



HAL
open science

Développement d'un modèle de transfert radiatif 3D adapté au calcul de la signature d'un jet de moteur-fusée dans l'ultraviolet

Pierre-Emmanuel Baudoux

► **To cite this version:**

Pierre-Emmanuel Baudoux. Développement d'un modèle de transfert radiatif 3D adapté au calcul de la signature d'un jet de moteur-fusée dans l'ultraviolet. Physique [physics]. Université de Rouen, 2002. Français. NNT: . tel-00003328

HAL Id: tel-00003328

<https://theses.hal.science/tel-00003328>

Submitted on 9 Sep 2003

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Numéro d'ordre :

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE de ROUEN

Discipline : Physique

présentée et soutenue publiquement

par

Pierre-Emmanuel BAUDOUX

le mercredi 27 mars 2002

Titre :

**DEVELOPPEMENT D'UN MODELE DE TRANSFERT RADIATIF 3D ADAPTE AU
CALCUL DE LA SIGNATURE D'UN JET DE MOTEUR-FUSEE DANS L'ULTRAVIOLET**

Directeur de thèse : Pierre VERVISCH

JURY

M. Patrick CHERVET, ONERA, Palaiseau (91)	, Examineur
M. Antoine ROBLIN, ONERA, Palaiseau (91)	, Examineur
M. John SELBY, Northrop Grumman Corp., Bethpage, NY, USA	, Examineur
M. Anouar SOUFIANI, Ecole Centrale de Paris, Châtenay-Malabry (92)	, Rapporteur
M. Jean-Pierre VANTELON, ENSMA, Futuroscope (86)	, Rapporteur
M. Pierre VERVISCH, CORIA, Saint-Etienne du Rouvray (76)	, Directeur de Thèse

A feus mes grands-parents,

à mes parents,

à mon frère, à son épouse et à leurs futurs enfants,

à mes deux petites sœurs.

« A lumine motus. »

Cadran solaire de l'Institut d'Optique d'Orsay

« Erat nubes tenebrosa et illuminans noctem. »

Liber Exodus, XIV, 20

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier Monsieur René JALIN, directeur du Département Optique Théorique et Appliquée de l'ONERA, pour m'avoir accueilli dans les laboratoires dont il a la responsabilité.

Ce travail a été financé par la Délégation Générale pour l'Armement et le CNRS (Délégation de Basse-Normandie). Que ces institutions en soient remerciées.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Messieurs Antoine ROBLIN et Patrick CHERVET pour la grande disponibilité et la confiance qu'ils m'ont accordées tout au long de mon travail. Je veux souligner ici la pertinence de leur jugement scientifique et plus généralement, la qualité de leur encadrement qui m'ont permis de progresser au cours de ces années.

Ma gratitude va aussi à Monsieur Pierre VERVISCH pour n'avoir jamais cessé de me faire confiance pour ce travail.

Je tiens à remercier Messieurs Stéphane LANGLOIS et Gérard DUNET pour les données expérimentales qu'ils m'ont fournies. Leur expertise m'a permis de mener à bien les comparaisons entre le modèle présenté dans ce travail et leurs mesures.

Mes remerciements vont à Messieurs Anouar SOUFIANI et Jean-Pierre VANTELON d'avoir accepté la lourde charge d'être Rapporteurs.

Je remercie Monsieur John SELBY d'avoir traversé l'Océan dans le but d'évaluer mes travaux.

Ma reconnaissance va aussi à Monsieur Jean-Louis MEYZONNETTE de l'Institut d'Optique d'Orsay, qui m'a permis de soutenir ma Thèse de Doctorat dans de bonnes conditions.

Un grand merci à tout le personnel technique et administratif de l'ONERA pour leur efficacité, leur zèle et leur gentillesse. Je tiens en particulier à remercier Madame Solange FIGURY pour m'avoir aidé à résoudre les divers problèmes administratifs auxquels j'ai été confronté. Je pense aussi au travail fourni par l'équipe d'informaticiens animée par Monsieur Stéphane BARTHOD qui m'a permis d'effectuer mes calculs avec du matériel de grande qualité.

Je n'oublie pas bien sûr les innombrables personnes qui m'ont soutenu, encouragé ou qui, tout simplement, m'ont offert leur amitié durant ces années ; en particulier : les ingénieurs de l'ONERA, les doctorants et les stagiaires. Leur goût pour l'effort a toujours été pour moi un encouragement. Des discussions parfois animées nous ont permis de tisser des liens d'amitié et de camaraderie. A ce propos, je me souviendrai longtemps de ce Tour du Chercheur qui chaque midi m'aérait l'esprit en docte compagnie. Merci à vous tous.

TABLE DES MATIÈRES

1. INTRODUCTION.....	19
2. RÉOLUTION DE L'ÉQUATION DE TRANSFERT RADIATIF	23
2.1. Présentation de l'équation de transfert radiatif (ETR).....	23
2.2. Spécification du modèle de calcul de signatures UV	27
2.3. Méthodes de résolution de référence	29
2.4. Modèles simplifiés (2-flux et 6-flux)	31
2.4.1. Modèle 2-flux	31
2.4.1.1. Flux hémisphériques moyens.....	33
2.4.1.2. Approximation de la quadrature	34
2.4.1.3. La méthode d'Eddington	39
2.4.1.4. Limitatons du modèle 2-flux.....	43
2.4.2. Modèle 6-flux	44
2.4.2.1. Milieux « plans parallèles »	46
2.4.2.2. Géométries cylindriques et 3D.....	47
2.4.2.3. Limitations du modèle 6-flux.....	49
2.5. Les méthodes des ordonnées discrètes	50
2.5.1. Résolution angulaire : schémas de quadrature utilisés	51
2.5.2. Méthodes de résolution.....	55
2.5.2.1. Résolution par inversion matricielle algébrique	56
2.5.2.2. Méthodes numériques de résolution par itérations successives	56
2.5.3. Conclusion	60
2.6. Méthodes utilisant une base d'harmoniques sphériques.....	61
3. PRÉSENTATION ET ADAPTATION DE LA MÉTHODE SHDOM AUX JETS DE MOTEUR-FUSÉE.....	65
3.1. Principes généraux de la méthode SHDOM.....	65
3.1.1. Evaluation de l'intégrale de diffusion sur la base des harmoniques sphériques	69
3.1.2. Intégration spatiale.....	73
3.2. Adaptations au cas particulier des jets.....	77
3.2.1. Introduction de l'émission de chimiluminescence des gaz.....	79
3.2.2. Géométrie de la grille de propriétés.....	80
3.2.3. Traitement de la luminance en fin de processus itératif	84
3.3. Conclusion.....	85
4. PHÉNOMÈNES PHYSICO-CHIMIQUES À L'ORIGINE DU RAYONNEMENT ULTRAVIOLET	87
4.1. Chimiluminescence de OH.....	88
4.1.1. Mécanisme réactionnel contribuant à l'émission de chimiluminescence de OH*.....	88
4.1.2. Propriétés spectroscopiques de OH et de OH*	92
4.1.3. Evaluation du rayonnement émis et absorbé par OH	95

4.2.	Chimiluminescence de CO+O	102
4.2.1.	Mécanisme réactionnel	102
4.2.2.	Propriétés spectroscopiques de CO ₂	104
4.2.3.	Evaluation du rayonnement émis et absorbé par CO ₂	105
4.3.	Propriétés optiques des particules d'alumine présentes dans les jets de propulseurs	109
4.3.1.	Formation des particules d'alumine.....	109
4.3.2.	Théorie de la diffusion.....	110
4.3.3.	Partie réelle de l'indice	113
4.3.4.	Partie imaginaire de l'indice	116
4.3.5.	Distribution granulométrique.....	124
4.3.6.	Etude paramétrique des grandeurs optiques	128
4.3.6.1.	Calcul des paramètres de diffusion en monodispersion.....	129
4.3.6.2.	Calcul des paramètres de diffusion en polydispersion.....	130
4.4.	Conclusion.....	135
5.	APPLICATION DE LA MÉTHODE SHDOM À DES GÉOMÉTRIES SIMPLES	137
5.1.	Comparaison de la méthode SHDOM avec des modèles de transfert radiatif de référence	137
5.1.1.	Comparaison avec une solution analytique exacte de l'ETR	137
5.1.2.	Enceintes carrées	144
5.1.3.	Conclusion	148
5.2.	Comparaison de la méthode SHDOM avec des approches simplifiées.....	148
5.2.1.	Cas des milieux « plans parallèles »	149
5.2.1.1.	Comparaison avec les modèles 2-flux, 6-flux et N-flux	149
5.2.1.2.	Comparaison avec le modèle 2-flux : dépendance angulaire de la luminance.....	151
5.2.2.	Milieux à symétrie cylindrique	153
5.2.2.1.	Milieu infini	156
5.2.2.2.	Milieu fini	157
5.2.3.	Conclusion	161
5.3.	Milieux cylindriques : effets des incertitudes sur les propriétés optiques des particules.....	161
5.3.1.	Influence de la taille des particules.....	162
5.3.2.	Influence des incertitudes sur l'indice réel des particules d'alumine	165
5.3.3.	Influence des incertitudes sur l'indice imaginaire des particules d'alumine	166
5.3.4.	Conclusion	168
5.4.	Conclusion.....	168
6.	COMPARAISON AVEC DES RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX ...	171
6.1.	Calculs de signature.....	171
6.2.	Comparaison entre les résultats expérimentaux et la modélisation.....	174
6.3.	Conclusion.....	175
7.	CONCLUSION.....	177
8.	BIBLIOGRAPHIE.....	181

9. ANNEXES	197
9.1. GRANDEURS RADIOMÉTRIQUES : DÉFINITIONS	197
9.2. SOLUTION DU MODÈLE 2-FLUX	199
9.3. PROPRIÉTÉS MATHÉMATIQUES DES HARMONIQUES SPHÉRIQUES.....	201
9.3.1. Conditions azimutales.....	201
9.3.2. Conditions relatives aux angles zénithaux.....	202
9.4. LA MÉTHODE DELTA- M	205
9.5. PROCÉDURE D'ENTRÉE DES DONNÉES DANS LE CODE SHDOM	207
9.6. INTERPOLATION BILINÉAIRE DES PROFILS AXISYMÉTRIQUES	209
9.7. ARTICLE	213

NOMENCLATURE DES PRINCIPALES GRANDEURS

Chapitre 2, 3, 5 et 6

a : facteur d'interpolation de la méthode des différences finies

B : facteur de diffusion arrière du modèle 2-flux non standard

b : facteur de diffusion arrière

C : paramètre d'hétérogénéité ($\text{W m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$)

c : facteur de diffusion latérale

D : facteur de diffusivité

dV : élément de volume (m^3)

E : émissivité

F : flux hémisphérique ($\text{W m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$)

f : facteur de diffusion avant

G : irradiance ($\text{W m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$)

g : paramètre d'asymétrie

I : intensité ($\text{W sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$)

J : fonction source ($\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$)

\hat{J} : fonction source ($\text{W m}^{-3} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$)

\hat{J}^C : émission de chimiluminescence ($\text{W m}^{-3} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$)

K : coefficient d'absorption du modèle 2-flux non standard (m^{-1})

K_{Abs} : coefficient d'absorption (m^{-1})

K_{Diff} : coefficient de diffusion (m^{-1})

K_{Ext} : coefficient d'extinction (m^{-1})

k : coefficient de la solution du modèle 2-flux standard (m^{-1})

L_0 : rayonnement du corps noir

N : nombre d'ordonnées discrètes

P : fonction de phase

$p_l(\mu)$: polynôme de Legendre

$p_l^{m_l}(\mu)$: fonction de Legendre associée

q : flux sphérique ($\text{W m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$)

R : luminance ($\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$)

r : rayon de particule (μm)

r_M : rayon du masquage par le corps du propulseur (m)

S : coefficient d'absorption du modèle 2-flux non standard (m^{-1})

\mathbf{s} : position dans l'espace (m)

s : distance dans l'espace (m)

T : température (K) ou transmittivité

$u(m\phi)$: harmonique sphérique azimutale

w : poids de quadrature angulaire

$Y_l^m(\Omega)$: harmonique sphérique (sr^{-1})

Γ : coefficient de la solution du modèle 2-flux standard

γ : coefficient du modèle 2-flux standard (m^{-1})

γ_l^m : facteur de normalisation des harmoniques sphériques (sr^{-1})

Δ_{sol} : résidu de convergence

η : cosinus directeur azimutal

Θ : angle de diffusion (rad)

θ : angle zénithal (rad)

$\Lambda_l^m(\mu)$: harmoniques sphérique zénithale

λ : longueur d'onde (nm ou μm)

μ : cosinus directeur zénithal

ξ : cosinus directeur azimutal

τ : épaisseur optique

ϕ : angle azimutal (rad)

χ_l : coefficient du développement en série de Legendre de la fonction de phase

Ω : direction de propagation du rayonnement (sr)

ω : poids de quadrature zénithal

$\bar{\omega}$: poids de quadrature azimutal

ω_0 : albédo de diffusion simple

Chapitre 4 (§ 4.1 & 4.2)

A : coefficient d'Einstein

B : coefficient d'Einstein

D : taux de prédissociation de OH* (s^{-1})

F : vitesse de formation de OH* ($\text{mol cm}^{-3} s^{-1}$)

I : émission de chimiluminescence molaire de CO + O ($\text{W sr}^{-1} \text{nm}^{-1} \text{mol}^{-2} \text{cm}^3$)

k : constante réactionnelle ($\text{cm}^{3\alpha} s^{-1} \text{molécule}^{-\alpha}$)

N : population des états électroniques de OH (mol cm^{-3})

K_{Abs} : coefficient d'absorption (m^{-1})

P : profil de raie

Q : taux de désactivation collisionnelle de OH* (s^{-1})

$R_\nu(\mathbf{s}, \Omega)$: luminance ($\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \text{Hz}^{-1}$)

Z : fonction de partition

λ : longueur d'onde (nm ou μm)

ν : fréquence lumineuse (Hz)

σ : section efficace de désactivation collisionnelle de OH* (\AA^2)

ψ : fonction d'onde

Chapitre 4 (§ 4.3)

K_{Abs} : coefficient d'absorption (m^{-1})

K_{Diff} : coefficient de diffusion (m^{-1})

K_{Ext} : coefficient d'extinction (m^{-1})

\mathbf{k} : vecteur d'onde (m^{-1})

m : partie imaginaire de l'indice complexe de réfraction

n : partie réelle de l'indice complexe de réfraction

$n(r)$: distribution granulométrique en nombre (μm^{-1})

\tilde{n} : indice complexe de réfraction

P : fonction de phase

$p_n(\mu)$: polynôme de Legendre

$p_n^1(\mu)$: fonction de Legendre associée d'ordre 1

Q_{Abs} : facteur d'efficacité d'absorption

Q_{Diff} : facteur d'efficacité de diffusion

Q_{Ext} : facteur d'efficacité d'extinction

R : luminance ($\text{W m}^{-2} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$)

r : rayon des particules (μm)

r_g : rayon géométrique moyen (μm)

r_{mn} : rayon moyen

S : fonction d'amplitude

T : température (K)

x : paramètre de taille

Θ : angle de diffusion (rad)

κ : terme de l'indice imaginaire de l'alumine correspondant à une bande d'absorption

λ : longueur d'onde (nm ou μm)

ρ : masse volumique ou densité (kg m^{-3})

σ_{Abs} : section efficace d'absorption (m^2)

σ_{Diff} : section efficace de diffusion (m^2)

σ_{Ext} : section efficace d'extinction (m^2)

σ_g : déviation standard géométrique

χ : coefficient du développement en série de Legendre de la fonction de phase

ψ : facteur de propagation des ondes planes

ω : pulsation d'onde (rad s^{-1})

ω_0 : albédo de diffusion simple

1. INTRODUCTION

La « signature optique » d'un jet de propulseur caractérise toutes les propriétés du rayonnement qu'il émet entre l'infrarouge (IR) et l'ultraviolet (UV). Pour certaines applications militaires, la connaissance de la signature des jets permet d'améliorer la discrétion des missiles ou, inversement, de concevoir des techniques de détection. Cette signature dépend de la géométrie du moteur-fusée, de son altitude et de sa vitesse de vol, et de la composition chimique du mélange propulsif utilisé.

Dans le cas des propulseurs à propergol solide dont l'altitude de vol est limitée à quelques centaines de mètres, le propergol utilisé se présente généralement sous la forme d'un chargement solide « composite » constitué d'un mélange compact de combustibles et de comburants. Cette technologie permet au moteur-fusée de fournir une poussée importante pendant une dizaine de secondes environ. L'ajout d'une fraction massique de 10% à 20% d'aluminium à la charge du propergol permet d'augmenter l'énergie motrice du propulseur.

La combustion de ce propergol composite produit des gaz et des particules d'alumine (Al_2O_3) issues de l'oxydation de l'aluminium. Les concentrations et les températures des produits de combustion dans le jet résultent de différents processus physico-chimiques se produisant dans la chambre de combustion, la tuyère et le jet lui-même. Ces processus peuvent être modélisés par des codes aérothermochimiques faisant encore aujourd'hui l'objet d'études approfondies [1].

En raison de leur haute température, les gaz et les particules émettent un rayonnement qui couvre un large domaine spectral : infrarouge, visible et ultraviolet. Cependant, la luminosité de l'environnement extérieur (soleil, ciel, sol...) est susceptible de perturber la détection à basse altitude des jets de propulseurs. L'utilisation du domaine ultraviolet permet de pallier cette difficulté en diminuant cette source de rayonnement parasite. En effet, le rayonnement émis par le soleil entre 200 nm et 300 nm de longueur d'onde, est absorbé par l'atmosphère terrestre, notamment par l'ozone (O_3) stratosphérique et troposphérique, ce qui crée un fond de ciel noir [2]. De ce fait, les signatures de jets peuvent apparaître avec un très bon contraste dans le domaine spectral appelé "*Solar Blind*", restreint aux longueurs d'onde comprises entre 240 nm et 280 nm où le rayonnement solaire parasite est particulièrement faible.

Les propriétés optiques des constituants des jets dépendent de la longueur d'onde, de la température, de la nature des espèces gazeuses et des caractéristiques physiques des particules. Dans le domaine spectral "*Solar Blind*", les réactions chimiques se produisant entre les espèces gazeuses sont à l'origine d'une émission de « chimiluminescence ». Dans le cas des jets de propulseurs à propergols composites aluminisés, cette dernière est produite d'une part par la recombinaison radiative du monoxyde de carbone (CO) avec l'oxygène atomique (O) et d'autre part par la désexcitation du radical hydroxyle (OH) [2] [3].

L'absorption et la diffusion du rayonnement par les particules d'alumine présentes dans les jets dépendent de leur forme, de leur dimension et de leur indice complexe de réfraction. Ces paramètres sont particulièrement sensibles aux processus de formation des particules, à leur historique et à leur environnement gazeux [4]. De ce fait, lors du calcul de la signature d'un jet, il faut avoir présent à l'esprit la connaissance partielle des propriétés optiques et granulométriques des particules car celle-ci peut être une source d'incertitudes importantes concernant le rayonnement émis par ce type de milieu.

Pour calculer la signature des jets, différents modèles de transfert radiatif ont été développés au cours des dernières décennies. Un des principaux problèmes rencontrés dans les calculs de signature est la prise en compte de la diffusion due aux particules. En effet, ce phénomène optique induit un couplage entre toutes les directions de propagation du rayonnement [5] [6] [7]. Cette difficulté peut être levée par l'échantillonnage angulaire du champ de rayonnement sur 2, 6 ou N ($N \gg 6$) directions comme dans les modèles de transfert radiatif 2-flux [6], 6-flux [6] [8] [9] ou N -flux [6]. Cependant, l'utilisation d'un nombre trop faible de directions peut compromettre la précision du résultat final. Or, les modèles de calcul de signatures de jets utilisent généralement des méthodes approchées, de type 2-flux [6] ou 6-flux [1] [6] [8] [9] du fait de leur rapidité. C'est pourquoi on peut s'interroger sur la validité des résultats obtenus au moyen de ces approches.

