyond the leftmost saddle-nodes the two branches intertwine forming a structure that has been called *slanted snaking* (Firth et al. 2007; Dawes 2008). As one follows the two branches in the direction of increasing energy the convectors gradually increase in length by nucleating new cells at either end. Because of the slant in the snaking structure the localized states move towards larger values of the Rayleigh number and their wavelength grows (Fig. 2). As a result of this Rayleigh number dependence of the convector wavelength the domain  $\Gamma$ becomes almost full when the convectors have grown to 4 wavelengths. At this point the structure resembles a periodic wavetrain with defects a distance  $\Gamma$  apart and the snaking stops. The branches now undergo a loop required to squeeze in an extra pair of cells and terminate on  $P_5$  with 5 wavelengths in the domain  $\Gamma$  (Fig. 1).

Convectons in a Rotating Fluid Layer



FIGURE 1. Bifurcation diagram showing the average poloidal kinetic energy  $\mathcal{E}$ , as a function of the Rayleigh number Ra for slanted snaking when T = 20 and  $\sigma = 0.1$ . The branches of localized states  $L_{10}^{\pm}$  in a  $\Gamma = 10\lambda_c$  domain are shown. They bifurcate in a secondary bifurcation on the branch  $P_{10}$  of periodic convection with 10 pairs of counter-rotating rolls in  $\Gamma$  and connect to  $P_5$ , the branch of 5 pairs of counter-rotating rolls in  $\Gamma$ . The solutions at each saddle-node during the snaking process are shown in Fig. 2.

The lower panels in Fig. 2 show the profile of the depth-integrated zonal velocity

$$V(x) \equiv \int_{0}^{1} v(x, z) \, dz.$$
 (3.2)

We see that the presence of convection imprints a step-like structure on this profile much as occurs in the corresponding magnetoconvection problem with imposed vertical magnetic field (Lo Jacono *et al.* 2011). This structure turns into a saw-tooth profile by the time the branches terminate on the branch  $P_5$  of periodic states. To understand this behavior we first note that the symmetry  $R_2$  implies that clockwise and counterclockwise cells have the same effect on V(x); moreover, the symmetry  $R_1$  implies that the slope of V(x) is unaffected by reflection in x = 0. In the periodic state (top panels) V(x) varies linearly across each convection cell with steeper diffusive layers of the opposite slope between adjacent cells. These diffusive layers are quite broad since their dimensional width is  $Re^{-1/2}h$ , where  $Re \equiv Uh/\nu$  is the Reynolds number; since the flow speed  $U \sim \kappa/h$  when  $Ra \sim Ra_c$  the dimensionless width  $\sim \sigma^{1/2}$ . The effect of the cellular motion outside these layers is most easily discussed in terms of the relation

$$\sigma \frac{dV}{dx} = -\int_0^1 \psi_z v \, dz,\tag{3.3}$$

obtained from Eq. (2.3) upon integration over z followed by integration once in x. Thus nonzero values of the averaged Reynolds stress are responsible for the presence of a linear profile V(x) across the cell.

These ideas extend to the whole convecton itself. Figure 2 shows that each convecton



FIGURE 2. Solution profiles at successive saddle-nodes on (a)  $L_{10}^-$ , (b)  $L_{10}^+$  in Fig. 1. Upper panels show isovalues of the streamfunction with light (dark) regions corresponding to clockwise (counterclockwise) flow. Lower panels show the profiles of V(x). Topmost solutions correspond to the termination point on  $P_5$ .

is accompanied, regardless of parity, by a nonzero shear across it. This shear can be quantified by

$$\Delta V \equiv V(x = L/2) - V(x = -L/2), \tag{3.4}$$

where L is the length of the convecton. The average shear generated by the presence of the convecton is therefore  $\Delta V/L$  with the cellular structure imprinted on this background shear. Of course in view of PBC the shear generated by the convecton must be compensated by equal and opposite shear in the convection-free part of the domain. The presence of this compensating shear is also seen in Fig. 2.

In the following we define the convecton length L as the distance between the global maxima and minima of the zonal velocity V(x) and show in Fig. 3(a) the corresponding velocity difference  $|\Delta V|$  for the solutions shown in Fig. 2 and in Fig. 3(b) the fraction  $L/\Gamma$  of the domain  $\Gamma$  occupied by the convecton, both as functions of Ra. Both even and odd parity convectons have similar lengths L at corresponding Rayleigh numbers and generate similar values of  $\Delta V$ . The resulting shear rate  $V'(x) \sim \Delta V/L$  reduces the local rotation rate quite substantially. For example, when T = 20 and  $\sigma = 0.1$  the maximum value of quantity  $|\Delta V|/\sigma LT \approx 0.7$ , occurs at  $Ra \approx 810$  and represents a 70% reduction in the local rotation rate.



FIGURE 3. Properties of the convectons computed in Fig. 1. (a) Jump  $|\Delta V|$  in zonal velocity across the convecton, (b) convecton length L relative to the domain period  $\Gamma = 10\lambda_c$ , both as functions of the Rayleigh number Ra. The length L is shown for the slanted snaking branch between the leftmost and rightmost saddle-nodes only since its determination requires that the convectons be well localized. Discontinuities (vertical jumps) correspond to nucleation of new cells.

#### 3.2. Effect of domain size

Figure 4 shows the effect of varying the domain size  $\Gamma$  and compares the bifurcation diagrams for  $\Gamma = 10\lambda_c$ ,  $15\lambda_c$  and  $20\lambda_c$ , all for T = 20 and  $\sigma = 0.1$ . As  $\Gamma$  increases the secondary bifurcation on  $P_{10}$  that creates the localized states moves to smaller and smaller amplitude (Fig. 4(a)) while the leftmost saddle-nodes on  $L^{\pm}$  shift towards lower Rayleigh numbers ( $Ra \approx 807$  for  $L_{10}^{\pm}$ ,  $Ra \approx 798$  for  $L_{15}^{\pm}$ ,  $Ra \approx 793$  for  $L_{20}^{\pm}$ ,  $Ra \approx 787$ for  $L_{40}^{\pm}$ ). Moreover, beyond the leftmost saddle-node  $\mathcal{E}$  increases with Ra at the same rate in all cases. At the same time the number of saddle-nodes on each branch increases in proportion to  $\Gamma$ . A careful examination of the solution profiles in each case indicates that the nucleation of new cells can be associated with the saddle-nodes on the left, with the new cells at full strength by the time one reaches the next saddle-node on the right. Thus in larger domains new cells are nucleated faster in such a way that at a fixed value of Ra the convectors fill the same fraction of the available domain. Figure 4(b) also reveals that the saddle-nodes occur more frequently for smaller values of Rathan for larger Ra. This is a consequence of the wavelength change that occurs with increasing Ra – because of this wavelength change the structure expands with Ra and so fewer nucleation events become necessary to maintain the growth rate of the structure with increasing Ra. Figure 4(b) suggests that this growth rate is constant in Ra and  $\Gamma$ independent. Computation of the wavelength within the localized structure as a function of  $R_a$  shows that the  $L_{20}^{\pm}$  branches bifurcate from  $P_{20}$  with wavelength  $\lambda \approx 1.9912$ ;  $L_{20}^{\pm}$  terminates on  $P_{10}$  with  $\lambda \approx 3.9825$  while  $L_{20}^{\pm}$  terminates on  $P_9$  with  $\lambda \approx 4.4250$ . Most of the required wavelength increase occurs along the lower convecton branch, prior to the leftmost saddle-node, growing from  $\lambda \approx 1.9912$  at the initial bifurcation point to  $\lambda \simeq 3.6$  at the leftmost saddle-node. Beyond the saddle-node, within the interval of



FIGURE 4. Bifurcation diagram showing the average poloidal kinetic energy  $\mathcal{E}$  as a function of the Rayleigh number Ra for various domain sizes  $\Gamma$  at T = 20 and  $\sigma = 0.1$ . (a) Small amplitude behavior: the branches  $P_n$  of periodic convection coincide, but the convecton branches  $L_n^{\pm}$  move to lower amplitude as  $\Gamma$  increases. At these values of Ra the  $L_n^{\pm}$  branches are exponentially close for each n and hence indistinguishable. (b) Comparison between branches of localized states for  $\Gamma = 10\lambda_c$ ,  $15\lambda_c$  and  $20\lambda_c$ . For clarity, the branches for  $\Gamma = 15\lambda_c$  and  $\Gamma = 20\lambda_c$  have been displaced to Ra + 50 and Ra + 100, respectively, i.e., in proportion to  $\Gamma$ .

slanted snaking, the wavelength varies linearly with Ra but the cumulative increase in the wavelength is less than on the lower branch.

Figure 5(a) shows the *total* poloidal kinetic energy  $E \equiv (1/2) \int_D (\psi_x^2 + \psi_z^2) dx dz$  as a function of Ra for  $\Gamma = 20\lambda_c$  and  $\Gamma = 40\lambda_c$ . This representation separates the two branches and demonstrates the presence of the extra saddle-nodes required for the localized structure to grow at twice the rate for  $\Gamma = 40\lambda_c$  as for  $\Gamma = 20\lambda_c$ . In particular, the figure employs vertical lines to indicate the correspondence between the right saddlenodes along the  $L_{20}^+$  and  $L_{40}^+$  branches and reveals that every second right saddle-node on  $L_{40}^+$  aligns with the corresponding right saddle-node on  $L_{20}^+$ . (The intervening right saddle-nodes on  $L_{40}^+$  align with those of  $L_{20}^-$ , since  $L_{40}^+$  possesses twice the number of cells as  $L_{20}^\pm$  at the same Rayleigh number, so the 8 roll saddle-node solution on  $L_{40}^+$  aligns with the 4 roll solution on  $L_{20}^-$  and so on). Figure 5(b) confirms the conclusion that convectons grow in length at twice the rate when the domain size is doubled by showing the fraction of the domain period occupied by even and odd parity convectons when  $\Gamma = 10\lambda_c$  and when  $\Gamma = 20\lambda_c$ .

#### 3.3. Effect of rotation rate

When rotation is absent the problem reduces to Rayleigh–Bénard convection which is supercritical and free from localized structures. In Fig. 6 we show how this picture changes as the Taylor number increases. Each panel in the figure is computed for the same Prandtl number  $\sigma = 0.1$  and  $\Gamma = 10\lambda_c$  as used for Fig. 1 for T = 20. Since the critical wavelength  $\lambda_c$  decreases with increasing T this choice implies that the aspect ratio used also decreases



FIGURE 5. (a) The total poloidal kinetic energy E for  $L_{20}^{\pm}$  ( $\Gamma = 20\lambda_c$ ) and  $L_{40}^{\pm}$  ( $\Gamma = 40\lambda_c$ ) as a function of the Rayleigh number Ra. The vertical dashed lines indicate the alignment of the saddle-nodes. Top panel: even parity convectons. Bottom panel: odd parity convectons. (b) The fraction of the domain period  $\Gamma$  occupied by both even and odd parity convectons when  $\Gamma = 10\lambda_c$  (black lines) and  $\Gamma = 20\lambda_c$  (gray lines).

with T. Since motion relieves the stabilizing constraints of rotation convection quickly becomes subcritical as T increases. Figure 6 shows that this is already so for T = 10 and reveals that at this rotation rate the leftmost saddle-nodes of both the periodic states and the localized states are close together. Since the latter lies below the saddle-node of the periodic state some localized states already fall outside the region of bistability between the periodic and conduction states. As T increases both saddle-nodes move towards larger Ra but the saddle-node of the periodic states does so much faster, thereby opening an increasingly wide Rayleigh number interval in which localized states fall outside the bistability region. This is a consequence of the higher rotation rate which stabilizes the conduction state and pushes  $Ra_c$  higher. This stabilizing effect is present at finite amplitude as well but is reduced for the localized states from that prevailing for the periodic states by the shear  $\Delta V/L$  that accompanies their presence. As a result the full Rayleigh number interval in which localized states are present also grows rapidly with the rotation rate (Fig. 6 and Table 1). The right edge of this interval is determined by the rightmost saddle-node but in all cases studied this point is not far from the saddle-node on the branch of periodic states on which the convectors terminate. This is a consequence of the strong Rayleigh number dependence of the wavelength within the convectors which prevents their termination until periodic states of the right wavelength are present. Of course, in cases in which the convecton wavelength is strongly incommensurate with the domain period the wavelength at termination may differ substantially from the preferred wavelength, as discussed in detail by Bergeon et al. (2008). This is the case, for example, for T = 40 and T = 80 in Fig. 6 for which the  $L_{10}^{\pm}$  branches terminate on different periodic branches (see Table 1).

Figure 6 also reveals that as T decreases from larger values the amplitude of the oscillations of  $L^{\pm}$  about the overall slope gradually decreases and the saddle-nodes that





FIGURE 6. Bifurcation diagrams  $\mathcal{E}(Ra)$  displaying the branches  $L_{10}^{\pm}$  of localized states together with the  $P_{10}$  branch from which they bifurcate, all for  $\sigma = 0.1$  and  $\Gamma = 10\lambda_c$ . The periodic branch(es) on which the  $L_{10}^{\pm}$  terminate is (are) not entirely shown (see Table 1). (a) T = 10, (b) T = 40 and (c) T = 80. Figure 1 shows the case T = 20.

T	10	20	40	80
$\lambda_c$	2.423	1.991	1.552	1.198
$Ra_c$	826	1179	2068	4195
Left saddle-node of $P_{10}$	737	913	1418	2721
Left edge of snaking	723	806	964	1258
Right edge of snaking	778	1025	1675	3013
Connects to	$P_7$	$P_5$	$P_4 (L_{10}^-)$ and $P_3 (L_{10}^+)$	$P_3 (L_{10}^-)$ and $P_2 (L_{10}^+)$
with wavelength	3.64	3.98	3.88 $(L_{10}^-)$ and 5.17 $(L_{10}^+)$	3.99 $(L_{10}^-)$ and 5.99 $(L_{10}^+)$
TABLE 1. Characteristics of slanted snaking for $\sigma = 0.1$ , $\Gamma = 10\lambda_c$ and different values of T.				

are so characteristic of the snaking region are progressively eliminated. In particular, in the case shown in Fig. 6(a) the convectons grow in length by adding new cells on either side while the solution branch remains *monotonic* in Ra. The resulting *smooth snaking* (Dawes & Lilley 2010; Lo Jacono *et al.* 2011) can also be attributed to the presence of the conserved quantity  $\bar{V}$ .

#### 3.4. Localized states in the supercritical regime

As  $\sigma$  is increased, the primary branch of periodic states becomes less and less subcritical and a transition occurs towards supercriticality. Figure 7(a) presents the bifurcation diagram for  $\sigma = 0.6$  and T = 40 in a domain  $\Gamma = 10\lambda_c$  where, at this Taylor number, the critical wavenumber  $k_c = 4.0481$ . For these parameter values the primary solution branch bifurcates supercritically at  $Ra = Ra_c \approx 2068$ . This branch loses stability almost immediately, at  $Ra \approx 2073$ , creating a pair of branches of spatially modulated states. These states behave in exactly the same way as in the subcritical case: as one follows the resulting  $L_{10}^{\pm}$  towards smaller Rayleigh numbers the modulation strengthens and generates, by the time one reaches the leftmost saddle-nodes, isolated convectons of even and odd parity. Beyond this point the  $L_{10}^{\pm}$  branches intertwine resulting in smooth snaking without any additional saddle-nodes until the rightmost saddle-nodes marking the right edge of the existence region for convectons. In the present case both  $L_{10}^{\pm}$  branches terminate together on the  $P_7$  branch at  $Ra \approx 2391$ . Figure 8 shows the solutions along these



FIGURE 7. (a) Bifurcation diagram showing the average poloidal kinetic energy  $\mathcal{E}$  as a function of the Rayleigh number Ra for the periodic states  $P_{10}$ ,  $P_7$  and for the branches  $L_{10}^{\pm}$  of spatially localized states. (b) The local reduction in the rotation rate within the localized structures as measured by the quantity  $|\Delta V|/\sigma LT$  between the leftmost and rightmost saddle-nodes on both slanted snaking branches, where L is the convecton length. The parameters are T = 40,  $\sigma = 0.6$ and  $\Gamma = 10\lambda_c$ .

branches using the same representation as used in Fig. 2. The solutions are qualitatively similar to those in Fig. 2 except for broader diffusive layers between adjacent cells owing to the larger Prandtl number. As a result the saw-tooth structure of V(x) in the periodic state is less marked. However, the localized states are still accompanied by strong negative shear within the structure (Fig. 7(b)) that serves to reduce the local rotation rate, with a compensating prograde shear zone outside. Thus the convectons are embedded in a self-generated shear zone exactly as in the subcritical case.

In Fig. 9 we show the evolution of the  $L_{10}^{\pm}$  branch as T is varied from T = 20 to T = 110, while keeping  $\sigma = 0.6$  and  $\Gamma = 10\lambda_c$ . We emphasize again that  $\lambda_c$  depends on the value of T used. In all cases the primary periodic branch bifurcates supercritically. We see that for small T the extent of the subcriticality of the secondary branches is relatively narrow while the maximum energy along the branch remains relatively small. With increasing T the branch of localized states moves to larger values of Ra (along with the primary bifurcation). At the same time the branch becomes more subcritical and the maximum energy attained increases rapidly. Simultaneously the small amplitude oscillations superposed on the general tilt of the branch become more and more noticeable although the snaking remains smooth. The number of these oscillations decreases with increasing T owing to two properties of the solutions: the Rayleigh number range for the presence of convectons increases with T and the wavelength within the convectons increases with Ra. As a result fewer and fewer cells can be added before the domain is filled and the  $L_{10}^{\pm}$  branches must terminate. For example,  $L_{10}^{+}$  terminates on  $P_8$  when T = 20 and on  $P_7$  when T = 30 and T = 40. This fact is responsible for the observation that maximum energy is attained for  $T \approx 40$  after which the energy begins to drop off. The extent in Rayleigh number within which convectors are present is likewise widest



FIGURE 8. Same as Fig. 2 but for the localized solutions along (a)  $L_{10}^-$  and (b)  $L_{10}^+$  in Fig. 7(a).

for T = 40 and starts to decrease for larger T while the extent of the subcriticality of the  $L_{10}^{\pm}$  branches decreases at the same time, and essentially disappears by T = 100. Figure 10 shows the existence region of convectons in the (Ra, T) plane when  $\sigma = 0.6$ and  $\Gamma = 10\lambda_c$ . The figure confirms that the range of Ra for which such states are present is broadest when  $T \approx 40$  and that it shrinks to zero at both small and large T. For example, we have found no secondary bifurcations from the periodic state at T = 5 and



FIGURE 9. Bifurcation diagrams representing the average poloidal kinetic energy  $\mathcal{E}$  as a function of the Rayleigh number Ra for the  $L_{10}^{\pm}$  branches for different Taylor numbers T when  $\sigma = 0.6$ and  $\Gamma = 10\lambda_c$ . In all cases these branches bifurcate from  $P_{10}$  (not shown). The  $L_{10}^{\pm}$  branches are indistinguishable for  $T \ge 70$ .

T = 120. The localization of the lowest Rayleigh number convectons is likewise strongest at  $T \approx 40$  (Fig. 11).

Figure 9 reveals another interesting aspect of this evolution. Until T = 50 the slope  $d\mathcal{E}/d(Ra)$  is approximately constant and independent of T. This is so beyond T = 60 as well, although the slope now takes a significantly lower value. In the former regime the localized structures grow via nucleation of new cells, behavior that is associated with snaking. In contrast, beyond T = 60 snaking is absent, suggesting that convectors no longer grow via nucleation. Moreover, the solution branches in this regime always terminate on  $P_{10}$ . Figure 9 suggests that the transition between these two regimes takes place at approximately T = 60.

In an attempt to understand the origin of this change in behavior we plot in Figs. 12 and 13 the profiles along the branches of even parity convectors for T = 50 and T = 100. While the convectors are in both cases well localized near the left saddle-nodes (albeit less so when T is larger) the figures reveal a significant change in the wavelength of the cells comprising them. In Fig. 12 the cells are initially broad and remain so until maximum energy is reached; thereafter the wavelength decreases rapidly and the branch terminates on  $P_{10}$ . In contrast, the wavelength of the cells when T = 100 (Fig. 13) hardly changes as  $\mathcal{E}$  increases from small values to large, and this is so already when Ta = 70. At the same time the dimples representing nucleation events in Fig. 12 disappear and the convecton branch exhibits "smooth snaking" (Dawes & Lilley 2010) with continuous and gradual appearance of new cells and no abrupt nucleation events. A similar transition was recently observed in magnetoconvection with an imposed vertical magnetic field (Lo Jacono et al. 2011, 2012). We surmise that the sudden change in slope of the slanted snaking that takes place around T = 60 is related to this change in cell wavelength and note, in particular, that broader cells are more efficient at transporting heat since in narrower cells such as those favored at larger rotation rates the rising plumes exchange more heat with falling plumes, thereby reducing their efficiency and hence the associated Nusselt number. Thus for  $T \lesssim 50$  the length scale of convection is selected primarily by



FIGURE 10. The existence region (shaded) of convectons in the (Ra, T) plane when  $\sigma = 0.6$ . The vertical bold line at  $Ra = Ra_c$  represents the onset of spatially periodic convection. The existence region is delimited either by saddle-node bifurcations on the convecton branches, or by bifurcations to modulated states if no such saddle-nodes exist.

thermal effects, while for  $T \gtrsim 70$  the length scale is selected primarily by a competition between the tendency towards a Taylor-Proudman balance and the requirement that the flow transport heat at the level specified by the Rayleigh number. In the former regime localization is strong and nucleation of new cells occurs at well-defined Rayleigh numbers. In contrast, the latter regime is characterized by weak localization while new cells grow gradually over a range of Rayleigh numbers. Of course, for  $T \lesssim 10$  localization is also weak but this is a consequence of the slow rotation rate.

Figures 2 and 8 also reveal a systematic trend that merits explanation: the convecton cells are always broader than the corresponding cells in the periodic state. We believe that this is a reflection of the shear V' across the convecton. If we suppose that this shear is smoothed out and is a linear function of x, i.e., V(x) = sx, where s < 0 (see, e.g., Fig. 2) we may include this shear in the base state and study the stability of the state  $(\psi, \theta, v) = (0, 0, sx)$  instead of the state  $(\psi, \theta, v) = (0, 0, 0)$ . The stability of this state is described by the relations given in §4 with  $T^2$  replaced by  $T(T + \sigma^{-1}s)$ . It follows that negative shear (s < 0) decreases both the critical Rayleigh number  $Ra_c$  and the associated critical wavenumber  $k_c$  relative to the case s = 0. However, this linear effect is quickly overwhelmed by the nonlinear wavelength change that takes place with increasing amplitude. We return to this question in the next section.

#### 4. Theoretical understanding of the bifurcation to convectons

Linear stability analysis predicts that the conduction state  $\psi = \theta = v = 0$  loses stability with respect to stationary perturbations with wavenumber k when Ra reaches

$$Ra(k) = \frac{p^3 + \pi^2 T^2}{k^2}, \qquad p \equiv k^2 + \pi^2.$$
(4.1)



Convectons in a Rotating Fluid Layer

FIGURE 11. Localized solutions at the leftmost saddle-node for T increasing from 10 to 90 in steps of 10 when  $\sigma = 0.6$  and  $\Gamma = 10\lambda_c$ . The same isovalues of the streamfunction are used in all panels. The localization is strongest when  $T \approx 40$ .

The critical value  $Ra_c$  is defined as the minimum of Ra(k) for a stationary bifurcation to occur, implying that (Veronis 1959)

$$Ra_c = 3p_c^2, \qquad p_c^2(2k_c^2 - \pi^2) = T^2\pi^2, \tag{4.2}$$

where  $p_c \equiv k_c^2 + \pi^2$  and  $k_c = k_c(T)$  is the critical wavenumber satisfying the second of the above relations. In the following we omit the subscript on  $k_c$  and  $p_c$  but retain the subscript on  $Ra_c \equiv Ra_c(T)$ .