Cette étude est consacrée au développement d'un modèle de transfert radiatif 3D permettant de calculer la signature UV d'un jet en prenant en compte le plus fidèlement possible les interactions entre la matière et le rayonnement à l'intérieur de ce milieu. A cette fin, on choisit d'utiliser un modèle de transfert radiatif 3D dont les performances en terme de

précision et de vitesse des calculs sont connues : la méthode des harmoniques sphériques et des ordonnées discrètes (*Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method*) développée par Evans [10]. Des adaptations de cette méthode originellement conçue pour des milieux atmosphériques nuageux, sont réalisées afin de prendre en compte la géométrie des jets et les propriétés optiques de leurs constituants.

Les résultats fournis par la méthode SHDOM sont comparés, pour des géométries simples, à des solutions de référence issues de la littérature et à des approches simplifiées, de type 2-flux notamment, généralement utilisées pour calculer la signature des jets. Ces cas tests doivent permettre d'étudier la précision de la méthode SHDOM selon différentes conditions de résolution angulaire et de discrétisation spatiale, et de mettre en évidence l'intérêt du choix de ce modèle de transfert radiatif. Par ailleurs, le code SHDOM modifié permet d'étudier le champ de rayonnement émis par un milieu de type jet en prenant en compte les incertitudes sur les propriétés optiques et granulométriques des particules.

Ces différents points sont étudiés dans les cinq chapitres suivants, dont les contenus sont exposés succinctement ci-dessous.

Le chapitre 2 présente une étude bibliographique concernant les différents modèles de transfert radiatif utilisables dans des milieux diffusants. Le modèle SHDOM et son adaptation aux jets de propulseurs composites aluminisés, sont exposés dans le chapitre 3. Une solution est proposée pour la prise en compte de l'émission de chimiluminescence des gaz, inexistante dans les milieux nuageux. L'adaptation de la méthode SHDOM à la géométrie des jets est en outre discutée.

Les propriétés optiques des gaz et des particules pour le domaine UV sont étudiées dans le chapitre 4, à l'aide de données issues de la littérature. Des lois permettant de calculer l'émission de chimiluminescence des gaz sont élaborées. Concernant les particules d'alumine, l'indice complexe de réfraction de cet oxyde, est estimé au moyen de modèles disponibles dans la littérature. Une étude sur la distribution en tailles des particules à l'intérieur des jets est ensuite effectuée. Enfin, l'évolution des paramètres optiques caractérisant les particules est évaluée par rapport à leur taille et à leur indice de réfraction.

Le chapitre 5 présente une série de cas tests effectués dans des géométries simples. Tout d'abord, la précision des résultats fournis par la méthode SHDOM est étudiée par

rapport à des solutions de référence issues de la littérature. Ensuite, ce modèle est comparé à des approches plus simples, de type 2-flux notamment, dans des géométries 1D ou cylindriques proches des jets. Enfin, le modèle SHDOM est utilisé pour calculer le rayonnement émis par un milieu cylindrique représentatif des jets, sous différentes hypothèses relatives aux propriétés granulométriques et optiques des particules.

Enfin, le chapitre 6 est consacré à la comparaison de la modélisation de la signature UV d'un jet de propulseur à propergol solide composite aluminisé, avec des résultats expérimentaux.

2. RÉOLUTION DE L'ÉQUATION DE TRANSFERT

RADIATIF

Le jet d'un moteur-fusée dont le chargement est un propergol composite aluminisé, est constitué de gaz et de particules d'alumine susceptibles d'émettre un rayonnement en raison de leur haute température (jusqu'à 2 500 K environ). En raison des propriétés de l'alumine, les particules émettent un rayonnement thermique. Dans le domaine ultraviolet (UV), l'émission des gaz provient essentiellement de la désexcitation de molécules excitées (CO_2^* , OH^* ...) qui sont produites par des réactions entre certaines espèces chimiques présentes dans le jet (CO , O , H , OH ...). Les phénomènes de ce type sont regroupés sous le nom de « chimiluminescence » [2] [3]. La diffusion et l'absorption du rayonnement sont provoquées par les particules qui forment la phase condensée des jets. L'absorption des gaz, et donc leur émission thermique peuvent être ignorées. Ce point sera justifié au chapitre 4. En raison du choix du domaine spectral entre 240 nm et 280 nm, aucun rayonnement solaire parasite n'est présent, qu'il soit sous la forme d'un rayonnement collimaté (éclairage direct) ou d'un fond de ciel diffus.

L'équation de transfert radiatif (ETR) permet de calculer le champ de rayonnement émis par un milieu en prenant en compte ses propriétés optiques locales. L'objet de ce chapitre est de présenter cette équation, de spécifier le modèle de calcul des signatures UV des jets de propulseurs, de décrire les principales méthodes de résolution de l'ETR présentes dans la littérature et de déterminer dans quelle mesure ces dernières sont adaptables au calcul de la signature d'un jet dans l'UV. Le choix d'une telle méthode devra être compatible avec la géométrie 3D des jets et avec la complexité des phénomènes optiques (notamment la diffusion par les particules et l'émission de chimiluminescence des gaz) se déroulant à l'intérieur de ces milieux.

2.1. Présentation de l'équation de transfert radiatif (ETR)

L'équation de transfert radiatif (ETR) décrit sous forme mathématique, les échanges d'énergie lorsqu'un rayonnement à la longueur d'onde λ s'est propagé selon la direction Ω à travers un élément de volume $dV(\mathbf{s})$ de longueur ds dans la direction de propagation. La

définition des principales grandeurs radiométriques est rappelée en annexe (cf. annexe § 9.1). Cette équation peut s'écrire sous la forme [5] :

$$\frac{d}{ds} R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega) = -K_{\text{Ext}}(\lambda, \mathbf{s}) R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega) + \hat{J}_\lambda(\mathbf{s}, \Omega) \quad (2.1)$$

avec les notations suivantes :

- $\frac{d}{ds} = (\Omega \cdot \nabla)$ est l'opérateur de dérivation spatiale selon la direction Ω ;
- $R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega)$ est la luminance monochromatique à la position définie par \mathbf{s} se propageant selon la direction Ω ;
- $K_{\text{Ext}}(\lambda, \mathbf{s})$ est le coefficient monochromatique d'extinction du milieu ;
- $\hat{J}_\lambda(\mathbf{s}, \Omega)$ est la fonction source qui représente les gains de rayonnement à la position définie par \mathbf{s} dans la direction Ω .

Le membre de gauche de cette équation désigne la variation de la luminance le long de la trajectoire du faisceau lumineux considéré. L'origine de cette variation est donnée dans le second membre qui dépend des propriétés optiques des constituants du milieu étudié et du domaine spectral. Pour un milieu diffusant composé de particules en suspension dans un gaz (considéré comme non émissif thermiquement) tel qu'un jet de moteur-fusée, l'équation de transfert radiatif à la longueur d'onde λ dans le domaine ultraviolet peut s'écrire [6] :

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega) = & -[K_{\text{Abs}}(\lambda, \mathbf{s}) + K_{\text{Diff}}(\lambda, \mathbf{s})] R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega) + K_{\text{Abs}}(\lambda, \mathbf{s}) L_{0\lambda}[T(\mathbf{s})] + \hat{J}_\lambda^c(\mathbf{s}) \\ & + \frac{K_{\text{Diff}}(\lambda, \mathbf{s})}{4\pi} \int_{4\pi} P(\lambda, \mathbf{s}, \Omega', \Omega) R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \end{aligned} \quad (2.2)$$

où :

- $K_{\text{Abs}}(\lambda, \mathbf{s})$ est le coefficient monochromatique d'absorption des particules présentes dans le milieu ;
- $K_{\text{Diff}}(\lambda, \mathbf{s})$ est le coefficient monochromatique de diffusion des particules ;
- $L_{0\lambda}[T(\mathbf{s})]$ représente l'émission du corps noir à la température T des particules situées en \mathbf{s} ;

- $\hat{J}_\lambda^c(\mathbf{s})$ représente le rayonnement provenant des réactions de chimiluminescence des gaz dans un milieu hors équilibre thermodynamique local. Ce terme est fonction de la concentration et de la température des gaz en \mathbf{s} ;
- $P(\lambda, \mathbf{s}, \Omega', \Omega)$ est la fonction de phase de diffusion. Celle-ci représente, à un facteur de normalisation près, la densité de probabilité de l'angle de diffusion (Ω', Ω) , c'est-à-dire la densité de probabilité qu'à l'élément de volume $dV(\mathbf{s})$ situé en \mathbf{s} de diffuser dans la direction Ω le rayonnement se propageant originellement suivant Ω' . Le terme $\frac{K_{\text{Diff}}(\lambda, \mathbf{s})}{4\pi} \int_{4\pi} P(\lambda, \mathbf{s}, \Omega', \Omega) R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega'$ appelé « intégrale de diffusion », représente le gain total de rayonnement dû aux phénomènes de diffusion.

Dans un jet, il existe des particules de différentes tailles. On peut donc associer à chaque classe de particules relative à un rayon noté r , une concentration $n(r)$ et une température $T(r)$ distincte. En chaque point, les propriétés optiques de l'ensemble des particules sont évaluées par les sommations suivantes :

$$K_{\text{Ext, Abs, Diff}}(\lambda, \mathbf{s}) = \int_0^\infty \sigma_{\text{Ext, Abs, Diff}}(r, \lambda, \mathbf{s}) n(r) dr \quad (2.3)$$

$$P(\lambda; \mathbf{s}; \Omega', \Omega) = \frac{1}{K_{\text{Diff}}(\lambda, \mathbf{s})} \int_0^\infty P(r; \lambda; \mathbf{s}; \Omega', \Omega) \sigma_{\text{Diff}}(r; \lambda; \mathbf{s}) n(r) dr \quad (2.4)$$

où $\sigma_{\text{Ext, Abs, Diff}}(r, \lambda, \mathbf{s})$ représente la section efficace d'extinction, d'absorption ou de diffusion des particules de rayon r et $P(r; \lambda; \mathbf{s}; \Omega', \Omega)$ la fonction de phase associée. La température moyenne équivalente des particules \bar{T} est évaluée par inversion de la fonction de Planck, et elle est définie par la relation :

$$K_{\text{Abs}}(\lambda, \mathbf{s}) L_{0\lambda}(\bar{T}) = \int_0^\infty L_{0\lambda}[T(r)] \sigma_{\text{Abs}}(r, \lambda, \mathbf{s}) n(r) dr \quad (2.5)$$

Dans la suite du texte, la notation T désigne la température des particules lorsqu'elle est unique ou, le cas échéant, la température moyenne des particules. En réalité, les sections efficaces d'absorption et de diffusion ainsi que la fonction de phase dépendent aussi de la température des particules. Pour alléger les notations, cette dépendance a été omise dans les relations (2.3) à (2.5). Ce point sera présenté au chapitre 4.

La Figure 2.1 présente, sous forme schématique, le sens physique de chacun des termes de l'équation de transfert radiatif.

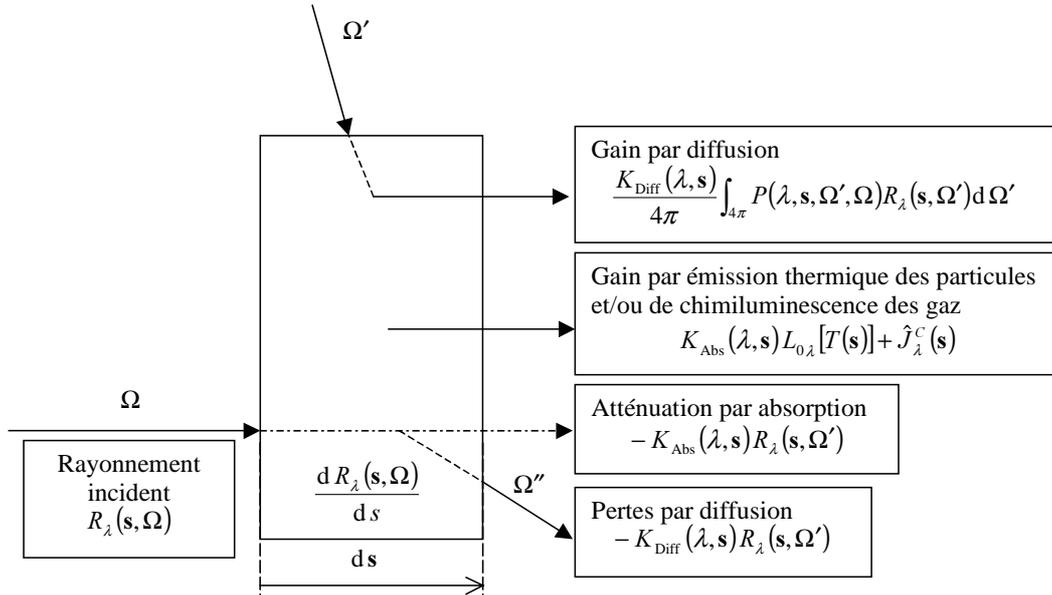


Figure 2.1 - Phénomènes radiatifs intervenant dans la propagation d'un rayonnement UV dans la direction Ω à travers l'élément de volume $dV(\mathbf{s})$ d'épaisseur ds

La fonction de phase $P(\lambda, s, \Omega', \Omega)$ obéit à la relation de normalisation suivante :

$$\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} P(\lambda, s, \Omega', \Omega) d\Omega' = 1 \quad (2.6)$$

Dans le cas d'un milieu composé de particules orientées aléatoirement dans l'espace ou de forme sphérique, la fonction de phase est symétrique par rotation autour de la direction d'incidence Ω et la dépendance par rapport à l'angle polaire de diffusion Θ entre les directions Ω' et Ω peut s'écrire :

$$P(\lambda, s, \Omega', \Omega) = 2\pi P(\lambda, s, \cos \Theta) \quad (2.7)$$

Le paramètre d'asymétrie (ou premier moment de diffusion) g permet de caractériser la diffusion avant. Il est défini par la relation suivante :

$$g = \frac{1}{2} \int_0^\pi P(\lambda, s, \cos \Theta) \cos \Theta \sin \Theta d\Theta \quad (2.8)$$

Si la diffusion est isotrope, la fonction de phase est constante et le paramètre d'asymétrie est nul. Si la diffusion se fait entièrement vers l'avant, alors $g=1$ et en cas de rétrodiffusion totale, $g=-1$. Dans les jets, ce paramètre d'asymétrie est proche de 0.8 dans l'UV. Cependant, cette seule grandeur ne permet pas de décrire toute la complexité de la structure

angulaire des fonctions de phase. En effet, ces dernières comprennent des pics de diffusion avant et arrière bien marqués et des figures de diffraction lissées du fait de l'existence de plusieurs tailles de particules.

Le changement de variables et de paramètres suivant permet de simplifier l'écriture de l'équation (2.2) [6] :

$$\text{Coefficient d'extinction : } K_{\text{Ext}}(\lambda, \mathbf{s}) = K_{\text{Abs}}(\lambda, \mathbf{s}) + K_{\text{Diff}}(\lambda, \mathbf{s}) \quad (2.9)$$

$$\text{Epaisseur optique : } d\tau(\lambda, \mathbf{s}) = K_{\text{Ext}}(\lambda, \mathbf{s})d s \quad (2.10)$$

$$\text{Albédo de diffusion simple : } \omega_0(\lambda, \mathbf{s}) = \frac{K_{\text{Diff}}(\lambda, \mathbf{s})}{K_{\text{Ext}}(\lambda, \mathbf{s})} \quad (2.11)$$

En utilisant les relations précédentes, l'équation de transfert radiatif peut désormais s'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau(\lambda, \mathbf{s})} R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega) = & -R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega) + [1 - \omega_0(\lambda, \mathbf{s})] L_{0\lambda}[T(\mathbf{s})] + \frac{\hat{j}_\lambda^c(\mathbf{s})}{K_{\text{Ext}}(\lambda, \mathbf{s})} \\ & + \frac{\omega_0(\lambda, \mathbf{s})}{4\pi} \int_{4\pi} P(\lambda, \mathbf{s}, \Omega', \Omega) R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \end{aligned} \quad (2.12)$$

Pour alléger les notations, les dépendances spatiales et spectrales des propriétés optiques des particules seront désormais omises ainsi que la dépendance spectrale de la fonction source et de la luminance. Comme l'ETR peut être résolue indépendamment pour chaque longueur d'onde, la dépendance spectrale du rayonnement sera ignorée dans la suite.

2.2. Spécification du modèle de calcul de signatures UV

Un modèle de transfert radiatif utilisé pour évaluer la signature des jets dans l'UV doit prendre en compte l'ensemble des phénomènes optiques qui se déroulent au sein de ce type de milieu, c'est-à-dire :

- L'émission de chimiluminescence des gaz ;
- L'émission thermique des particules ;
- Les phénomènes d'absorption et de diffusion par les particules.

Les jets sont des milieux 3D, finis, considérés comme axisymétriques [8] [9] [11]. La grille de propriétés optiques décrivant ces milieux doit être compatible avec ce type de géométrie. De plus, le modèle de transfert radiatif doit permettre de calculer la luminance émise selon toutes les directions possibles.

Les principales étapes préparatoires à la résolution de l'ETR dans le cas des jets sont :

- La détermination des grandeurs aérothermochimiques dans le jet : ce point n'est pas traité dans cette étude ;
- L'évaluation des propriétés optiques locales des constituants du milieu (gaz et particules) : ce point fera l'objet du chapitre 4 ;
- Le choix de la discrétisation spatiale utilisée pour décrire la géométrie du milieu ;
- Le choix des hypothèses sur la résolution angulaire permettant d'évaluer l'intégrale de diffusion.

La résolution de l'équation de transfert radiatif doit permettre d'obtenir une solution mathématique avec le maximum de précision, basée sur des approximations physiques raisonnables pour les caractéristiques spatiales et spectrales du milieu. Pour des milieux tridimensionnels tels que les jets, la résolution de l'ETR se complique notablement en un problème à 5 dimensions (2 angulaires pour la direction et 3 pour les coordonnées spatiales), n'admettant généralement pas de solutions analytiques exactes.

Le choix de la résolution spatiale et angulaire est donc lié aux moyens de calculs numériques disponibles (mémoire de stockage, vitesse du processeur...) ainsi qu'à la précision des résultats que l'on souhaite obtenir. Le modèle de calcul de signatures UV de jets devra prendre en compte l'émission de chimiluminescence des espèces gazeuses [2] [3] ainsi que les fonctions de phase piquées des particules [3]. Une dépendance de la température des particules par rapport à leur taille devra être envisagée. Ce modèle devra permettre d'évaluer la dépendance angulaire et spatiale du champ de luminance, notamment pour la vue avant. Comme le jet n'est en contact direct avec aucune surface hormis la tuyère, les conditions aux limites du calcul devront être ouvertes.

Une revue des principaux modèles de transfert radiatif, pour les problèmes de combustion, est proposée par Viskanta et Mengüç [7]. Dans la suite de ce chapitre, les modèles les plus couramment utilisés dans l'étude des jets seront abordés. Les méthodes de résolution considérées comme références, les modèles approchés de type 2-flux et 6-flux qui sont fréquemment utilisés pour calculer la signature des jets [6] [8] [9], et la méthode des ordonnées discrètes seront décrits. Enfin, des approches mathématiques utilisant une base d'harmoniques sphériques seront présentées. A la fin de ce chapitre, le choix du modèle de

transfert radiatif utilisé dans cette étude pour calculer la signature des jets est arrêté. Ce dernier sera présenté en détail dans le chapitre suivant.

2.3. Méthodes de résolution de référence

Peu de méthodes permettent de résoudre l'ETR avec une précision telle que les résultats puissent être utilisés comme référence. En raison de leur utilisation fréquente, on a retenu deux types d'approches : les méthodes Monte-Carlo et la méthode de zones.