To compute the resulting solutions in the weakly nonlinear regime we suppose that  $Ra = Ra_c + \epsilon^2 r$ , where r = O(1),  $\epsilon \ll 1$ , and introduce a slow spatial scale  $X = \epsilon x$  and a slow time scale  $T_2 = \epsilon^2 t$ . We follow Cox & Matthews (2001) and look for solutions in the form

$$\psi = \frac{\epsilon}{2} \left( a(X, T_2) e^{ikx} + c.c. \right) \sin(\pi z) + h.o.t., \tag{4.3}$$

$$\theta = \frac{\epsilon k}{2p} \left( ia(X, T_2)e^{ikx} + c.c. \right) \sin(\pi z) + h.o.t., \tag{4.4}$$



FIGURE 12. (a) Bifurcation diagram for the  $L_{10}^+$  branch when T = 50 (Fig. 9). The branch bifurcates from  $P_{10}$  and terminates on  $P_{10}$ . The solid dots indicate the location of the solutions shown in (b).



FIGURE 13. As for Fig. 12 but for T = 100.

Convectors in a Rotating Fluid Layer 17

$$v = \epsilon V(X, T_2) + \frac{\epsilon T \pi}{2p} \left( a(X, T_2) e^{ikx} + c.c. \right) \cos(\pi z) + h.o.t.$$
(4.5)

The large scale zonal velocity V is necessary to capture the shear that builds up across a convecton and enters at  $O(\epsilon)$ ; its inclusion is a consequence of the phase-like quality of the variable v, i.e., the invariance of Eqs. (2.1)–(2.3) with the boundary conditions (2.5) with respect to  $v \to v + c$ , where c is a constant. At third order we obtain the equations (Cox & Matthews 2001)

$$\frac{p(3k^2\sigma - k^2 + 2\pi^2)}{\sigma k^2}a_{T_2} = ra + 12pa_{XX} - \frac{3pk^2}{8}(1 - \xi^2)|a|^2a - \frac{T\pi^2}{\sigma k^2}aV_X, \quad (4.6)$$

$$V_{T_2} = \sigma V_{XX} + \frac{T\pi^2}{4p} \left( |a|^2 \right)_X, \qquad (4.7)$$

where  $\xi \equiv \frac{T\pi^2}{\sqrt{3pk^2\sigma}}$ . This set of equations can be further simplified by rescaling the variables  $(a \rightarrow \frac{2A}{\sqrt{3pk}}, V \rightarrow 2V/\sqrt{p}, X \rightarrow \sqrt{12p}X, T_2 \rightarrow 12pT_2/\sigma)$ , leading to

$$\eta A_{T_2} = rA + A_{XX} - \frac{1 - \xi^2}{2} |A|^2 A - \xi A V_X, \qquad (4.8)$$

$$V_{T_2} = V_{XX} + \xi \left( |A|^2 \right)_X, \tag{4.9}$$

where  $\eta \equiv \frac{3k^2\sigma - k^2 + 2\pi^2}{12k^2}$ . The quantity  $\eta$  vanishes at the Takens-Bogdanov point  $Ra_H = Ra_c$  where  $Ra_H$  is the critical Rayleigh number for the onset of a Hopf mode with the same wavenumber k. In the present work we are interested in the case in which the conduction state loses stability at a steady state bifurcation, i.e., a Hopf bifurcation is absent. In this case  $\eta > 0$ .

Equations (4.8) and (4.9) can also be written in the form

$$A_{T_2} = -\eta^{-1} \frac{\delta F}{\delta A^*}, \qquad V_{T_2} = -\frac{\delta F}{\delta V}, \qquad (4.10)$$

where F is defined as

$$F[A, A^*, V] = \int_{\Gamma'} \left\{ -r|A|^2 + |A_X|^2 + \frac{1}{2}|V_X|^2 + \frac{1-\xi^2}{4}|A|^4 + \xi|A|^2V_X \right\} dX.$$
(4.11)

The functional  $F[A, A^*, V]$  is bounded from below when  $\xi^2 < 1/3$ . It follows that in this case the system (4.6)-(4.7) has variational dynamics provided only that  $\eta > 0$ . This is not necessarily the case for the original system (2.1)-(2.3).

In the stationary case with PBC on the large scale X Eq. (4.9) implies that

$$V_X = \xi\left(\left\langle |A|^2 \right\rangle - |A|^2\right),\tag{4.12}$$

where  $\langle \cdot \rangle$  represents a spatial average over the domain. Thus  $V_X > 0$  if  $|A|^2 < \langle |A|^2 \rangle$ , i.e., outside the convecton, while  $V_X < 0$  if  $|A|^2 > \langle |A|^2 \rangle$ , i.e., inside the convecton, exactly as found in Figs. 2 and 8. Moreover, using Eq. (4.12) to eliminate  $V_X$  from Eq. (4.8) we obtain the *nonlocal* equation (Cox & Matthews 2001)

$$rA + A_{XX} - \frac{1}{2}(1 - 3\xi^2)|A|^2 A - \xi^2 \langle |A|^2 \rangle A = 0.$$
(4.13)

Let  $A = \rho e^{i\phi}$  with  $\rho, \phi \in \mathbb{R}$  and  $\rho > 0$ . If  $\rho$  is independent of X, i.e., the solution is periodic, then  $\langle |A|^2 \rangle = \rho^2 = 2(r-q^2)/(1-\xi^2)$ , where  $q \equiv \phi_X$ , and the solution is supercritical when  $\xi^2 - 1 < 0$  and subcritical when  $\xi^2 - 1 > 0$ , as determined already by C. Beaume, A. Bergeon, H.-C. Kao and E. Knobloch

Veronis (1959). The point  $\xi^2 = 1$ , sometimes called the tricritical point, occurs at

$$T_{c} = \frac{\sqrt{3}\sigma\pi^{2} \left(2 \pm \sqrt{1 - 3\sigma^{2}}\right)}{\left(1 \pm \sqrt{1 - 3\sigma^{2}}\right)^{2}} \equiv T_{\pm}^{per}.$$
(4.14)

This relation implies that, provided  $\sigma < 1/\sqrt{3}$ , the bifurcation to periodic convection is supercritical for  $T < T_{+}^{per}$ , becomes subcritical for  $T_{+}^{per} < T < T_{-}^{per}$  and then changes back to supercritical for  $T > T_{-}^{per}$ , cf. Goldstein *et al.* (1990); the bifurcation is always supercritical when  $\sigma \ge 1/\sqrt{3}$ . Equation (4.12) shows that the inclusion of amplitude modulation on the scale X = O(1) alters this picture dramatically. In particular, the codimension two point for *modulated* wavetrains occurs at a *different* location, as determined next. This shift is a consequence of the nonlinear interaction between the unstable mode and the marginally stable longwave mode V.

Nonlocal equations of the form (4.13) have been studied before (Hall 1984; Elmer 1988; Norbury *et al.* 2002; Vega 2005; Norbury *et al.* 2007). We summarize first the stability properties of the periodic solution  $A = \rho e^{iqX}$ , V = 0, corresponding to a wavetrain  $(\psi, \theta, v)$  with wavenumber  $k + \epsilon q$ . We write  $A = \rho e^{iqX} (1 + \tilde{A})$ , where  $|\tilde{A}| \ll 1$ , and let V be the associated zonal velocity perturbation. The linearized equations are

$$\eta \tilde{A}_{T_2} = \tilde{A}_{XX} + 2iq\tilde{A}_X - (1 - \xi^2)\rho^2 Re[\tilde{A}] - \xi V_X, \qquad (4.15)$$
$$V_{T_2} = V_{XX} + 2\xi\rho^2 Re[\tilde{A}]_X. \qquad (4.16)$$

The characteristic polynomial for the growth rate  $\lambda$  of a Fourier mode with wavenumber l is (Cox & Matthews 2001)

$$\begin{split} & \eta^2 \lambda^3 + \eta \lambda^2 \left[ (1 - \xi^2) \rho^2 + (2 + \eta) l^2 \right] + \lambda l^2 \left[ (1 - \xi^2) \rho^2 + \eta (1 - 3\xi^2) \rho^2 - 4q^2 \right] \\ & + \lambda l^4 (1 + 2\eta) + l^4 \left[ l^2 - 4q^2 + (1 - 3\xi^2) \rho^2 \right] = 0. \end{split}$$

Thus when  $|l| \ll 1$  there is a pure amplitude mode with O(1) eigenvalue  $\lambda \approx (\xi^2 - 1)\rho^2/\eta + O(l^2)$  reflecting the supercriticality or subcriticality of the periodic state and two  $O(l^2)$  eigenvalues satisfying

$$\eta \rho^2 (1-\xi^2) \lambda^2 + \left[ \eta \rho^2 (1-3\xi^2) + \rho^2 (1-\xi^2) - 4q^2 \right] l^2 \lambda + \left[ \rho^2 (1-3\xi^2) - 4q^2 \right] l^4 \approx 0.$$
(4.17)

It follows that when q = 0 there are two longwave modes,  $\lambda = -l^2/\eta$  and  $\lambda = \frac{3\xi^2 - 1}{1 - \xi^2}l^2$ . Thus when  $\eta < 0$  ( $Ra_H < Ra_c$ ) the periodic state at band center is necessarily unstable. On the other hand when  $\eta > 0$  (no primary Hopf bifurcation) there is a longwave instability when  $1/3 < \xi^2 < 1$  but no longwave instability when  $\xi^2 < 1/3$ . Thus the q = 0 mode loses stability as  $\xi^2$  decreases through  $\xi^2 = 1/3$ , i.e., as the rotation increases or decreases (see Fig. 14). The resulting instability generates an amplitude modulated wave-train. When  $\xi^2 > 1$  the periodic state is subcritical and therefore also unstable. Finally, when  $q \neq 0$  the two longwave modes become coupled but no secondary Hopf bifurcation is possible when  $\eta > 0$ . These results apply to infinite domains; in finite domains they require modification as discussed further below (Norbury *et al.* 2007).

The spatial dynamics of Eq. (4.13) take the form of a complex Duffing equation which is integrable with two conserved quantities:

$$K_1 \equiv \rho^2 \phi_X, \quad K_2 \equiv \frac{1}{2} (\rho_X)^2 + U[\rho],$$
 (4.18)

where

$$U[\rho] \equiv \frac{1}{2}r'\rho^2 + \frac{K_1^2}{2\rho^2} - \frac{1}{8}(1 - 3\xi^2)\rho^4.$$
(4.19)

Here  $r' \equiv r - \xi^2 \langle \rho^2 \rangle$ , implying that the bifurcation parameter r is increasingly modified as the convection amplitude  $\rho$  grows. In a periodic domain with period  $\Gamma'$  (the period  $\Gamma$ in terms of the large scale X) PBC and the integral constraint imply

$$\frac{\Gamma'}{2n} = \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \frac{d\rho}{\sqrt{2(K_2 - U)}}, \quad \frac{\langle \rho^2 \rangle \Gamma'}{2n} = \int_{\rho_{min}}^{\rho_{max}} \frac{\rho^2 d\rho}{\sqrt{2(K_2 - U)}}, \quad (4.20)$$

where  $n \in \mathbb{N}$  is the number of full periods of amplitude modulation within  $\Gamma'$ , and  $\rho_{min}$  $(\rho_{max})$  corresponds to the minimum (maximum) of  $\rho$  during amplitude modulation. The total change of phase across the domain (including the contribution from the fast oscillation with wavenumber k) must be an integer multiple of  $2\pi$  implying that  $\int_0^{\Gamma'} \phi_X dX$  must also be a constant unless a phase jump occurs. The wavenumber  $q \equiv \phi_X$  is a constant along the branch of periodic states. Secondary branching occurs when  $\rho$  attains a local minimum of U. To fit PBC,  $U_{\rho\rho}$  must be equal to  $4\pi^2 n^2/\Gamma'^2$  which occurs at  $r = r_n$  where

$$r_n \equiv \frac{2\pi^2 n^2}{\Gamma'^2} \frac{1-\xi^2}{3\xi^2-1} + \frac{5\xi^2-3}{3\xi^2-1}q^2$$
(4.21)

in both super and subcritical cases. When q is small, a secondary bifurcation is only possible when  $\xi^2 > 1/3$ . The branching direction at these points was calculated by Elmer (1988), who shows that when q = 0, the secondary bifurcation is supercritical when  $\xi^2 < 3/7$  and subcritical when  $\xi^2 > 3/7$  (see Appendix A for an alternative derivation of this result). In summary, there are four possible scenarios for the primary–secondary bifurcations with PBC: (1) both bifurcations are subcritical ( $\xi^2 > 1$ ), (2) the primary bifurcation is supercritical while the secondary bifurcation is subcritical ( $3/7 < \xi^2 < 1$ ), (3) both bifurcations are supercritical ( $1/3 < \xi^2 < 3/7$ ), and (4) the primary bifurcation is supercritical but no secondary bifurcation is present ( $\xi^2 < 1/3$ ). Figure 14 shows the regions of super and subcriticality in the ( $\sigma, T$ ) plane, while Fig. 15 shows sample bifurcation diagrams computed from Eq. (4.13) for (some of) the Taylor numbers used in Fig. 9 using the numerical continuation software AUTO (Doedel *et al.* 2008). Owing to translation symmetry ( $A \rightarrow Ae^{i\phi_0}$ ) and spatial reversibility ( $A \rightarrow A^*, X \rightarrow -X$ ), we perform continuation on the half domain using Neumann boundary conditions (NBC), i.e.,

$$Re[A_X] = Im[A] = 0 \tag{4.22}$$

at the boundaries. The average poloidal kinetic energy  $\mathcal{E}$  to  $O(\epsilon^4)$  takes the form

$$\mathcal{E} = \frac{1}{8}\epsilon^2 p \left\langle |a|^2 \right\rangle + \frac{1}{8}i\epsilon^3 k \left\langle aa_X^* - a^*a_X \right\rangle + \frac{1}{8}\epsilon^4 \left\langle |a_X|^2 \right\rangle, \tag{4.23}$$

where the amplitude a is defined in Eq. (4.3). We use this expression to draw bifurcation diagrams  $\mathcal{E}(Ra)$  for  $\sigma = 0.6$ . For this purpose we define  $\epsilon$  using the ratio of the small and large scales,  $\epsilon \equiv \lambda_c/\Gamma = 0.1$ . We then solve Eq. (4.13) in the domain  $\Gamma' = 2\pi/k$  varying the parameter r. Owing to the relatively small domain (large value of  $\epsilon$ ) the calculation requires quite large values of r in order to locate the secondary states. The resulting energy  $\mathcal{E}$  is therefore also large. Of course, as r and hence  $\mathcal{E}$  increase the amplitude equation (4.13) becomes less reliable, and comparison with the results of §3 shows that in the full problem the convecton branch always turns towards larger values of Ra as  $\mathcal{E}$ increases, in contrast to the predictions summarized below.

Figure 15 shows that for  $\sigma = 0.6$  the convecton branch bifurcates supercritically from the periodic states once  $T \ge 119.2579$  (i.e.,  $\xi^2 < 3/7$ ), in reasonable agreement with Fig. 9. The bifurcation to convectons is also supercritical when T < 6.1108 since for these

C. Beaume, A. Bergeon, H.-C. Kao and E. Knobloch



FIGURE 14. Regions of super and subcriticality for primary–secondary branches in the  $(\sigma, T)$  plane on (a) linear and (b) logarithmic scales. (c) Sketches of the bifurcation diagrams characteristic of each of the four regions. The curves  $\xi^2 = 1$  and  $\xi^2 = 1/3$  were computed by Cox & Matthews (2001).

values  $\xi^2 < 3/7$  also. As  $\xi^2$  decreases towards  $\xi^2 = 1/3$  the secondary bifurcation moves to larger and larger amplitude and for  $\xi^2 < 1/3$  the secondary bifurcation to convectons is absent. Of course before this happens Eq. (4.13) loses validity, a fact that may account for the discrepancy between Fig. 15(d) and the phase diagram in Fig. 10; in particular, a different scaling is required to understand the disappearance of the convecton branch (see §5).

We define the length L of a convecton as the interval where  $|A|^2 > \langle |A|^2 \rangle$ . This interval can be calculated explicitly by solving the nonlocal equation (4.13) in terms of elliptic functions. The explicit form of the n = 1 solution is

$$\rho^2 / \rho_+^2 = 1 - \zeta^2 \operatorname{sn}^2 \left[ \frac{1}{2} \sqrt{\rho_+^2 (3\xi^2 - 1)} X; \zeta \right], \tag{4.24}$$

where

$$\Gamma' = \frac{4K(\zeta)}{\sqrt{\rho_+^2(3\xi^2 - 1)}}, \qquad \left< \rho^2 \right> = \frac{E(\zeta)}{K(\zeta)}\rho_+^2.$$
(4.25)

The ratio  $L/\Gamma'$  is thus equal to  $F\left(\zeta^{-1}\sqrt{1-E(\zeta)/K(\zeta)},\zeta\right)/K(\zeta)$ . Here  $\zeta \equiv \sqrt{1-\rho_{-}^2/\rho_{+}^2}$ ,  $\rho_{\pm}$  are the positive roots of  $U[\rho] = K_2$  with  $\rho_{-} < \rho_{+}$ , F is the incomplete elliptic integral of the first kind, and K and E are the complete elliptic integrals of the first and second kind. There are two limiting regimes which yield simple predictions for the parameter dependence of L. In the case of weak spatial modulation,  $K_2$  is only slightly greater than the local minimum of U and we have

$$L/\Gamma' = \frac{1}{2} - \frac{\Gamma'}{2\pi^2} \sqrt{\frac{(3\xi^2 - 1)(r - r_1)}{3 - 7\xi^2}} + O(|r - r_1|).$$
(4.26)



FIGURE 15. Bifurcation diagrams showing stationary solutions of Eq. (4.13) with  $\phi_X = 0$  satisfying NBC for  $\sigma = 0.6$  and  $\Gamma = 10\lambda_c$ . Thick solid lines: k = 0 primary state (periodic convection). Thin solid lines: modulated states (convectons). (a) T = 50 ( $\xi^2 = 0.7032$ , region (2)). (b) T = 70 ( $\xi^2 = 0.5882$ , region (2)). (c) T = 120 ( $\xi^2 = 0.4269$ , region (2)). (d) T = 140 ( $\xi^2 = 0.3877$ , region (3)). The periodic state is stable up to the secondary bifurcation; in (d) the modulated state is stable up to the saddle-node.

In the strongly modulated case with large domain size  $(\Gamma'\sqrt{-r'} \gg 1)$ , the solutions with  $\phi_X = 0$  can be approximated by the sech function (Matthews & Cox 2000; Cox & Matthews 2001),

$$\rho = \sqrt{\frac{-4r'}{3\xi^2 - 1}} \operatorname{sech}\left(\sqrt{-r'}X\right),\tag{4.27}$$

where

$$r' = -\tilde{r} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{r}{\tilde{r}}} \right)^2, \quad r < \tilde{r} \equiv \frac{16\xi^4}{\Gamma'^2 (3\xi^2 - 1)^2};$$

the + solution exists for all  $r < \tilde{r}$  while the – solution exists for  $0 < r < \tilde{r}$  only. The resulting solutions are homoclinic to  $\rho = 0$  and so represent fully localized convectons. It should be noted that due to finite domain size,  $\langle \rho^2 \rangle$  is nonzero. The length of such a convecton is thus

$$L/\Gamma' \approx \frac{\log\left(2\Gamma'\sqrt{-r'}\right)}{\Gamma'\sqrt{-r'}}.$$
(4.28)

See Proctor (2001) and Cox (2004) for related results.

The stability of the solutions (4.24) on a finite domain was studied rigorously by Norbury *et al.* (2007) in the case  $\eta > 0$ . In conjunction with Appendix A these results

C. Beaume, A. Bergeon, H.-C. Kao and E. Knobloch



FIGURE 16. Sample profiles of the stationary solutions of Eq. (4.13) when  $\Gamma = 10\lambda_c$ . The amplitude |A| is shown as function of a scaled variable while the z-average of the zonal velocity, V(x), is shown in terms of the original variable x. (a,b)  $\sigma = 0.1$ , T = 20 ( $\xi^2 = 33.3308$ ). (1) Ra = 1174.3. (2) Ra = 1171.8. (3) Ra = 1166.8. (4) Ra = 1161.7. (c,d)  $\sigma = 0.6$ , T = 50 ( $\xi^2 = 0.7032$ ). (1) Ra = 2573.5. (2) Ra = 2573.3. (3) Ra = 2572.6. (4) Ra = 2571.6. Note that the spatial frequency of V(x) is double that of  $\psi(x)$ .

confirm that for  $1/3 < \xi^2 < 3/7$  the secondary branch is supercritical and stable in the interval between the bifurcation point and a saddle-node on the right and unstable thereafter. For  $\xi^2 > 3/7$  the secondary branch is subcritical and unstable throughout (Fig. 15).

We can use the above results to calculate the local shear at the maximum of the amplitude modulation. For the n = 1 secondary branch we obtain

$$s = -\frac{8T\pi^3}{3p^2k^2\sigma\Gamma}\sqrt{\frac{Ra - Ra_1}{(3\xi^2 - 1)(3 - 7\xi^2)}} + O(|Ra - Ra_1|),$$
(4.29)

where  $Ra = Ra_1$  denotes the location of the secondary bifurcation. To obtain this result we include a nonzero constant of integration in Eq. (3.3), as required by PBC, and choose this constant to cancel the mean Reynolds stress associated with periodic wavetrains. With this shear the critical wavenumber  $\tilde{k}_c$  for instability of the sheared base state  $(\psi, \theta, v) = (0, 0, sx)$  differs from  $k_c$  in Eq. (4.2) by

$$\tilde{k}_c - k_c \approx \frac{T\pi^2 s}{12pk^3\sigma} = -\frac{2T^2\pi^5}{9p^3k^5\sigma^2\Gamma}\sqrt{\frac{Ra - Ra_1}{(3\xi^2 - 1)(3 - 7\xi^2)}} + O(|Ra - Ra_1|), \qquad (4.30)$$

showing that the wavelength of the instability of the sheared state will be larger than

that of the unsheared state  $(\psi, \theta, v) = (0, 0, 0)$ . Numerical measurements of the convecton wavelength near onset (not shown) are consistent with the predicted square root behavior.

Figure 16 shows the profiles of the resulting convectons for (a,b)  $\xi^2 > 1$  (the subcritical case) and (c,d)  $\xi^2 < 1$  (the supercritical case). The results are in excellent qualitative agreement with the continuation results in Figs. 2 and 8.

### 5. The transition at $\xi^2 = 1/3$

The calculation in the preceding section shows that periodic wavetrains are supercritical for  $\xi^2 < 1$  while spatially modulated wavetrains are present when  $\xi^2 > 1/3$ . Near these critical parameter values the amplitude equation (4.13) breaks down and the derivation must be extended to higher order. We focus here on the latter and more interesting case. To derive the corresponding amplitude equation we introduce a slow spatial variable  $X \equiv \epsilon^2 x$ , where  $\epsilon \ll 1$ , and write

$$\psi \sim \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^n \psi_n(x, X, z), \quad \theta \sim \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^n \theta_n(x, X, z), \quad v \sim v_0(X) + \sum_{n=1}^{\infty} \epsilon^n v_n(x, X, z).$$
(5.1)

In contrast to §4 the leading order term in the zonal velocity is now of order one. The parameters Ra and T are expanded as  $Ra = Ra_c + \epsilon^2 r_2 + \epsilon^4 r_4$  and  $T = T_c + \epsilon^2 \delta$ , where  $Ra_c$  is the critical Rayleigh number for the onset of stationary convection and  $T_c$  is the critical Taylor number determined by  $\xi^2 = 1/3$ . Thus

$$T_{c} = T_{\pm}^{mod} \equiv \frac{\sigma \pi^{2} \left(2 \pm \sqrt{1 - \sigma^{2}}\right)}{\left(1 \pm \sqrt{1 - \sigma^{2}}\right)^{2}}$$
(5.2)

and secondary bifurcations to modulated wave trains occur in the interval  $T_+^{mod} < T < T_-^{mod} ~(\xi^2 > 1/3)$  provided that  $\sigma \leqslant 1$ .