Les méthodes Monte-Carlo [8] [9] [12] permettent de calculer le trajet de paquets de lumière élémentaires appelés « photons », dans des milieux 3D hétérogènes de géométrie complexe tout en prenant en compte les effets spectraux. Les interactions entre la matière et le rayonnement dans le milieu diffusant sont simulées directement selon une analyse statistique des propriétés radiatives [13]. En d'autres termes, les différents événements (diffusion, absorption, émission...) pouvant avoir lieu au cours des trajets sont définis comme aléatoires, chacun d'entre eux étant affecté d'une densité de probabilité. De ce fait, ce type de modélisation de la propagation du rayonnement est compatible avec une gamme très étendue de propriétés radiatives (y compris les fonctions de phase) [14] et de longueur d'onde [15]. C'est pourquoi les méthodes Monte-Carlo sont fréquemment utilisées pour les milieux atmosphériques nuageux [13]. L'incertitude numérique de ces méthodes statistiques est, en valeur relative, inversement proportionnelle à la racine carrée du nombre de photons utilisés. Mais la précision des résultats dépend aussi fortement des caractéristiques géométriques et optiques du milieu. En raison de leur coût en temps de calcul [16], ce type de méthode n'est guère utilisé pour modéliser des jets complets mais plutôt pour des milieux simplifiés, cylindriques [8] [9] ou coniques [17], notamment pour valider d'autres approches telles que le modèle 6-flux [8] [9]. Pour le calcul de la signature de jets complets, on préférera des approches simplifiées qui permettent d'obtenir des résultats aussi précis mais avec un temps de calcul plus faible. Ces dernières sont présentées dans les paragraphes suivants.

Dans la méthode de zones [18], le milieu est découpé en régions supposées homogènes. Les échanges d'énergie entre ces zones sont exprimés sous forme matricielle en terme d'aires d'échanges orientés. Cette approche permet d'obtenir une solution numérique exacte en terme de flux sphériques et d'irradiance, pouvant servir de résultat de référence [19]. Ces deux grandeurs sont définies respectivement par les relations [18] :

$$q(\mathbf{s}) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 R(\mathbf{s}; \mu, \phi) \mu d\mu \quad (2.13)$$

$$G_i(\mathbf{s}) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 R(\mathbf{s}; \mu, \phi) d\mu \quad (2.14)$$

Dans un milieu « plans parallèles » composé de N couches homogènes de même épaisseur optique $\Delta\tau$ avec une fonction de phase linéairement anisotrope (telle que $|g| < 1/3$), l'ETR peut être réécrite sous la forme de trois systèmes d'équations définis par [18] :

$$\left\{ \begin{array}{l} G_i(\tau_i) \Delta\tau = J_{1s} s_0 g_i^{(0)} + J_{2s} s_N g_i^{(0)} + (1 - \omega_0) \sum_{j=1}^N E_b(\tau_j) g_j g_i^{(0)} \\ \quad + \frac{\omega_0}{4} \sum_{j=1}^N G(\tau_j) g_j g_i^{(0)} + \frac{3\omega_0 g}{4} \sum_{j=1}^N q(\tau_j) g_j g_i^{(1)} \end{array} \right. \quad (2.15)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} q(\tau_i) \Delta\tau = J_{1s} s_0 g_i^{(1)} + J_{2s} s_N g_i^{(1)} + (1 - \omega_0) \sum_{j=1}^N E_b(\tau_j) g_j g_i^{(1)} \\ \quad + \frac{\omega_0}{4} \sum_{j=1}^N G(\tau_j) g_j g_i^{(1)} + \frac{3\omega_0 g}{4} \sum_{j=1}^N q(\tau_j) g_j g_i^{(2)} \end{array} \right. \quad (2.16)$$

$${}_{i=1\dots N} \{q(\tau_i) \Delta\tau d\tau = (1 - \omega_0) \Delta\tau [4E_b(\tau_i) - G_i(\tau_i)] \quad (2.17)$$

Les coefficients de type $s_{0,N}$ et $g_i^{(k)}$ qui se rapportent aux intégrales spatiales des différents termes de l'ETR, sont appelés « aires d'échanges orientés » (**D**irected **E**xchange **A**reas) et les variables $J_{1s,2s}$ et $E_b(\tau_j)$ sont associées respectivement au rayonnement entrant dans le milieu (vers le haut et vers le bas) et au rayonnement thermique des particules. La résolution par inversion matricielle d'un tel système nécessite des moyens de calculs importants, et le formalisme mathématique de la méthode dépend de la structure du milieu étudié (géométrie...). En raison de sa difficulté de mise en œuvre, la méthode de zones est utilisée essentiellement dans les géométries simples (milieux « plans parallèles », enceintes carrées [19]...). De plus, elle est conçue pour des milieux ayant des fonctions de phase isotropes ou linéairement anisotropes qui sont beaucoup moins piquées que celles rencontrées dans les jets dans le domaine visible et ultraviolet [3]. Cette formulation ne peut donc pas être utilisée pour calculer les signatures de jets. En revanche, elle peut être utilisée pour valider des modèles de transfert radiatif plus simples.

2.4. Modèles simplifiés (2-flux et 6-flux)

2.4.1. Modèle 2-flux

Le modèle 2-flux consiste à résoudre l'ETR dans un milieu « plans parallèles » en ne considérant que les flux hémisphériques associés à une direction de propagation du rayonnement notée « z ». Cette variable correspond à l'altitude pour les problèmes atmosphériques [20]. Le modèle 2-flux peut cependant être étendu aux milieux 3D en assimilant chaque ligne de visée le long de laquelle on souhaite calculer le rayonnement, à un milieu « plans parallèles » distinct. Le milieu est donc considéré comme une mosaïque de colonnes indépendantes les unes des autres. Dans la suite du texte, ce type d'approximation sera désigné sous le nom « d'approximation des pixels indépendants » (Independent Pixel Approximation). Dans ce cas, il faut prendre garde au fait que les interactions entre les lignes de visée produites par les phénomènes de diffusion latérale sont négligées.

Le schéma de principe du modèle 2-flux est présenté sur la Figure 2.2.

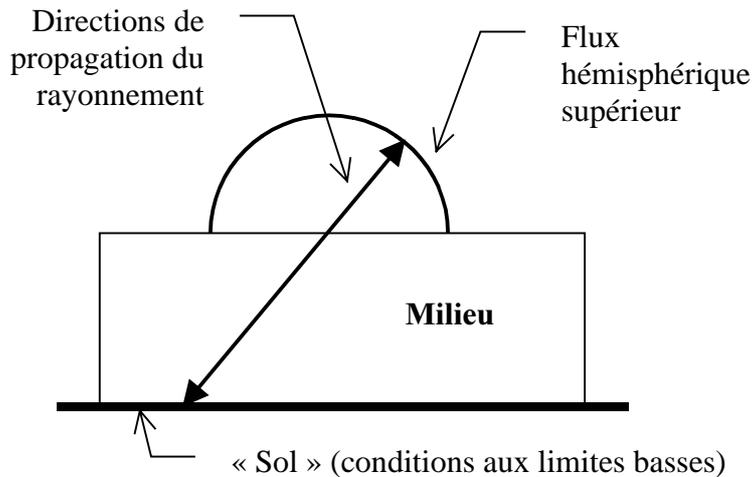


Figure 2.2 - Principe du modèle 2-flux

Les flux hémisphériques dans le sens de propagation et dans celui de la rétrodiffusion sont définis par les relations [20] :

$$F^{\pm}(z) = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^1 R(z; \pm\mu, \phi) \mu d\mu = \int_0^1 R(z, \pm\mu) \mu d\mu \quad (2.18)$$

où « + » et « - » représentent les sens de propagation ou de rétrodiffusion et z l'altitude par rapport à un « sol » définissant les conditions aux limites basses. $\theta = \arccos \mu$ et ϕ désignent

respectivement les angles zénithaux et azimutaux. $R(z, \mu) = \int_0^{2\pi} R(z; \mu, \phi) d\phi$ correspond à la luminance intégrée azimutalement.

L'équation du modèle 2-flux s'obtient en intégrant angulairement l'ETR. Celle-ci n'est donc plus exprimée en terme de luminances mais de flux hémisphériques suivant une relation de la forme [20] [21] :

$$\frac{dF^\pm(z)}{dz} = -\gamma_\pm F^\pm(z) + \gamma_\mp F^\mp(z) \pm \check{J}^\pm(z) \quad (2.19)$$

où $\check{J}^\pm(z)$ est la représentation en termes de flux de la fonction source $\check{J}(z; \mu, \phi)$ représentant la somme de tous les termes d'émission de l'ETR. Dans le cas des jets, la fonction source $\check{J}(z; \mu, \phi)$ est isotrope, elle a donc une forme similaire à l'émission thermique infrarouge (IR) des nuages dans les scènes atmosphériques.

La solution générale de l'équation (2.19) pour une couche homogène s'écrit [21] :

$$F^\pm(z) = g_\pm e^{\mp kz} + \Gamma g_\mp e^{\pm kz} + A^\pm(z) \quad (2.20)$$

où g_+ et g_- sont des coefficients déterminés par les conditions aux limites de la couche homogène étudiée. $A^+(z)$ et $A^-(z)$ dépendent de la fonction source du milieu (solutions particulières de (2.19)). Les conditions de validité de cette solution sont discutées en annexe (cf. annexe 9.2). k et Γ dépendent des propriétés du milieu suivant les relations [21] :

$$k = \sqrt{\gamma_+^2 - \gamma_-^2} \quad (2.21)$$

$$\Gamma = \frac{\gamma_-}{\gamma_+ + k} = \frac{\gamma_+ - k}{\gamma_-} \quad (2.22)$$

Les paramètres γ_+ et γ_- sont évalués à partir des propriétés optiques du milieu, en introduisant des hypothèses sur la dépendance angulaire du champ de luminance et de la fonction de phase à l'intérieur du milieu. Meador et Weaver [20] présentent une revue des approches permettant de définir γ_+ et γ_- . Ces approches peuvent être classées suivant trois catégories principales :

- L'approximation des « flux hémisphériques moyens » [20] [21] ;
- Une approche utilisant une quadrature avec deux ordonnées discrètes [22] ;

- La méthode d'Eddington [23] et ses dérivées où la fonction de phase et le champ de luminance sont posés linéairement anisotropes.

Le tableau suivant présente les valeurs de γ_+ et de γ_- associées aux différentes formulations du modèle 2-flux couramment employées.

Formulation	$\frac{\gamma_+}{K_{\text{Ext}}}$	$\frac{\gamma_-}{K_{\text{Ext}}}$	Approximation utilisée
Flux hémisphériques moyens [20] [21]	$2 - \omega_0(1 + g)$	$\omega_0(1 - g)$	$F^\pm(z) = \frac{1}{2}R(z, \pm\mu)_{\mu>0}$ $P(\cos \Theta)$ $= \begin{cases} 1 + g & \text{si } \cos \Theta > 0 \\ 1 - g & \text{si } \cos \Theta < 0 \end{cases}$
Quadrature [20] [22]	$\frac{1}{\mu_0} \left(1 - \omega_0 \frac{1+g}{2} \right)$	$\frac{1}{\mu_0} \omega_0 \frac{1-g}{2}$	$R(z, \pm\mu)_{\mu>0}$ $= DF^\pm(z) \delta(\mu - \mu_0)$ ou $P(\cos \Theta)$ $= (1 + g) \delta(\cos \Theta - 1)$ $+ (1 - g) \delta(\cos \Theta + 1)$
Eddington [20] [23]	$\frac{7 - \omega_0(4 + 3g)}{4}$	$-\frac{1 - \omega_0(4 - 3g)}{4}$	$R(z, \mu)$ $= R_0(z) + R_1(z)\mu$ $P(\mu', \mu) = 1 + 3g\mu'\mu$
Eddington hybride [20]	$\frac{\left[7 - 3g^2 - \omega_0(4 + 3g) + \omega_0 g^2 [2 + 3g(1 - \mu_0)] \right]}{4[1 - g^2(1 - \mu_0)]}$	$-\frac{\left[1 - 3g^2 - \omega_0(4 - 3g) - \omega_0 g^2 [2 - 3g(1 - \mu_0)] \right]}{4[1 - g^2(1 - \mu_0)]}$	$R(z, \mu)_{\mu>0}$ $= R_0(z) \pm R_1(z)\mu$ $+ R^\pm(z) \delta(\mu \mp \mu_0)$ $P(\mu', \mu) = 1 + 3g\mu'\mu$

Tableau 2.1 – Formulations du modèle 2-flux couramment employées

La suite de ce paragraphe présente plus en détail ces différentes approximations.

2.4.1.1. Flux hémisphériques moyens

Dans l'approximation des « flux hémisphériques moyens », le champ de luminance est considéré comme constant sur chaque hémisphère défini par le signe du cosinus directeur zénithal μ . La valeur des flux est donc égale à :

$$F^\pm(z) = \frac{1}{2}R(z, \pm\mu)_{\mu>0} \quad (2.23)$$

La diffusion est supposée isotrope sur chaque hémisphère associé à la diffusion avant et arrière selon la relation :

$$P(\cos \Theta) = \begin{cases} 1 + g & \text{si } \cos \Theta > 0 \\ 1 - g & \text{si } \cos \Theta < 0 \end{cases} \quad (2.24)$$

L'intégrale de diffusion peut s'écrire ainsi :

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_{-1}^1 P(\cos \Theta) R(z; \mu', \phi') d\mu' \\ &= \frac{\omega_0}{2} [(1+g)R(z, \pm\mu) + (1-g)R(z, \mp\mu)] \end{aligned} \quad (2.25)$$

L'ETR peut se réécrire ainsi :

$$\frac{dR(z, \pm\mu)}{dz} = \frac{1}{\pm\mu} K_{\text{Ext}} \left\{ -R(z, \pm\mu) + \omega_0 \left[\frac{1+g}{2} R(z, \pm\mu) + \frac{1-g}{2} R(z, \mp\mu) \right] \right\} + \check{J}(z, \pm\mu) \quad (2.26)$$

Soit en terme de flux :

$$\frac{dF^\pm(z)}{dz} = \pm 2 K_{\text{Ext}} \left\{ -F^\pm(z) + \omega_0 \left[\frac{1+g}{2} F^\pm(z) + \frac{1-g}{2} F^\mp(z) \right] \right\} + \check{J}^\pm(z) \quad (2.27)$$

puisque [20] :

$$\int_0^1 \frac{1}{\mu} R(z, \pm\mu) \mu d\mu = \int_0^1 R(z, \pm\mu) d\mu = R(z, \pm\mu)_{\mu>0} = 2F^\pm(z) \quad (2.28)$$

Aussi les coefficients spécifiques de cette formulation du modèle 2-flux peuvent-ils s'écrire :

$$\gamma_+ = K_{\text{Ext}} [2 - \omega_0 (1 + g)] \quad (2.29)$$

$$\gamma_- = K_{\text{Ext}} \omega_0 (1 - g) \quad (2.30)$$

Par construction, cette formulation n'est adaptée que dans le cas des milieux « plans parallèles » possédant un champ de luminance quasi-isotrope et une fonction de phase peu piquée. De plus, la pertinence des résultats est limitée au seul calcul des flux.

2.4.1.2. Approximation de la quadrature

Dans « l'approximation de la quadrature », les flux sont évalués suivant une quadrature définie avec deux « ordonnées discrètes » opposées et de poids identiques, données par la relation [22] :

$$\mu_\pm = \pm\mu_0 = \pm \frac{1}{D} \quad (2.31)$$

où $D \geq 1$ est appelé facteur de diffusivité. Les flux sont donc posés égaux à :

$$F^\pm(z) = \frac{1}{D} R(z, \mu_\pm) \quad (2.32)$$

Le champ de luminance en fonction des flux est donné par [20] :

$$\text{Si } \mu > 0, \quad R(z, \pm\mu) = D F^\pm(z) \delta(\mu - \mu_0) \quad (2.33)$$

La fonction de phase normalisée est isotrope sur deux hémisphères selon la relation (2.24) [21]. Par conséquent, l'équation de transfert radiatif correspondant au modèle 2-flux s'écrit dans ce cas :

$$\mu_\pm \frac{dR(z, \mu_\pm)}{dz} = K_{\text{Ext}} \left\{ -R(z, \mu_\pm) + \omega_0 \left[\frac{1+g}{2} R(z, \mu_\pm) + \frac{1-g}{2} R(z, \mu_\mp) \right] \right\} + \check{J}(z, \mu_\pm) \quad (2.34)$$

En terme de flux, cette équation peut se réécrire ainsi :

$$\frac{dF^\pm(z)}{dz} = \pm D K_{\text{Ext}} \left\{ -F^\pm(z) + \omega_0 \left[\frac{1+g}{2} F^\pm(z) + \frac{1-g}{2} F^\mp(z) \right] \right\} + \check{J}^\pm(z) \quad (2.35)$$

Les coefficients spécifiques du modèle 2-flux avec l'approximation de la quadrature sont donc définis par les relations suivantes [22] :

$$\gamma_+ = D K_{\text{Ext}} \left(1 - \omega_0 \frac{1+g}{2} \right) \quad (2.36)$$

$$\gamma_- = D K_{\text{Ext}} \omega_0 \frac{1-g}{2} \quad (2.37)$$

On peut noter qu'on obtient le même résultat avec un champ de luminance quelconque en supposant que la fonction de phase est constituée de deux pics de diffusion opposés selon la relation [20] [24] :

$$P(\cos \Theta) = (1+g) \delta(\cos \Theta - 1) + (1-g) \delta(1 + \cos \Theta) \quad (2.38)$$

Une étude de Fu *et al.* [22] sur l'émissivité des nuages dans l'IR suggère que la valeur du facteur de diffusivité optimal (c'est-à-dire donnant un résultat comparable en terme de flux à celui issu d'un modèle de transfert radiatif de référence) dépend de la structure angulaire du champ de luminance du milieu étudié. En effet, dans le modèle 2-flux, le schéma de quadrature a deux rôles : évaluer l'intégrale de diffusion et calculer les flux hémisphériques. Le schéma le plus simple, défini avec le facteur de diffusivité $D = 1$, est utilisé pour évaluer la luminance normale à la surface du milieu étudié. Pour déterminer les flux hémisphériques, il est possible d'utiliser une quadrature de Legendre-Gauss ($D = \sqrt{3}$) ou encore le schéma hémisphérique moyen ($D = 2$) [22]. Ce dernier a l'avantage de donner la valeur exacte des

flux lorsque le champ de luminance est isotrope comme pour les milieux émissifs optiquement épais. La valeur retenue par Fu *et al.* [22] est $D = 1.66$ qui permet d'évaluer avec une bonne précision le rayonnement issu d'un milieu « plans parallèles » non diffusant proche des scènes atmosphériques. D'après ces auteurs, ce schéma peut induire des erreurs importantes pour les milieux optiquement fins. D'après une étude de Li [25] sur la propagation du rayonnement IR (thermique) à travers les différentes couches de l'atmosphère (jusqu'à 20 km d'altitude), la valeur optimale du facteur de diffusivité serait $D = e^{1/2} = 1,649\dots$ qui est très proche (à 0.68 % près) de celle suggérée par Fu *et al.* [22]. Cette discrétisation angulaire est caractérisée par un moment m d'ordre infini vérifiant la relation [25] :

$$2 \int_0^1 f(\mu) \mu d\mu = \lim_{m \rightarrow +\infty} \left[(m+1) \int_0^1 f(x^{(m+1)/2}) x^m dx \right] = f\left(\frac{1}{D}\right) \quad (2.39)$$

où $f(\mu)$ est une fonction de l'angle zénithal telle que la luminance. Cette valeur du facteur de diffusivité a été utilisée par Li et Fu [26] dans un modèle 2-flux prenant en compte la diffusion. Dans leurs études, ces différents auteurs ont donc souhaité donner un sens mathématique au facteur de diffusivité. Dans la suite de ce paragraphe, on va chercher à donner un sens physique à cette grandeur.