The expansion procedure leads to a *nonlocal* fifth order stationary Ginzburg-Landau equation of the form (see Appendix B)

$$\mu A + A_{XX} + i\left(\gamma A_X + a_1 |A|^2 A_X + a_2 A^2 A_X^*\right) + b|A|^2 A - |A|^4 A = 0, \quad (5.3)$$

where

$$\mu = \mu_0 + \mu_1 \langle |A|^2 \rangle + \mu_2 \langle |A|^4 \rangle + \mu_3 \operatorname{Im} \left[ \langle AA_X^* \rangle \right] + \mu_4 \langle |A|^2 \rangle^2,$$
  

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_1 \langle |A|^2 \rangle, \quad b = b_0 + b_1 \langle |A|^2 \rangle.$$
(5.4)

Here A(X) is a suitably scaled amplitude of the leading order mode  $\psi_1$ . This equation generalizes Eq. (4.13) and applies whenever the coefficient of  $|A|^4A$  can be scaled to -1. This is always the case when  $T_c = T_+^{mod}$  but when  $T_c = T_-^{mod}$  the Prandtl number is restricted to the range  $0.59796 \leq \sigma < 1$ . These results and the coefficients  $\mu_0, \ldots$ are readily deduced from the expressions provided in Appendix B. Figure 17 shows the coefficients  $a_1$  and  $a_2$  as functions of  $\sigma$ .

An equation of the form (5.3) has been written down before (Elmer 1992; Riecke 1999) but its properties have not been studied except in one special case (Wei & Winter 2004). In contrast, the local version of the equation is well studied (Eckhaus & Iooss 1989; Kao & Knobloch 2012). We describe here the solutions of (5.3) for the parameter values used in §3 and compare the results with the computed solutions of Eqs. (2.1)-(2.3) with the boundary conditions (2.5).

We begin by observing that Eq. (5.3) with the nonlocal terms (5.4) is integrable just



FIGURE 17. The coefficients (a)  $a_1$ , (b)  $a_2$  as functions of  $\sigma$ . Solid line:  $T = T^{mod}_+$ . Dashed line:  $T = T^{mod}_-$ .

like Eq. (4.13), with the conserved quantities

$$K_1 = \rho^2 \phi_X + \frac{1}{2} \gamma \rho^2 + \frac{1}{4} (a_1 + a_2) \rho^4, \quad K_2 = \frac{1}{2} (\rho_X)^2 + U[\rho], \tag{5.5}$$

where

$$U[\rho] = \frac{K_1^2}{2\rho^2} + \left[\mu + \frac{\gamma^2}{4} + \frac{(3a_2 - a_1)K_1}{2}\right]\frac{\rho^2}{2} + \left[b - \frac{\gamma(a_2 - a_1)}{2}\right]\frac{\rho^4}{4} - \left[1 + \frac{(a_1 + a_2)(5a_2 - 3a_1)}{16}\right]\frac{\rho^6}{6}.$$

For stationary solutions with  $A_X = 0$ , the amplitude  $\rho$  can be written as

$$\rho^2 = \rho_{\pm}^2 \equiv \frac{\mu_1 + b_0 \pm \sqrt{(\mu_1 + b_0)^2 + 4\mu_0(1 - b_1 - \mu_2 - \mu_4)}}{2(1 - b_1 - \mu_2 - \mu_4)}.$$
 (5.6)

The parameter values must lie in a range such that  $\rho_{\pm} > 0$  is well defined. Secondary branching points depend on the sign of  $U_{\rho\rho}$  at the stationary point  $U_{\rho} = 0$  (Kao & Knobloch 2012). When  $A_X = 0$  we have

$$U_{\rho\rho} = \gamma_0^2 + 2 \left[ b_0 + \gamma_0 (a_1 + \gamma_1) \right] \rho^2 + \left[ (\gamma_1 + a_1)^2 + 2b_1 - a_2^2 - 4 \right] \rho^4.$$
(5.7)

Owing to the presence of  $\gamma_0$  the first bifurcating branch in a domain with finite period may correspond to n > 1, where n is the number wavelengths in the domain. The number of secondary branches is determined by the coefficient of  $\rho^4$  in Eq. (5.7), and is finite when  $(\gamma_1 + a_1)^2 + 2b_1 < 4 + a_2^2$ , a condition that is always satisfied in the case considered.

We compare here the predictions from the above equations, computed as in §4, with the bifurcation behavior seen in the original problem. To distinguish the different branches we have found it useful to plot the average three-dimensional kinetic energy,  $\mathcal{E}' \equiv \frac{1}{2\Gamma} \int_{D} |\mathbf{u}|^2 dx dz$  as a function of Ra instead of  $\mathcal{E}$ , since in the latter representation all branches fall essentially on top of one another. Here

$$\mathcal{E}' = \frac{1}{2} \left\langle v_0^2 \right\rangle + \frac{3}{8} \epsilon^2 k^2 \left\langle |a|^2 \right\rangle + O(\epsilon^4), \tag{5.8}$$

where a is again defined as in Eq. (4.3). The bifurcation diagrams that result are shown in Fig. 18 for  $\sigma = 0.6$ ,  $\Gamma = 50\lambda_c$  and several different Taylor numbers near  $T^{mod}_+ \approx 5.1176$ . The figure shows that there are two types of secondary branches and that both are strongly supercritical. Those represented in red correspond to the convecton states studied in the full problem: the secondary bifurcations producing these states move towards small amplitude as the domain period  $\Gamma'$  increases, in agreement with the theory pre-





FIGURE 18. Bifurcation diagrams showing the average kinetic energy  $\mathcal{E}'$  of the solutions of Eq. (5.3) with  $\phi_X = 0$  satisfying NBC as a function of Ra for  $\sigma = 0.6$  ( $T_+^{mod} = 5.1176$ ),  $T \sim T_+^{mod}$  and  $\Gamma = 50\lambda_c$ . Solid black lines:  $\phi_X = 0$  primary state (periodic convection). Red curves: convectons. Dashed curve in: (a) modulated states called defect states and (d):  $\phi_X = 2\pi/\Gamma$  primary state. (a) T = 4.4176. (b) T = 5.2176. (c) T = 5.5676. (d) T = 5.6676.

sented in  $\S4$ . However, as shown in Fig. 18(a), there is a second type of secondary states as well, represented by a dashed line. The presence of these states is a finite size effect: the secondary bifurcations producing these states move towards larger amplitude as  $\Gamma'$ increases. We refer to the latter as n = 1 defect states by analogy with other problems of this type (Bergeon et al. 2008); we have not computed states of this type in the full problem. Secondary branches of n = 2, 3... defect states may appear with further decrease of T. However, Fig. 18(b) shows that no secondary branches of either type are present when T is close to but below  $T_{+}^{mod}$ , as expected from the analysis in §4. When we increase the Taylor number above  $T_{+}^{mod}$ , an n = 1 secondary branch bifurcates from the primary  $\phi_X = 0$  branch at small but nonzero amplitude and reconnects to it at a subsequent secondary bifurcation (red line in Fig. 18(c)). This is the convecton branch. For larger Taylor numbers, the left end of the convecton branch moves down to smaller amplitude and undergoes a phase jump to  $\phi_X \neq 0$  primary branch (Fig. 18(d)) while the right end remains on the  $\phi_X = 0$  primary branch and moves up to larger amplitude. Figure 19 shows sample profiles of the amplitude |A| along both branch types. These results may be compared with Fig. 13. We emphasize that the termination of the convecton branches cannot be determined within the cubic amplitude equation (4.13); for this purpose the nonlocal Eq. (5.3) is required.

It remains to mention that for  $T = T_{-}^{mod}$  and  $0 < \sigma \leq 0.59796$  the coefficient of  $|A|^4 A$  is positive and a fifth order calculation cannot capture the complete details of the transition whereby convectons disappear as T increases.



FIGURE 19. Sample solution profiles at the points indicated in Fig. 18. (a) T = 4.4176. (b) T = 5.5676. Solutions in (b) correspond to convectons (red curve in Fig. 18(c)), while those in (a) correspond to defect states (dashed curve in Fig. 18(a)).

#### 6. Conclusion

In this paper we have computed strongly nonlinear solutions of the equations describing two-dimensional convection in a horizontal layer rotating with constant angular velocity about the vertical axis. The localized solutions were computed on spatially periodic domains with a period that is large compared to the critical wavelength of convection, and are present regardless of whether the primary branch of periodic states is sub- or supercritical, provided only that  $\xi^2 > 1/3$ . The localized structures are embedded in a self-generated zonal shear layer with a compensating shear profile outside the structure. The shear rate V' < 0 inside the convecton while V' > 0 outside, implying that the convecton locally reduces the angular velocity by expelling angular momentum; this angular momentum increases the angular velocity outside the convecton and creates a shear layer. Similar symbiotic coexistence between anticyclonic shear and localized vortex structures is familiar from other rotating fluid systems (Marshall & Schott 1999; Marcus *et al.* 2000; Evonuk & Glatzmaier 2007; Petersen *et al.* 2007).

In the present case the localized structures are present only for low Prandtl numbers  $(\sigma < 1)$  and moderate Taylor numbers. At small rotation rates the shear that accompanies a putative convector is insufficient to localize it, while rotation rates that are too high suppress the amplitude of the convection and thereby the angular momentum expulsion that is required to confine the structure. However, when convectons are possible they are present over a substantial range of Rayleigh numbers (Fig. 10) in contrast to other fluid systems exhibiting localized states (Batiste et al. 2006; Lo Jacono et al. 2010; Beaume et al. 2011). This is a consequence of the conserved integral  $\bar{V}$  of the zonal velocity v(x, z, t) in the presence of stress-free boundary conditions at the top and bottom boundaries. Because of this conserved quantity the amplitude equations describing the localized structure are nonlocal, and the spatially periodic states are unstable at small amplitude even when they bifurcate supercritically. This nonlocal aspect of the problem has four consequences: (i) it leads to slanted snaking of the localized structures, (ii) it permits localized structures to be present outside the region of bistability between the conduction state and periodic convection, (iii) it destabilizes the spatially periodic convection at small amplitude even when the bifurcation to convection is supercritical, and (iv) it permits localized states even when periodic convection bifurcates supercritically. These effects are all a consequence of the interaction between convection and the zonal shear flow it generates through the action of the Reynolds stresses associated with the convective flow. We have seen explicitly how the zonal shear flow generated by this

mechanism can, under appropriate conditions, confine convection in the lateral direction thereby creating the localized structures studied in this paper.

The presence of slanted snaking permitted by the boundary conditions we use is significant since it greatly increases the Rayleigh number interval within which localized states may be found. The behavior that results is similar to the slanted snaking present in convection in an imposed vertical magnetic field (Dawes 2007; Lo Jacono *et al.* 2011, 2012). As emphasized by Cox & Matthews (2001) this is a consequence of the conservation of imposed magnetic flux, a conserved quantity that exerts a qualitatively similar effect on the properties of localized states as exerted here by the requirement  $\bar{V} = 0$ . The effect of the conserved quantity persists as  $\Gamma$  increases (see, e.g., Fig. 4). However, the limit  $\Gamma \to \infty$  differs from the situation on the whole real line. In the latter case flux expulsion does not lead to an increase in the ambient magnetic field and the problem becomes *local*. This is the case for rotating convection as well – on the real line no prograde (anticyclonic) shear develops outside the convector. It follows that with increasing  $\Gamma$  the slant of the snaking branches must decrease so that snaking in large domains ultimately becomes vertical. This is indeed the case when the *total* poloidal kinetic energy E is plotted as a function of Ra (Lo Jacono *et al.* 2011).

We emphasize that the wavelength within the convecton does not in general correspond to the wavelength of a coexisting periodic state, even if such a state is present. This is because the convecton wavelength is selected by the fronts on either side; because the convecton is spatially localized the wavelength within can vary with the applied Rayleigh number simply by adjusting the location of the fronts. This is not the case for periodic convection which is hemmed in by the imposed period  $\Gamma$  – for such states any increase in wavelength of one or more cells must be compensated by a corresponding wavelength decrease on the part of the remaining cells. On the other hand centrifugal effects on a periodic cell state are usually neglected whenever  $L\Omega^2/g \ll 1$ , where  $L \equiv \lambda$  is the dimensional wavelength. For convectons such as those described here the corresponding requirement is more stringent, since the relevant length scale L is now the convecton length, i.e.,  $L = N\lambda$ , where N is the number of cell pairs within the structure.

In this work we have not studied the stability properties of the localized states we have calculated. These are complicated by the presence of Galilean invariance permitted by the stress-free boundaries we use, much as in nonrotating convection. In addition, in three dimensions these boundary conditions are responsible for the presence of a small angle Küppers-Lortz instability (Clune & Knobloch 1993; Cox & Matthews 2000). Nevertheless, the third order nonlocal amplitude equation studied in §4 sheds light on the likely stability properties of the states we have found (Norbury *et al.* 2007), as does the fifth order nonlocal equation derived in §5, provided allowed perturbations are restricted to two dimensions.

This work was supported in part by Action Thématique de l'Université Paul Sabatier (CB) and the National Science Foundation under grants DMS-0908102 and DMS-1211953 (H-CK & EK).

#### Appendix A. Direction of branching of the convecton branches

We begin with Eqs. (4.8) and (4.9) and compute the secondary branch of stationary modulated solutions using weakly nonlinear theory, following Matthews & Cox (2000). These equations have the stationary equilibrium  $(A, V) = (A_0, 0)$ , where without loss of

C. Beaume, A. Bergeon, H.-C. Kao and E. Knobloch

generality  $A_0 = \sqrt{2r/(1-\xi^2)}$ . We seek nearby solutions in the form

$$A = A_0(1 + \tilde{A}(X, \tau; \epsilon)), \qquad V = \tilde{V}(X, \tau; \epsilon), \tag{A1}$$

where  $\tau = \epsilon^2 T_2$  and  $\tilde{A} = \epsilon \tilde{A}_1 + \epsilon^2 \tilde{A}_2 + \epsilon^3 \tilde{A}_3 + \dots$ ,  $\tilde{V} = \epsilon \tilde{V}_1 + \epsilon^2 \tilde{V}_2 + \epsilon^3 \tilde{V}_3 + \dots$  Here  $\epsilon$  is defined implicitly by the relation  $r = r_1 + \epsilon^2 \tilde{r}$ , where  $r = r_1$  denotes the location of the secondary bifurcation. Since the imaginary part of  $\tilde{A}$  decays to zero we take  $\tilde{A}$  to be real. At  $O(\epsilon)$  we obtain a linear eigenvalue problem for  $r_1$  with solution  $\tilde{A}_1 = \tilde{A}_{11} \cos l X$ ,  $\tilde{V}_1 = \tilde{V}_{11} \sin l X$ , where

$$r_1 = \frac{l^2}{2} \left( \frac{1 - \xi^2}{3\xi^2 - 1} \right), \qquad \tilde{V}_{11} = -\frac{4\xi r_1}{l(1 - \xi^2)} \,\tilde{A}_{11}. \tag{A 2}$$

In the following we assume that  $\xi^2 < 1$  so that the periodic state  $(A_0, 0)$  is supercritical. Thus a secondary bifurcation requires that  $3\xi^2 - 1 > 0$ .

#### $Second \ order$

At  $O(\epsilon^2)$  we obtain

$$\tilde{A}_{2XX} - 2r_1\tilde{A}_2 - \xi\tilde{V}_{2X} = 3r_1\tilde{A}_1^2 + \xi\tilde{A}_1\tilde{V}_{1X},$$
(A 3)

$$\tilde{V}_{2X} + \frac{4\xi r_1}{1-\xi^2} \,\tilde{A}_2 = -\frac{2\xi r_1}{1-\xi^2} \,\tilde{A}_1^2 + C_2,\tag{A4}$$

where  $C_2$  is a constant of integration. The requirement that  $\langle \tilde{V}_{2X} \rangle = 0$  determines  $C_2$ and leads to the solution

$$\tilde{A}_2 = \tilde{A}_{20} + \tilde{A}_{22} \cos 2lX, \qquad \tilde{V}_{2X} = \tilde{V}_{22} \cos 2lX,$$
(A 5)

where

$$\tilde{A}_{20} = \frac{7\xi^2 - 3}{4(1 - \xi^2)} \tilde{A}_{11}^2, \quad \tilde{A}_{22} = \frac{1}{4} \tilde{A}_{11}^2, \quad \tilde{V}_{22} = -\frac{2\xi r_1}{1 - \xi^2} \tilde{A}_{11}^2.$$
(A 6)

Third order

At  $O(\epsilon^3)$  we obtain

$$\tilde{A}_{3XX} - 2r_1\tilde{A}_3 - \xi\tilde{V}_{3X} = 2\tilde{r}\tilde{A}_1 + 6r_1\tilde{A}_1\tilde{A}_2 + r_1\tilde{A}_1^3 + \xi\tilde{A}_2\tilde{V}_{1X} + \xi\tilde{A}_1\tilde{V}_{2X}, \quad (A7)$$

$$\tilde{V}_{3X} + \frac{4\xi r_1}{1-\xi^2} \tilde{A}_3 = -\frac{4\xi \tilde{r}}{1-\xi^2} \tilde{A}_1 - \frac{4\xi r_1}{1-\xi^2} \tilde{A}_1 \tilde{A}_2 + C_3.$$
(A8)

The requirement  $\langle \tilde{V}_{3X} \rangle = 0$  establishes that  $C_3 = 0$ . Elimination of terms proportional to  $\cos lX$  from the equation for  $\tilde{A}_3$  leads to the solvability condition

$$\tilde{r} = \frac{l^2}{4} \left( \frac{3 - 7\xi^2}{3\xi^2 - 1} \right) \tilde{A}_{11}^2, \tag{A9}$$

where  $l = 2\pi/\Gamma'$  and  $\Gamma'$  is defined in Eq. 4.25. It follows that the secondary branch is supercritical ( $\tilde{r} > 0$ ) if  $\xi^2 < 3/7$  and subcritical ( $\tilde{r} < 0$ ) if  $\xi^2 > 3/7$ , in agreement with the numerical results in §4. These results can also be obtained from a careful study of the conditions (4.20) using the potential  $U[\rho]$  given in Eq. (4.19) with  $K_1 = 0$  (Kao & Knobloch 2012).

We remark that Norbury *et al.* (2007) identify in their study of Eqs. (4.8) and (4.9) only one type of secondary bifurcation, a supercritical one. In their work the bifurcation behavior is described by the function

$$f(k) \equiv \frac{L^2}{8E(k)K(k)} + \frac{(1 - k^2/2)K(k)}{E(k)},$$
 (A 10)

where L is the domain length, and E(k) and K(k) are elliptic integrals of the first and second kind. Their result is based on the claim that f(k) always attains a local minimum for some  $k_0 \in (0, 1)$  owing to strict convexity  $(f''(k) > 0 \text{ for all } k \in (0, 1))$ . However, an expansion of f(k) around k = 0 shows that

$$f(k) = 1 + \frac{L^2}{2\pi^2} + \frac{k^4}{16} \left( 1 - \frac{L^2}{4\pi^2} \right) + o(|k|^4).$$
 (A 11)

Thus if  $L < 2\pi$ , f is nondecreasing and no local minimum is present. This in turn implies that the fold in the secondary branch is absent, i.e., that the secondary branch bifurcates subcritically. The condition  $L = 2\pi$  agrees with that determined by Matthews & Cox (2000).

#### Appendix B. Derivation of the fifth order Ginzburg-Landau equation

Here we give pertinent details of the derivation of the nonlocal fifth order Ginzburg-Landau equation (5.3) following the setting introduced in §5. To simplify expressions, we use in the following notation

$$\nabla^{2} \equiv \partial_{xx} + \partial_{zz}, \qquad J(u, w) \equiv u_{x}w_{z} - u_{z}w_{x}, \qquad \tilde{J}(u, w) \equiv u_{X}w_{z} - u_{z}w_{X},$$
$$p_{nm} \equiv -\left(n^{2}k^{2} + m^{2}\pi^{2}\right)^{3} + Ra_{c}n^{2}k^{2} - T_{c}^{2}m^{2}\pi^{2}.$$

Expansion (5.1) leads, order by order, to linear inhomogeneous problems of the form

$$\mathbf{M}\boldsymbol{\Psi}_{n} \equiv \begin{pmatrix} \nabla^{4} & Ra_{c}\partial_{x} & -T_{c}\partial_{z} \\ \partial_{x} & \nabla^{2} & 0 \\ T_{c}\partial_{z} & 0 & \nabla^{2} \end{pmatrix} \boldsymbol{\Psi}_{n} = \mathbf{f}_{n},$$
(B1)

where  $\Psi_n$  represents  $(\psi_n, \theta_n, v_n)^T$  and  $\mathbf{f}_n$  is a vector with components that are polynomials in  $\psi_1, ..., \psi_{n-1}, \theta_1, ..., \theta_{n-1}, v_0, ..., v_{n-1}$ , and their derivatives. Equation (B1) can also be written as a single equation with respect to  $\psi_n$ ,

$$M\psi_n \equiv \left(\nabla^6 - Ra_c\partial_{xx} + T_c^2\partial_{zz}\right)\psi_n = \nabla^2 f_{n1} - Ra_c\partial_x f_{n2} + T_c\partial_z f_{n3}.$$
 (B2)

We solve this equation for  $\psi_n$  and determine the corresponding  $\theta_n$  and  $v_n$  from Eq. (B1). First & second order

At  $O(\epsilon)$   $\mathbf{f}_1 = 0$ . The resulting homogeneous problem has a solution of the form (cf. §4)

$$\psi_1 = \frac{a(X)}{2} e^{ikx} \sin(\pi z) + c.c.,$$
  

$$\theta_1 = \frac{ika(X)}{2p} e^{ikx} \sin(\pi z) + c.c.,$$
  

$$v_1 = \frac{\pi T_c a(X)}{2p} e^{ikx} \cos(\pi z) + c.c.,$$

where k and  $\pi$  are, respectively, the wavenumbers in the x and z directions. The critical value  $Ra_c$  and the critical wavenumber  $k_c$  satisfy condition (4.2). Note that the linear operator M in Eq. (B2) is self-adjoint with kernel  $e^{\pm ikx} \sin(\pi z)$ . This fact simplifies the solvability condition applied at each subsequent order.

At  $O(\epsilon^2)$  **f**<sub>2</sub> is given by

$$f_{21} = \sigma^{-1} J(\psi_1, \nabla^2 \psi_1),$$
  

$$f_{22} = -J(\theta_1, \psi_1),$$
  

$$f_{23} = -J(v_1, \psi_1).$$

C. Beaume, A. Bergeon, H.-C. Kao and E. Knobloch

The solvability condition for  $\psi_2$  is always satisfied. Thus  $\psi_2$  may be set to zero and  $\Psi_2$  is given by

$$\begin{split} \psi_2 &= 0, \\ \theta_2 &= -\frac{k^2 |a|^2}{8\pi p} \sin(2\pi z), \\ v_2 &= v_{20}(X) + \frac{iT_c \pi^2 a^2}{16kp\sigma} e^{2ikx} + c.c. \end{split}$$

The homogeneous term  $v_{20}(X)$  plays an important role in what follows.

Third order

At  $O(\epsilon^3)$  **f**<sub>3</sub> is given by

$$\begin{split} f_{31} &= -4\nabla^2 \psi_{1,Xx} - Ra_c \theta_{1,X} + \delta v_{1,z} + \sigma^{-1} \left[ J(\psi_2, \nabla^2 \psi_1) + J(\psi_1, \nabla^2 \psi_2) \right] - r_2 \theta_{1,x}, \\ f_{32} &= J\left(\psi_1, \theta_2\right) + J(\psi_2, \theta_1) - \psi_{1,X} - 2\theta_{1,Xx}, \\ f_{33} &= -\delta \psi_{1,z} - 2v_{1,Xx} + \sigma^{-1} \left[ J\left(\psi_1, v_2\right) + J(\psi_2, v_1) - \psi_{1,z} v_{0,X} \right]. \end{split}$$

The solvability condition at this order gives

$$\left(\frac{k^2 r_2}{2} - T_c \pi^2 \delta\right) a - \frac{T_c \pi^2}{2\sigma} a v_{0,X} + \left(\frac{T_c^2 \pi^4}{16p\sigma^2} - \frac{3pk^4}{16}\right) |a|^2 a = 0.$$
(B3)

In traditional approaches which do not include spatial modulation the result (B3) with  $r_2 = \delta = 0$  reduces to  $\xi^2 = 1$ , i.e., the relation that determines the location of the codimension two point at which a subcritical periodic wavetrain becomes supercritical (Veronis 1959).

The solution  $\Psi_3$  is

$$\begin{split} \psi_3 &= -\frac{T_c^2 \pi^4 a^3}{16 p \sigma^2 p_{31}} \, e^{3ikx} \sin(\pi z) - \frac{3pk^4 |a|^2 a}{16 p_{13}} \, e^{ikx} \sin(3\pi z) + c.c., \\ \theta_3 &= \frac{ik^3 (p_{13} - 3p^2 k^2) |a|^2 a}{16 p p_{13} (k^2 + 9\pi^2)} \, e^{ikx} \sin(3\pi z) - \frac{3iT_c^2 k \pi^4 a^3}{16 p p_{31} \sigma^2 (9k^2 + \pi^2)} \, e^{3ikx} \sin(\pi z) \\ &\quad + \frac{(\pi^2 - k^2) a_X}{2p^2} \, e^{ikx} \sin(\pi z) - \frac{ik^3 |a|^2 a}{16p^2} \, e^{ikx} \sin(\pi z) + c.c., \\ v_3 &= \left[ \frac{\pi \left( v_{0,X} + \delta \sigma \right) a}{2\sigma p} + \frac{iT_c k \pi a_X}{p^2} - \frac{T_c \pi^3 |a|^2 a}{16p^2 \sigma^2} \right] e^{ikx} \cos(\pi z) \\ &\quad - \frac{9pT_c k^4 \pi |a|^2 a}{16p_{13} (k^2 + 9\pi^2)} \, e^{ikx} \cos(3\pi z) - \frac{T_c \pi^3 a^3 \left( T_c^2 \pi^2 + p_{31} \right)}{16\sigma^2 p p_{31} (9k^2 + \pi^2)} \, e^{3ikx} \cos(\pi z) + c.c. \end{split}$$

Fourth order

At  $O(\epsilon^4)$  **f**<sub>4</sub> is given by

$$\begin{split} f_{41} &= \sigma^{-1} \left[ 2J \left( \psi_1, \psi_{1,Xx} \right) + \tilde{J} \left( \psi_1, \nabla^2 \psi_1 \right) + J \left( \psi_1, \nabla^2 \psi_3 \right) + J \left( \psi_3, \nabla^2 \psi_1 \right) \right. \\ &+ J (\psi_2, \nabla^2 \psi_2) \right] - r_2 \theta_{2,X} - Ra_c \theta_{2,X} + \delta v_{2,z} - 4 \nabla^2 \psi_{2,Xx}, \\ f_{42} &= -\psi_{2,X} - 2 \theta_{2,Xx} - \tilde{J} \left( \theta_1, \psi_1 \right) - J \left( \theta_3, \psi_1 \right) - J \left( \theta_2, \psi_2 \right) - J \left( \theta_1, \psi_3 \right), \\ f_{43} &= -\sigma^{-1} \left[ v_{0,X} \psi_{2,z} + \tilde{J} \left( v_1, \psi_1 \right) + J \left( v_1, \psi_3 \right) + J \left( v_2, \psi_2 \right) + J \left( v_3, \psi_1 \right) \right] \\ &- 2 v_{2,Xx} - v_{0,XX} - \delta \psi_{2,z}. \end{split}$$

The solvability condition for  $\psi_4$  is always satisfied at this order. However, the Laplace

operator appearing in the equation for  $v_4$  has a nonempty kernel spanned by multiples of  $v_4 = 1$ , a fact that is responsible for the presence of a second solvability condition, viz.,

$$v_{0,XX} + \frac{T_c \pi^2}{4p\sigma} (|a|^2)_X = 0, \tag{B4}$$

31

From Eqs. (B 3) and (B 4), we obtain  $\xi^2 = 1/3$ , defining the critical Taylor number  $T_c$  given in Eq. (5.2).

Now that all solvability conditions have been imposed we can proceed to solve the  $O(\epsilon^4)$  problem. Here we only list the terms which are relevant to the computation of the solvability conditions at  $O(\epsilon^5)$  and  $O(\epsilon^6)$ . These are

$$\begin{split} \psi_4 &= -\frac{k^2 \pi (2T_c^2 \pi^2 + 4p^2 \pi^2 + 3\sigma p^3) (|a|^2)_X}{2p^2 p_{02} \sigma} \sin(2\pi z) + \dots \\ \theta_4 &= \frac{k^4 (p_{13} - 3p^2 k^2) (k^2 + 5\pi^2) |a|^4}{32\pi p^2 p_{13} (k^2 + 9\pi^2)} \sin(2\pi z) + \left\{ \frac{ik\pi a^* a_X}{8p^2} \sin(2\pi z) + c.c. \right\} + \dots \\ v_4 &= -\frac{k^4 (4T_c^2 \pi^2 + 8p^2 \pi^2 + 6\sigma p^3 + p_{02}) (|a|^2)_X}{8p p_{02} \pi^2} \cos(2\pi z) \\ &+ \left\{ -\frac{ik\pi^2 (T_c^2 \pi^2 + p_{31}) (5k^2 + \pi^2) |a|^2 a^2}{64p p_{31} \sigma^2 (9k^2 + \pi^2)} e^{2ikx} + \frac{i\pi^2 (v_{0,X} + \delta\sigma) a^2}{16k p \sigma^2} e^{2ikx} - \frac{(3k^2 + \pi^2) aa_X}{16p} e^{2ikx} + c.c. \right\} + \dots \end{split}$$

Fifth & sixth order

At  $O(\epsilon^5)$  and  $O(\epsilon^6)$ ,  $\mathbf{f}_5$  and  $f_{63}$  are given by

$$\begin{split} f_{51} &= \sigma^{-1} \left[ \sum_{n=1}^{2} \left( 2J(\psi_n, \psi_{3-n,Xx}) + \tilde{J}(\psi_n, \nabla^2 \psi_{3-n}) \right) + \sum_{n=1}^{4} J(\psi_n, \nabla^2 \psi_{5-n}) \right] - 4\psi_{1,XXxx} \\ &- 2\nabla^2 \psi_{1,XX} - 4\nabla^2 \psi_{3,Xx} - Ra_c \theta_{3,X} - r_4 \theta_{1,x} + \delta v_{3,z} - r_2 \theta_{1,X} - r_2 \theta_{3,x}, \\ f_{52} &= -\psi_{3,X} - \theta_{1,XX} - 2\theta_{3,Xx} - \sum_{n=1}^{4} J(\theta_n, \psi_{5-n}) - \sum_{n=1}^{2} \tilde{J}(\theta_n, \psi_{3-n}), \\ f_{53} &= -\sigma^{-1} \left[ \sum_{n=1}^{4} J(v_n, \psi_{5-n}) + \sum_{n=1}^{2} \tilde{J}(v_n, \psi_{3-n}) + v_{0,X} \psi_{3,z} \right] - v_{1,XX} - 2v_{3,Xx} - \delta \psi_{3,z}, \\ f_{63} &= -\sigma^{-1} \left[ \sum_{n=1}^{3} \tilde{J}(v_n, \psi_{4-n}) + \sum_{n=1}^{5} J(v_n, \psi_{6-n}) + v_{0,X} \psi_{4,z} \right] - v_{2,XX} - 2v_{4,Xx} - \delta \psi_{4,z}. \end{split}$$

The solvability condition for  $\psi_5$  yields

$$(\tilde{\mu}_{0} + \tilde{\mu}_{1}v_{0,X} + i\tilde{\mu}_{2}v_{0,XX}) a + \tilde{d}a_{XX} + i\left[(\tilde{\gamma}_{0} + \tilde{\gamma}_{1}v_{0,X})a_{X} + \tilde{a}_{10}|a|^{2}a_{X} + \tilde{a}_{20}a^{2}\bar{a}_{X}\right] + \left(\tilde{b}_{0} + \tilde{b}_{1}v_{0,X}\right)|a|^{2}a - \tilde{c}_{0}|a|^{4}a - \frac{pk^{2}}{2}av_{20,X} = 0$$
(B5)

with coefficients given by

$$\begin{split} \tilde{\mu}_0 &= \frac{k^2 r_4 - \delta^2 \pi^2}{2}, \quad \tilde{\mu}_1 = -\frac{\delta \pi^2}{2\sigma}, \quad \tilde{d} = 6k^2 p, \quad \tilde{\gamma}_0 = -\frac{k\pi^2 (r_2 + 2T_c \delta)}{p}, \\ \tilde{\mu}_2 &= \tilde{\gamma}_1 = -k^3, \quad \tilde{b}_0 = \frac{2p\delta \pi^2 - k^2 r_2 \sigma}{16p\sigma} k^2, \quad \tilde{b}_1 = \frac{k^2 \pi^2}{16\sigma^2}, \end{split}$$

$$\begin{split} &\tilde{a}_{10} = \frac{k^3 p (4k^2 + 2\pi^2 + 3p\sigma) (2k^4 - 9\pi^4 + 7k^2\pi^2 + 6k^2\pi^2\sigma)}{8p_{02}\sigma^2} + \frac{9k^3 (3\pi^2 + k^2)}{32} + \frac{k^7}{16\pi^2},\\ &\tilde{a}_{20} = \frac{k^3 p (4k^2 + 2\pi^2 + 3p\sigma) (2k^4 - 9\pi^4 + 7k^2\pi^2 + 6k^2\pi^2\sigma)}{8p_{02}\sigma^2} + \frac{k^3 (3\pi^2 + k^2)}{32} + \frac{k^7}{16\pi^2},\\ &\tilde{c}_0 = \frac{p^2 k^8 (19k^2 + 3\pi^2)}{128p_{31}(9k^2 + \pi^2)} + \frac{k^4 \pi^2 (5k^2 + \pi^2)}{64\sigma^2 (9k^2 + \pi^2)} + \frac{9k^8 p^2}{128p_{13}} - \frac{3k^6 (k^2 + 5\pi^2) (p_{13} - 3k^2p^2)}{64p_{13}(k^2 + 9\pi^2)}. \end{split}$$

The solvability condition for  $v_6$  yields

$$v_{20,XX} + \left(\frac{k^3}{2p} \text{Im}[aa_X^*] + \frac{\pi^2 |a|^2 v_{0,X}}{4p\sigma^2} + \frac{\delta \pi^2 |a|^2}{4p\sigma} - \frac{k^2 \pi^2 |a|^4}{32p\sigma^2}\right)_X = 0.$$
(B6)

Equation (5.3) follows from (B 5) on integrating conditions (B 4) and (B 6) with respect to X as in Eq. (4.12).

#### REFERENCES

- ASSEMAT, P., BERGEON, A. & KNOBLOCH, E. 2008 Spatially localized states in Marangoni convection in binary mixtures. *Fluid Dyn. Res.* **40**, 852–876.
- BAJAJ, K. M. S., AHLERS, G. & PESCH, W. 2002 Rayleigh-Bénard convection with rotation at small Prandtl numbers. *Phys. Rev. E* **65**, 056309.
- BATISTE, O., KNOBLOCH, E., ALONSO, A. & MERCADER, I. 2006 Spatially localized binary-fluid convection. J. Fluid Mech. 560, 149–156.
- BEAUME, C., BERGEON, A. & KNOBLOCH, E. 2011 Homoclinic snaking of localized states in doubly diffusive convection. *Phys. Fluids* 23, 094102.
- BERGEON, A., BURKE, J., KNOBLOCH, E. & MERCADER, I. 2008 Eckhaus instability and homoclinic snaking. *Phys. Rev. E* 78, 046201.
- BERGEON, A. & KNOBLOCH, E. 2008 Spatially localized states in natural doubly diffusive convection. *Phys. Fluids* 20, 034102.
- BLANCHFLOWER, S. 1999 Magnetohydrodynamic convectons. Phys. Lett. A 261, 74–81.
- BURKE, J. & KNOBLOCH, E. 2007 Snakes and ladders: localized states in the Swift–Hohenberg equation. *Phys. Lett. A* **360**, 681–688.
- CHANDRASEKHAR, S. 1961 Hydrodynamic and Hydromagnetic Stability. Oxford University Press.
- CLUNE, T. & KNOBLOCH, E. 1993 Pattern selection in rotating convection with experimental boundary conditions. *Phys. Rev. E* 47, 2536–2550.
- Cox, S. M. 2004 The envelope of a one-dimensional pattern in the presence of a conserved quantity. *Phys. Lett. A* **333**, 91–101.
- Cox, S. M. & MATTHEWS, P. C. 2000 Instability of rotating convection. J. Fluid Mech. 403, 153–172.
- Cox, S. M. & MATTHEWS, P. C. 2001 New instabilities in two-dimensional rotating convection and magnetoconvection. *Physica D* **149**, 210–229.
- DAWES, J. H. P. 2007 Localized convection cells in the presence of a vertical magnetic field. J. Fluid Mech. 570, 385–406.
- DAWES, J. H. P. 2008 Localized pattern formation with a large-scale mode: slanted snaking. SIAM J. Appl. Dyn. Syst. 7, 186–206.
- DAWES, J. H. P. & LILLEY, S. 2010 Localized states in a model of pattern formation in a vertically vibrated layer. SIAM J. Appl. Dyn. Syst. 9, 238–260.
- DOEDEL, E. J., CHAMPNEYS, A. R., DERCOLE, F., FAIRGRIEVE, T., KUZNETSOV, Y., OLDE-MAN, B., PAFFENROTH, R., SANDSTEDE, B., WANG, X. & ZHANG, C. 2008 AUTO-07P: Continuation and Bifurcation Software for Ordinary Differential Equations.
- ECKHAUS, W. & IOOSS, G. 1989 Strong selection or rejection of spatially periodic patterns in degenerate bifurcations. *Physica D* **39**, 124–146.
- ELMER, F. J. 1988 Nonlinear and nonlocal dynamics of spatially extended systems: Stationary states, bifurcations and stability. *Physica D* **30**, 321–342.
- ELMER, F. J. 1992 Parallels between pattern formation in high-power ferromagnetic resonance

and fluid convection. In Pattern Formation in Complex Dissipative Systems (ed. S. Kai), pp. 309–313. Singapore: World Scientific.

- EVONUK, M. & GLATZMAIER, G. A. 2007 The effects of rotation rate on deep convection in giant planets with small solid cores. *Planetary and Space Sci.* 55, 407–412.
- FIRTH, W. J., COLUMBO, L. & SCROGGIE, A. J. 2007 Proposed resolution of theory-experiment discrepancy in homoclinic snaking. *Phys. Rev. Lett.* **99**, 104503.
- GOLDSTEIN, H. F., KNOBLOCH, E. & SILBER, M. 1990 Planform selection in rotating convection. Phys. Fluids A 2, 625–627.
- GOLDSTEIN, H. F., KNOBLOCH, E. & SILBER, M. 1992 Planform selection in rotating convection: Hexagonal symmetry. Phys. Rev. A 46, 4755–4761.
- GUCKENHEIMER, J. & KNOBLOCH, E. 1983 Nonlinear convection in a rotating layer: Amplitude expansions and normal forms. *Geophys. Astrophys. Fluid Dyn.* 23, 247–272.
- HALL, P. 1984 Evolution equations for Taylor vortices in the small-gap limit. Phys. Rev. A 29, 2921–2923.
- KAO, H.-C. & KNOBLOCH, E. 2012 Weakly subcritical stationary patterns: Eckhaus instability and homoclinic snaking. *Phys. Rev. E* **85**, 026211.
- KNOBLOCH, E. 1998 Rotating convection: recent developments. Int. J. Engineering Sci. 36, 1421–1450.
- LO JACONO, D., BERGEON, A. & KNOBLOCH, E. 2010 Spatially localized binary fluid convection in a porous medium. *Phys. Fluids* **22**, 073601.
- LO JACONO, D., BERGEON, A. & KNOBLOCH, E. 2011 Magnetohydrodynamic convectons. J. Fluid Mech. 687, 595–605.
- LO JACONO, D., BERGEON, A. & KNOBLOCH, E. 2012 Spatially localized magnetoconvection. *Fluid Dyn. Res.* in press.
- MAMUN, C. K. & TUCKERMAN, L. S. 1995 Asymmetry and Hopf bifurcation in spherical Couette flow. *Phys. Fluids* **7**, 80–.
- MARCUS, P. S., KUNDU, T. & LEE, C. 2000 Vortex dynamics and zonal flows. *Phys. Plasmas* 7, 1630–1640.
- MARSHALL, J. & SCHOTT, F. 1999 Open-ocean convection: observations, theory, and models. *Rev. Geophys.* **37**, 1–64.
- MATTHEWS, P. C. & Cox, S. M. 2000 Pattern formation with a conservation law. *Nonlinearity* 13, 1293–1320.
- NORBURY, J., WEI, J. & WINTER, M. 2002 Existence and stability of singular patterns in a Ginzburg-Landau equation coupled with a mean field. *Nonlinearity* **15**, 2077–2096.
- NORBURY, J., WEI, J. & WINTER, M. 2007 Stability of patterns with arbitrary period for a Ginzburg-Landau equation with a mean field. *Euro. J. Appl. Math.* **18**, 129–151.
- PETERSEN, M. R., JULIEN, K. & STEWART, G. R. 2007 Baroclinic vorticity production in protoplanetary disks. I. Vortex formation. Astrophys. J. 658, 1236–1251.
- PROCTOR, M. R. E. 2001 Finite amplitude behaviour of the Matthews-Cox instability. Phys. Lett. A 292, 181–187.
- RIECKE, H. 1999 Localized structures in pattern-forming systems. In Pattern Formation in Continuous and Coupled Systems (ed. M. Golubitsky, D. Luss and S. H. Strogatz), pp. 215–229. New York: Springer.
- SCHNEIDER, T. M., GIBSON, J. F. & BURKE, J. 2010 Snakes and ladders: Localized solutions of plane Couette flow. Phys. Rev. Lett. 104, 104501.
- SILBER, M. & KNOBLOCH, E. 1990 Travelling wave convection in a rotating layer. Geophys. Astrophys. Fluid Dyn. 51, 195–209.
- SILBER, M. & KNOBLOCH, E. 1993 Oscillatory convection in a rotating layer. Physica D 63, 213–232.
- VEGA, J. M. 2005 Instability of the steady states of some Ginzburg-Landau-like equations with real coefficients. *Nonlinearity* 18, 1425–1441.
- VERONIS, G. 1959 Cellular convection with finite amplitude in a rotating fluid. J. Fluid Mech. 5, 401–435.
- WEI, J. & WINTER, M. 2004 On a cubic-quintic Ginzburg-Landau equation with global coupling. Proc. Amer. Math. Soc. 133, 1787–1796.

## Bibliographie

- [1] S. M. Cox and P. C. Matthews. New instabilities in two-dimensional rotating convection and magnetoconvection. *Physica D*, 149:210–229, 2001.
- [2] J. H. P. Dawes. Localized pattern formation with a large-scale mode: slanted snaking. SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 7:186–206, 2008.
- [3] J. H. P. Dawes and S. Lilley. Localized states in a model of pattern formation in a vertically vibrated layer. *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.*, 9:238–260, 2010.
- [4] W. J. Firth, L. Columbo, and A. J. Scroggie. Proposed resolution of theoryexperiment discrepancy in homoclinic snaking. *Phys. Rev. Lett.*, 99:104503, 2007.
- [5] R. C. Kloosterziel and C. F. Carnevale. Closed-form linear stability conditions for rotating Rayleigh–Bénard convection with rigid stress-free upper and lower boundaries. J. Fluid Mech., 480:25–42, 2003.
- [6] E. Knobloch and M. Silber. Travelling wave convection in a rotating layer. Geophysical and Astrophysical Fluid Dynamics, 51(1):195–209, 1990.
- [7] D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch. Magnetohydrodynamic convectons. J. Fluid Mech., 687:595–605, 2011.
- [8] J. M. Lopez and F. Marques. Centrifugal effects in rotating convection: nonlinear dynamics. J. Fluid Mech., 628:269–297, 2009.
- [9] P. C. Matthews and S. M. Cox. Pattern formation with a conservation law. Nonlinearity, 13:1293–1320, 2000.
- [10] A. Rubio, J. M. Lopez, and F. Marques. Onset of Küppers–Lortz-like dynamics in finite rotating thermal convection. J. Fluid Mech., 644:337–357, 2010.
- [11] J. D. Scheel. The amplitude equation for rotating Rayleigh–Bénard convection. *Phys. Fluids*, 19:104105, 2007.

# Chapitre 7

## Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié la formation d'états spatialement localisés dans deux problèmes classiques de mécanique des fluides : la convection de double diffusion et la convection de Rayleigh–Bénard en présence de rotation.

Nos travaux ont reposé majoritairement sur la simulation numérique. Nous avons exploité une méthode numérique de continuation qui nous a permis d'analyser la formation de structures convectives au regard des résultats existant sur des systèmes dynamiques modèles. Cette démarche s'est appuyée sur l'analyse des diagrammes de bifurcation présentant des cartes d'évolution des solutions en fonction d'un paramètre adimensionnel. Ces diagrammes ont été complétés par une analyse de stabilité linéaire des solutions et par la simulation numérique directe (intégration en temps) des équations d'évolution.

Dans les systèmes que nous avons étudiés, nous avons mis en évidence la formation de structures convectives spatialement localisées. Leur nature en général peut être très variée couvrant des solutions stationnaires ou non, symétriques ou non et formées de un ou plusieurs pulses. Dans ce travail, elles prennent la forme de régions du fluide dans lesquelles une convection stationnaire prend place sous la forme d'un arrangement de cellules, le reste du fluide restant au repos. Elles sont appelées convectons. Leur mécanisme de formation est connu sous le nom d'homoclinic snaking et largement documenté dans une littérature récente exploitant notamment l'équation modèle de Swift-Hohenberg [3, 4]. Il conduit à la formation d'une région de l'espace des paramètres dans laquelle coexiste un grand nombre de solutions spatialement localisées. La dynamique non-linéaire induite par ce mécanisme est extrêmement riche et fait l'objet d'un nombre très abondant de travaux comme en témoigne un numéro spécial de Chaos consacré à la formation de ces structures dans les systèmes spatialement étendus [10]. Dans les systèmes fluides présentés dans ce travail, notre objectif a d'abord été de mettre en évidence que des états spatialement localisés s'y forment. Notre second objectif a été d'étudier leurs mécanismes de formation au regard de ce qui était connu dans la littérature concernant autant les équations modèles que d'autres systèmes fluides en particulier. Nos travaux ont révélé des variations du mécanisme de formation de ces structures. Dans la suite de ce chapitre nous résultants succintement l'essentiel de nos résultats en présentant quelques perspectives.