Pour cela, on examine en premier lieu le cas d'un milieu « plans parallèles » homogène et non diffusant « éclairé » par un « sol » de type lambertien. Le champ de luminance obéit à la relation suivante (loi de Lambert) :

$$R(\tau, \mu) = R(0, \mu) e^{-\tau/\mu} = 2\pi R(0; \mu, \phi) e^{-\tau/\mu} \quad (2.40)$$

Pour un milieu « plans parallèles » émissif non diffusant, la relation (2.40) devient :

$$R(\tau, \mu) = 2\pi J_0 \left(1 - e^{-\tau/\mu} \right) \quad (2.41)$$

où J_0 est la fonction source homogène et isotrope du milieu. Les flux hémisphériques normalisés de ce type de milieu sont donnés, en introduisant (2.40) et (2.41) dans (2.18), par les relations suivantes :

$$\text{Milieu transmissif + sol lambertien : } T(\tau) = \frac{F^+(\tau)}{R_0} = 2\pi \int_0^1 e^{-\tau/\mu} \mu d\mu \quad (2.42)$$

Milieu émissif :
$$E(\tau) = \frac{F^+(\tau)}{J_0} = 2\pi \int_0^1 \left(1 - e^{-\tau/\mu}\right) \mu d\mu \quad (2.43)$$

Comme ces intégrales n'ont pas de solution analytique évidente, elles ont été évaluées numériquement au moyen d'une quadrature de Legendre-Gauss définie avec $N_\mu = 74$. Le facteur de diffusivité idéal D peut être évalué en résolvant les équations suivantes obtenues par comparaison des intégrales (2.42) et (2.43) avec la représentation des flux définie par la relation (2.32) :

Milieu transmissif + sol lambertien :
$$\frac{e^{-D\tau}}{D} = \int_0^1 e^{-\tau/\mu} \mu d\mu \quad (2.44)$$

Milieu émissif :
$$\frac{1 - e^{-D\tau}}{D} = \int_0^1 \left(1 - e^{-\tau/\mu}\right) \mu d\mu \quad (2.45)$$

La Figure 2.3 représente l'évolution du facteur de diffusivité idéal en fonction de l'épaisseur optique de ces différents milieux « plans parallèles » non diffusants.

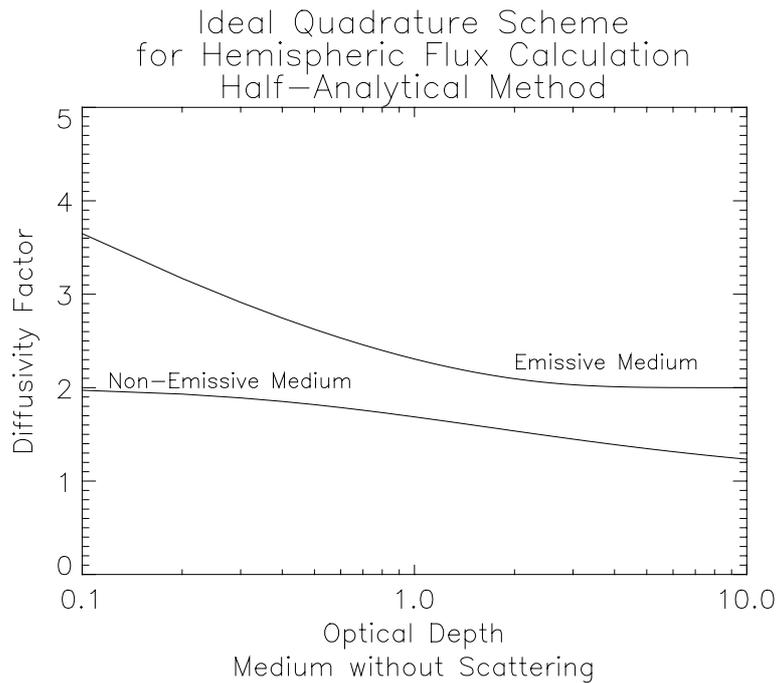


Figure 2.3 - Evolution du facteur de diffusivité idéal pour des milieux « plans parallèles » non diffusants en fonction de l'épaisseur optique

Pour un milieu homogène transmissif et non diffusant, le facteur de diffusivité idéal prend la valeur $D = 2$ lorsque l'épaisseur optique est faible. Dans le cas des milieux épais, ce facteur tend vers 1. Lorsque le milieu est émissif et non diffusant, ces valeurs limites sont de l'ordre de 4 pour un milieu mince et de l'ordre de 2 pour les milieux épais. La Figure 2.4

représente la courbe polaire de la dépendance angulaire normalisée du champ de luminance de différents milieux non diffusants.

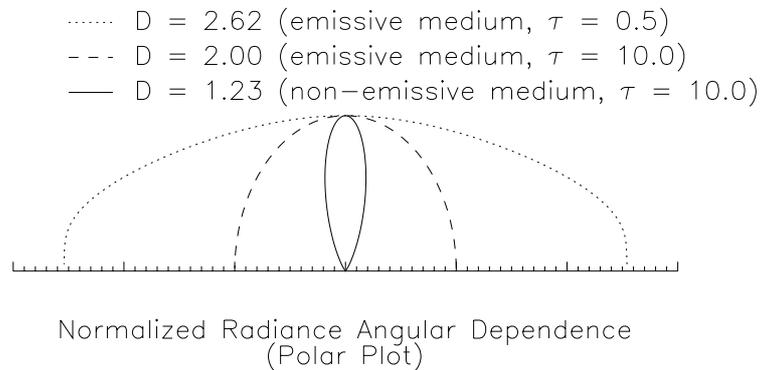


Figure 2.4 - Courbe polaire de la dépendance angulaire normalisée du champ de luminance de différents milieux non diffusants

Le facteur de diffusivité idéal reflète la structure angulaire du champ de luminance. Ainsi, lorsque le facteur de diffusivité idéal prend la valeur $D = 2$, le champ de luminance est lambertien. Cette situation se rencontre lorsque le milieu est non-émissif et mince, *i.e.* transparent ou qu'il est émissif et épais. Lorsque le milieu est épais et non-émissif, le milieu atténue beaucoup moins fortement le rayonnement provenant de la direction normale à la surface du milieu ($\mu \approx 1$) que celui se propageant suivant les autres directions. Les directions utiles à l'évaluation de l'intégrale dans le calcul du flux hémisphérique sont, de ce fait, restreintes au voisinage de la direction normale. Le champ de luminance est donc piqué vers l'avant et le facteur de diffusivité est proche de 1. Au contraire, quand la courbe polaire de dépendance angulaire est aplatie, le facteur de diffusivité est supérieur à 2. Ces valeurs sont obtenues pour des milieux fins et émissifs puisque l'émissivité croît avec la longueur de milieu traversée.

Les valeurs du facteur de diffusivité proposées par Fu *et al.* [22] et de Li [25] pour la propagation du rayonnement infrarouge dans l'atmosphère, sont proches du cas des milieux non émissifs éclairés par un sol lambertien puisque, dans ce domaine spectral, l'atmosphère est illuminée par ses couches basses et par la terre même si le système « terre + atmosphère » est loin de constituer un ensemble homogène. Le facteur de diffusivité optimal dans les jets ou les enceintes chaudes telles que les fours, correspondra au cas des milieux émissifs. Ainsi, le paramétrage de l'approximation de la quadrature dépend fortement du type de milieu étudié et le choix du facteur de diffusivité est essentiellement empirique.

Kubelka et Munk [27] [28] ont proposé une autre formulation du modèle 2-flux qui s'exprime par les relations :

$$\frac{dF^+(z)}{dz} = -(K + S)F^+(z) + SF^-(z) + \check{J}^+(z) \quad (2.46)$$

$$\frac{dF^-(z)}{dz} = (K + S)F^-(z) - SF^+(z) - \check{J}^-(z) \quad (2.47)$$

La constante K représente l'absorption et S la diffusion arrière. Par comparaison avec la relation (2.19), les coefficients des relations (2.46) et (2.47) peuvent s'écrire :

$$K = \tilde{D} K_{\text{Abs}} = \gamma_+ - \gamma_- \quad (2.48)$$

$$S = B K_{\text{Diff}} = \gamma_- \quad (2.49)$$

où \tilde{D} représente le facteur d'anisotropie des flux et B le facteur de diffusion arrière. Au cours d'une étude sur la propagation du rayonnement à travers des milieux denses (peintures, plastiques...) plaqués sur une paroi réfléchissante, Mudgett *et al.* [27] ont constaté que, lorsque l'épaisseur optique de diffusion était égale à $\hat{\tau} = \omega_0 \tau = 50$, la valeur du facteur d'anisotropie était très proche de $\tilde{D} \approx 2$. Ce cas correspond à la situation où le champ de luminance est lambertien comme l'a montré notre étude sur le facteur de diffusivité idéal de l'approximation de la quadrature. La valeur du facteur de rétrodiffusion dépend des propriétés de la fonction de phase et elle est déterminée empiriquement selon la relation suivante :

$$B \approx \frac{3}{4} \omega_0 (1 - g) \quad (2.50)$$

Le facteur B n'est pas compatible avec l'approximation de la quadrature puisque, selon celle-ci, ce dernier devrait valoir $\omega_0 (1 - g)$. Ces résultats ne peuvent être étendus aux jets puisque les applications pour lesquelles cette formulation a été développée, sont très différentes de ce type de milieu.

2.4.1.3. La méthode d'Eddington

La méthode d'Eddington [23] permet d'obtenir rapidement une estimation du champ de luminance et des flux hémisphériques des milieux « plans parallèles. » Elle repose sur l'hypothèse d'anisotropie linéaire de la fonction de phase et du champ de luminance par rapport à $\mu = \cos \theta$ suivant les relations [20] :

$$\text{Champ de luminance :} \quad R(z, \mu) = R_0(z) + R_1(z)\mu \quad (2.51)$$

Fonction de phase :
$$P(\cos \Theta) = 1 + 3g \cos \Theta \quad (2.52)$$

Le terme $R_0(z)$ est la composante isotrope du champ de luminance tandis que $R_1(z)$ représente sa dépendance linéairement anisotrope. Si la définition des flux hémisphériques (relation (2.18)) est appliquée à l'hypothèse (2.51), ceux-ci sont reliés au champ de luminance par la relation :

$$R(z, \mu) = \frac{1}{2} \left[(2 + 3\mu)F^+(z) + (2 - 3\mu)F^-(z) \right] \quad (2.53)$$

L'avantage de cette formulation est d'utiliser seulement deux grandeurs (flux montants et descendants) pour caractériser entièrement le champ de luminance. L'angle de diffusion est donné par la relation :

$$\cos \Theta = \cos \theta' \cos \theta + \sin \theta' \sin \theta \cos \Delta\phi \quad (2.54)$$

avec $\Delta\phi = \phi' - \phi$. Par conséquent, l'intégrale de diffusion s'écrit :

$$\begin{aligned} & \frac{\omega_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^\pi P(\cos \theta', \phi', \pm \cos \theta, \phi) R(z; \cos \theta', \phi') d(\cos \theta') \\ &= \frac{\omega_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^\pi \left[1 + 3g \left(\begin{array}{c} \cos \theta' \cos \theta \\ + \sin \theta' \sin \theta \cos \Delta\phi \end{array} \right) \right] \frac{R_0(z) + R_1(z) \cos \theta'}{2\pi} d(\cos \theta') \\ &= \frac{\omega_0}{2} \int_0^\pi [1 + 3g (\cos \theta' \cos \theta)] \frac{R_0(z) + R_1(z) \cos \theta'}{2\pi} d(\cos \theta') \\ &+ \frac{\omega_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} \underbrace{\left(\begin{array}{c} \overbrace{\cos \phi' \cos \phi}^{\cos \Delta\phi = \cos(\phi' - \phi)} \\ + \sin \phi' \sin \phi \end{array} \right)}_{\equiv 0} d\phi' \int_0^\pi 3g \sin \theta' \sin \theta \frac{R_0(z) + R_1(z) \cos \theta'}{2\pi} d(\cos \theta') \\ &= \frac{\omega_0}{2} \int_{-1}^1 \underbrace{(1 + 3g \mu' \mu)}_{P(\mu', \mu)} \frac{R_0(z) + R_1(z) \mu'}{2\pi} d\mu' \\ & \quad \text{(fonction de phase zénithale)} \\ &= \frac{\omega_0}{2\pi} [R_0(z) + g R_1(z) \mu] \end{aligned} \quad (2.55)$$

D'après cette dernière relation l'intégrale de diffusion n'est fonction que de la coordonnée zénithale de la luminance. Cette réduction de la dépendance angulaire est liée à l'axisymétrie du champ de luminance et de la fonction de phase. C'est pourquoi, il est possible d'utiliser une fonction de phase zénithale notée :

$$P(\mu', \mu) = 1 + 3g \mu' \mu \quad (2.56)$$

comme ceci est réalisé sur le Tableau 2.1. En terme de flux, l'intégrale de diffusion peut s'écrire :

$$\begin{aligned}
& \frac{\omega_0}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^1 [R_0(z) \pm g R_1(z) \mu] \mu d\mu \\
&= \omega_0 \left[\frac{1}{2} R_0(z) \pm \frac{1}{3} g R_1(z) \right] \\
&= \frac{\omega_0}{4} [(4 \pm 3g)F^+(z) + (4 \mp 3g)F^-(z)]
\end{aligned} \tag{2.57}$$

L'équation de transfert radiatif se ramène donc à celle d'un modèle 2-flux (2.19) dont les coefficients spécifiques sont :

$$\gamma_+ = K_{\text{Ext}} \frac{7 - \omega_0(4 + 3g)}{4} \tag{2.58}$$

$$\gamma_- = -K_{\text{Ext}} \frac{1 - \omega_0(4 - 3g)}{4} \tag{2.59}$$

L'intérêt de cette méthode, par rapport à un modèle 2-flux classique, est que l'approximation au premier ordre faite sur le champ de luminance et la fonction de phase permet de s'affranchir du problème du choix du schéma de quadrature. Toutefois, lorsque $g > (4\omega_0 - 1)/(3\omega_0)$ (soit $\omega_0 < 1/4$ pour tout $g > 0$), ce modèle n'est plus fiable car la réflectivité des milieux « plans parallèles » devient négative [20]. De plus, la dépendance angulaire du champ de luminance n'est pas décrite suffisamment finement par la méthode d'Eddington pour les milieux hétérogènes tels que les jets de moteurs-fusées.

La méthode « Delta-Eddington » [29] permet de reconditionner la fonction de phase lorsque cette dernière est très piquée. Dans ce cas, la fonction de phase est décrite comme la somme d'un pic avant et d'une fonction linéairement anisotrope représentant les phénomènes de diffusion latérale suivant la relation :

$$P(\cos \Theta) = 4\pi f \delta(\cos \Theta - 1) + (1 - f)(1 + 3\tilde{g} \cos \Theta) \tag{2.60}$$

Le facteur f correspond au terme d'ordre 2 du développement de la fonction de phase en série de polynômes de Legendre (cf. annexe : la méthode Delta- M § 9.4). Le paramètre d'asymétrie est égal à :

$$g = \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi P(\cos \Theta) \cos \Theta d(\cos \Theta) = f + (1 - f)\tilde{g} \tag{2.61}$$

Le paramètre d'asymétrie renormalisé \tilde{g} dépend donc des valeurs respectives de g et f selon la relation :

$$\tilde{g} = \frac{g - f}{1 - f} \quad (2.62)$$

La prise en compte du pic avant dans l'intégrale de diffusion revient à retrancher $f K_{\text{Diff}}$ au coefficient d'absorption selon la relation :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} R_\lambda(z, \Omega) &= K_{\text{Ext}} \left[-R(z, \Omega) + \frac{\omega_0}{4\pi} \int_{4\pi} \left[4\pi f \delta(\cos \Theta - 1) + (1 - f)(1 + 3\tilde{g} \cos \Theta) \right] R(z, \Omega') d\Omega' \right] \\ &\quad + \tilde{J}(z, \mu) \\ &= K_{\text{Ext}} \left[- (1 - f \omega_0) R(z, \Omega) + \frac{\omega_0}{4\pi} (1 - f) \int_{4\pi} (1 + 3\tilde{g} \cos \Theta) R(z, \Omega') d\Omega' \right] + \tilde{J}(z, \mu) \end{aligned} \quad (2.63)$$

Cette nouvelle forme de l'ETR correspond à celle d'une méthode d'Eddington classique dont les paramètres de diffusion auraient été remplacés par :

$$\text{Coefficient d'extinction :} \quad \tilde{K}_{\text{Ext}} = (1 - f \omega_0) K_{\text{Ext}} \quad (2.64)$$

$$\text{Epaisseur optique :} \quad d\tilde{\tau} = (1 - f \omega_0) d\tau \quad (2.65)$$

$$\text{Albédo de diffusion simple :} \quad \tilde{\omega}_0 = \frac{1 - f}{1 - f \omega_0} \omega_0 \quad (2.66)$$

Les coefficients γ_+ et γ_- de la relation (2.19) sont donc donnés par :

$$\gamma_+ = \tilde{K}_{\text{Ext}} \frac{7 - \tilde{\omega}_0(4 + 3\tilde{g})}{4} \quad (2.67)$$

$$\gamma_- = -\tilde{K}_{\text{Ext}} \frac{1 - \tilde{\omega}_0(4 - 3\tilde{g})}{4} \quad (2.68)$$

Une autre approximation de ce type proposée par Meador et Weaver [20], décrit la dépendance de la luminance comme la somme d'une fonction linéairement anisotrope et d'un pic avant selon la relation :

$$\text{Si } \mu > 0, R(z, \pm\mu) = \frac{1}{1 - g^2(1 - \mu_0)} \left[(1 - g^2) \left[\begin{aligned} &\left(1 \pm \frac{3}{2}\mu\right) F^\pm(z) \\ &+ \left(1 \mp \frac{3}{2}\mu\right) F^\mp(z) \end{aligned} \right] + g^2 \delta(\mu \pm \mu_0) F^\pm(z) \right] \quad (2.69)$$

Cette forme hybride constitue une variante du modèle 4-flux dont la composante μ_0 correspond à un rayonnement incident collimaté. La fonction de phase est celle donnée par la relation (2.52). Dans ce cas, les coefficients de la relation (2.19) sont donnés par [20] :

$$\gamma_+ = K_{\text{Ext}} \frac{7 - 3g^2 - \omega_0(4 + 3g) + \omega_0 g^2 [2 + 3g(1 - \mu_0)]}{4[1 - g^2(1 - \mu_0)]} \quad (2.70)$$

$$\gamma_- = -K_{\text{Ext}} \frac{1 - g^2 - \omega_0(4 - 3g) - \omega_0 g^2 [2 - 3g(1 - \mu_0)]}{4[1 - g^2(1 - \mu_0)]} \quad (2.71)$$

D'après les cas test réalisés par ces auteurs [20], cette formulation est la mieux adaptée au calcul de la réflexion d'un rayonnement solaire collimaté (absent pour les jets dans l'UV). Cependant, la dépendance angulaire du champ de luminance exprimée par la relation (2.69) est mal adaptée aux fonctions sources isotropes.

2.4.1.4. Limitations du modèle 2-flux

Le modèle 2-flux permet d'évaluer l'énergie radiative échangée entre différents milieux « plans parallèles ». Il faut toutefois prendre garde à la façon dont est évaluée la dépendance angulaire du champ de luminance et de la fonction de phase. En effet, les approximations utilisées sont empiriques et les résultats obtenus doivent être compris comme des estimations. Le tableau suivant en résume les principales limitations.

Formulation	Source de rayonnement	Limitations particulières
Quadrature	Collimatée et isotrope	La précision des résultats dépend de la direction choisie pour résoudre l'ETR ainsi que du type de milieu étudié.
Eddington	Collimatée et isotrope	La description de la dépendance angulaire de la luminance et de la fonction de phase est trop pauvre pour pouvoir représenter correctement le rayonnement émis par un milieu hétérogène comme un jet de moteur-fusée. Le paramètre d'asymétrie et l'albédo de diffusion simple doivent vérifier la condition $g < (4\omega_0 - 1)/(3\omega_0)$.
Eddington hybride	Collimatée	La description de la dépendance angulaire de la luminance et de la fonction de phase est mal adaptée aux sources de rayonnement isotropes (émission de chimiluminescence des gaz et rayonnement thermique des particules).