## 7.1 Convection de double diffusion 2D

Le chapitre 4 est consacré à l'étude de l'instabilité de double-diffusion dans une couche fluide horizontale formée d'un mélange binaire. La couche est chauffée par le bas (instable thermiquement) et stratifiée stable en concentration (la concentration diminue avec la côte). Dans cette configuration, le système admet une solution conductive dont nous avons étudié la stabilité en fonction du nombre de Rayleigh thermique. La couche est supposée  $\Gamma$ -périodique dans la direction horizontale x où  $\Gamma$  est choisi comme un multiple entier n de la longueur d'onde critique associée à la bifurcation primaire stationnaire d'une couche infinie. La solution conductive perd tout d'abord sa stabilité par une série de bifurcations de Hopf dont le nombre dépend des nombres de Lewis et de Grashof solutal et de la période  $\Gamma$ . Nous avons calculé la branche de bifurcation associée à la première bifurcation stationnaire. Elle émerge de la solution conductive par une bifurcation fourche sous-critique et est formée d'un ensemble de n paires identiques de rouleaux contra-rotatifs (solutions dites périodiques). Au voisinage de ce point, nous avons identifié une bifurcation secondaire donnant naissance à deux branches de solutions associées au voisinage du point à une modulation spatiale de longueur d'onde  $\Gamma$  des solutions périodiques. Ces branches émergent dans le sens des nombres de Rayleigh Ra décroissants. A mesure que Ra décroît, la modulation s'accentue pour finir par former des solutions spatialement localisées formées de une et deux cellules de convection suivant les propriétés de symétrie de la branche. Les deux branches entrent alors dans la région dite de snaking dans laquelle elle s'entrelacent en serpentant dans un intervalle de nombre de Rayleigh. Au cours de ce processus, les solutions nucléent des rouleaux supplémentaires de part et d'autre de ceux existant ce qui les amène à croître spatialement et amène leur énergie cinétique à augmenter. Une fois que la dimension des structures est proche de celle du domaine ( $\Gamma$ ), les branches quittent la région de snaking pour terminer en un point de bifurcation secondaire situé sur une branche de solutions périodiques éventuellement différente de celle dont elles ont émergé.

Ce scénario est identique à celui que l'on peut observer dans les travaux de Burke et Knobloch [3] sur l'équation de Swift-Hohenberg en dépit du fait que le présent système est dissipatif ou à celui observable dans la convection d'un fluide binaire en présence d'effet Soret. La différence principale avec ce dernier problème réside dans l'alignement des noeuds-cols des deux branches dans la région de snaking, alignement perdu pour les noeuds-cols de droite (associés aux nombres de Rayleigh les plus grands) en présence d'effet Soret. Cet différence s'explique par un mécanisme de pompage de soluté au travers des convectons, mécanismes qui dépend des symétries et donc affecte les deux branches de solutions localisées différemment.

Nous avons complété le diagramme de bifurcation en y représentant les branches de solutions stationnaires localisées à deux pulses. Elles sont formées de deux convectons équidistants dans le domaine périodique  $\Gamma$ . Comme celles à un pulse, elles émergent d'une bifurcation secondaire. Une paire de branche est produite par la seconde bifurcation secondaire le long de la branche périodique et une seconde paire par la première bifurcation secondaire le long de la seconde branche de solutions périodiques (issue donc du second point de bifurcation primaire). De la même manière, ces branches suivent dans la même gamme de paramètre un snaking les amenant à croître spatialement.

Il est clair que cette région de snaking peut s'enrichir pour des domaines  $\Gamma$ suffisamment grands de solutions à trois, quatre (ou plus) pulses. Il convient toutefois de noter que dans le cas présent, les solutions stationnaires à 1 et 2 pulses sont toutes linéairement instables. Puisque cette instabilité est héritée en majeure partie de l'instabilité de la branche de solution conductive (plusieurs bifurcations de Hopf précèdent la première bifurcation primaire), il est plausible d'anticiper que les branches à nombre de pulses plus grand seraient également instables même pour des périodes  $\Gamma$  plus grandes. Les solutions stationnaires obtenues étant toutes linéairement instables, nous nous sommes tournés vers la simulation numérique directe des équations instationnaires afin de déterminer quelles solutions s'y substituaient. Les régimes instationnaires que nous avons obtenus ont montré que la capacité du système à construire des convectons influençait la dynamique instationnaire dans une gamme de paramètres plus étendue que celle strictement restreinte à la région de snaking. Cette interaction mériterait une attention plus soutenue. Elle nécessiterait néanmoins le développement d'outils numériques spécifiques permettant le calcul par méthode de point fixe et le suivi par continuation des branches de solutions périodiques en temps. Nous n'avons pas développé cet outil dans ce travail mais il nous semble que les perspectives offertes par un tel outil sont multiples sans être restreintes à l'étude de ce système en particulier.

Pour terminer, il convient de souligner que le nombre de Lewis utilisé dans ce travail ( $Le = \tau^{-1} \approx 10$ ) sous-évalue les nombres de Lewis de la plupart des mélanges fluides ordinaires pour lesquels il est de l'ordre de la centaine. La continuation de mélanges fluides pour de plus larges nombres de Lewis a dans notre cas soulevé des problèmes de convergence tant dans l'inversion du système linéaire par un gradient bi-conjugué carré que dans le suivi de branches de solutions. Nous imputons ces difficultés à la proximité de nombreuses branches de solutions pour les grands nombres de Lewis (le nombre de bifurcation de Hopf précédant la première bifurcation primaire stationnaire augmente avec Le) et à la formation éventuelle de couches limites solutales aux grands nombres de Rayleigh ( $Ra \approx 10^6$ ).

### 7.2 Convection de double diffusion 3D

Le chapitre 5 est consacré à l'étude de l'instabilité de double-diffusion dans des cavités parallélépipédiques de dimensions finies. Dans ce système, les gradients imposés sont perpendiculaires à la gravité et produits par deux surfaces verticales opposées le long desquelles des températures et concentrations différentes sont prescrites. Le cas des forces de volume d'origine solutale et thermique strictement opposées (N = -1) nous a amené à nous intéresser aux branches de bifurcation résultant de l'instabilité linéaire de la solution conductive dans des cavités plus étendues dans une direction.

Dans le cas des cavités à section horizontale carrée et plus étendues dans la direction de la gravité, l'étude par continuation des branches primaires a révélé qu'elles étaient responsables de la formation d'états spatialement localisés se substituant aux branches secondaires observées en présence de conditions aux limites périodiques. Les deux branches d'états spatialement localisés sont formées par les parties sous-critique et super-critique issues de la bifurcation transcritique primaire. Le comportement de ces deux branches est en partie similaire à celui du cas périodique. Elles croissent en s'entrelaçant dans une région de snaking ce qui s'accompagne de la nucléation de nouvelles cellules de convection. Toutefois, une fois que les dimensions du convecton approchent l'extension verticale de la cavité, l'une d'elles poursuit vers les nombres de Rayleigh croissants tandis que l'autre reste un peu plus dans la région de snaking avant de partir vers les grands nombres de Rayleigh en évoluant vers une solution à deux pulses. Ce type de comportement est similaire à celui des branches d'états localisés obtenues dans l'équation de Swift-Hohenberg 1D pour des conditions aux limites de Robin préservant la symétrie par réflexion [9].

L'une des surprises de cette étude est la présence de snakings secondaires produits par des bifurcations secondaires le long des branches primaires. Elles apparaissent dans la région de snaking une fois par aller-retour à la suite d'une instabilité des solutions spatialement localisées. Nous l'avons qualifiée d'instabilité 3D au regard du fait que durant ce snaking secondaire, les structures croissent en nucléant des rouleaux twistés par rapport à l'axe vertical [2] produisant des convectons qui n'ont pas d'analogue dans une version 2D du problème. Six snaking secondaires ont ainsi été identifiés. Il est plausible de penser que si les branches primaires effectuaient plus d'allers-retours ces bifurcations secondaires seraient plus nombreuses. C'est l'une des perspectives de cette étude que nous n'avons pas abordée pour des raisons numériques : les temps de calculs dans l'état actuel de l'outil numérique et des machines sur lesquelles nous avons travaillé ne nous permettent pas pour l'instant d'aborder de manière raisonnable des domaines plus grands (cette étude a monopolisé un Intel Xeon 5650 (12 threads) pendant presque un an et demi).

Il existe un autre type de solutions que nous n'avons pas présenté dans ce travail et pour lequel nous menons toujours des simulations. Il s'agit de convectons spatialement localisés le long d'un coté du domaine. Ils sont semblables à ceux obtenus par Mercader *et al.* [12] dans l'étude de la convection de Rayleigh-Bénard dans les mélanges fluides binaires. Ces structures sont présentes dans ce problème sous une version tri-dimensionnelle (figure 7.1). Ce n'est évidemment pas une surprise compte tenu du fait qu'elles avaient déjà été mises en évidence dans le problème 2D par Ghorayeb et Mojtabi [7, 8]. Nous les avons obtenues par intégration temporelle. Elles sont instables linéairement par la même instabilité tridimensionnelle qui affecte les branches primaires et pour les obtenir, nous avons dû maintenir numériquement durant les itérations en temps, la symétrie par rapport au plan vertical médian et parallèle aux surfaces où T et C sont maintenus contants. L'origine de ces branches et la manière dont elles connectent ou pas les branches que nous avons identifiées restent des questions ouvertes et l'une des perspectives de ce travail.

Nous avons également considéré des cavités à section verticale carrée unitaire et plus allongées dans la direction horizontale parallèle aux surfaces où T et C sont maintenus contants. La partie sous-critique de la branche primaire évolue rapidement à mesure que Ra décroit d'une structure monocellulaire convective modulée vers une structure spatialement localisée. La branche commence alors à croître brusquement en énergie, un effet lié à la croissance spatiale de la cellule. La croissance s'arrête lorsque la taille de la cellule approche celle de la cavité. On retrouve une structure quasiment bi-dimensionnelle ayant la forme d'un long rouleau de convection mono-cellulaire. Ce mécanisme est appelé proto-snaking [1]. Nous avons interprété ce diagramme en le comparant à celui d'un domaine périodique dans lequel


FIGURE 7.1 – Etat spatialement localisé calculé à  $Ra \approx 818$  par intégration en temps dans le problème de double diffusion dans une cavité étendue dans la direction verticale. Par commodité de représentation, la figure a été tournée : x est la coordonnée verticale avec  $\mathbf{g} = -g\mathbf{e}_x$ . Sont représentées deux isosurfaces (associées à des valeurs opposées) de la vitesse verticale u dans la direction x.

les solutions du problème bi-dimensionnel restent des solutions du problème 3D. L'analyse de stabilité de cette branche nous a également permis de mettre à nouveau en évidence l'instabilité tridimensionnelle que nous avions observée dans le cas des cavités verticales.

# 7.3 Convection thermique d'une couche fluide en rotation

La dernière partie de ce travail (chapitre 6) est consacrée à la convection de Rayleigh-Bénard en présence de rotation. Nous y étudions la formation d'états localisés d'une couche fluide maintenue entre deux surfaces portées à des températures différentes (chauffage par le bas) et en rotation constante autour de l'axe vertical (parallèle à la gravité). On ne considère que l'effet de Coriolis lié à la rotation et pas l'effet de la force centrifuge (faibles nombres de Froude). Des conditions aux limites de glissement sur les surfaces horizontales ont été considérées ainsi que des conditions aux limites périodiques dans la direction horizontale. L'approximation est bi-dimensionnelle dans le sens où l'écoulement tridimensionnel est invariant dans la direction transverse horizontale.

En nous inspirant des travaux de Cox & Matthews [5], nous avons mené l'analyse linéaire, faiblement non-linéaire et pleinement non-linéaire (numérique) de la stabilité de la solution conductive afin de déterminer les gammes de paramètres (nombres de Taylor, de Prandtl et de Rayleigh) dans lesquelles des solutions spatialement localisées pouvaient apparaître. L'analyse faiblement non-linéaire a permis d'identifier quatres régimes dépendant des paramètres. Ces régimes présentent :

- une bifurcation primaire fourche supercritique de convection périodique,
- une bifurcation primaire fourche supercritique de convection périodique et une bifurcation secondaire supercritique vers des états localisés,
- une bifurcation primaire fourche supercritique de convection périodique et une bifurcation secondaire sous-critique vers des états localisés,
- une bifurcation primaire fourche sous-critique de convection périodique et une bifurcation secondaire sous-critique vers des états localisés.

Nous avons ensuite mené par méthode de continuation l'étude pleinement nonlinéaire des branches de solutions. Cette étude a confirmé que dans chacun des cas présentant une bifurcation secondaire (les trois derniers), les branches de bifurcation secondaire créent des états localisés. Les caractéristiques de ces branches sont similaires à celles observées en magnéto-hydrodynamique [11]. En particulier et à la différence de la convection de double diffusion étudiée dans les autres chapitres, les branches effectuent un snaking incliné. Cette caractéristique est attribuée à la présence d'un mode neutre de grande longueur d'onde (k = 0) induit par une quantité conservée : muni de conditions aux limites de glissement le long des surfaces horizontales, la vitesse zonale est définie à une constante additionnelle près que nous fixons en imposant à sa moyenne spatiale d'être nulle sur le domaine. La conséquence est d'étirer le domaine dans lequel les états localisés existent ce qui conduit à un snaking incliné qui va s'étaler jusqu'à des valeurs du nombre de Rayleigh inférieures à celle au delà de laquelle existent les solutions périodiques (correspondant au noeudcol des branches primaires lorsqu'elles sont sous-critiques). On remarquera en effet que dans le cas de la double diffusion, le snaking était pleinement contenu dans la région d'existence des solutions périodiques. L'analyse du mécanisme de formation de ce snaking incliné est mené par Dawes [6] sur le problème de la magnétohydrodynamique. Ce que ne révèle pas son analyse centrée sur la dérivation d'une équation de Ginzburg-Landau non-locale est la persistence de ce snaking même lorsque la bifurcation primaire est supercritique. Ce phénomène a été par la suite mis en évidence par Lo Jacono *et al.* [11] sur ce même problème.

Le problème de la convection de Rayleigh-Bénard en présence de rotation est, après la magnétoconvection, la seconde occurence de snaking incliné. Afin de mieux comprendre comment ce comportement est lié au snaking classique, une première perspective consiste à suivre par homotopie le changement du diagramme de bifurcation dans le passage de conditions aux limites de glissement aux conditions de non-glissement. Il serait également intéressant de mener une étude similaire à celle de Dawes [6] en diminuant le couplage entre les modes de grande et de petite longueur d'onde ou de briser progressivement la propriété de conservation du flux magnétique en rajoutant un terme à l'équation (2.2) de [6]. La comparaison des résultats de ces deux études permettra sans doute de mieux comprendre le snaking incliné.

Dans un autre registre, le modèle de convection en présence de rotation que nous avons étudié simplifie significativement la physique en ne considérant que les effets couplés de la poussée d'Archimède et de la force de Coriolis. D'autre part, l'hypothèse de bidimensionalité, malgré la présence de 3 composants pour la vitesse, exclut les couplages non-linéaires 3D. Tenir compte de la troisième dimension permettrait d'avoir une vision plus complète de la physique des convectons en présence de rotation, avec notamment de nouvelles structures et une stabilité plus précise. Dans l'avenir, d'autres effets sont à prendre en compte pour se rapprocher de réalités physiques telles que les écoulements atmosphériques.

## Bibliographie

- D. Avitabile, D. J. B. Lloyd, J. Burke, E. Knobloch, B. Sandstede, R. Richter, and I. V. Barashenkov. To snake or not to snake in the planar Swift-Hohenberg equation. SIAM J. App. Dyn. Syst., 9:704–733, 2010.
- [2] A. Bergeon and E. Knobloch. Natural doubly diffusive convection in threedimensional enclosures. *Phys. Fluids*, 14:3233–3250, 2002.
- [3] J. Burke and E. Knobloch. Localized states in the generalized Swift–Hohenberg equation. *Phys. Rev. E*, 73:056211, 2006.
- [4] J. Burke and E. Knobloch. Snakes and ladders: Localized states in the Swift-Hohenberg equation. *Phys. Lett. A*, 360:681–688, 2007.
- [5] S. M. Cox and P. C. Matthews. New instabilities in two-dimensional rotating convection and magnetoconvection. *Physica D*, 149:210–229, 2001.
- [6] J. H. P. Dawes. Localized pattern formation with a large-scale mode: slanted snaking. SIAM J. Appl. Dyn. Syst., 7:186–206, 2008.
- [7] K. Ghorayeb. Etude des écoulements de convection thermosolutale en cavité rectangulaire. *Thèse de Doctorat de l'Université de Toulouse*, 1997.
- [8] K. Ghorayeb and A. Mojtabi. Double diffusive convection in a vertical rectangular cavity. *Phys. Fluids*, 6:2339–2348, 1997.
- [9] S. M. Houghton and E. Knobloch. Homoclinic snaking in bounded domains. *Phys. Rev. E*, 80:026210, 2009.
- [10] Focus issue. Dissipative localized structures in extended systems. *Chaos*, 17:037101–037119, 2007.
- [11] D. Lo Jacono, A. Bergeon, and E. Knobloch. Magnetohydrodynamic convectons. J. Fluid Mech., 687:595–605, 2011.
- [12] I. Mercader, O. Batiste, A. Alonso, and E. Knobloch. Convectons, anticonvectons and multiconvectons in binary fluid convection. J. Fluid Mech., 667:586– 606, 2011.

## Chapitre 8

### Annexe : Electrodynamique

Dans cette annexe nous présentons le résultat de l'analyse par méthode de continuation (code AUTO [4]) et du point de vue des systèmes dynamiques d'un système physique différent de ceux abordés jusqu'ici. Ce travail débuté dans le cadre d'un stage de master 2 et que nous avons achevé durant ces trois années de thèse porte sur l'étude d'une instabilité observée à petite échelle dans un électrolyte. Nous rapportons ici les principaux résultats obtenus.

La miniaturisation progressive des systèmes entraîne de nouveaux phénomènes. Plus on réduit la taille d'un système et plus les interactions électriques jouent un rôle important dans la dynamique, comme c'est le cas dans les MEMS (MicroElectroMechanical Systems). Si intuitivement on s'attend à ce que deux parois électriquement identiques se repoussent, plusieurs observations expérimentales ont montré des comportements attractifs lorsque les parois sont faiblement espacées [3, 9]. Pour comprendre cette attraction, plusieurs modèles ont été testés comme celui de Poisson–Boltzmann pour des parois à potentiel fixe, mais sans succès [7]. Aux échelles microscopiques, la présence de couches limites complexes peut conduire à une réorganisation des charges dans l'électrolyte et à des transitoires complexes [2]. Proche des parois, une double couche électrique se développe dans l'électrolyte. La première partie de cette double couche électrique est appelée couche de Stern. Elle constitue la zone occupée par les ions adsorbés sur la paroi. La deuxième partie de la double couche électrique est la couche de Debye ou couche diffusive et englobe la zone dans laquelle le champ électrique diffuse. Ce type de couche limite est un ingrédient important de la modélisation physique à l'échelle microscopique et fait l'objet de plusieurs modélisations mathématiques [6, 1, 5]. En adoptant une condition à la limite de Stern pour le potentiel électrique, Plouraboué & Chang ont montré l'existence de solutions antisymétriques en potentiel et donc attractives dans l'équation de Poisson-Boltzmann [8]. Notre but ici est d'analyser la stabilité de ces solutions attractives.

On considère un électrolyte 1D constitué de cations et d'anions dissociés possédant les mêmes caractéristiques physiques (mais des charges électriques opposées) et borné par deux parois. Le problème statique est décrit par l'équation de Poisson– Boltzmann, que l'on munit de celles de Nernst–Planck afin de décrire la dynamique temporelle des charges et donc la stabilité temporelle des solutions. On utilise la relation d'Einstein–Smoluchowsky pour la mobilité ionique et on adimensionne les équations en utilisant la demi-distance entre les parois h pour les longueurs, le temps caractéristique diffusif  $\tau = h^2/D$  avec D la diffusivité ionique pour les temps, la concentration en cation (ou anion) en absence de champ électrique  $c_0$  pour les concentrations et  $k_B T/e$  où  $k_B$  est la constante de Boltzmann, T la température, e la charge électrique élémentaire pour le potentiel électrique. Les équations ainsi obtenues s'écrivent :

$$\nabla^2 \phi = \frac{\beta}{2} (c^- - c^+), \tag{8.1}$$

$$\partial_t c^+ = \partial_x (\partial_x c^+ + c^+ \partial_x \phi), \qquad (8.2)$$

$$\partial_t c^- = \partial_x (\partial_x c^- - c^- \partial_x \phi), \tag{8.3}$$

où  $\phi$  représente le potentiel électrique,  $c^+$  la concentration en cation,  $c^-$  celle en anion, t le temps et  $\beta = h^2/\lambda_D^2$  quantifie l'écartement des parois 2h par rapport à la longueur de Debye  $\lambda_D = \sqrt{\varepsilon \varepsilon_0 k_B T/(2e^2c_0)}$  avec  $\varepsilon$  ( $\varepsilon_0$ ) la permittivité de l'électrolyte (du vide). La condition à la limite de Stern pour le potentiel électrique s'écrit :

$$\partial_n \phi = \nu \sqrt{\beta} (\phi - \phi_{wall}), \tag{8.4}$$

où  $\partial_n$  est la dérivée par rapport au vecteur normal sortant à la paroi,  $\nu = \lambda_D / \lambda_S$ le rapport entre la longueur de Debye  $\lambda_D$  et l'épaisseur de la couche de Stern  $\lambda_S$ et  $\phi_{wall}$  le potentiel à la paroi. On utilise en outre des conditions de non-flux aux parois :

$$\partial_x c^+ + c^+ \partial_x \phi = 0, \tag{8.5}$$

$$\partial_x c^- - c^- \partial_x \phi = 0. \tag{8.6}$$

Lorsque  $\nu < 0$ , le système ne présente qu'une solution invariablement stable [2]. Cependant, pour  $\nu > 0$ , il présente une instabilité amenant à des solutions antisymétriques en potentiel électrique (et donc attractives), y compris pour des potentiels imposés  $\phi_{wall}$  identiques aux deux parois [8]. On s'intéresse donc à  $\nu > 0$ .

Dans le cas où l'on impose le même potentiel  $\phi_{wall}$  aux parois, un changement de variable permet de se ramener à  $\phi_{wall} = 0$  et le système possède une solution triviale  $(c, \rho, \phi) = (\bar{c}, 0, 0)$  avec  $\bar{c}$  désignant la concentration totale moyenne. On perturbe cette solution triviale en mode normaux et on analyse le problème de stabilité linéarisé obtenu. La solution triviale est stable jusqu'à  $\beta_s = 1/\nu^2$ . A cette valeur particulière du paramètre, le système est singulier et le taux de croissance d'un mode antisymétrique en potentiel diverge, partant vers  $-\infty$  pour  $\beta < \beta_s$  et vers  $+\infty$  pour  $\beta > \beta_s$ . La solution triviale est donc instable au-delà de  $\beta_s$ . Aucune perturbation ne possédant de taux de croissance nul à  $\beta_s$ , cette perte de stabilité ne se fait pas via un point de bifurcation et n'entraîne donc pas la création de nouvelles solutions. L'analyse de stabilité linéaire révèle en outre que la solution triviale regagne sa stabilité en  $\beta_c$ , dont la valeur est donnée par la relation suivante :

$$\beta_c = \frac{1}{2\bar{c}} \left( \ln \frac{\nu + \sqrt{\bar{c}/2}}{\nu - \sqrt{\bar{c}/2}} \right)^2. \tag{8.7}$$

A cette valeur, le taux de croissance du mode antisymétrique responsable de la singularité en  $\beta_s$  est nul et des solutions antisymétriques se forment via une fourche. La solution triviale reste ensuite stable pour  $\beta > \beta_c$ .



FIGURE 8.1 – Diagramme de bifurcation représentant le potentiel électrique à la paroi  $\phi_w$  en fonction de  $\beta$  pour  $\phi_{wall} = 0$ ,  $\bar{c} = 2$  et  $\nu = 2$ . Les traits pleins représentent les solutions temporellement stables et les traits discontinus celles instables. La solution triviale  $(c, \rho, \phi) = (2, 0, 0)$  perd sa stabilité à  $\beta_s = 0.25$  puis la regagne à la fourche en  $\beta_c = 0.3017$ . Cette bifurcation crée deux branches de solutions antisymétriques (figure 8.2) dont l'amplitude diverge à  $\beta_s$ .



FIGURE 8.2 – Solution non-linéaire prise sur la branche inférieure issue de la fourche (figure 8.1) pour  $\beta = 0.28$ .

Les résultats qui suivent ont été obtenus avec le logiciel de continuation Auto-07p [4] après avoir discrétisé le domaine par 41 points de Gauss-Lobatto-Legendre. La figure 8.1 représente le diagramme de bifurcation pour  $\phi_{wall} = 0, \bar{c} = 2$  et  $\nu = 2$ . Les solutions sont représentées en utilisant la valeur du potentiel électrique à la paroi  $\phi_w$  en fonction de  $\beta$ . On remarque que la solution triviale identiquement nulle en potentiel électrique reste stable jusqu'à  $\beta_s = 0.25$  où elle perd sa stabilité sans générer de nouvelles solutions, puis regagne sa stabilité à  $\beta_c = 0.3017$  via une fourche, comme prédit par l'analyse de stabilité linéaire. Cette fourche crée une branche de solutions antisymétriques. Une solution le long de cette branche est représentée sur la figure 8.2. Ces solutions antisymétriques sont stables et partent vers les petits  $\beta$  jusqu'à ce que leur amplitude diverge en  $\beta_s$ . Ainsi, dans l'intervalle  $\beta_s < \beta < \beta_c$ , il existe des solutions où l'électrolyte présente un profil de potentiel électrique antisymétrique et donc attractif, malgré la présence de conditions aux limites identiques aux deux parois. La superposition des doubles couches électriques des deux parois et de la capacité de celles-ci à accumuler les charges entraînent une préférence du système pour des profils de potentiel électrique antisymétrique et

explique la formation de la solution présentée en figure 8.2.

Dans l'article qui suit, les résultats de cette étude sont présentés en détail. On y trouve une discussion sur la condition à la limite de Stern et sa justification par les isothermes d'adsorbtion, puis l'étude complète de la stabilité linéaire avec une discussion approfondie sur le comportement singulier en  $\beta_s$ . Enfin, plusieurs valeurs des paramètres sont explorées, pour  $\nu > 0$  dans un premier temps, puis  $\nu < 0$ . Des résultats concernant l'évolution des solutions en présence d'un champ électrique imposé sont aussi présentés.



### Electrolyte Stability in a Nanochannel with Charge Regulation

Cédric Beaume,<sup>\*,†</sup> Franck Plouraboué,<sup>†</sup> Alain Bergeon,<sup>†</sup> and Edgar Knobloch<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>Université de Toulouse, INP, and CNRS, IMFT (Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse), Allée Camille Soula, F-31400 Toulouse, France

<sup>‡</sup>Department of Physics, University of California, Berkeley, California 94720, United States

**ABSTRACT:** The stability of an electrolyte confined in one dimension between two solid surfaces is analyzed theoretically in the case where overlapping double layers produce nontrivial interactions. Within the Poisson—Boltzmann—Nernst—Planck description of the electrostatic interaction and transport of electrical charges, the presence of Stern layers can enrich the set of possible solutions. Our analytical and numerical study of the stability properties of the trivial state of this system identified an instability to a new antisymmetric state. This state is stable for a



range of gap widths that depends on the Debye and Stern lengths, but for smaller gap widths, where the Stern layers overlap, a second transition takes place and the stable nontrivial solution diverges. The origin of this divergence is explained and its properties analyzed using asymptotic techniques which are in good agreement with numerical results. The relevance of our results to confined electrolytes at nanometer scales is discussed in the context of energy storage in nanometric systems.

#### **1. INTRODUCTION**

The advent of integrated electrokinetic systems has renewed interest in employing such systems for manipulation of smallscale flows of charged liquids using electrical forces. Electrokinetic effects increase within decreasing scale and are therefore especially important when a charged liquid is confined to small domains. The stability of electro-osmotic flows confined between parallel plates has been investigated in several recent papers motivated by mesoscale experimental observations of flow instability.<sup>1,2</sup> Far from double layers, at a scale much larger than the Debye length, charged electrolytes are almost electroneutral and diffusive currents are negligible compared to electromigration. The resulting "ohmic" model approximation for the electrolyte is commonly used<sup>3,4</sup> for analyzing the dynamics of electrokinetic flows. In this framework, the presence of electrolyte concentration gradients induces electrical conductivity changes which are in turn responsible for electrical potential variations.<sup>5,6</sup> Abrupt electrolyte concentration variations can induce both longitudinal and transverse variations in the potential leading to flow instability.<sup>5,6</sup>

When convective transport dominates over diffusive (the large Péclet number regime), a recent study<sup>7</sup> shows that the electrokinetic flow is stable even in the presence of time-dependent electrical forcing. In this case, the nonstationary flow in the Stokes layers near the boundaries decouples from the bulk electrokinetic problem, but is driven by the Coulomb forces arising in the bulk. These studies have been restricted to the linear Debye—Hückel approximation and are all based on the thin double-layer approximation. In this limit, the bulk electrolyte remains quasi-neutral, and the double layer remains in thermal quasi-equilibrium. However, dynamical studies investigating the stability at the double-layer scale have apparently not been done. At this scale, charges are no longer locally electroneutral, and nonlinearities involving the potential and ion concentration can play an important role.

At these very small scales, the electrokinetic phenomenon involves new physical effects that are still not clearly elucidated. For example, dynamical charge relaxation involves a very fast time scale associated with various diffusion times across the double layer.<sup>8</sup> At distances on the order of the Debye length, when the electrolyte is confined between two solid surfaces, the double layers overlap and their interaction can produce nontrivial attraction<sup>9,10</sup> and ion concentration profile.<sup>11</sup> This is not true for imposed surface charges, where Poisson–Boltzmann electrostatic interactions are always repulsive,<sup>12</sup> unless nonsymmetric boundary conditions associated with nonidentical surfaces are considered.<sup>13,14</sup>

However, attraction can occur even for symmetric boundary conditions provided charge regulation is included, as first noted in refs 15,16 and subsequently analyzed in ref 9. In other situations charge regulation produces repulsion.<sup>17</sup> In the present work, we concentrate on "reduced" charge regulation for which the surface charge *decreases* with the applied electrical potential, in contrast to the case studied in ref 8. In this case, Stern layers associated with mixed boundary conditions for the electrical potential destabilize the trivial state, leading to a nontrivial symmetry-breaking stationary solution describing attractive interaction between solid surfaces.<sup>9</sup> Such Stern layers are consistent with modified mean-field descriptions incorporating fluctuations and charge correlation effects.<sup>9,18</sup> Interest in this specific case is justified within the framework of Langmuir and Frumkin–Fowler–Guggenheim (FFG) mass action models as

```
        Received:
        May 17, 2011

        Revised:
        July 15, 2011

        Published:
        July 19, 2011
```



**Figure 1.** (a) Sketch of the system with a neutral monovalent electrolyte confined between two chargeable walls located at  $x = \pm h$ . The Debye and Stern lengths  $\lambda_D$  and  $\lambda_S$  relative to the gap width 2h when (b)  $\beta > \beta_s$  and (c)  $\beta = \beta_s$ . The corresponding electrical potential  $\phi(x)$  is superposed.

discussed in section 2.1.3. In ref 9, the attractive far-field behavior of "reduced" charge regulation solutions between similar surfaces was successfully compared with atomic force microscopy measurements obtained in ref 19. The present contribution analyzes in greater depth the origin of such attractive solutions, as well as their stability properties with respect to parameter changes including charge density variations and potential disturbances. In the context of charge transport balance formulation, the study shows that attractive solutions are not only robust but also display a dramatic increase in the wall potential at small separations, similar to that observed in refs 20,21 that can swamp the spring constant of an AFM probe tip at small distances. It is important, therefore, to also consider the stability properties of both the trivial and nontrivial solutions, and to do so within the framework of a Poisson—Nernst—Planck mean-field description.

The problem is formulated in section 2 together with the governing equations and a brief summary of the numerical method used to solve them. The linear stability of the trivial homogeneous solution of the Poisson—Nernst—Planck equations is studied analytically in section 3. Section 4 is devoted to a description of the numerical results and an analytical treatment of the behavior of the system near a singularity identified in the course of the numerical study. Two cases are studied, with and without an imposed electric field, focusing on a closed system with a fixed number of charges. In section 4.3, we consider the effects of different diffusivities of the anions and cations; in section 4.4, the case of a non electroneutral electrolyte is briefly described; the influence of the different Stern layers is discussed in section 4.5. Brief discussion and conclusions follow in section 5.

#### 2. CONSTITUTIVE EQUATIONS AND NUMERICAL METHOD

**2.1. Governing Equations.** 2.1.1. Dimensionless Formulation. We consider a neutral monovalent electrolyte between two chargeable, planar, and parallel vertical walls, as in Figure 1. In the case considered here, the vertical extent of the walls is sufficiently large compared to the gap 2h that a one-dimensional formulation is appropriate, and we use the variable x to refer to the horizontal coordinate transverse to the walls. The electrolyte is taken to consist of dissociated cations and anions with identical mobilities and diffusivities, satisfying the Poisson equation

$$\varepsilon \varepsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = e(c^+ - c^-) \tag{1}$$

Here,  $\varepsilon$  is the electrolyte permittivity,  $\varepsilon_0$  the vacuum permittivity, e the elementary electrical charge,  $c^+$  and  $c^-$  are, respectively, the

cation and the anion number densities, and **E** is the electric field that may be written as the gradient of a potential  $\phi$ 

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi \tag{2}$$

defined to within a constant. The diffuse-charge dynamics are described by the Nernst-Planck equations

$$\partial_t c^{\pm} = \partial_x (D \partial_x c^{\pm} \pm \mu c^{\pm} \partial_x \phi) \tag{3}$$

where *t* is the time, *D* is the (constant) ion diffusivity, and  $\mu$  is the (constant) ion mobility given by the Einstein-Smoluchowski formula

$$u = \frac{De}{k_{\rm B}T} \tag{4}$$

Here,  $k_{\rm B}$  is the Boltzmann constant and *T* is the temperature. As already mentioned, we assume that the diffusivities of positive and negative charges are identical. However, it is important to stress that when we relax this hypothesis (see section 4.3) we find that doubly diffusive effects do not qualitatively affect the conclusions reached with a single diffusivity hypothesis. Finally, it is also interesting to mention that we have neglected convective transport contribution in eq 3 because, at nanometer scale, diffusive transport is generally much faster than convection (zero Péclet number limit).

In the following, lengths, time, and the number densities  $c^{\pm}$  are nondimensionalized, respectively, using half the wall separation h, the diffusive time scale  $\tau \equiv h^2/D$ , and the number density  $c_0$  of cations in the absence of an electric field (equivalently, anions, since both of these constants are equal, owing to electroneutrality and isovalence). The electrical potential  $\phi$  is nondimensionalized by  $k_{\rm B}T/e$ . The dimensionless Poisson– Nernst–Planck equations read

$$\Delta \phi = \frac{\beta}{2} (c^- - c^+) \tag{5}$$

$$\partial_t c^+ = \partial_x (\partial_x c^+ + c^+ \partial_x \phi) \tag{6}$$

$$\partial_t c^- = \partial_x (\partial_x c^- - c^- \partial_x \phi) \tag{7}$$

and are *time-dependent*. Here,  $\Delta \equiv \partial_{xx}^2$  and the variables *x*, *t*,  $c^{\pm}$ , and  $\phi$  now refer to dimensionless quantities. In the following, we refer to  $c^{\pm}$  as *concentrations*; number densities can be converted to true or relative concentrations by dividing by the Avogadro number Av or by a reference number density such as  $c_0$ , but these prefactors cancel out from the above equations. In eq 5, the parameter  $\beta \equiv h^2/\lambda_D^2$ 

quantifies the relation between the gap width 2h and the Debye length  $\lambda_{\rm D}$  defined by

$$\lambda_{\rm D} = \sqrt{\frac{\varepsilon \varepsilon_0 k_{\rm B} T}{2\epsilon^2 c_0}} \tag{8}$$

In the following, we shall be interested in the case of overlapping double layers corresponding to the case  $\beta < 1$  (see Figure 1). Following classical formulation,<sup>22</sup> we introduce the total concentration  $c \equiv c^+ + c^-$  and the charge density  $\rho \equiv c^+ - c^-$  and rewrite eqs 5–7 in the form

$$\Delta \phi = -\frac{\beta}{2}\rho \tag{9}$$

$$\partial_t c = \partial_x (\partial_x c + \rho \partial_x \phi) \tag{10}$$

$$\partial_t \rho = \partial_x (\partial_x \rho + c \partial_x \phi) \tag{11}$$

We assume that the flux of anions and cations across the boundaries vanishes

$$\partial_x c + \rho \partial_x \phi = \partial_x \rho + c \partial_x \phi = 0$$
 at  $x = \pm 1$  (12)

Under these conditions, eqs 10 and 11 show that  $\partial_t \langle c \rangle = \partial_t \langle \rho \rangle = 0$ , where  $\langle f \rangle = \int_{-1}^{1} f \, dx$ . Thus, the number of anions and cations in the electrolyte remains constant in time. To fix these constants, we take the global charge of the electrolyte to be zero corresponding to an electrically neutral system. In dimensionless form, this assumption leads to the constraints

$$\langle c \rangle - 2\overline{c} = \langle \rho \rangle = 0 \tag{13}$$

where  $\overline{c}$  is a constant determined by the number density of anions and cations prior to charge separation. This condition preserves global charge neutrality in the bulk plus solution. For simplicity, we consider first an electrolyte with identical anion and cation diffusivities, with global charge neutrality, i.e.,  $\langle \rho \rangle \equiv \overline{\rho} = 0$ , and no applied electric field. Our conclusions extend, however, to the more general case of an applied electric field (as shown in section 4.2), heterogeneous ion properties (as shown in section 4.3), and non-electroneutral liquid bulk for which  $\overline{\rho} \neq 0$  (as shown in section 4.4).

In view of our nondimensionalization, we take  $\overline{c} = 2$ , although our analytical calculations are carried out for general  $\overline{c}$ . In some applications, for example, in open systems in which the system is in contact with electrolyte reservoirs above and below,  $\overline{c}$  can be a function of *z*, the coordinate parallel to the walls.<sup>11</sup>

2.1.2. Stern Layer Boundary Conditions. It remains to specify the boundary conditions on the electrical potential  $\phi$  at the solid surfaces. The appropriate conditions go back to the work of O. Z. Stern,<sup>23</sup> albeit with a physical interpretation that benefits from recent advances in statistical fluctuation theory analysis of surface adsorption.<sup>9,18</sup> This analysis modifies the traditional physical picture of the Stern boundary conditions (see, e.g., refs 24,25) and attributes to Stern layers chemical and entropic contributions to the charge regulation capacity, in addition to the traditional electrical contribution.<sup>13</sup> In the traditional picture, developed by Stern<sup>23</sup> and used in many subsequent studies, e.g., refs 24,25, a Stern layer (sometimes separated into an inner and an outer part<sup>24</sup>) is a region where transverse spatial variations of the potential are taken to be linear, with an apparent dielectric permittivity different from the double-layer bulk. The value of the electrical potential  $\phi$  at the outer edge of the boundary layer which connects to the double layer is called  $\zeta$ . In the context of a thin double layer, the Stern layer is sometimes considered

as providing an effective boundary condition to capture the compact counterion sublayer resulting from local Poisson— Boltzmann equilibrium. This point of view is not supported by fluctuation theory<sup>9,18</sup> where charge regulation is the result of local surface—bulk interactions, at a scale smaller than the Debye length. Such a local picture of the Stern layer is also supported by mass action models in which the local Stern surface charge/field relation results from adsorption/desorption kinetics, independent of the Debye scale. This is the reason charge regulation boundary conditions can be applied even on the scale of overlapping double layers.<sup>26</sup> Nonetheless, the fact remains that in the case of overlapping thick double layers with charge regulation boundary conditions the local electrical potential on one wall depends on the potential on the other, resulting in an indirect coupling between the two.

The linear variation of the potential with transverse coordinate within the Stern layer is described through the ratio of two parameters  $\sigma_d/C$ , the surface charge density  $\sigma_d$  divided by the Stern layer capacitance *C*. From Gauss' theorem, the surface charge density is proportional to the transverse electric field at the double-layer edge and the double-layer bulk permittivity  $\varepsilon$ ,  $\sigma_d \sim -\varepsilon d\phi/dx$ , with a negative sign in the presence of negative surface charges and no adsorbed counterions.<sup>25</sup> The Stern layer capacitance *C* is proportional to the Stern layer permittivity  $\varepsilon_r$ and inversely proportional to the Stern layer width  $\lambda_S$ ,  $C \sim \varepsilon_r/\lambda_S$ . In this picture, valid at each solid boundary, the Stern boundary condition thus reads

$$\phi = \zeta - \frac{\sigma_{\rm d}}{C} \equiv \zeta + \frac{\varepsilon \lambda_{\rm S}}{\varepsilon_{\rm r}} \frac{\partial \phi}{\partial x} \tag{14}$$

Thus

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\varepsilon_{\rm r}}{\varepsilon \lambda_{\rm S}} (\phi - \zeta) \tag{15}$$

A more up-to-date picture of the boundary condition eq 15 emerges from analyzing the electrical, chemical, and entropic contributions to charge regulation within a statistical mechanics framework. These lead to a modified mean-field Poisson-Boltzmann equations with surface source terms.<sup>18</sup> In the weakfield regime, these surface terms can in turn be mapped into a Stern layer type boundary condition eq 15.9 Moreover, when the Stern layer permittivity is taken to equal the bulk permittivity, this mapping provides an explicit formula for the Stern layer width in terms of intrinsic constitutive parameters such as the Bjerrum length  $l_{\rm B}$ , the ionic charge number Z, and the surface charge density  $n_c$  of condensed ions, viz.,  $\lambda_s = 1/\pi Z^2 / {}_B n_c$ .<sup>9</sup> In fact, as discussed in refs 3 and 9, boundary conditions of the same type result from a linearization of the adsorption isotherm potential/concentration, the sign of which depends on the specific kinetics.

A dimensionless formulation of the Stern layer boundary condition eq 15, with the half-gap h used as the length scale for transverse variation of  $\phi$ , leads to the conditions

$$\partial_x \phi = \pm \nu \sqrt{\beta} (\phi - \phi_{\pm}) \quad \text{at} \quad x = \pm 1$$
 (16)

where  $|\nu| \equiv \lambda_D / \lambda_S$  measures the width of the electrical double layer relative to the Stern layer width, and  $\phi_{\pm}$  denotes the dimensionless  $\zeta$ -potentials outside the Stern layers. These potentials may be zero or nonzero and of opposite signs as in the case of an applied transverse electric field (see below). In the



**Figure 2.** (a) and (b) Sketches of the adsoption isotherm from, respectively, the Langmuir and Frumkin–Fowler–Guggenheim models.<sup>29</sup> The parameters are Z = 3,  $k_d^0/(k_a^0 C_b) = 1/6$  and (a)  $\Delta G/RT = 0$ , (b)  $\Delta G/RT = -2$ , as used in ref 29. (c) Sketch of the adsorption isotherm for cobalt-hexamine on silica surfaces as given by eq 21.<sup>19</sup> In each figure,  $\sigma_d$  represents the surface charge density and  $\phi$  is the applied electrical potential.

following, we shall be interested in the case  $\lambda_s < h$  depicted in Figure 1, corresponding to  $1/\nu^2 < \beta < 1$ .

The sign of the parameter  $\nu$  has important consequences for the stability properties of the basic state. As already mentioned, previous derivations led to the estimate  $\nu \sim \lambda_D /_B n_c$ , with a positive prefactor, implying that  $\nu > 0$ . This result is consistent with fluctuation theory-based modified mean-field equations.<sup>18</sup> However, the sign in the Stern layer mixed boundary condition depends on the dependence of  $\sigma_d$  on the potential. In particular, when  $\sigma_d$  increases with  $\phi$  the parameter  $\nu$  is negative.<sup>27</sup> This case is studied in ref 8. In contrast, when  $\sigma_d$  decreases with  $\phi$  the parameter  $\nu$  is positive. In section 2.1.3, we discuss different mass action models which lead to the latter relationship, and conclude that both signs of  $\nu$  arise in practice.

It should be mentioned that with the Bjerrum length  $\ell_{\rm B} = 0.7 \,\mathrm{nm}$  at 300 K and the surface ion density  $n_{\rm c}$  considered by Jiang and Stein,<sup>28</sup> i.e.,  $0.5 \,\mathrm{nm}^{-2} < n_{\rm c} < 5 \,\mathrm{nm}^{-2}$ , the expression  $\lambda_{\rm S} = 1/\pi Z^2 / {}_{\rm B} n_{\rm c}$  shows that for monovalent ions (Z = 1) the Stern length  $\lambda_{\rm S}$  falls in the range 0.9 nm  $< \lambda_{\rm S} < 9$  nm. Thus, the Stern length may represent a substantial fraction of the Debye length if the latter is smaller than 20 nm. In this case, the parameter  $|\nu| \equiv \lambda_{\rm D} / \lambda_{\rm S} = \mathcal{O}(1)$ . In the following, we shall see that when the gap size is smaller than the Debye length, i.e.,  $\beta < 1$ , the physically relevant range 1.5  $< \nu < 3.5$  contains an instability responsible for the spontaneous generation of a stable nonzero static electrical potential.

2.1.3. Mass Action Models. In this section, we discuss three distinct mass-action models, all of which lead to an effective decrease of the surface charge  $\sigma_d$  with increasing applied electrical potential. Following the notation,<sup>29</sup> we write first-order mass-action equations for equilibrated Z-covalent charged particles associated with adsorption/desorption in terms of Arrhenius-type coefficients. In the absence of electrical effects, the adsorption/desorption coefficients are denoted by  $k_a^{ne}$  and  $k_d^{ne}$ . In the presence of a dimensionless potential  $\phi$  nondimensionalized by  $k_BT/e$ , these coefficients read

$$k_{\rm a} = k_{\rm a}^{ne} e^{-\lambda_{\rm a} Z \phi} \quad k_{\rm d} = k_{\rm d}^{ne} e^{(1 - \lambda_{\rm a}) Z \phi}$$
(17)

where *Z* is the covalence and  $0 < \lambda_a < 1$  is an affinity factor describing the surface/ion interaction. As shown in refs 13,29, the equilibrium eq 17 leads to the Langmuir model with the normalized surface carrier concentration *C*<sub>s</sub> given by the relation

$$C_{\rm s} = \frac{1}{1 + \frac{k_{\rm d}^{\rm ne}}{k_{\rm a}^{\rm ne}C_{\rm b}}} e^{Z\phi}$$
(18)

where  $C_{\rm b}$  is the bulk ion concentration. Consequently, in the Langmuir model the normalized surface charge density  $\sigma_{\rm d} = ZC_{\rm s}$ 

is a decaying function of the applied potential whenever Z > 0, as exemplified in Figure 2a.

Another popular mass-action kinetic model is the Frumkin– Fowler–Guggenheim (FFG) model, for which, in the absence of electrical potential, the adsorption/desorption coefficients display an Arrhenius-like dependence on the surface carrier concentration

$$k_{\rm a}^{ne} = k_{\rm a}^0 e^{-\alpha(\Delta G/RT)C_{\rm s}} \quad k_{\rm d}^{ne} = k_{\rm d}^0 e^{(1-\alpha)(\Delta G/RT)C_{\rm s}}$$
(19)

where  $\Delta G$  is the standard net lateral interaction energy in the adsorbed layer and  $\alpha \Delta G$  is the standard net activation energy due to lateral interactions, where  $0 < \alpha < 1$ . Using the relation eq 19 for equilibrated mass action leads to the following closed relationship between the applied electrical potential  $\phi$  and the surface carrier concentration

$$Z\phi = \ln\left(\frac{1-C_{\rm s}}{\frac{k_{\rm d}^0}{k_{\rm a}^0C_{\rm b}}C_{\rm s}}e^{(\Delta G/RT)C_{\rm s}}}\right) \tag{20}$$

This model also leads to a decreasing surface charge density as illustrated in Figure 2b.

Finally, the mass-action adsorption isotherm linearization in the specific case of cobalt-hexamine on silica surfaces proposed in ref 19 leads to the following surface charge-potential relation:

$$\sigma_{\rm d}(\phi) = -n_{si}e \frac{1-K_1 \exp(-3\phi)}{1+K_2 \exp(-3\phi)}$$
(21)

where  $n_{\rm si} = 0.5 \text{ nm}^{-2}$  and  $K_1 = 10^4$ ,  $K_2 = 5 \times 10^3$ . In this case, too, the surface charge density  $\sigma_d$  decreases monotonically with the applied surface potential (cf. Figure 2c). These mass-action models motivate our interest in the effect of the Stern boundary conditions eq 16 with  $\nu > 0$ .