Tableau 2.2 – Limitations majeures des principales formulations du modèle 2-flux

Pour les calculs de luminance émise normalement à la surface de milieux « plans parallèles », une étude de l'*Air Force Rocket Propulsion Laboratory (USAF/AFRPL)* [6]

indique que, lorsque l'épaisseur optique du milieu est importante, il devient nécessaire de tenir compte de la diffusion latérale qu'ignore, par construction, le modèle 2-flux. De plus, ce dernier est mal adapté aux milieux hétérogènes puisqu'il ne peut pas prendre en considération l'influence de l'environnement extérieur aux lignes de visée selon lesquelles l'ETR est résolue.

2.4.2. Modèle 6-flux

Les phénomènes de diffusion latérale sont à l'origine du couplage de toutes les directions de propagation du rayonnement entre elles. La façon la plus simple de prendre en compte ce phénomène dans un milieu 3D est d'échantillonner la propagation du rayonnement selon les trois axes d'un repère orthonormé. Dans ce cas, la dénomination « modèle 6-flux » est employée et l'ETR a pour forme [6] :

$$\left. \frac{d R(\mathbf{s}, \mathbf{x}_i)}{d x_i} = K_{\text{Ext}} \left[\begin{array}{l} -R(\mathbf{s}, \mathbf{x}_i) \\ + \omega_0 \left[\begin{array}{l} f R(\mathbf{s}, \mathbf{x}_i) \\ + b R(\mathbf{s}, \mathbf{x}_{-i}) + c \sum_{|j| \neq |i|} R(\mathbf{s}, \mathbf{x}_j) \end{array} \right] \end{array} \right] \right\} + \check{J}(\mathbf{s}, \mathbf{x}_i) \quad (2.72)$$

$i = -3, \dots, -1, 1, \dots, 3$

où les \mathbf{x}_i représentent les directions de propagation orthogonales deux à deux pour des valeurs de $|i|$ différentes et telles que $\mathbf{x}_{-i} = -\mathbf{x}_i$. Dans un repère cartésien, elles sont définies d'après le tableau suivant :

i	-3	-2	-1	1	2	3
\mathbf{x}_i	$-\mathbf{z}$	$-\mathbf{y}$	$-\mathbf{x}$	\mathbf{x}	\mathbf{y}	\mathbf{z}

Tableau 2.3 – Notations utilisées pour l'ETR du modèle 6-flux (relation (2.72))

Les coefficients f , b et c représentent respectivement les facteurs de diffusion avant, arrière et de côté. La relation de normalisation est donnée par :

$$f + b + 4c = 1 \quad (2.73)$$

Il est possible d'aboutir à la relation (2.73) en supposant :

- Soit que la fonction de phase puisse être représentée par la somme de six pics de Dirac donnée par la relation [30] :

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi} P(\Omega', \Omega) &= \frac{1}{4\pi} P(\cos \Theta, \Phi) \\ &= f \delta(1 - \cos \Theta) + b \delta(1 + \cos \Theta) + c \delta(\cos \Theta) \sum_{n=1}^4 \delta\left(\Phi - (n-1)\frac{\pi}{2}\right) \end{aligned} \quad (2.74)$$

où Φ représente la dépendance azimutale de la fonction de phase. Cette variable réapparaît afin de permettre la représentation des quatre directions selon lesquelles le rayonnement est diffusé latéralement. Le paramètre d'asymétrie s'écrit alors :

$$g = f - b \quad (2.75)$$

Comme dans le cas du modèle 2-flux, ces paramètres de diffusion doivent être ajustés selon la nature du problème. Par exemple, une fonction de phase isotrope est définie avec les paramètres suivants :

$$f = b = c = \frac{1}{6} \quad (2.76)$$

Ces facteurs de diffusion peuvent être évalués à partir d'une fonction de phase réaliste selon les approximations de Chu et Churchill [31], données à un facteur de normalisation près, par les relations suivantes :

$$\left. \begin{array}{l} f \\ b \end{array} \right\} = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^1 P(\pm \mu', \phi'; 1, \phi) \mu'^2 d\mu' \quad (2.77)$$

Une des limitations de cette approximation est que le paramètre d'asymétrie g n'est pas conservé.

- Soit que le champ de rayonnement est échantillonné selon trois directions suivant la relation :

$$\tilde{R}(\mathbf{s}, \Omega) = \sum_{|i|=1}^3 R_i(\mathbf{s}, \Omega) \delta(\Omega - \mathbf{x}_i) \quad (2.78)$$

Dans ce cas, les facteurs f , b et c représentent les valeurs de la fonction de phase aux différents angles de diffusion selon les relations :

$$f = \frac{P(\cos \Theta = 1)}{P(\cos \Theta = 1) + P(\cos \Theta = -1) + 4P(\cos \Theta = 0)} \quad (2.79)$$

$$b = \frac{P(\cos \Theta = -1)}{P(\cos \Theta = 1) + P(\cos \Theta = -1) + 4P(\cos \Theta = 0)} \quad (2.80)$$

$$c = \frac{P(\cos \Theta = 0)}{P(\cos \Theta = 1) + P(\cos \Theta = -1) + 4P(\cos \Theta = 0)} \quad (2.81)$$

Dans le cas de fonctions de phase semblables à celles rencontrées dans les jets, cette approximation présente toutefois le défaut de surestimer l'influence de la diffusion avant lorsque la fonction de phase est fortement piquée et de majorer le paramètre d'asymétrie.

A la différence du modèle 2-flux, la forme des solutions dépend de la géométrie du milieu étudié. Dans les paragraphes ci-dessous, trois géométries ont été envisagées : le cas « plans parallèles », les cylindres infinis et les milieux 3D quelconques.

2.4.2.1. Milieux « plans parallèles »

Emslie et Aronson [31] ont mis au point une méthode de résolution explicite pour les milieux « plans parallèles » non émissifs. Dans ce cas, si z est la variable décrivant l'altitude, on peut écrire, du fait de la symétrie du milieu :

$$R_x(z) = R_{-x}(z) = R_y(z) = R_{-y}(z) = \frac{1}{4} R_0(z) \quad (2.82)$$

En introduisant cette relation dans le système différentiel (2.72), on obtient [31] :

$$R_0(z) = \frac{S_c}{K + \frac{1}{2}S_c} [R_z(z) + R_{-z}(z)] \quad (2.83)$$

Avec le changement de paramètre suivant :

$$S_b = K_{\text{Ext}} \omega_0 b \quad (2.84)$$

$$S_c = 4 K_{\text{Ext}} \omega_0 c \quad (2.85)$$

$$K = K_{\text{Ext}} (1 - \omega_0 f) - S_b - S_c \quad (2.86)$$

Et l'ETR pour un milieu non émissif devient [31] :

$$\frac{d R_z(z)}{d z} = -(K' + S') R_z(z) + S R_{-z}(z) \quad (2.87)$$

$$\frac{d R_{-z}(z)}{d z} = (K' + S') R_{-z}(z) - S R_z(z) \quad (2.88)$$

avec :

$$K' = \frac{4 K^2 + 6 K S_c}{4 K + 2 S_c} \quad (2.89)$$

$$S' = \frac{4K S_b + 2S_b S_c + S_c^2}{4K + 2S_c} \quad (2.90)$$

Les équations (2.87) et (2.88) sont semblables à la formulation de Kubelka et Munk [27] [28] (*cf.* relations (2.46) et (2.47)) et la résolution de l'ETR est donc réduite à celle d'un modèle 2-flux. Cependant, cette formulation a tendance à surestimer les phénomènes d'absorption lorsque la fonction de phase est piquée vers l'avant [30]. Afin d'améliorer la précision des résultats, Meador et Weaver [30] répartissent les axes du modèle 6-flux selon une quadrature de Legendre-Gauss et aboutissent à une formulation de type 2-flux. Cependant, ces auteurs remarquent que sous ce type d'hypothèse, il devient difficile de satisfaire correctement les conditions aux limites du problème étudié.

Freeman *et al.* [6] ont développé un modèle 6-flux utilisable pour des milieux « plans parallèles » et pour les milieux cylindriques proches des jets. Dans les géométries « plans parallèles », des hypothèses semblables à la relation (2.82) sont utilisées. Le cas d'un milieu infini horizontalement selon une seule direction est envisagé, à la différence de l'étude d'Emslie et Aronson [31]. Lorsque le milieu est optiquement mince, la formulation du modèle 6-flux de Freeman *et al.* [6] surestime les effets de la diffusion latérale. En revanche, la luminance émise normalement à la surface du milieu est correctement évaluée lorsque le milieu est optiquement épais.

2.4.2.2. Géométries cylindriques et 3D

Viskanta et Mengüç [7] décrivent succinctement une manière de résoudre l'ETR du modèle 6-flux en coordonnées cylindriques. Après quelques manipulations mathématiques, cette équation peut être transformée en un système différentiel du second ordre. Toutefois, la solution de ce système est généralement peu précise.

Pour des milieux cylindriques proches des jets, Freeman *et al.* [6] supposent que les gradients de luminance dans la direction de l'axe sont négligeables. En outre, les auteurs font l'hypothèse que le rayonnement se propageant tangentiellement est directement relié au rayonnement se propageant radialement. Ces hypothèses permettent d'aboutir à une formulation de type 2-flux possédant une solution analytique. Cette dernière dépend exclusivement des coordonnées radiales, ce qui correspond au cas des milieux cylindriques infinis vus de côté. Cependant, par construction, ces méthodes sont inadaptées aux milieux 3D fortement hétérogènes.

Pour ce type de milieu, il est nécessaire de résoudre le système d'équations différentielles du modèle 6-flux en utilisant une méthode itérative où chaque itération se compose de deux étapes essentielles [6] :

1. Intégration spatiale de l'ETR selon les axes du repère utilisé en prenant en compte l'intégrale de diffusion estimée lors de l'itération précédente (*cf.* étape 2). Pour cette opération, il est possible d'utiliser le formalisme du modèle 2-flux sur l'axe considéré afin d'accélérer la convergence des résultats.
2. Evaluation de l'intégrale de diffusion et des conditions aux interfaces entre les cellules définissant le milieu.

Cette démarche peut être utilisée dans le cas de milieux 3D hétérogènes comme les jets. Cependant, elle peut nécessiter un nombre important d'itérations afin de faire converger la solution. Lyons *et al.* [8] [9] ont mis au point un modèle 6-flux de ce type où seule la première itération est effectuée. Dans ce cas, on parle d'approximation de la « diffusion simple ». D'après ces auteurs, les résultats obtenus avec une telle méthode sont compatibles avec une approche Monte-Carlo lorsque le milieu est optiquement mince.

2.4.2.3. Limitations du modèle 6-flux

Les principales limitations des formulations du modèle 6-flux sont présentées dans le tableau ci-dessous.

	Type	Approximation	Limitation
Fonction de phase	Chu et Churchill [31]	$f \left. \vphantom{f} \right\} = \frac{\int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^1 P\left(\pm \mu', \phi'; 1, \phi\right) \mu'^2 d\mu'}{4\pi}$	Adaptée aux fonctions de phase piquées vers l'avant et vers l'arrière. Pas de conservation du facteur d'asymétrie.
	Valeur directe	$f \propto P(\cos \Theta = 1)$ $b \propto P(\cos \Theta = -1)$ $c \propto P(\cos \Theta = 0)$	Si la fonction de phase est trop piquée, les phénomènes de diffusion avant et arrière peuvent être fortement majorés. Pas de conservation du facteur d'asymétrie.
Méthodes de résolution	Méthode exacte [31]	Aucune hormis celle sur la fonction de phase.	Solution limitée aux seuls milieux « plans parallèles » Majoration des phénomènes d'absorption avec une fonction de phase réaliste.
	Freeman <i>et al.</i> [6]	Semblable à la méthode précédente Milieu infini selon une seule direction horizontale	En diffusion isotrope, l'influence de la diffusion latérale est majorée.
Méthode de résolution pour les milieux cylindriques [6]		Gradient axial nul pour la luminance Rayonnement tangentiel relié au rayonnement radial	Réservée aux milieux cylindriques infinis
Méthodes de résolution pour les milieux 3D	Résolution itérative [6]	Aucune hormis celle sur la fonction de phase.	Temps de calcul plus long que par une méthode « explicite » (ou analytique)
	« Diffusion simple » [8] [9]	Même principe que la méthode itérative sauf que le calcul est arrêté à la première itération	Limité aux milieux peu diffusants ou optiquement minces

Tableau 2.4 – Limitations majeures des principales formulations du modèle 6-flux

Chaque formulation du modèle 6-flux correspond à un type de milieu donné et seules les techniques de résolution itératives apparaissent adaptées aux milieux 3D. Néanmoins, la limitation majeure du modèle 6-flux demeure la faiblesse de sa résolution angulaire. C'est pourquoi l'usage du modèle 6-flux est restreint à l'estimation des échanges d'énergie selon trois directions de propagations orthogonales. Ce modèle ne peut être utilisé qu'avec prudence

pour évaluer la dépendance angulaire d'un champ de luminance puisque celle-ci nécessite d'effectuer une rotation du système d'axes $\{\mathbf{x}_i\}_{i=-3, \dots, -1, 1, \dots, 3}$. Pour ces raisons, un nombre important d'erreurs peut apparaître surtout lorsque le milieu est épais ou hétérogène. L'étude de la signature des jets nécessite donc de prendre en compte un nombre de directions plus important pour améliorer la précision des résultats. Les modèles reposant sur ce type d'approximations sont regroupés sous le nom de « méthodes des ordonnées discrètes » (**D**iscrete **O**rdinate **M**ethod) et sont étudiés au paragraphe suivant.

2.5. Les méthodes des ordonnées discrètes

Pour les méthodes des ordonnées discrètes (DOM), le champ de luminance et par conséquent, l'intégrale de diffusion sont échantillonnés angulairement suivant le même schéma de quadrature en tout point du milieu [32] [33] [34] [35]. Si N_0 désigne le nombre de directions réparties sur 4π sr selon lesquelles le rayonnement est calculé, alors l'ETR peut s'écrire sous la forme du système d'équations différentielles suivant :

$$\left\{ (\boldsymbol{\Omega}_i \cdot \nabla) R_\lambda(\mathbf{s}, \boldsymbol{\Omega}_i) = K_{\text{Ext}} \left[-R_\lambda(\mathbf{s}, \boldsymbol{\Omega}_i) + \frac{\omega_0}{4\pi} \sum_{j=1}^{N_0} w_j P(\boldsymbol{\Omega}_j, \boldsymbol{\Omega}_i) R_\lambda(\mathbf{s}, \boldsymbol{\Omega}_j) \right] + \check{J}_\lambda(\mathbf{s}, \boldsymbol{\Omega}_i) \right. \quad (2.91)$$

où w_j est le facteur de poids associé à l'ordonnée discrète $\boldsymbol{\Omega}_j = (\mu_j, \phi_j)$ de cosinus directeurs (ξ_j, η_j, μ_j) liés au système d'axes (x, y, z) . Généralement, ce système différentiel est écrit en coordonnées cartésiennes du fait de son application aux milieux de type atmosphérique [10]. Mais, grâce à des approximations de type volume fini qui permettent de calculer les échanges d'énergie entre les différentes cellules constituant le milieu, il est possible d'utiliser un système de coordonnées curvilinéaires suivant la symétrie du milieu étudié [36]. Toutefois, si on souhaite évaluer la propagation du rayonnement suivant une ligne de visée, alors la discrétisation spatiale et la résolution angulaire sont couplées. Il devient alors très difficile d'évaluer correctement la luminance en prenant en compte l'influence de la diffusion le long du trajet optique lorsque le milieu est fortement hétérogène. Ce point sera approfondi au chapitre suivant dans le cas des repères cylindriques. Ainsi, seuls les modèles de transfert radiatif utilisant un système de coordonnées cartésiennes ont été considérés dans cette étude.

Dans la suite de ce paragraphe, le choix des hypothèses sur la résolution angulaire est discuté et les principales méthodes mathématiques de résolution mises en œuvre dans la littérature sont présentées.

2.5.1. Résolution angulaire : schémas de quadrature utilisés

Les directions angulaires des lignes de propagation du rayonnement (ou ordonnées discrètes) sont données dans l'ensemble du milieu, par une quadrature dépendant du milieu (géométrie...) et du type de résultats souhaités (flux ou luminance). La précision des calculs dépend de la résolution angulaire de ce schéma. En effet, le sous-échantillonnage de la dépendance angulaire des champs de rayonnement est à l'origine des deux sources d'erreurs suivantes :

- « L'effet de rayon » [37], apparaît lorsque les interactions entre certaines cellules d'un milieu ne peuvent pas être prises en compte du fait d'une résolution angulaire trop faible. L'influence de cette source d'erreur est difficile à évaluer puisqu'elle est liée à la géométrie et aux propriétés optiques du milieu étudié.
- L'intégrale de diffusion peut être mal évaluée du fait d'une fonction de phase ou d'un champ de luminance trop anisotrope.

Afin d'évaluer correctement l'intégrale de diffusion, un schéma de quadrature doit obéir, dans la mesure du possible, à un certain nombre de principes de construction pour le cas général 3D [33] :

- A chaque ordonnée discrète Ω_i est associée une ordonnée discrète opposée $-\Omega_i$ de même poids w_i . Cette règle de la symétrie centrale doit nécessairement être respectée puisqu'elle garantit la conservation de l'énergie radiative entre le rayonnement incident et sortant en un point quelconque du milieu.
- Dans la mesure du possible, la quadrature doit être invariante par rotation de 90° des axes principaux du système (x, y, z) de façon à ne pas favoriser une direction de propagation particulière. Dans ce cas, il suffit de construire la quadrature sur un seul octant pour la définir entièrement. Cette condition, plus restrictive que la règle de symétrie centrale, n'est pas toujours vérifiée.

- Pour chaque angle zénithal μ_j , la répartition azimutale des ordonnées discrètes ou nœuds de quadrature est régulière (sauf pour les schémas de quadrature où tous les poids sont égaux entre eux). Le nombre d'azimuts $N_{\phi,j}$ peut dépendre de la valeur de μ_j . Si le poids de quadrature zénithale vaut ω_j , alors celui du nœud $\Omega_i = (\mu_j, \phi_k)$ est $w_i = \omega_j \bar{\omega}_{j,k} = \omega_j \frac{2\pi}{N_{\phi,j}}$.

Les quadratures sont caractérisées par leurs moments d'ordre α où α est un entier positif. Un schéma est dit « de moment α » s'il obéit à la relation suivante [33] :

$$\sum_{\mu_j \geq 0} \omega_j \mu_j^\alpha = \int_0^1 \mu^\alpha d\mu = \frac{1}{\alpha+1} \quad (2.92)$$

Par construction, la condition de normalisation des poids de quadrature est donnée par le moment d'ordre 0. Si le moment d'ordre 1 est respecté, les flux hémisphériques sont correctement estimés par le schéma de quadrature dès lors que le champ de luminance est isotrope.

Du fait de son application à l'étude des atmosphères planétaires, le schéma de Legendre-Gauss [5] est construit en privilégiant un axe noté ici ($z'z$) de façon à prendre en compte les hétérogénéités verticales de ce type de milieu, ce qui implique que le principe d'invariance par rotation n'est pas parfaitement respecté. Dans ce schéma, les μ_j sont les racines du polynôme de Legendre $p_{N_\mu}(\mu)$ de degré N_μ . Comme $p_{N_\mu}(\mu)$ est une fonction paire ou impaire (paire si N_μ est pair, sinon impaire), cette quadrature respecte nécessairement la règle de la symétrie centrale. Cependant, le principe d'invariance par rapport à la rotation des axes impose que N_μ doit être pair. Dans le cas contraire, un des μ_j serait nul et par rotation d'un quart de tour de cette abscisse zénithale, il existerait deux autres μ_j valant respectivement -1 et 1 . Or ces valeurs ne sont racines d'aucun polynôme de Legendre. Les poids de quadrature sont donnés par la relation [5] :

$$\omega_j = \frac{1}{\left(\frac{d p_{N_\mu}(\mu)}{d\mu} \right)_{\mu=\mu_j}} \int_{-1}^1 \frac{p_{N_\mu}(\mu)}{\mu - \mu_j} d\mu \quad (2.93)$$

Les angles azimutaux ϕ_k sont répartis de façon équidistante pour chaque valeur de μ_j . Un tel schéma ne respecte pas le moment de quadrature d'ordre 1. Cependant, plus la résolution angulaire augmente, meilleure est la précision avec laquelle ce moment est évalué. Plus précisément, si $N_\mu = 2, 4, 6$ ou 8 , l'erreur relative sur le moment d'ordre 1 est respectivement égale à 15.5%, 4.3%, 2.0% et 1.2%. En revanche, ce schéma se comporte différemment vis-à-vis du moment d'ordre 2. En effet, ce dernier est défini par la relation :

$$\int_0^1 \mu^2 d\mu \equiv \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \mu^2 d\mu = \frac{1}{3} \quad (2.94)$$

Or, on peut toujours écrire :

$$\mu^2 = p_0(\mu) \frac{p_0(\mu) + 2p_2(\mu)}{3} \quad (2.95)$$

et, par construction :

$$\begin{aligned} \forall m < N_\mu : \\ \forall n < N_\mu : \end{aligned} \quad \int_{-1}^1 p_m(\mu) p_n(\mu) d\mu = \sum_{j=1}^{N_\mu} \omega_j p_m(\mu_j) p_n(\mu_j) = \frac{2}{2m+1} \delta_{m,n} \quad (2.96)$$

On peut déduire de ces trois dernières relations que toutes les quadratures de Legendre-Gauss respectent le moment d'ordre 2.

Parmi les autres quadratures qui sont le plus couramment utilisées, le schéma S_N [34] (où $N = N_\xi = N_\eta = N_\mu$ est pair) génère $N(N+2)$ ordonnées discrètes sur 4π sr. Ce type de schéma de quadrature est défini à partir de ses différents moments. Si les poids de quadrature sont supposés égaux entre eux, les moments de quadrature d'ordres $\{\alpha\}_{\alpha=0 \dots \frac{N}{2}}$ sont respectés et la quadrature S_N est dite « impaire et à poids égaux. » Dans les autres cas, les moments d'ordres $\{2\alpha\}_{\alpha=0 \dots \frac{N}{2}-1}$ sont respectés et la quadrature S_N est dite « paire et à poids symétriques. » Afin d'augmenter la précision des intégrations angulaires, Koch *et al.* [33] ont proposé une généralisation de la quadrature S_N , appelée « *Double Cyclic Triangles* » qui consiste en un ensemble d'arrangements de 1, 3 ou 6 points nodaux par octant obtenus par permutation des cosinus directeurs (ξ_i, η_i, μ_i) selon que respectivement 3, 2 ou aucun de ces cosinus directeurs sont égaux entre eux. Chaque schéma de ce type est défini par l'ordre des moments de quadrature qu'il respecte et par le nombre des arrangements dont il est constitué.

L'intérêt de cette formulation réside dans sa conformité avec l'ensemble des principes de construction cités plus haut.

Afin de mettre en évidence l'évolution de la précision des résultats en fonction de la résolution angulaire, Joumani [38] a calculé à l'aide de différents schémas de quadrature S_N , les flux pariétaux émis par une enceinte carrée optiquement mince, émissive, absorbante et non diffusante de 1 m de côté dont la géométrie est présentée sur la Figure 2.5. Le milieu est supposé infini selon la direction ($y'y$)

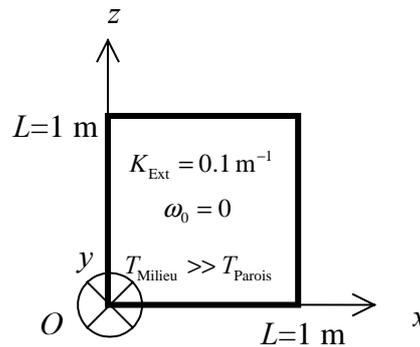


Figure 2.5 – Géométrie d'une enceinte carrée optiquement mince, émissive et absorbante [38]

En raison de l'absence de diffusion, on teste ici la précision du calcul des flux pariétaux. La DOM définie par cet auteur pour résoudre ce problème est une méthode itérative de type « différences finies » dont le principe général est présenté dans la suite de ce chapitre (*cf.* § 2.5.2). Afin d'évaluer la précision de cette méthode, les résultats obtenus ont été comparés avec des données de référence issues de la méthode de zones. La Figure 2.6 représente les flux radiatifs calculés sur une demi-paroi avec un maillage de 50×50 points. Le nombre n se rapporte au schéma de quadrature $S_{N=n}$.

La précision des résultats dépend non seulement de la résolution angulaire mais aussi de la position du point où le rayonnement est calculé. Selon l'emplacement de ce dernier, l'erreur peut augmenter avec la résolution angulaire. Cette erreur est due à l'effet de rayon [37] qui résulte de la combinaison entre la géométrie du milieu étudié (1D, 2D, 3D...) et la qualité de la résolution angulaire du schéma de quadrature. Cet effet de rayon peut même être amplifié lorsque la discrétisation spatiale utilisée est plus fine [39]. Ce comportement provient du couplage entre les erreurs dues à l'effet de rayon et à la fausse diffusion [37] qui provient elle-même d'une discrétisation spatiale insuffisante.

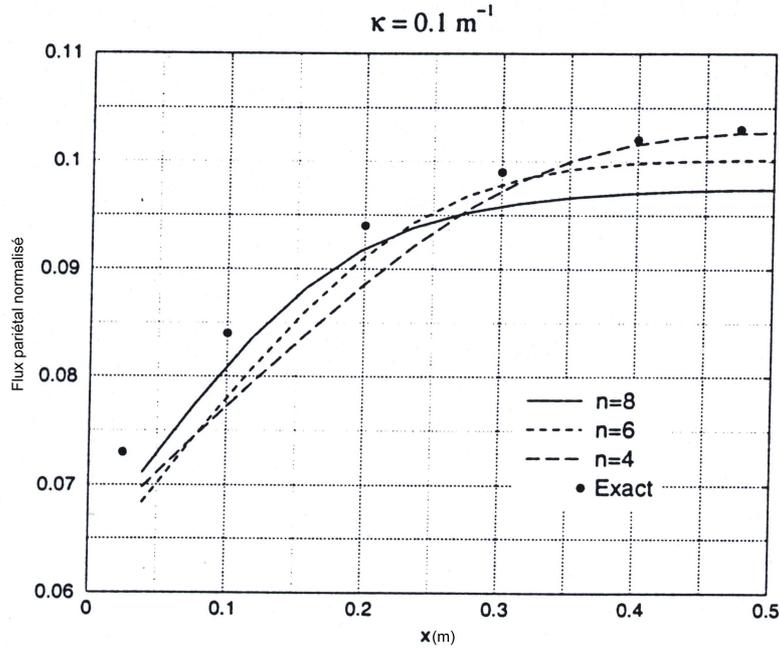


Figure 2.6 – Flux radiatifs pariétaux émis par une enceinte carrée émissive et absorbante (optiquement mince) calculés selon différentes résolutions angulaires (schéma de quadrature $S_{N=n}$, Exact = méthode de zones) [38]

Dans cet exemple, le schéma S_N favorise par construction les directions de propagation horizontales (selon x). Pour cette raison, les contributions des directions verticales sont mal prises en compte et ainsi, les flux pariétaux ne sont pas modélisés correctement au milieu de la paroi. Ce phénomène est amplifié du fait que pour les schémas $S_{N=4,6,8}$ il n'y a que deux directions zénithales inférieures à 45° en valeur absolue. On peut donc en conclure qu'il est difficile de déterminer *a priori* la quadrature optimale permettant d'évaluer avec la meilleure précision le champ de rayonnement issu d'un milieu donné.

2.5.2. Méthodes de résolution

L'ETR de la méthode des ordonnées discrètes (*cf.* relation (2.91)) peut être résolue de deux manières différentes : par inversion matricielle algébrique ou par itérations successives [40]. Chacune de ces approches, dont il existe de nombreuses variantes, a été conçue en fonction d'un milieu particulier (atmosphères planétaires, fours, chambres de combustion...). Le but de ce paragraphe est de discuter de l'adaptabilité de ces approches au calcul de la signature d'un jet de moteur-fusée dans l'UV.

2.5.2.1. Résolution par inversion matricielle algébrique

Dans le cas des milieux « plans parallèles », les nombreuses méthodes de résolution par inversion matricielle algébrique reviennent à transformer l'ETR en un système matriciel différentiel [41]. La solution, obtenue numériquement, est une combinaison linéaire d'une solution particulière et de la solution générale de l'équation matricielle homogène associée [12]. Parmi les différentes techniques d'inversion matricielle existantes, on peut citer la méthode « double Gauss » [35] où le champ de luminance est réparti en deux hémisphères correspondant au rayonnement montant et descendant. Ce découplage partiel de la dépendance angulaire du rayonnement permet de réduire le nombre d'opérations nécessaires à la résolution du système différentiel. Liu *et al.* [19] ont proposé une formulation de la méthode des ordonnées discrètes basée sur la décomposition de la luminance en une somme de fonctions respectivement paires et impaires par rapport à la direction Ω . Cette transformation, appelée *EPF (Even Parity Formulation)*, permet de réécrire l'ETR comme un système différentiel du second ordre. D'après ces auteurs [19], cette formulation ne paraît cependant pas être aussi robuste que la méthode des ordonnées discrètes conventionnelles, compte tenu des temps de calcul et de la précision des résultats obtenus.

La résolution de l'ETR par inversion de matrice est économe en temps de calcul comparée aux autres techniques de résolution telles que la méthode de zones ou la méthode Monte-Carlo [8] [9] [12] [16]. Cette technique de résolution permet de calculer en une seule fois le champ de rayonnement en tout point du milieu. De plus, le temps de calcul ne dépend pas de l'influence de la diffusion dans le milieu. Cependant, les solutions deviennent instables pour les fonctions de phase fortement piquées vers l'avant [12] même si le reconditionnement de l'ETR à l'aide de la méthode Delta- M [42] permet de réduire ces instabilités. Enfin, ces méthodes sont essentiellement adaptées aux milieux dont la géométrie est simple, tels que les milieux « plans parallèles » représentant les atmosphères planétaires. Pour ces raisons, dans les milieux 3D fortement hétérogènes, on utilise plutôt des méthodes reposant sur la convergence de solutions numériques obtenues par itérations successives.

2.5.2.2. Méthodes numériques de résolution par itérations successives

Dans les méthodes numériques de résolution par itérations successives, l'ETR est résolue selon les étapes suivantes [38] [40] [43] [44] [45] :

1. L'ETR est intégrée spatialement suivant chacune des ordonnées discrètes sans tenir compte de l'intégrale de diffusion, ce qui permet l'initialisation du système.

2. L'intégrale de diffusion est évaluée à partir du champ de luminance calculé lors de l'étape précédente.
3. L'ETR est intégrée spatialement suivant toutes les ordonnées discrètes en tenant compte de l'intégrale de diffusion calculée lors de l'étape précédente.
4. Les étapes 2 et 3 sont poursuivies jusqu'à ce que les résultats convergent suivant un critère prédéfini.

Chaque itération ajoute un ordre de diffusion dans l'évaluation de la propagation du rayonnement dans le milieu, puisque la diffusion du rayonnement est évaluée à partir du champ de luminance calculé lors de l'étape précédente. C'est pourquoi, cette démarche porte le nom de « solution par ordres de diffusion successifs » (Successive Order Scattering Method) [43]. Le temps de calcul des méthodes de type SOS dépend du nombre d'itérations ; celui-ci augmente avec le caractère diffusant du milieu étudié [43].

Les méthodes SOS sont caractérisées par les techniques qu'elles utilisent pour effectuer l'intégration spatiale de l'ETR le long des ordonnées discrètes (étapes (1) et (3)). La méthode par différences finies permet d'obtenir simultanément une bonne description angulaire et spatiale du champ de rayonnement, c'est pourquoi elle paraît être bien adaptée au calcul d'une signature de jet. Dans l'exemple proposé par Sánchez *et al.* [45] pour les milieux atmosphériques, la grille de propriétés du milieu est discrétisée en volumes élémentaires (ou « cellules ») de forme parallélépipédique rectangle, auxquels sont associés un coefficient d'extinction, un albédo de diffusion simple, une fonction de phase et une fonction source. Pour une ordonnée discrète, il est possible de définir pour chaque cellule des « faces d'entrée » d'où provient l'énergie radiative traversant la cellule, et des « faces de sortie » où parvient le rayonnement. Le champ de luminance est supposé uniforme sur chaque face. La Figure 2.7 représente ces différentes faces pour une ordonnée discrète arbitraire.

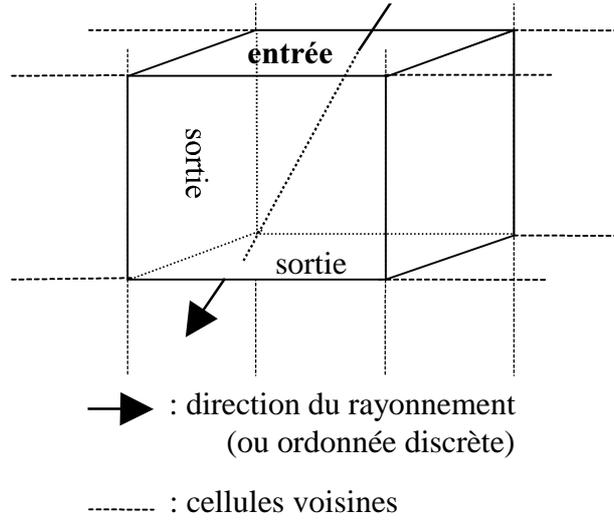


Figure 2.7 - Représentation, pour une ordonnée discrète arbitraire, des faces d'entrée et de sortie du rayonnement traversant une cellule [45]

On cherche à déterminer le champ de luminance sortant de chaque cellule. Les grandeurs radiatives disponibles sont le champ de luminance entrant et la fonction source moyenne de la cellule étudiée. L'ETR est résolue en utilisant l'approximation, dite « des différences finies », donnée par la relation :

$$\begin{aligned} & \xi_i \frac{R(\mathbf{s}_s^x, \Omega_i) - R(\mathbf{s}_e^x, \Omega_i)}{\Delta x} \\ & + \eta_i \frac{R(\mathbf{s}_s^y, \Omega_i) - R(\mathbf{s}_e^y, \Omega_i)}{\Delta y} \\ & + \mu_i \frac{R(\mathbf{s}_s^z, \Omega_i) - R(\mathbf{s}_e^z, \Omega_i)}{\Delta z} = -K_{\text{Ext}} R(\mathbf{s}_C, \Omega_i) + \hat{J}(\mathbf{s}_C, \Omega_i) \end{aligned} \quad (2.97)$$

avec les notations suivantes :

- \mathbf{s}_s^k désigne la face de sortie normale à l'axe \mathbf{k} ($\mathbf{k} = \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}$) ;
- \mathbf{s}_e^k représente la face d'entrée normale à ce même axe ;
- \mathbf{s}_C désigne la position de la cellule. Toutes les variables dépendant de cette grandeur doivent être entendues comme des valeurs moyennes relatives à la cellule considérée.

Le champ interne moyen de luminance $R_\lambda(\mathbf{s}_C, \Omega_i)$ est évalué par interpolation linéaire du champ de luminance de chacune des faces de la cellule suivant la relation :

$$R(\mathbf{s}_C, \Omega_i) = a R(\mathbf{s}_s^k, \Omega_i) + (1 - a) R(\mathbf{s}_e^k, \Omega_i) \quad (2.98)$$

où a est un coefficient d'interpolation. D'après Fiveland [34] et Sánchez *et al.* [45], la valeur généralement choisie est $a = 1/2$. Cependant, selon Fiveland [34], plus il y a d'ordonnées discrètes, plus les mailles de la grille de propriétés doivent être fines. Si le maillage est trop large, il est possible qu'apparaissent des artefacts numériques (luminances négatives...). Par exemple, pour le schéma de quadrature S_2 (où $N = 2$ représente le nombre d'angles zénithaux), l'épaisseur optique élémentaire des couches constituant un milieu « plans parallèles » ne doit pas dépasser la valeur $\Delta\tau = 1$ [34] tandis que pour le schéma de quadrature impair de type S_3 , cette limite supérieure devient $\Delta\tau = 0.205$ [34]. Selon Sánchez *et al.* [45], une autre solution consiste à poser $a = 1$. En effet, cette nouvelle formulation évite les instabilités numériques rencontrées lorsque $a = 1/2$ tout en restant en bon accord avec les résultats de référence. Ce type d'interpolation est donc assez bien adapté aux géométries 2D et 3D où il est difficile de contrôler l'épaisseur optique de chaque cellule. L'utilisation de la solution formelle de l'ETR [4] permet cependant d'éviter les artefacts numériques induits par l'approximation des différences finies. Cette solution est donnée par la relation :

$$R(\mathbf{s}, \Omega) = R(0, \Omega) \exp\left[-\int_0^s K_{\text{Ext}} ds'\right] + \int_0^s \exp\left[-\int_{s'}^s K_{\text{Ext}} ds''\right] J(\mathbf{s}', \Omega) K_{\text{Ext}} ds' \quad (2.99)$$

Les résultats obtenus avec une telle formulation mise au point par Tofsted et O'Brien [46] (dite des « éléments finis »), sont très proches de ceux issus d'un code Monte-Carlo de référence pour des milieux atmosphériques « plans parallèles », gris et éclairés par un rayonnement solaire ou lunaire. Dans cette approche, les cellules sont divisées en plusieurs zones d'influences selon la direction de propagation du rayonnement considérée. Ceci permet de décrire plus fidèlement les interactions entre les parois des cellules.

La formulation intégrale de l'ETR (équation (2.99)) peut aussi être utilisée dans la méthode du « lancer de rayons » où l'on étudie la propagation du rayonnement suivant des directions discrètes réparties selon le schéma de quadrature prédéfini [47].

Sánchez *et al.* [45] ont effectué des cas test dans de nombreux milieux en géométrie 1D, 2D et 3D pour des fonctions de phase isotropes, linéairement anisotropes ou des fonctions de phase de gouttelettes d'eau avec des sources de rayonnement isotropes, « lambertiennes » ou collimatées. Les résultats tendent à montrer que les méthodes des ordonnées discrètes résolues par différences finies peuvent être utilisées dans un nombre varié de milieux (1D, 2D ou 3D) même optiquement épais ou hétérogènes avec une bonne précision. Cependant, ce

type de méthode est généralement conçu pour calculer les échanges d'énergie radiative en terme de flux hémisphériques au sein de l'atmosphère ou d'enceintes chaudes tels que les fours ou les chambres de combustion. En conséquence, il est impossible de calculer la luminance selon d'autres directions que celles de la quadrature utilisée, ce qui diminue la souplesse d'utilisation de ces modèles de transfert radiatif pour le calcul de la signature des jets.

2.5.3. Conclusion

Dans une synthèse exhaustive, Vaillon [47] a classé différentes DOM selon le schéma de quadrature, la géométrie du maillage du milieu et la méthode d'intégration spatiale de l'ETR. Le tableau suivant présente les différents critères de classification des DOM présentées dans ce chapitre.