**2.2.** Numerical Method. In the following, we restrict our study to steady states. In order to compute steady solutions of the above problem as a function of the experimentally easiest-to-change parameter  $\beta$ , we use a numerical continuation method (Auto-07p<sup>30</sup>) based on a Newton solver for the time-independent version of eqs 9–11 with the boundary conditions eq 12 and eq 16. To do so, the fields *c*,  $\rho$ , and  $\phi$  are approximated by a high-order interpolant through the Gauss-Lobatto-Legendre points.<sup>31</sup> Equations 9–11 are discretized using a weak formulation, a procedure that enforces the corresponding boundary conditions eq 12 and eq 16. A similar treatment is applied to the linearized version of the equations and their derivative with respect to  $\beta$ .

Table 1. Summary of the Primary Eigenmodes<sup>a</sup>

ARTICLE

trivial solution eigenmodes			
$ ilde{\phi}=0, ilde{c}, ilde{ ho}=0$		$ ilde{\phi},~ ilde{c}=0,~ ilde{ ho}$	
symmetric	antisymmetric	symmetric	antisymmetric
$\sigma = -(n+1)^2 \pi^2$ see eq 28	$\sigma = -(2n+1)^2 \pi^2 / 4$ see eq 29	$\sigma = -(n+1)^2 \pi^2 - c\beta/2$ see eqs 30–31	transcendental eq. see eqs 32–34
" The only eigenmodes that o	can lead to instability are those expressed b	y eqs 32–34.	

#### 3. LINEAR STABILITY ANALYSIS

**3.1. The Trivial Solution and Its Stability.** When the potential difference across the system vanishes, we may, without loss of generality, write  $\phi_{\pm} = 0$ . The problem in eqs 9–12 and eq 16 then has the trivial solution  $(c, \rho) = (\bar{c}, 0)$  with  $\phi = 0$ . To analyze the stability of this solution, we linearize the equations and write the perturbation as  $(\tilde{c}, \tilde{\rho}, \tilde{\phi}) \exp(\sigma t)$ , where  $\sigma$  is the temporal growth rate. This procedure leads to the eigenvalue problem

$$\Delta \tilde{c} = \sigma \tilde{c} \tag{22}$$

$$\Delta \tilde{\rho} + \bar{c} \Delta \tilde{\phi} = \sigma \tilde{\rho} \tag{23}$$

$$\Delta \tilde{\phi} = -\frac{\beta}{2} \tilde{\rho} \tag{24}$$

The corresponding linearized boundary conditions are

$$\partial_x \tilde{c} = \partial_x \tilde{\rho} + \bar{c} \partial_x \tilde{\phi} = 0 \quad \text{at} \quad x = \pm 1$$
 (25)

$$\partial_x \tilde{\phi} \mp \nu \sqrt{\beta} \tilde{\phi} = 0 \quad \text{at} \quad x = \pm 1$$
 (26)

The integral constraints on the perturbation become

$$\langle \tilde{c} \rangle = \langle \tilde{\rho} \rangle = 0$$
 (27)

Because the equation for  $\tilde{c}$  decouples, the form of an eigenmode  $(\tilde{c}, \tilde{\rho})$  is either  $(\tilde{c}, 0)$  with  $\tilde{\phi} \equiv 0$  or  $(0, \tilde{\rho})$  with  $\tilde{\phi} \neq 0$ . Solving equation eq 22 with the first boundary condition in eq 25 and the first constraint in eq 27, we find that  $\tilde{c}$  is either symmetric,  $\tilde{c} \equiv \tilde{c}_s$  with  $\tilde{c}_s(x) = \tilde{c}_s(-x)$ , or antisymmetric,  $\tilde{c} \equiv \tilde{c}_a$  with  $\tilde{c}_a(x) = -\tilde{c}_a(-x)$ 

$$\tilde{c}_{\rm s} = \cosh(\sqrt{\sigma}x)$$
 with  $\sigma = -(n+1)^2\pi^2$  (28)

$$\tilde{c}_{a} = \sinh(\sqrt{\sigma}x)$$
 with  $\sigma = -(2n+1)^{2}\frac{\pi^{2}}{4}$  (29)

where  $n = 0, 1, \cdots$  is a non-negative integer. Likewise, when  $\tilde{c} = 0$ , we set  $\lambda^2 \equiv \sigma + [\bar{c}\beta/2]$  and find that  $\tilde{\rho}$  is either symmetric,  $\tilde{\rho} \equiv \tilde{\rho}_s$ 

$$ilde{
ho}_{
m s}=\cosh(\lambda x) \quad {
m with} \quad \sigma=\ -\ (n\ +\ 1)^2\pi^2-rac{\overline{c}eta}{2} \qquad (30)$$

with associated potential

$$\tilde{\phi}_{s} = -\frac{\beta}{2\lambda^{2}}\cosh(\lambda x) + \frac{\beta}{2\lambda^{2}}(-1)^{n+1}$$
(31)

or antisymmetric,  $\tilde{\rho}\equiv\tilde{\rho}_{\rm a}$ 

$$\tilde{\rho}_{\rm a} = \sinh(\lambda x)$$
 (32)



**Figure 3.** Evolution of the location of the primary bifurcation  $\beta_c$  as a function of the mean concentration  $\overline{c}$  as computed from eq 35 for  $\nu = 2$ .

with associated potential

$$\tilde{\phi}_{a} = -\frac{\beta}{2\lambda^{2}}\sinh(\lambda x) + \frac{1}{\overline{c}}\left(\frac{\beta\overline{c}}{2\lambda} - \lambda\right)x\cosh\lambda$$
(33)

Imposition of the boundary conditions eq 25 leads to a transcendental equation for the associated eigenvalue  $\sigma$ 

$$1 - \nu \sqrt{\beta} = \frac{\overline{c}\nu \beta^{3/2}}{2\lambda^2} \left(\frac{1}{\lambda} \tanh \lambda - 1\right)$$
(34)

A summary of the eigenmodes of the trivial solution is given in Table 1. These results indicate that the only eigenmodes that can be unstable ( $\sigma > 0$ ) are of the form ( $0, \tilde{\rho}_a$ ). From eq 34, we first observe that, for  $\nu > 0$ , a singularity appears at  $\beta = \beta_s \equiv 1/\nu^2$ . At this value,  $\sigma \rightarrow \infty$  and the potential  $\tilde{\phi}_a$  diverges at all  $x \in [-1, 1]$  except x = 0 (see eq 33). To locate bifurcations, we set  $\sigma = 0$  in eq 34. This provides a criterion for stability: if  $\nu \leq (\bar{c}/2)^{1/2}$ , no instability from the trivial solution can occur. If, on the other hand,  $\nu \geq (\bar{c}/2)^{1/2}$  there is a critical dimensionless gap  $\beta_c$  at which the trivial state changes stability given by

$$\beta_{\rm c} = \frac{1}{2\overline{c}} \left( \ln \frac{\nu + \sqrt{\overline{c}/2}}{\nu - \sqrt{\overline{c}/2}} \right)^2 \tag{35}$$

The dependence of  $\beta_c$  on  $\overline{c}$  is shown in Figure 3. A more detailed analysis of eq 34 reveals that this is the only bifurcation of the trivial state and hence that any bifurcation from the trivial state must correspond to an antisymmetric eigenmode. The structure of the unstable eigenmode is shown in Figure 4 for  $\overline{c} = 2$ ,  $\nu = 2$ , and  $\beta = 0.3 < \beta_c \equiv 0.3017$ . Moreover, eq 34 shows that  $\sigma$ decreases to  $-\infty$  as  $\beta$  approaches  $\beta_s = 0.25$  from below and increases to  $+\infty$  when  $\beta$  approaches  $\beta_s$  from above. Thus, when  $\beta > \beta_c > \beta_s$  (respectively,  $\beta_c > \beta > \beta_s$ ), the trivial state is stable (respectively unstable).



**Figure 4.** The marginal antisymmetric eigenmode  $(\tilde{\rho}, \tilde{\phi})$  versus *x* for  $\bar{c} = 2$ ,  $\beta = 0.3017$ ,  $\nu = 2$ . The solid line denotes the charge density perturbation  $\tilde{\rho}_a$  in eq 32 and the broken line the electrical potential perturbation  $\tilde{\phi}_a$  in eq 33.



**Figure 5.** Location  $\beta_s$  of the singularity and  $\beta_c$  of the bifurcation point as a function of the aspect ratio of the boundary layer  $\nu$  when  $\overline{c} = 2$ . Both locations approach  $\beta = 0$  monotonically as  $\nu \rightarrow \infty$ , with  $\beta_s < \beta_c$ .

The variation of  $\beta_s$  and  $\beta_c$  with the aspect ratio  $\nu$  of the boundary layer is illustrated in Figure 5 for  $1.5 < \nu < 3.5$ . When  $\nu$  increases, i.e., when the Stern layer becomes smaller and smaller compared to the Debye layer,  $\beta_c$  decreases toward  $\beta_s$  and the interval of instability decreases. Asymptotically, the case  $\nu \gg 1$  corresponds to a constant imposed potential—Dirichlet boundary conditions for the Poisson—Boltzmann problem eq 9—at the solid boundary and in this system there is no bifurcation of the trivial state.

**3.2.** Analysis of the Growth Rate Divergence near  $\beta_s$ . Let us now turn to the divergence of the growth rate near  $\beta_s \equiv 1/\nu^2$ . We write

$$\beta = (1 + \varepsilon)/\nu^2 \tag{36}$$

where  $|\varepsilon| \ll 1$  measures the distance to the singularity, and obtain from eq 34 the following leading order balance

$$\sigma \sim \frac{\overline{c}}{\nu^2 \varepsilon} \sim \frac{\overline{c}}{\nu^2 (\nu^2 \beta - 1)} \tag{37}$$

valid when  $|\varepsilon| \ll 1$ . A comparison between this relation and the numerical results presented in Figure 6 confirms the validity of this leading order asymptotic behavior.

#### 4. NONLINEAR REGIME

We now turn to the study of the nontrivial solutions created at  $\beta = \beta_{c}$  and consider the case with no electric field imposed across the layer separately from the case with an imposed electric field.



**Figure 6.** Asymptotic behavior of the eigenvalue  $\sigma$  as a function of  $\varepsilon/\nu^2$ , i.e.,  $\beta - \beta_s$  when  $\overline{c} = 2$ ,  $\nu = 2$ . The solid line represents the analytical prediction eq 37, while the squares are numerical results obtained with 81 mesh points.



**Figure 7.** This bifurcation diagram shows the dependence of the electrical potential  $\phi_w$  at the right wall on  $\beta$  in the case of a closed system with no imposed electric field and  $\bar{c} = 2$ ,  $\nu = 2$ . Resolution uses 41 mesh points. Solid (respectively dashed) lines refer to stable (respectively unstable) solutions. The trivial solution loses stability at  $\beta_s = 0.25$  before recovering it after a supercritical pitchfork bifurcation at  $\beta_c = 0.3017$ . This pitchfork creates two stable nonlinear branches of antisymmetric states whose amplitude diverges near  $\beta_s$ .

The bifurcation diagrams exhibited below show  $\phi_w$ , the potential at the right wall, as a function of the parameter  $\beta$ . As shown by Plouraboué and Chang,<sup>9</sup> this potential is directly linked to the amplitude of the interaction between the walls. This relation is modified here by the constraint eq 13 imposing global charge neutrality but the results for different choices of  $\overline{c}$  are qualitatively similar.

**4.1.** Nontrivial Solutions with No Imposed Electric Field. *4.1.1.* Numerical Results. As already mentioned, in the absence of an imposed electric field we may set  $\phi_+ = \phi_- = 0$ . The resulting problem has the solution  $(c, \rho) = (\overline{c}, 0)$  with  $\phi = 0$ , valid for any value of  $\beta$ . We refer to this solution as the trivial state and study the solutions resulting from the instability of this state at  $\beta = \beta_c$ .

Equations 9–11 with the boundary conditions eq 12 and eq 16 are invariant under two symmetry operations, the operation  $S:(c, \rho, \phi) \rightarrow (c, -\rho, -\phi), x \rightarrow x$ , and the spatial reflection  $S_{\Delta}:(c, \rho, \phi) \rightarrow (c, \rho, \phi), x \rightarrow -x$ .

The type of bifurcation that takes place at  $\beta = \beta_c$  depends on the symmetry properties of the marginally stable eigenfunction. We showed that, at  $\beta = \beta_c$ , the marginal eigenmode takes the form  $(\bar{c}, \tilde{\rho}, \tilde{\phi}) = (0, \tilde{\rho}_a, \tilde{\phi}_a)$  with  $\tilde{\rho}_a(x) = -\tilde{\rho}_a(-x)$ ,  $\tilde{\phi}_a(x) = -\tilde{\phi}_a(-x)$ . This eigenvector breaks both the *S* and *S*<sub>Δ</sub> symmetries but is invariant under  $S \circ S_\Delta = S_\Delta \circ S$ . We expect therefore that the

ARTICLE



**Figure 8.** As for Figure 7 but with  $\overline{c} = 3$ , yielding  $\beta_c = 0.3386$ . The resolution uses 41 mesh points.



**Figure 9.** Nonlinear solutions on the lower solution branch in Figure 7 for  $\overline{c} = 2$ ,  $\nu = 2$ , and  $\beta = 0.28$  using 41 mesh points. Note that *c* is symmetric and nonzero.

bifurcation at  $\beta_c$  is a pitchfork. Figure 7 and Figure 8 show the resulting bifurcation diagrams for  $\nu = 2$  and  $\overline{c} = 2$ ,  $\overline{c} = 3$ , respectively. Solid (broken) lines correspond to linearly stable (unstable) solutions. The trivial state corresponds to  $\phi_w = 0$ . As predicted by linear theory, this state is unstable for  $\beta_s = 0.25 < \beta < \beta_c = 0.3017$  ( $\overline{c} = 2$ ), 0.3386 ( $\overline{c} = 3$ ). At  $\beta = \beta_c$ , the branch undergoes a *supercritical* pitchfork bifurcation as  $\beta$  *decreases*, producing two branches. Solutions along each branch are related by the broken symmetry (S or  $S_{\Delta}$  that in the present case produce the same solution) and are therefore dynamically equivalent. Both inherit the stability properties of the bifurcating trivial solution and are therefore *stable*. Sample solutions are shown in Figure 9 for  $\overline{c} = 2$ ,  $\nu = 2$  and  $\beta = 0.28$ . With further decrease in  $\beta$ 



**Figure 10.** This bifurcation diagram shows the dependence of the electrical potential  $\phi_w$  at the right wall on  $\beta$  in the case of a closed system with no imposed electric field and  $\bar{c} = 2$ ,  $\nu = 0.8$ . Resolution uses 29 mesh points. Solid (respectively dashed) lines refer to stable (respectively unstable) solutions. The trivial solution loses stability at  $\beta_s = 1.5625$ .



**Figure 11.** Nonlinear solutions on the upper solution branch in Figure 10 for  $\bar{c} = 2$ ,  $\nu = 0.8$ , and  $\beta = 2$  and 41 mesh points. The electrical potential is nearly linear with the double layer structure clearly visible in the concentration and charge density profiles.

both branches diverge, at  $\beta = \beta_s$ , independently of the value of  $\overline{c}$ . In fact, a divergence is present at this parameter value in the steady state potential  $\phi(x)$  at all locations  $|x| \le 1$  in the domain except x = 0.

Figure 10 shows the bifurcation diagram for  $\overline{c} = 2$  and  $\nu = 0.8$ . The nonlinear solution branches persist and remain stable throughout. Both branches continue to diverge at  $\beta_s$  but no longer bifurcate from the trivial state which remains unstable for all values of  $\beta > \beta_s$ . However, since  $\beta_s$  is now larger the electrical double layer in the corresponding solutions is sharper (Figure 11).



**Figure 12.** Asymptotic behavior of the electrical potential  $\phi_w$  at the right wall as a function of  $\varepsilon/\nu^2$ , i.e.,  $\beta - \beta_s$  when  $\overline{c} = 2$ ,  $\nu = 2$ . The solid line represents the analytical prediction eq 55 while the squares are numerical results obtained with 81 mesh points.

4.1.2. Analysis of the Divergence of the Stationary Solution near  $\beta_s$ . The singular behavior of the nonlinear solutions at  $\beta_s$  is, like the growth rate divergence in the linear problem, a consequence of the global charge constraint eq 13. To analyze the origin of this behavior, we adopt the parametrization eq 36 in the vicinity of  $\beta_s$  and restrict attention to the branch of nonlinear solutions with  $\phi_w > 0$ . After integrating once the stationary solutions of eqs 10–11 with the boundary conditions eq 12 and eq 16, it is possible to obtain a general expression for the total concentration and density

$$c = 2e^{\gamma} \cosh(\phi + \delta) \tag{38}$$

$$\rho = -2e^{\gamma}\sinh(\phi + \delta) \tag{39}$$

where  $\gamma$  and  $\delta$  are two constants of integration. The normalization conditions eq 13 imply that  $\delta = 0$  and yield an integral condition determining the second constant of integration  $\gamma$ 

$$e^{\gamma} = \frac{\overline{c}}{\int_{-1}^{1} \cosh \phi \, dx} \tag{40}$$

The constant  $\gamma$  can be found from an implicit integral relation that we now establish.

The governing equation eq 9 with  $\rho$  from eq 38 has the first integral

$$\frac{1}{2}(\partial_x \phi)^2 = \beta e^{\gamma}(\cosh \phi + d) \tag{41}$$

where d is a further constant of integration. Integrating once more and making use of the relation eq 40, we obtain

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{1} (\partial_x \phi)^2 \, \mathrm{d}x = \beta(\overline{c} + 2de^{\gamma}) \tag{42}$$

The constant d is determined by the boundary conditions eq 16 and eq 41

$$d = \frac{1}{2}\nu^2 \phi_{\rm w}^2 e^{-\gamma} - \cosh \phi_{\rm w} \tag{43}$$

where  $\phi_w$  is the potential at the wall,  $\phi_w = \phi(1)$ . We now rewrite the left-hand side of eq 42 using the parity of the integrand

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{1} (\partial_x \phi)^2 \, \mathrm{d}x = \int_{0}^{\phi_w} \partial_x \phi \, \mathrm{d}\phi \tag{44}$$



**Figure 13.** This bifurcation diagram shows the dependence of the electrical potential  $\phi_w$  at the right wall on  $\beta$  in the case of a closed system with an imposed electric field ( $\phi_0 = 0.01$ ) and  $\nu = 2$ . Resolution uses 41 mesh points. The applied potential difference is 2% of the thermal potential. Solid (respectively dashed) lines refer to stable (respectively unstable) solutions. The imperfect pitchfork bifurcation produces a fold, here observed at  $\beta_f = 0.2911$ . The upper branch loses stability at  $\beta_s = 0.25$  and recovers it after the fold. The lower branch is always stable. Both branches diverge at  $\beta_s$ . Points *a*, *b*, and *c* correspond to the solutions shown in Figure 14.

and combine eqs 41-44 to obtain

$$\sqrt{de^{\gamma}} \int_{0}^{\phi_{w}} \sqrt{1 + \frac{\cosh \phi}{d}} \, \mathrm{d}\phi = \sqrt{\frac{\beta}{2}} (\overline{c} + 2de^{\gamma}) \tag{45}$$

Equations 43 and 45 provide a transcendental equation for the constant  $\gamma$ . This equation requires the knowledge of the potential  $\phi$  in order to compute the integral on the left, as well as the wall potential  $\phi_w$ .

It is necessary therefore to solve for the potential  $\phi$  near the singularity. Since the wall potential diverges at the singularity, so does  $\cosh \phi$ . Hence, the integral  $\int_{-1}^{1} \cosh \phi \, dx$  in eq 40 will also diverge and we may anticipate that the constant  $\gamma$  approaches  $-\infty$  monotonically as a function of the departure  $\varepsilon$  from the singularity. Consequently, we set  $e^{\gamma} \equiv \overline{\varepsilon}$ , where  $\overline{\varepsilon}$  is a small parameter with monotone dependence on  $\varepsilon$ . This setup provides the relevant asymptotic ordering required to find the dependence of  $\overline{\varepsilon}$  on  $\varepsilon$  and thereby to identify the singularity in the wall potential when the dimensionless gap  $\beta$  approaches  $\beta_s$ . To do so, we insert the above Ansatz in the governing equation for the potential

$$\Delta \phi = \beta e^{\gamma} \sinh \phi = \beta \overline{\varepsilon} \sinh \phi \tag{46}$$

The small forcing term on the right-hand side suggests the following expansion for the potential near  $\beta_s$ :

$$\phi = \phi^0 + \overline{\varepsilon}\phi^1 + O(\overline{\varepsilon}^2) \tag{47}$$

At leading order, the homogeneous problem

$$\partial_{xx}^2 \phi^0 = 0 \tag{48}$$

$$\partial_x \phi^0|_{x=\pm 1} = \pm \nu \sqrt{\beta} \phi^0 \tag{49}$$

leads to the simple linear solution

$$\phi^0(x) = \nu \sqrt{\beta} \phi_{\rm w} x \tag{50}$$

Close to the singularity,  $\nu(\beta)^{1/2} \rightarrow 1$  so that the integral in eq 40 required to compute the constant  $\gamma$  yields

$$\mathbf{e}^{\gamma} \simeq \overline{c} \phi_{\mathbf{w}} \mathbf{e}^{-\phi_{\mathbf{w}}} \tag{51}$$

d



**Figure 14.** Solutions in 4.2 for  $\bar{c} = 2$ ,  $\nu = 2$ ,  $\phi_0 = 0.01$ , and  $\beta = 0.28$  at the locations indicated, obtained with 41 mesh points. (a) left column: solution from the upper branch, (b) middle column: solution from the middle branch, (c) right column: solution from the lower branch.

Using eq 51 in the definition eq 43, we see that, near  $\beta_{s}$ ,  $d \gg \cosh \phi_w \geq \cosh \phi(x)$ . Since  $\cosh \phi/d \ll 1$ , we expand the integrand on the left-hand side of eq 45, and by integrating only the leading order term, we obtain

$$\sqrt{de^{\gamma}}\phi_{\rm w} \simeq \sqrt{\frac{\beta}{2}} \left(\overline{c} + 2de^{\gamma}\right)$$
 (52)

We next approximate the quantity  $(de^{\gamma})^{1/2}$  on the left-hand side of eq 52 using eq 51

$$\sqrt{de^{\gamma}} \simeq \frac{\nu \phi_{\rm w}}{\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{\overline{c}}{2\nu^2 \phi_{\rm w}} \right) \tag{53}$$

Inserting the approximation eq 53 into eq 52 and using the scaling eq 36 for  $\beta$ , we obtain finally the following balance between the wall potential  $\phi_w$  and the distance  $\varepsilon$  to the singular dimensionless wall gap  $\beta_s$ 

$$\frac{\nu \phi_{w}^{2}}{\sqrt{2}} \left( 1 - \frac{\overline{c}}{2\nu^{2}\phi_{w}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}\nu} \left( 1 + \frac{\varepsilon}{2} \right) \left( \overline{c} + \nu^{2} \phi_{w}^{2} - \overline{c} \phi_{w} \right)$$
(54)

This expression leads to an explicit relation between the wall potential, the constant  $\gamma$ , the previously introduced small parameter  $\overline{\varepsilon}$  and the distance from singular behavior as measured by  $\varepsilon$ 

$$\phi_{\rm w} \simeq \frac{\overline{c}}{\nu^2 \varepsilon} \sim \frac{\overline{c}}{\nu^2 (\nu^2 \beta - 1)} \tag{55}$$



**Figure 15.** The locations of the singularity  $\beta_s$  and of the fold  $\beta_f$  as a function of  $\phi_0$  when  $\overline{c} = 2$ ,  $\nu = 2$ . The imposed electrical field has no influence on the location of the singularity, but unfolds the pitchfork bifurcation at  $\beta_c$  thereby creating a fold at  $\beta_f$  (see Figure 13).

$$\overline{\varepsilon} = e^{\gamma} \simeq \frac{\overline{c}^2}{\nu^2 \varepsilon} e^{-\overline{c}/\nu^2 \varepsilon}$$
(56)

A comparison between this analytical result and the numerical results is shown in Figure 12. The numerical results agree well with the analytical prediction.

**4.2. Imposed Electric Field.** We next consider the case where  $\phi_+ \neq \phi_-$  corresponding to an imposed electric field, as considered by Bazant et al.<sup>8</sup> Since a constant can be added to the



**Figure 16.** Plots of the stable potential, concentration, and density profiles for a nonelectroneutral electrolyte with  $\overline{\rho} = 0.2$  and  $\overline{c} = 2$  computed for dimensionless half-gap  $\beta = 0.245$ , just below the singularity at  $\beta_s = 1/\nu^2 = 0.25$ .



**Figure 17.** Bifurcation diagram showing the stable trivial solution in the case  $\nu = -2$  and an applied potential difference equal to 2% of the thermal potential. The remaining parameters are as in Figures 7, 8, and 13.

values of  $\phi_+$  and  $\phi_-$  without changing the solution  $(c, \rho)$ , we study the general case in which the boundary condition on  $\phi$  is rewritten as  $\partial_x \phi = \pm \nu \beta^{1/2} (\phi \mp \phi_0)$  at  $x = \pm 1$ , where  $\phi_0 \neq 0$ , so that  $\phi_+ = -\phi_- = \phi_0$  providing an electrically neutral system. We take  $\phi_0 = 0.01$ , representing a potential difference of 2% of the thermal potential  $k_{\rm B}T$ .

The main effect produced by the imposed electric field is the destruction of the trivial equilibrium state  $(c, \rho) = (\overline{c}, 0)$ . Equations 9-11 with the boundary conditions eq 12 and eq 16 no longer have any symmetry. As a consequence, we expect that the primary bifurcation becomes imperfect when  $\phi_0$  is small but nonzero. Figure 13 shows the resulting bifurcation diagram and confirms this expectation. The lower branch,  $\phi_w < 0$ ,  $\beta > \beta_s$ , is always stable, while the upper branch,  $\phi_w > 0$ , loses stability with increasing  $\beta$  at  $\beta_s$  and then passes through a fold at  $\beta_{\rm f}$  and recovers stability. Note that  $\beta_{\rm s} \leq \beta_{\rm f} \leq \beta_{\rm c}$ . Different steady solutions corresponding to the same value of  $\beta$  are shown in Figure 14. The dependence of  $\beta_{\rm f}$  and  $\beta_{\rm s}$  on the potential difference  $\phi_0$  is shown in Figure 15; the imposed electric field does not affect the value at which the nontrivial solutions diverge. Additionally, reversing the sign of the imposed electric field changes the bifurcation diagram in a simple way: the fold now appears on the lower branch and is absent from the upper branch.

**4.3. Doubly Diffusive Effects.** It is important, finally, to mention that we can also analyze the possible influence of double diffusion on the electrolyte dynamics. Let us first note that double diffusion results in different time scales for charge density and charge concentration dynamics. Indeed, on inspecting the Nernst–Planck equations (eq 3) one sees that each diffusion coefficient can be factored from the right-hand side because both the electroconvective and the diffusive fluxes are proportional to it. On adding and subtracting the anionic and cationic

concentrations to obtain the dynamical equations associated with the charge density and total concentration, one finds that different time scales are present in each equations. These time scales obviously impact the transient states such as those studied by Bazant et al.<sup>8</sup> However, they do not change the steady states, and do not change the stability of the trivial solution. Moreover, although additional secondary bifurcations are in general possible, our results show that double diffusion does not qualitatively impact the results already obtained, although it does affect the instability growth rates. In particular, no Hopf bifurcations leading to oscillatory dynamics of the charge distribution were located while changing the diffusivity ratio between 0.1 and 10, even when applying a supplementary potential difference.

**4.4. The Nonneutral Case**  $\overline{\rho} \neq \mathbf{0}$ . We next turn to the case of an electrolyte with nonzero global charge density, a case studied experimentally at the nonelectroneutral point pH  $\neq$  7 in ref 32. The resulting solution profiles, displayed in Figure 16, differ quantitatively from the electroneutral case, since the profiles of the potential, concentration, and charge density are now all parabolic. In the case of the potential, this profile is the result of symmetric forcing associated with the Coulomb source terms. Despite these differences, we find that the system behaves exactly as in the electroneutral case ( $\phi = 0, c = 2, \overline{\rho} = 0$ ). In particular, all the main features of the bifurcation diagram are recovered, including the presence of the singularity at  $\beta = \beta_s$  that is simultaneously responsible for the change in stability of the trivial state and the divergence of the nonsymmetric solution that bifurcates from the trivial state at  $\beta_c > \beta_s$ , cf. Figure 7. A detailed numerical study of the divergent behavior of the solution in the vicinity of the singularity  $\beta = \beta_s$  follows the analytical properties identified in relations eqs 55-56. Indeed, the asymptotic analysis developed in section 4.1.2 can be easily extended to the nonelectroneutral case, with the important difference that the constant  $\delta \equiv \tanh^{-1}(\overline{\rho}/\overline{c})$  in relations eqs 38–39 now differs from zero. The wall potential  $\phi_w$  again diverges at  $\beta_s$  following the prediction eq 55, and the potential variation for  $\beta > \beta_s$  follows the asymptotically linear trend found in eq 50 and confirmed in Figure 11.

**4.5. The Case**  $\nu < 0$  in the Stern Layer Boundary Condition. Let us also comment on the choice  $\nu < 0$  in the Stern layer boundary condition, as considered in refs 8 and 27. In this case, the stability result is dramatically different. There are no solutions apart from the trivial solution which remains stable for all values of  $\beta$ . In the absence of an applied electric field, the stability analysis for the trivial state in section 3 and the corresponding relations (eqs 34–35) do not generate either bifurcation or singularity. This theoretical observation complements the analysis of the bifurcation diagram in the presence of an applied electric field as exemplified in Figure 17.

#### 5. DISCUSSION AND CONCLUSION

**5.1. Discussion.** *5.1.1. Instability Mechanism.* In this paper, we have analyzed the properties of electro-osmotic flows confined between parallel plates, focusing on gap widths 2h on the order of the Debye length  $\lambda_D$ . We have shown that, in the presence of Stern layers, there is a range of gaps for which an electroneutral but charged electrolyte is unstable and a stable potential difference is spontaneously generated despite thermodynamic equilibrium.

To understand the physical origins of the instability of the trivial state when  $\nu > 0$ , we recall (see section 3) that the perturbation in the total concentration decouples from the perturbations of both the charge density and the potential. Thus, all concentration perturbations decay, as described by eq 28 and eq 29, and instability arises from the coupling between charge density fluctuations and the potential. This coupling leads to eqs 22-23, and hence to an eigenvalue problem of Poisson type

$$\Delta \tilde{\rho} - \beta \tilde{\rho} = \sigma \tilde{\rho} \tag{57}$$

where  $\tilde{\rho}$  is the density perturbation and  $\sigma$  is the eigenvalue. The first term of the left side of eq 57 describes diffusion of the perturbation and is stabilizing. The second term on the left arises from electroconvection. Since  $\beta > 0$ , this term is also stabilizing. Hence, one has to look to the boundary conditions for the source of instability. Equations 25 and 26 show that the perturbation of the potential in the Stern layer generates a nonzero charge flux,  $\partial_x \overline{\rho} = \pm \overline{c} \nu \sqrt{\beta} \widetilde{\phi}$  at  $x = \pm 1$ . Thus, when  $\nu > 0$  an increase in the potential  $\tilde{\phi}$  on the wall (and hence an increase in the positive charge) leads to an increased flux of (positive) charge to the wall. This positive feedback is in turn responsible for the instability, and the instability is thus a consequence of the charge regulation process. The strength of the feedback mechanism scales with  $\sqrt{\beta}$ and so increases with increasing  $\beta$ . However, for large gaps,  $\beta \gg$ 1, the destabilizing mechanism is suppressed by the stabilizing electroconvection effect which is proportional to  $\beta$ . Likewise, for very small gaps,  $\beta \ll 1$ , the destabilizing term is dominated by the stabilizing effect of diffusion. Thus, straightforward balances between the different physical effects explain qualitatively the range of values of the parameter  $\beta$  for which instability occurs. The detailed calculations in section 3 confirm this basic picture. Note that no instability is predicted for  $\nu < 0$  and none is found.

The parameter range for which this occurs is most easily given in terms of the parameter  $\beta \equiv h^2/\lambda_{\rm D}^2$ :  $\beta_{\rm s} \equiv 1/v^2 < \beta < \beta_{\rm c} \equiv 1/2\overline{c} \{\ln[(v + (\overline{c}/2)^{1/2}]/[v - (\overline{c}/2)^{1/2}]\}^2$ , where  $v \equiv \lambda_{\rm D}/\lambda_{\rm S}$  is the ratio between the Debye length and the width of the Stern layer. Figure 5 shows the range of values of  $\beta$  (between the continuous and dotted lines) for which this is the case. For large Debye lengths, the range is narrow but broadens considerably as the Debye length approaches the Stern length. This regime is both of physical interest and relevant to experimental observations;<sup>9</sup> consequently, the generation of a spontaneous potential difference across the gap should be accessible to experimental confirmation. For a confined system ( $\overline{c} = 2$ ), the typical values of the Stern length  $\lambda_{\rm S}$  = 5 nm and the Debye length  $\lambda_{\rm D}$  = 10 nm indicate that v = 2 and hence that the instability sets in at  $\beta = 0.3017$ , i.e., at a wall gap  $2h \simeq 11$  nm. This property of the system is a consequence of the overlap of the double layers resulting in nonlinear interactions that lead to a preferred antisymmetric potential difference. Indeed, when the overlap zone is sufficiently large, both double layers compete and destabilize the trivial

solution. As a result, any small perturbation grows and evolves into an antisymmetric solution.

The instability threshold  $\beta_c$  diverges when  $\nu \rightarrow (\bar{c}/2)^{1/2}$ , and for  $0 < \nu < (\bar{c}/2)^{1/2}$  the trivial solution is stable. For the confined system of interest,  $\bar{c} = 2$ . Since the Stern length associated with the width of the ion adsorption layer is always smaller than the Debye length, this regime of stability is not accessible in physical systems. In contrast, when  $\nu > (\bar{c}/2)^{1/2}$  the trivial solution is stable at large  $\beta$  but loses stability at the critical value  $\beta = \beta_c$  as  $\beta$ decreases. This value is on the order of 1 implying that stability is lost when the gap is on the order of the Debye length. A nontrivial antisymmetric steady solution emerges from the trivial branch through a supercritical bifurcation, i.e., in the direction of decreasing  $\beta$ . When the gap width is twice the Stern length, the nontrivial branch diverges to infinity and, at the same time, the neutral solution restabilizes.

5.1.2. Divergent Behavior of the Potential. In section 4.1.2, we showed that there is a critical gap for which the stable attractive solution diverges, leading to large and potentially infinite surface potential and charge. The analytical study of this behavior in the vicinity of this singularity is consistent with our numerical results, confirming that the presence of the singularity is a property of the mathematical model, and in particular a consequence of the imposition of overall charge balance—whether electroneutral or not.

The singularity results from a "reduced" charge regulation effect at the solid surface combined with Poisson-Boltzmann nonlinearities. These imply that increasing the charge on one surface increases the potential on the other, with increasing but opposite charges on the two surfaces owing to the overall charge conservation constraint. For antisymmetric solutions, this constraint thus leads to an increase in the potential difference between the surfaces. This effect increases with decreasing gap width and is in turn enhanced by growing nonlinear terms. Furthermore, the singular behavior appears precisely when the Stern layers of the two surfaces first touch (Figure 1c) implying that no electrical breakdown occurs unless the Stern layers overlap. This is physically reasonable, since ion adsorption precludes gap widths equal to or greater than typical electron cloud separations. Hence, even if the singularity is an artifact of the model, it is physically clear that bringing two solids closer together than a Stern length will involve strong repulsive forces associated with short-range hard-sphere repulsion. Therefore, the singularity identified here also represents a limit on the possible distance between the two solid surfaces. With the same physical parameters used previously ( $\lambda_{\rm S} = 5 \text{ nm}$ ,  $\lambda_{\rm D} = 10 \text{ nm}$ , and  $\nu = 2$ ), this distance is 2h = 10 nm.

It is important, however, to stress that the singularity is unphysical, since very high values of the electrical potential are inconsistent with the dilute Poisson—Boltzmann approximation.<sup>33</sup> At very high potentials, other mechanisms such as limiting current or Faradaic electron transfer reactions<sup>34</sup> become important, but these have not been included in the model studied here. Furthermore, at very small distances other forces such as strong repulsive van der Waals/Lennard-Jones potentials will overcome the attractive Coulomb forces considered in this study, smoothing out the associated singularity. Nevertheless, the prediction of a strong attractive interaction at small distances could provide an explanation for the observation of just such interactions.<sup>20,21</sup> Moreover, since the singularity is also associated with a divergence of the total electrical energy, our findings are also likely relevant to the design and use of electrolyte solutions in nanometer-sized sheets for electrical storage.<sup>35–37</sup> The high surface potential dependence with a reduced charge regulation effect in Stern layers emphasizes the tremendous role of adsorption kinetics in confined systems, and provides a rationale for the choice of chemically relevant systems in highly compact double-layer-scale capacitors. Our results predict an explicit dimensionless gap range (between  $\beta_s$  and  $\beta_c$ ) for which these desirable surface potentials arise, and its dependence on the parameters characterizing the adsorption kinetics of the chosen materials.

5.1.3. Bifurcation Diagrams. Let us now comment on the generality of our results. It is an important observation that the bifurcation diagrams associated with the different solutions we have identified here appear to be a generic property of this type of physical system, since similar diagrams characterize both different parameter values and different variants of the same system. For example, we have changed the ratio v between the Debye and Stern lengths widely without finding any new solution branches. Adding an imposed electric field modifies the trivial state and unfolds the supercritical pitchfork bifurcation in the field-free case, replacing it by a fold bifurcation, at a new threshold value  $\beta_{fi}$ in an entirely predictable manner. This local change in behavior does not alter our main conclusion that for small gaps there is a range of parameter values in which nontrivial steady antisymmetric solutions are stable. These conclusions remain qualitatively unchanged when different anion and cation diffusivities are included or when nonelectroneutrality is permitted. Thus, the conclusions of our study are robust, and no new effects arise when the model assumptions are relaxed.

5.2. Conclusion. The analysis of electrokinetic dynamics at nanometer scales opens new directions for research on electroosmosis. In this paper, we followed the classical mean-field Poisson-Boltzmann-Nernst-Planck description associated with double-layer electrokinetics. We have considered the simplest model, consisting of an infinite slot configuration and onedimensional field variations perpendicular to the parallel solid surfaces, but have taken into account the overlap of double layers and the influence of the associated Stern layers. At a distance on the order of the Debye length, a nontrivial antisymmetric steadystate solution bifurcates supercritically from the trivial electroneutral state through a pitchfork bifurcation. This solution is stable between this length scale and the shorter Stern length. At separations resulting in overlap of the Stern layers, a second transition takes place, where the stable nontrivial solution diverges. These properties persist within more elaborate models and are therefore likely to be of interest in future work.

#### AUTHOR INFORMATION

#### **Corresponding Author**

\*E-mail: cedric.beaume@imft.fr.

#### ACKNOWLEDGMENT

We thank Professor H.-C. Chang for helpful discussions.

#### REFERENCES

(1) Chen, C. H.; Lin, H. L.; Lele, S. K.; Santiago, J. G. Electro-kinetic microflow instability with conductivity gradients. In *Proceedings of the* 7th International Conference on Micro Total Analysis Systems, Vol. 1; Northrup, M. A.; Jensen, K. F.; Harrison, D. J., Eds.; Kluwer: Dordrecht, 2003.

(2) Chang, M. H.; Homsy, G. M. Phys. Fluids 2005, 17, 074107.

- (3) Levich, V. *Physico-chemical Hydrodynamics*; Prentice Hall: Upper Saddle River, NJ, 1962.
  - (4) Saville, D. A. Annu. Rev. Fluid. Mech. 1997, 29, 27-64.
- (5) Lin, H.; Storey, B. D.; Oddy, M. H.; Chen, C. H.; Santiago, C. J. *Phys. Fluids* **2004**, *16*, 1922–1935.
- (6) Chen, C. H.; Lin, H. L.; Lele, S. K.; Santiago, J. G. J. Fluid Mech. 2005, 524, 263–303.
- (7) Suresh, V.; Homsy, G. M. Phys. Fluids 2004, 16, 2349-2356.

(8) Bazant, M. Z.; Thornton, K.; Ajdari, A. Phys. Rev. E 2004, 70, 021506.

(9) Plouraboué, F.; Chang, H.-C. Phys. Rev. E 2009, 79, 041404.

(10) Plouraboué, F.; Chang, H.-C. Anais da Academia Brasileira de Ciências 2010, 82, 95–108.

(11) Singer, A.; Norbury, J. SIAM. J. Appl. Math. 2009, 70, 949–968.

(12) Neu, J. C. Phys. Rev. Lett. 1999, 82, 1072-1074.

(13) Lyklema, J.; Duval, J. F. Adv. Colloid Interface Sci. 2005, 114-115, 27-45.

(14) Chan, D. Y.; Healyb, T. W.; Supasitia, T.; Usuic, S. J. Colloids Interface Sci. 2006, 296, 150–158.

(15) Zhmud, B. V.; Meurk, A.; Bergström, L. Colloids Surf., A 2000, 164, 3–7.

(16) Biesheuvel, P. M. Langmuir 2001, 17, 3553-3556.

(17) Basu, S.; Sharma, M. M. J. Colloids Interface Sci. 1994, 165, 355–366.

(18) Lau, A. W. C.; Pincus, P. Phys. Rev. E 2002, 66, 041501.

(19) Zohar, O.; Leizerson, I.; Sivan, U. Phys. Rev. Lett. 2006, 96, 177802.

(20) Kokkoli, E.; Zukoski, C. F. Langmuir 1998, 14, 1189-1195.

(21) Sotres, J.; Baró, A. M. Biophys. J. 2010, 98, 1995–2004.

(22) Squires, T. M.; Bazant, M. Z. J. Fluid Mech. 2004, 509, 217–252.

(23) Stern, O. Z. Elecktrochemistry 1924, 30.

(24) Mangelsdorf, C.; White, L. R. J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2 1990, 86, 2859–2870.

(25) Healy, T. W.; White, L. R. Adv. Colloid Interface Sci. 1978, 9, 303–345.

(26) Baldessari, F. J. Colloids Interface Sci. 2008, 325, 526–538.

(27) Haydon, D. A. Proc. R. Soc. London, Ser. A 1960, 258, 319-328.

(28) Jiang, Z.; Stein, D. Langmuir 2010, 26, 8161-8173.

(29) Koopal, L. K.; Avena, M. J. Colloids Surf. 2001, 192, 93-107.

(30) Doedel, E. J.; Oldeman, B. E. AUTO-07p: Continuation and bifurcation software for ordinary differential equations; Concordia University: Montreal, Canada, 2007.

(31) Deville, M. O.; Fischer, P. F.; Mund, E. H. *High-order Methods for Incompressible Fluid Flow*; Cambridge University Press: New York, 2002.

(32) Ghzaoui, A. E. J. Appl. Phys. 1999, 86, 5894-5897.

(33) Kilic, M. S.; Bazant, M. Z.; Ajdari, A. Phys. Rev. E 2007, 75, 021502.

(34) Chu, K.; Bazant, M. Z. SIAM. J. Appl. Math. 2005, 65, 1485–1505.

(35) Wang, X.; Zhi, L.; Müllen, K. Nano Lett. 2008, 8, 323-7.

(36) Khan, U.; Porwal, H.; O'Neill, A.; Nawaz, K.; May, P.; Coleman,

J. N. Langmuir **2011**, *27*, 9077–9082.

(37) Coleman, J. N. Science 2011, 331, 568–571.

## Bibliographie

- F. Baldessari. Electrokinetics in nanochannels Part I. Electric double layer overlap and channel-to-well equilibrium. J. Colloids. Interface Sci, 325:526–538, 2008.
- [2] M. Bazant, K. Thornton, and A. Ajdari. Diffuse-charge dynamics in electrochemical systems. *Phys. Rev. E*, 70:021506, 2004.
- [3] K. Besteman, M. A. G. Zevenbergen, H. A. Heering, and S. G. Lemay. Direct observation of charge inversion by multivalent ions as a universal electrostatic phenomenon. *Phys. Rev. Lett.*, 93:170802, 2004.
- [4] E. J. Doedel and B. E. Oldeman. AUTO-07p: continuation and bifurcation software for ordinary differential equations. Concordia University, Montreal, Canada, 2007.
- [5] H. Friedmann, O. Amiri, and A. Aït-Mokhtar. Physical modeling of the electrical double layer effects on multispecies ions transport in cement-based materials. *Cement and Concrete Research*, 38:1394–1400, 2008.
- [6] J. Lyklema and J.F.L. Duval. Hetero-interaction between Gouy–Stern double layers: Charge and potential regulation. Advances in Colloid and Interface Science, 114-115:27–45, 2005.
- J. C. Neu. Wall mediated forces between like-charged bodies in an electrolyte. *Phys. Rev. Lett.*, 82:1072–1074, 1999.
- [8] F. Plouraboué and H.-C. Chang. Symmetry breaking and electrostatic attraction between two identical surfaces. *Phys. Rev. E*, 79:041404, 2009.
- [9] O. Zohar, I. Leizerson, and U. Sivan. Short range attraction between two similarly charged silica surfaces. *Phys. Rev. Lett.*, 96:177802, 2006.

### Doctorat de l'Université de Toulouse Spécialité Dynamique des Fluides

présentée par

Cédric Beaume le lundi 22 octobre 2012

et dirigée par

**Prof. Alain Bergeon** IMFT, Université de Toulouse

# Etats spatialement localisés dans les systèmes fluides : application à la double diffusion

Les états spatialement localisés sont des solutions physiques possédant une structure spatiale particulière en une région bien définie d'un domaine structuré différemment. Nous nous intéressons aux états spatialement localisés susceptibles de se former lorsqu'une convection d'origine thermique est couplée à une convection d'origine solutale ou induite par la rotation du système. Trois configurations physiques différentes sont abordées : la convection de double diffusion induite par des gradients thermiques et solutaux verticaux dans des couches fluides bidimensionnelles, celle induite par des gradients horizontaux dans des cavités tridimensionnelles et la convection de Rayleigh–Bénard en présence de rotation. Dans chacun des cas, des solutions spatialement localisées sont obtenues et analysées en utilisant la théorie des systèmes dynamiques. Les résultats obtenus dans ce travail révèlent différents scénarios d'un même mécanisme baptisé snaking, observé et analysé à l'aide d'équations modèles.

**Mots-clés :** Etats localisés, convection thermique, double diffusion, convection thermosolutale, écoulement tournant, snaking

### Spatially localized states in fluid systems: application to double diffusion

Spatially localized states are physical solutions with a particular structure in a well-defined region in space that is embedded in a different background. We focus here on such states that are formed when thermal convection is coupled to solutal or Coriolis forcing. Three different physical configurations are studied: doubly diffusive convection with vertical gradients of temperature and concentration in two-dimensional fluid layers, doubly diffusive convection with horizontal gradients in three-dimensional fluid layers and Rayleigh–Bénard convection in the presence of rotation. In each of these cases, spatially localized solutions are computed and analyzed using dynamical systems theory. Our results reveal different variations of snaking, a mechanism observed and analyzed using model equations

 ${\bf Keywords}$  : Localized states, thermal convection, double diffusion, thermosolutal convection, rotating flow, snaking