Schéma de quadrature	Gauss-Legendre [5] DCT [33] S_N [34]
Géométrie du maillage du milieu	Curviligne [36] Cartésien [45]
Méthode d'intégration spatiale de l'ETR	Différences finies [45] Eléments finis [46] Lancer de rayons (solution intégrale) [47]

Tableau 2.5 – Caractéristiques principales des méthodes des ordonnées discrètes

Les avantages ainsi que les limitations majeures des méthodes des ordonnées discrètes sont récapitulés sur le tableau suivant selon leurs modes de résolution.

	Avantages	Limitations
Méthodes par inversion matricielle algébrique	Calcul immédiat de la solution Bonne précision des résultats	Limitées aux géométries simples (1D) Ligne de visée horizontale exclue Instabilités numériques possibles pour des fonctions de phase trop piquées vers l'avant (solution possible : la méthode Delta- M)
Méthodes numériques de résolution par itérations successives	Bonne précision des résultats Fonctionnent avec toutes les géométries	Nécessitent parfois de nombreuses itérations (milieu très diffusant) Instabilités numériques induites par le schéma d'interpolation spatiale

Tableau 2.6 – Limitations majeures des différentes DOM

A ce tableau, on peut ajouter que les DOM ne permettent pas de calculer directement la luminance selon d'autres directions que celles définies par le schéma de quadrature. Les seules DOM permettant de calculer les signatures des jets sont donc les méthodes itératives de

type différences finies. Cependant, il faudrait trouver un moyen de rendre leur utilisation plus souple de façon à pouvoir évaluer la luminance selon d'autres directions que des ordonnées discrètes prédéfinies, en interpolant par exemple la dépendance angulaire du champ de rayonnement à l'aide de fonctions appropriées. L'intégration spatiale peut être rendue plus robuste numériquement par l'utilisation de la forme intégrale de l'ETR qui est peu sensible aux artefacts numériques induits par le schéma d'interpolation spatiale.

2.6. Méthodes utilisant une base d'harmoniques sphériques

Les méthodes des harmoniques sphériques remplacent le schéma de quadrature des DOM par une représentation du champ de luminance en séries d'harmoniques sphériques. Le champ de luminance peut donc être évalué simultanément selon toutes les directions de l'espace et les flux hémisphériques peuvent facilement être déduits du développement du champ de rayonnement selon la base d'harmoniques sphériques. La précision des résultats dépend cependant de la troncature de la base d'harmoniques sphériques. Il est aussi important de noter que, par construction, les harmoniques sphériques sont définies par rapport à un axe vertical privilégié. La méthode des harmoniques sphériques permet, en outre, de simplifier le calcul de l'intégrale de diffusion. En effet, si $\{\hat{Y}_l^m(\Omega)\}_{\substack{l \leq L \\ |m| \leq l}}$ désigne une base d'harmoniques sphériques tronquée à l'ordre L , on montre que l'intégrale de diffusion est réduite à la forme suivante [48] :

$$\frac{\omega_0}{4\pi} \int_{4\pi} P(\Omega', \Omega) R(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \approx \omega_0 \sum_{l=0}^L \frac{\chi_l}{2l+1} \sum_{m=-l}^l \hat{R}_l^m(\mathbf{s}) \hat{Y}_l^m(\Omega) \quad (2.100)$$

où $\hat{R}_l^m(\mathbf{s})$ est le moment de luminance en harmoniques sphériques d'ordre (l, m) qui est défini par la relation :

$$R(\mathbf{s}, \Omega) \approx \sum_{l=0}^L \sum_{m=-l}^l R_l^m(\mathbf{s}) \hat{Y}_l^m(\Omega) \quad (2.101)$$

χ_l est le coefficient du développement en série de polynômes de Legendre de la fonction de phase, il est défini par la relation :

$$P(\cos \Theta) \approx \sum_{l=0}^L \chi_l p_l(\cos \Theta) \quad (2.102)$$

Ou et Liou [48] ont proposé une technique de résolution de cette méthode adaptée aux milieux 3D de géométries diverses : parallélépipèdes rectangles, éléments de cylindre ou de

sphère. Dans cette méthode, le développement de la dépendance angulaire du rayonnement au premier ordre des harmoniques sphériques ($L = 1$) permet de transformer l'ETR en une équation différentielle du second ordre après des manipulations mathématiques assez lourdes. En raison de la troncature de la base d'harmoniques sphériques, cette formulation n'est valable que pour les fonctions de phase linéairement anisotropes. En présence d'hétérogénéités, la solution pourrait être obtenue par convergence des conditions aux interfaces entre les différentes cellules constituant le milieu étudié. La complexité de la forme mathématique des solutions rend toutefois l'utilisation de cette méthode peu aisée pour le calcul du rayonnement émis par des milieux 3D.

La « méthode des harmoniques sphériques avec une grille spatiale » (**Spherical Harmonic Spatial Grid Method : SHSG**) [49] est une extension de la méthode des harmoniques sphériques, aux milieux hétérogènes 2D. Les équations différentielles couplées issues de l'ETR sont résolues selon une technique itérative. L'ordre de développement de la luminance en harmoniques sphériques détermine la troncature de la décomposition de la fonction de phase en séries de polynômes de Legendre. Cette méthode donne des résultats dont la précision est comparable à celle de codes de Monte-Carlo de référence pour des scènes atmosphériques dont la source de rayonnement est soit un rayonnement solaire collimaté, soit une émission thermique [49]. Une généralisation de cette méthode aux milieux 3D est envisageable [49]. Néanmoins, en raison de la complexité de la forme mathématique de l'ETR sur la base des harmoniques sphériques, la description de la propagation du rayonnement avec ce type de méthode n'est pas aussi explicite qu'avec une DOM classique. De plus, le nombre d'itérations nécessaires pour faire converger la solution peut être très grand [10].

La « méthode des ordonnées discrètes et des harmoniques sphériques » (**Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method : SHDOM**), conçue à l'origine pour modéliser les scènes atmosphériques [10], est une méthode de résolution itérative (SOS) de l'ETR qui cumule la rapidité de l'évaluation de l'intégrale de diffusion sur une base d'harmoniques sphériques avec l'efficacité du calcul de la propagation du rayonnement le long d'ordonnées discrètes dans les trois dimensions de l'espace. Le nombre d'itérations nécessaires pour faire converger la solution avec la méthode SHDOM est beaucoup plus faible qu'avec le modèle SHSG, pour une précision des résultats équivalente. L'intégration spatiale est robuste numériquement du fait de l'utilisation de la solution intégrale formelle de l'ETR (équation (2.99)) [5]. L'interpolation des propriétés optiques le long de lignes de visée entre les nœuds

d'une grille de propriétés optiques 3D permet de calculer la luminance en tout point du milieu en prenant en compte le caractère diffus de milieux tels que les scènes atmosphériques. De ce fait, le modèle SHDOM utilise pour l'intégration spatiale, une méthode de lancer de rayons (*cf.* Tableau 2.5). Les harmoniques sphériques permettent de calculer le champ de luminance selon d'autres directions que les ordonnées discrètes utilisées au cours du processus itératif. D'après des cas tests sur des milieux 1D, 2D et 3D [10], la précision de la méthode SHDOM est comparable à celle d'un code Monte-Carlo de référence tout en nécessitant des temps de calcul moindres (quelques minutes pour la méthode SHDOM contre plusieurs heures pour un code Monte-Carlo pour les milieux 1D testés par Evans [10]). Pour ces raisons, la démarche proposée par la méthode SHDOM est apparue comme une voie prometteuse pour le calcul de la signature des jets de moteurs-fusées dans le domaine UV. L'adaptation de cette méthode à ce type de milieu est présentée au chapitre suivant.

3. PRÉSENTATION ET ADAPTATION DE LA MÉTHODE SHDOM AUX JETS DE MOTEUR- FUSÉE

Le modèle pour calculer les signatures UV de jets est la méthode des ordonnées discrètes et des harmoniques sphériques (**Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method**). Cette approche a été initialement développée pour évaluer le rayonnement issu de milieux atmosphériques en prenant en compte les phénomènes de diffusion provoqués, par exemple, par la présence de gouttelettes d'eau dans les nuages [10]. Ces milieux ont une géométrie très différente de celle des jets et leurs espèces gazeuses ne produisent pas d'émission de chimiluminescence. Il a donc été nécessaire d'adapter le code SHDOM originel aux jets de propulseurs. L'objet de ce chapitre est donc de présenter les principes généraux du modèle SHDOM tels qu'Evans [10] les a définis et de montrer les améliorations effectuées au cours de cette étude, pour pouvoir appliquer ce modèle au calcul de la signature des jets. Les résultats obtenus au moyen du modèle SHDOM amélioré sont présentés dans le chapitre 5.

3.1. Principes généraux de la méthode SHDOM

L'approche SHDOM [10] est une méthode itérative où la structure angulaire du champ de rayonnement est décrite alternativement selon une base d'harmoniques sphériques pour calculer l'intégrale de diffusion, et selon des ordonnées discrètes le long desquelles la propagation du rayonnement est évaluée par intégration spatiale de l'équation de transfert radiatif. Les harmoniques sphériques réelles sont définies par rapport à un axe de référence noté $(z'z)$, qui correspond à la verticale dans les problèmes atmosphériques. Pour ce type de milieu, les dépendances spatiales du coefficient d'extinction, de l'albédo de diffusion simple, de la fonction de phase et de la température sont exprimées dans une « grille de propriétés optiques » cartésienne.

L'algorithme de la méthode SHDOM est schématisé sur la Figure 3.1.

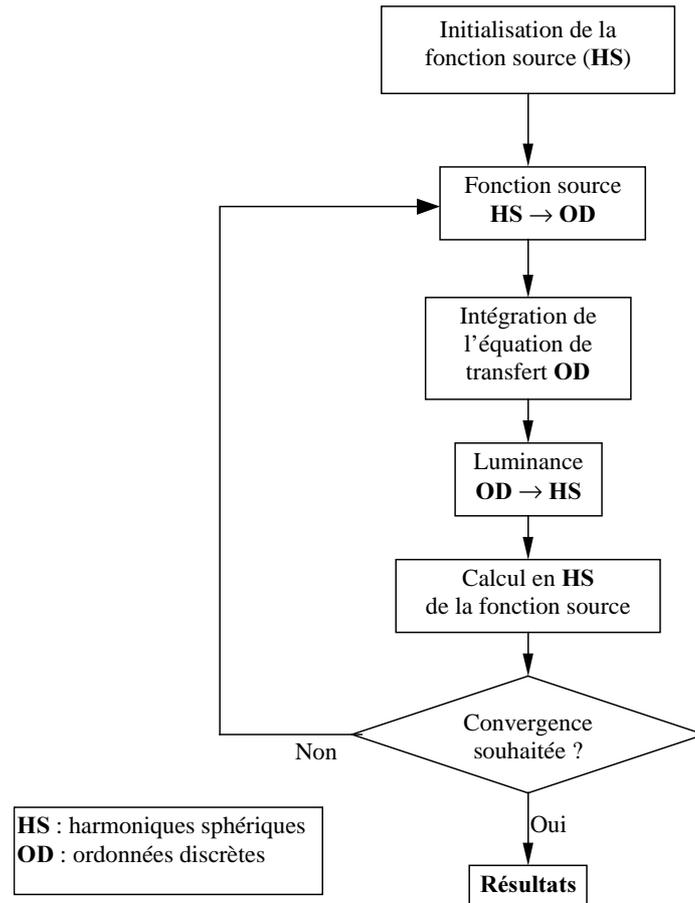


Figure 3.1 - Schéma simplifié de l'algorithme de SHDOM [10]

Les principales étapes de cet algorithme itératif sont :

1. Initialisation du champ de luminance au moyen de la méthode δ -Eddington (cf. chapitre 2) le long de chaque colonne verticale d'axe $(z'z)$, puis décomposition de ce champ au premier ordre sur une base d'harmoniques sphériques ;
2. Conversion en ordonnées discrètes de la fonction source $J(\mathbf{s}, \Omega)$ décomposée en harmoniques sphériques pour chaque point de la grille. Cette grandeur radiative est homogène à une luminance, et est reliée à la fonction source $\hat{J}(\mathbf{s}, \Omega)$ de l'équation (2.1), par :

$$J(\mathbf{s}, \Omega) = \frac{\hat{J}(\mathbf{s}, \Omega)}{K_{\text{Ext}}} \quad (3.1)$$

3. Calcul du champ de luminance par intégration de la fonction source le long des ordonnées discrètes selon la technique de « l'intégration arrière », afin de prendre en compte l'ensemble des variations du rayonnement lors de sa traversée du milieu ;

4. Développement sur la base des harmoniques sphériques du champ de luminance décrit en ordonnées discrètes ;
5. Calcul d'une nouvelle fonction source sur la base des harmoniques sphériques ;
6. Réitération des étapes 2 à 5 jusqu'à ce que la différence entre les fonctions sources issues de deux itérations successives soit inférieure à un seuil arbitraire appelé « critère de convergence » ;
7. Evaluation de la fonction source en harmoniques sphériques selon des directions de visée arbitraires ;
8. Intégration de l'ETR selon ces directions de visée, de façon à obtenir le champ de luminance issu de plans de sortie prédéfinis.

La fonction source est la grandeur radiative la plus compliquée à évaluer dans les problèmes tridimensionnels, du fait de la prise en compte de l'ensemble des radiations arrivant de toutes les directions de l'espace en un point donné du milieu. Les harmoniques sphériques réelles permettent d'en optimiser le calcul en réduisant le nombre d'éléments à sommer dans l'intégrale de diffusion. La taille de la base d'harmoniques sphériques détermine la troncature du développement de la fonction de phase en polynômes de Legendre. Si les fonctions de phase sont piquées vers l'avant, cette troncature peut affecter les calculs de transfert radiatif : la fonction de phase tronquée peut devenir négative pour certains angles de diffusion. Pour y remédier, le code SHDOM peut reconditionner la fonction de phase grâce à la méthode *Delta-M* [42] où la fonction de phase est posée comme étant la somme d'un pic de diffusion avant et d'une fonction de phase lissée. Comme une partie de la diffusion avant est prise en compte sous la forme d'une diminution des valeurs respectives du coefficient d'extinction et de l'albédo de diffusion simple, la contribution des phénomènes de diffusion dans l'ETR est moins importante. De ce fait, les calculs peuvent converger plus rapidement. Cependant, le lissage de la fonction de phase imposée par cette troncature entraîne une perte d'information. Par exemple, les figures de diffraction sont susceptibles de disparaître. Toutefois, lorsque l'on considère plusieurs tailles de particules, ces figures sont moyennées et la fonction de phase renormalisée par la méthode *Delta-M* est assez proche de la fonction de phase originale. Ce point est étudié au chapitre suivant.

Le nombre d'ordonnées discrètes dépend de deux paramètres :

- N_μ qui représente le nombre d'angles zénithaux par cellule, répartis suivant une quadrature de Legendre-Gauss ;
- N_ϕ qui est le nombre maximal d'azimuts. Le nombre de coordonnées azimutales diminue à mesure que les $|\mu_j|$ s'approchent de 1. Les angles azimutaux sont répartis de manière équidistante pour chaque valeur de μ_j .

La relation entre ces deux paramètres et la taille de la base d'harmoniques sphériques est présentée au § 3.1.1.

La méthode d'accélération de la convergence implantée dans SHDOM repose sur l'hypothèse que la fonction source $J(\mathbf{s}, \Omega)$ converge comme une suite géométrique. Pour que la convergence soit plus rapide, il est possible de remplacer le vecteur $\mathbf{J}^{(n)}$ représentant la fonction source $J(\mathbf{s}, \Omega)$ évaluée dans l'ensemble du milieu après n itérations successives, par [10] :

$$\mathbf{J}'^{(n)} = \mathbf{J}^{(n)} + \varepsilon (\mathbf{J}^{(n)} - \mathbf{J}^{(n-1)}) \quad (3.2)$$

où le paramètre ε est déterminé à l'aide des propriétés géométriques de la convergence selon les relations :

$$\varepsilon = \frac{1 - q \cos \Psi + q^{1 + \frac{\pi}{2\Psi}}}{1 - 2q \cos \Psi + q^2} \quad (3.3)$$

avec :

Rapport de convergence :

$$q = \frac{|\mathbf{u}^{(n)}|}{|\mathbf{u}^{(n-1)}|} \quad (3.4)$$

« Angle » de convergence :

$$\cos \Psi = \frac{\mathbf{u}^{(n-1)} \cdot \mathbf{u}^{(n)}}{|\mathbf{u}^{(n-1)}| |\mathbf{u}^{(n)}|} \quad (3.5)$$

Résidu de convergence :

$$\mathbf{u}^{(n)} = \mathbf{J}^{(n)} - \mathbf{J}^{(n-1)} \quad (3.6)$$

Le processus d'itération s'arrête lorsque la distance normalisée entre les vecteurs associés respectivement à la fonction source courante et à celle calculée lors de l'itération précédente, est inférieure à une valeur prédéfinie appelée critère de convergence. Ce résidu normalisé est défini par la relation :

$$\Delta_{\text{Sol}}^{(n)} = \frac{|\mathbf{J}^{(n)} - \mathbf{J}^{(n-1)}|}{|\mathbf{J}^{(n)}|} \quad (3.7)$$

Dans la suite de ce paragraphe, la technique d'évaluation de l'intégrale de diffusion au moyen des harmoniques sphériques, et la méthode d'intégration spatiale de l'ETR de SHDOM seront présentées.

3.1.1. Evaluation de l'intégrale de diffusion sur la base des harmoniques sphériques

Afin de simplifier le calcul de l'intégrale de diffusion, la luminance et la fonction source sont représentées sur la base d'harmoniques sphériques réelles $\{Y_l^m(\Omega)\}_{l=0\dots L, m=-M\dots M}$ selon les relations :

$$R(\mathbf{s}, \Omega) \approx \sum_{l=0}^L \sum_{m=-M}^M R_l^m(\mathbf{s}) Y_l^m(\Omega) \quad (3.8)$$

$$J(\mathbf{s}, \Omega) \approx \sum_{l=0}^L \sum_{m=-M}^M J_l^m(\mathbf{s}) Y_l^m(\Omega) \quad (3.9)$$

Les harmoniques sphériques réelles sont définies par les relations suivantes [49] [10] :

$$Y_l^m(\Omega) = Y_l^m(\mu, \phi) = \Lambda_l^m(\mu) u(m\phi) = \gamma_l^m p_l^{|m|}(\mu) u(m\phi) \quad (3.10)$$

avec :

$$\text{Facteur azimutal : } \begin{cases} u(m\phi) = \sin(m\phi) & \text{si } m < 0 \\ u(m\phi) = \cos(m\phi) & \text{si } m \geq 0 \end{cases} \quad (3.11)$$

$$\text{Constante de normalisation : } \gamma_l^m = \sqrt{\frac{2l+1}{2\pi(1+\delta_{m0})} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \quad (3.12)$$

où $\mu = \cos\theta$ est la composante zénithale de Ω et ϕ sa composante azimutale, et où les $p_l^{|m|}(\mu)$ sont les fonctions de Legendre associées définies par :

$$p_l^{|m|}(\mu) = \sqrt{(1-\mu^2)^{|m|}} \frac{d^{|m|}}{d\mu^{|m|}} p_l(\mu) \quad (3.13)$$

où $p_l^0(\mu) = p_l(\mu)$ est le polynôme de Legendre de degré l . La relation d'orthonormalité de cette base d'harmoniques sphériques peut s'écrire sous la forme :

$$\int_{-1}^1 d\mu \int_0^{2\pi} d\phi Y_{l'}^{m'}(\mu, \phi) Y_l^m(\mu, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3.14)$$

où $\delta_{i,j}$ est le symbole de Kronecker. L'intégrale (3.14) peut se réécrire selon les ordonnées discrètes suivant la relation :

$$\gamma_{l'}^{m'} \gamma_l^m \sum_{j=1}^{N_\mu} \omega_j p_{l'}^{m'}(\mu_j) p_l^m(\mu_j) \sum_{k=1}^{N_\phi} \bar{\omega}_{j,k} u(m\phi_k) = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (3.15)$$

où les ω_j sont les poids de quadrature zénithale et les $\bar{\omega}_{j,k}$ sont les poids de quadrature azimutale.

Le respect de cette relation nécessite que la troncature de la base d'harmoniques sphériques soit liée à la résolution angulaire selon les relations (*cf.* annexe § 9.3) :

$$L = N_\mu - 1 \quad (3.16)$$

$$M = \frac{N_\phi}{2} - 1 \quad (3.17)$$

Comme par construction la valeur de M ne peut dépasser celle de L , le nombre d'azimuts est limité par :

$$N_\phi \leq 2N_\mu \quad (3.18)$$

Durant l'étape (4) du processus itératif, le champ de luminance exprimé selon les ordonnées discrètes, est décomposé en harmoniques sphériques. En appliquant la relation d'orthonormalité de ces fonctions, les moments d'harmoniques sphériques de la luminance sont exprimés par :

$$R_l^m(\mathbf{s}) = \int_{4\pi} Y_l^m(\Omega) R(s, \Omega) d\Omega = \int_{-1}^1 \Lambda_l^m(\mu) d\mu \int_0^{2\pi} u(m\phi) R(\mathbf{s}, \mu, \phi) d\phi \quad (3.19)$$

Ces intégrales sont approchées par la relation :

$$R_l^m(\mathbf{s}) = \sum_{j=1}^{N_\mu} \omega_j \Lambda_l^m(\mu_j) \sum_{k=1}^{\hat{N}_{\phi,j}} \bar{\omega}_{j,k} u(m\phi_k) R_\lambda(\mathbf{s}, \mu_j, \phi_k) \quad (3.20)$$

Comme ces transformations font intervenir des séries de sinus et de cosinus, pour un nombre important d'azimuts ($\hat{N}_{\phi,j} > 12$), les transformées de Fourier rapides (FFT) permettent d'accélérer jusqu'à trois fois la vitesse de ces calculs par rapport à l'application directe de la relation (3.20).

La fonction de phase est développée en série de polynômes de Legendre $p_l(\cos\Theta)$ suivant la relation :

$$P(\cos \Theta) \approx \sum_{l=0}^L \chi_l p_l(\cos \Theta) \quad (3.21)$$

Lors de l'écriture de la grille de propriétés optiques, les coefficients du développement en série de polynômes de Legendre de la fonction de phase sont calculés à partir de la dépendance angulaire de ce paramètre en utilisant la relation [10] :

$$\chi_l = \left(l + \frac{1}{2} \right) \int_0^\pi P(\cos \Theta) p_l(\cos \Theta) d(\cos \Theta) \quad (3.22)$$

En raison de la relation de normalisation de la fonction de phase, χ_0 prend nécessairement la valeur 1. Par construction, le paramètre d'asymétrie se déduit de χ_1 selon la relation :

$$g = \frac{\chi_1}{3} \quad (3.23)$$

Le théorème d'addition des harmoniques sphériques réelles relie les polynômes de Legendre avec la base d'harmoniques sphériques réelles par la relation [50] :

$$p_l(\cos \Theta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\Omega) Y_l^m(\Omega') \quad (3.24)$$

La fonction de phase s'exprime donc dans la base d'harmoniques sphériques suivant la relation :

$$P(\cos \Theta) = 4\pi \sum_{l=0}^L \frac{\chi_l}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\Omega) Y_l^m(\Omega') \quad (3.25)$$

Aussi l'intégrale de diffusion se réduit-elle à la forme suivante :

$$\frac{\omega_o}{4\pi} \int_{4\pi} P(\Omega', \Omega) R(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' = \omega_o \sum_{l=0}^L \frac{\chi_l}{2l+1} \sum_{m=-M}^M R_l^m(\mathbf{s}) Y_l^m(\Omega) \quad (3.26)$$

et la fonction source s'écrit sur la base des harmoniques sphériques :

$$J_l^m(\mathbf{s}) = \left[\frac{\hat{J}^C(\mathbf{s})}{K_{\text{Ext}}} + (1 - \omega_o) L_0 \right] \sqrt{4\pi} \delta_{l0} \delta_{m0} + \omega_o \frac{\chi_l}{2l+1} R_l^m(\mathbf{s}) \quad (3.27)$$

Le premier terme correspond à l'émission isotrope des gaz (chimiluminescence) et des particules (rayonnement thermique) tandis que le second représente l'intégrale de diffusion. L'introduction du terme de chimiluminescence dans le modèle SHDOM sera présentée au § 3.2.1. Les $R_l^m(\mathbf{s})$ sont les moments d'harmoniques sphériques de la luminance calculée lors de l'itération précédente par intégration de la fonction source suivant les ordonnées discrètes.

A la première itération, la luminance $R_l^m(\mathbf{s})$ est initialisée par la méthode δ -Eddington [29] où la fonction de phase est développée sur seulement les deux premiers termes de sa série en polynômes de Legendre. Il faut noter que le développement de la fonction de phase en polynômes de Legendre est de fait limité par la troncature de la base d'harmoniques sphériques, lui-même déterminé par le nombre de coordonnées zénithales N_μ . Comme cela a été évoqué plus haut, la méthode Delta- M [42] (*cf.* annexe § 9.4) permet de corriger les artefacts numériques induits par cette troncature.

Grâce à la base d'harmoniques sphériques, les itérations nécessitent moins d'opérations qu'une méthode des ordonnées discrètes classique. Si N_0 désigne le nombre d'ordonnées discrètes, seules N_0 opérations doivent être effectuées pour évaluer l'intégrale de diffusion et $9N_0^{3/2}$ ($3N_0^{3/2}$ avec les FFT) pour les conversions entre les représentations en ordonnées discrètes et en harmoniques sphériques du champ de rayonnement. Pour une méthode des ordonnées discrètes classique, chaque itération se déroule en $2N_0^2$ opérations [10]. La mémoire de stockage est aussi réduite par l'usage des harmoniques sphériques. Par exemple, si la résolution angulaire est définie avec $N_\phi = 2N_\mu$ angles azimutaux, une méthode des ordonnées discrètes classique utilisera $2N_\mu^2$ ordonnées discrètes pour stocker la fonction source. Pour la même résolution angulaire, la méthode SHDOM réduit ce nombre à N_μ^2 moments d'harmoniques sphériques.

De plus, il est possible d'économiser de la mémoire en ne stockant pas les moments d'harmoniques sphériques $J_l^m(\mathbf{s})$ dont la valeur est nulle. Cependant, la dépendance angulaire du champ de luminance devient de plus en plus complexe à chaque itération en raison du couplage de l'intégration spatiale de l'ETR avec l'évaluation des phénomènes de diffusion. De ce fait, la contribution de la diffusion dans la fonction source devient de plus en plus anisotrope et le nombre d'harmoniques sphériques nécessaire pour décrire correctement cette grandeur radiative augmente. Si le nombre de moments d'harmoniques sphériques utilisés dépasse une limite prédéfinie, le développement du champ de la fonction source sur la base des harmoniques sphériques sera tronqué. Dans ce cas, la dépendance angulaire de cette grandeur radiative risque d'être insuffisamment décrite. Pratiquement, cette troncature ne concerne que les moments d'harmoniques sphériques d'ordre élevé et elle n'a qu'une influence marginale sur le résultat final.

3.1.2. Intégration spatiale

La grille de propriétés optiques dans laquelle l'ETR est résolue, est constituée d'un maillage cartésien régulier et de pas constant selon l'horizontale et de pas constant ou variable selon la verticale. Les caractéristiques du milieu sont définies aux sommets des cellules parallélépipédiques rectangles ainsi formées et elles sont interpolées entre ces points le long des trajets optiques. La surface supérieure de la grille, qui correspond au sommet de l'atmosphère (« le ciel ») dans les problèmes atmosphériques, ne réfléchit ni n'émet aucun rayonnement. La surface inférieure peut être représentée comme un « sol » lambertien dans le cadre de cette étude. Les conditions aux limites horizontales du milieu peuvent être soit « périodiques », soit « ouvertes » :

- En conditions « périodiques », le rayonnement émergent sur une face latérale à la frontière du milieu est prolongé sur la face opposée en tant que nouveau rayon incident. Par conséquent, le milieu peut être représenté comme une mosaïque infinie dont le motif est donné par la grille de propriétés. Cette option permet de définir des milieux infinis de types « plans parallèles » ou bien des cylindres infinis représentant une section de jet.
- En conditions « ouvertes », le rayonnement des parois verticales à la frontière du milieu est supposé se propager parallèlement à ces dernières. Dans ce cas, l'équation de transfert est résolue en « mode 2D ». Les cellules externes de la grille de propriétés représentent donc l'environnement extérieur de la scène étudiée.

Les procédures d'entrée des données sont présentées en annexe (cf. annexe § 9.5).

Dans le modèle SHDOM, la méthode d'intégration spatiale de l'ETR le long des ordonnées discrètes repose sur l'utilisation de la solution intégrale formelle donnée par la relation (rappel de l'équation (2.99)) :

$$R(\mathbf{s}, \Omega) = R(0, \Omega) \exp \left[- \int_0^{\mathbf{s}} K_{\text{Ext}} \, d\mathbf{s}' \right] + \int_0^{\mathbf{s}} \exp \left[- \int_{\mathbf{s}'}^{\mathbf{s}} K_{\text{Ext}} \, d\mathbf{s}'' \right] J(\mathbf{s}', \Omega) K_{\text{Ext}} \, d\mathbf{s}' \quad (3.28)$$

La Figure 3.2 montre un exemple de domaine d'intégration spatiale de l'ETR (en géométrie 2D pour simplifier la représentation) nécessaire à l'évaluation de la luminance le long d'une ordonnée discrète donnée.

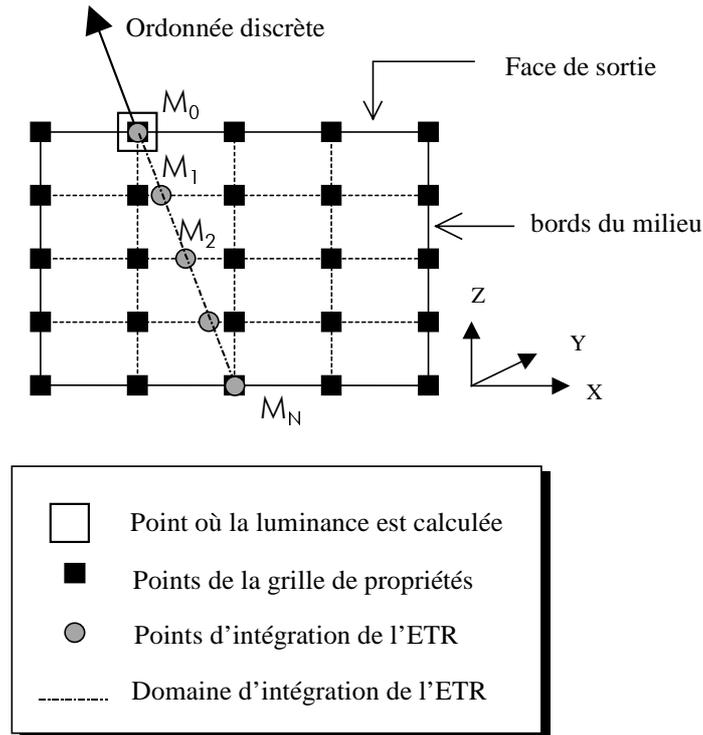


Figure 3.2 - Calcul de la luminance en un point donné M_0 pour une ordonnée discrète : représentation bidimensionnelle du domaine d'intégration de l'équation de transfert radiatif

Le calcul de la luminance $R(M_0, \Omega)$ au point « d'observation » M_0 de la grille de propriétés dans la direction Ω se déroule de la manière suivante :

1. Au point M_0 , on associe une ligne de visée arrière de direction $-\Omega$ dont l'extrémité inférieure M_N correspond à l'intersection entre cette ligne et les parois du milieu.
2. Cette ligne $[M_N, M_0]$ est discrétisée en N intervalles $[M_k, M_{k-1}]$ dont les bords sont formés par les intersections entre $[M, M_0]$ et les faces des cellules traversées à l'intérieur de la grille de propriétés.
3. Les propriétés optiques et la fonction source $J(\mathbf{s}', \Omega)$ aux points $\{M_k\}_{k=0 \dots N}$ sont évaluées par interpolation bilinéaire sur les faces des cellules considérées.
4. L'ETR est ensuite intégrée segment par segment de M_0 à M_N selon la technique de l'intégration arrière.

Cette technique consiste à sommer les contributions de tous les intervalles de la ligne de visée arrière considérée en commençant par ceux qui sont les plus proches du point d'observation. Si on appelle $R(k, \Omega)$ la luminance résultant de l'intégration de l'ETR sur le

segment $[M_k, M_0]$, $T(k, \Omega)$ le facteur de transmission entre M_k et M_0 , et $J(k, k-1; \Omega)$ le résultat de l'intégration de la fonction source $J(\mathbf{s}, \Omega)$ sur l'intervalle $[M_k, M_{k-1}]$, alors cette sommation est gouvernée par les relations de récurrence suivantes :

$$\text{Initialisation : } R(1, \Omega) = J(1, 0; \Omega) = \int_{M_1}^{M_0} \exp\left[-\int_{s'}^{M_0} K_{\text{Ext}} ds''\right] J(\mathbf{s}', \Omega) K_{\text{Ext}} ds' \quad (3.29)$$

$$T(0) = 1 \quad (3.30)$$

Intégration de la fonction source sur l'intervalle $[M_k, M_{k-1}]$:

$$J(k, k-1; \Omega) = \int_{M_k}^{M_{k-1}} \exp\left[-\int_{s'}^{M_{k-1}} K_{\text{Ext}} ds''\right] J(\mathbf{s}', \Omega) K_{\text{Ext}} ds' \quad (3.31)$$

Facteur de transmission sur l'intervalle $[M_k, M_0]$:

$$T(k, \Omega) = T(k-1, \Omega) \exp\left[-\int_{M_k}^{M_{k-1}} K_{\text{Ext}} ds\right] \quad (3.32)$$

Le rayonnement émis par le segment $[M_k, M_{k-1}]$ a pour valeur au point M_{k-1} $J(k, k-1; \Omega)$ et il est transmis dans l'intervalle $[M_{k-1}, M_0]$ avec un facteur égal à $T(k-1, \Omega)$. Les contributions de tous les intervalles sont sommées par la relation de récurrence suivante :

$$R(k, \Omega) = R(k-1, \Omega) + T(k-1, \Omega) J(k, k-1; \Omega) \quad (3.33)$$

Comme la luminance $R(M_N, \Omega)$ correspondant au rayonnement entrant dans le milieu est atténuée d'un facteur $T(N, \Omega)$, la luminance en M_0 est obtenue par la relation :

$$R(M_0, \Omega) = R(k=N, \Omega) + T(k=N, \Omega) R(M_N, \Omega) \quad (3.34)$$

Afin de calculer explicitement les intégrales données dans les équations (3.31) et (3.32), les évolutions spatiales à l'intérieur des segments $[M_k, M_{k-1}]$, du coefficient d'extinction K_{Ext} et de son produit avec la fonction source $J_\lambda(\mathbf{s}', \Omega) K_{\text{Ext}}$, seront supposées linéaires. Le choix de cette hypothèse résulte de la forme mathématique de la relation (3.31) [10]. Dans ce cas l'épaisseur optique de l'intervalle est égale à :

$$\tau(k, k-1) = \frac{K_{\text{Ext}}(M_k) + K_{\text{Ext}}(M_{k-1})}{2} D(M_k, M_{k-1}) \quad (3.35)$$

où $D(M_k, M_{k-1})$ représente la distance entre les points M_k et M_{k-1} . Lorsque la valeur de $\tau(k, k-1)$ est inférieure à 2, alors la relation (3.31) s'exprime, au premier ordre, par [10] :

$$J(k, k-1; \Omega) = \frac{1 - e^{-\tau(k, k-1)}}{K_{\text{Ext}}(M_k) + K_{\text{Ext}}(M_{k-1})} \times \left[\begin{aligned} & [J(M_k, \Omega)K_{\text{Ext}}(M_k) + J(M_{k-1}, \Omega)K_{\text{Ext}}(M_{k-1})] \\ & + \frac{D(M_k, M_{k-1})}{6} \left[\begin{aligned} & K_{\text{Ext}}(M_k)J(M_{k-1}, \Omega)K_{\text{Ext}}(M_{k-1}) \\ & - K_{\text{Ext}}(M_{k-1})J(M_k, \Omega)K_{\text{Ext}}(M_k) \end{aligned} \right] \end{aligned} \right] \quad (3.36)$$

Pour les grandes épaisseurs optiques, cette formulation devient [10] :

$$J(k, k-1; \Omega) = \frac{1 - e^{-\tau(k, k-1)}}{K_{\text{Ext}}(M_k) + K_{\text{Ext}}(M_{k-1})} \times \left[\begin{aligned} & [J(M_k, \Omega)K_{\text{Ext}}(M_k) + J(M_{k-1}, \Omega)K_{\text{Ext}}(M_{k-1})] \\ & + 2 \left[\begin{aligned} & K_{\text{Ext}}(M_k)J(M_{k-1}, \Omega)K_{\text{Ext}}(M_{k-1}) \\ & - K_{\text{Ext}}(M_{k-1})J(M_k, \Omega)K_{\text{Ext}}(M_k) \end{aligned} \right] \frac{1 - \frac{2}{\tau(k, k-1)} + \frac{2e^{-\tau(k, k-1)}}{1 - e^{-\tau(k, k-1)}}}{K_{\text{Ext}}(M_k) + K_{\text{Ext}}(M_{k-1})} \end{aligned} \right] \quad (3.37)$$

Dans ce cas, afin d'avoir un comportement asymptotique correct lorsque $\tau(k, k-1) \rightarrow \infty$, si $K_{\text{Ext}}(M_k) \neq K_{\text{Ext}}(M_{k-1})$, l'extinction de la face d'entrée de la cellule est réajustée selon la relation [10] :

$$K'_{\text{Ext}}(M_k) = K_{\text{Ext}}(M_{k-1}) + 4 \frac{K_{\text{Ext}}(M_k) - K_{\text{Ext}}(M_{k-1})}{\tau(M_k, M_{k-1})} \quad (3.38)$$

Si le milieu est optiquement épais, le balayage des points d'intégration (relation (3.33)) peut être arrêté avec un risque d'erreur minimal lorsque le facteur de transmission est inférieur à une valeur limite [47]. Evans [10] a suggéré de la fixer à 10^{-5} , ce qui correspond à une épaisseur optique égale à 11.5 le long d'une ligne de visée. Puisque la méthode SHDOM a été utilisée d'abord pour modéliser les vues satellitales de scènes atmosphériques, le code original d'Evans [10] ne peut calculer, en fin du processus itératif, que le champ de luminance émis par des plans horizontaux, c'est-à-dire parallèles au « ciel » ou au « sol ».

La continuité des lignes de visée permet d'évaluer la propagation du rayonnement indépendamment de la discrétisation spatiale de la grille de propriétés. La méthode d'intégration spatiale du code SHDOM permet non seulement l'évaluation de la luminance le long des ordonnées discrètes, mais aussi de calculer le rayonnement dans d'autres directions que celles du schéma de quadrature utilisé, en interpolant angulairement la fonction source au moyen de son développement en harmoniques sphériques.

La précision des solutions de l'équation de transfert radiatif dépend fortement de la variation spatiale de l'extinction et de la fonction source à l'intérieur du milieu. Lorsque les gradients de la fonction source à l'intérieur d'une cellule sont trop importants dans une direction, il est souhaitable de scinder cette dernière en deux nouvelles cellules. Les propriétés optiques définies aux sommets de ces dernières sont évaluées par interpolation trilineaire de la grille de propriétés initiale. Cette fonctionnalité, appelée « grille adaptative », est activée lorsque le « paramètre d'hétérogénéité » C , homogène à un flux sphérique, dépasse une valeur arbitraire, appelée « critère de découpage ». La valeur de C est donnée par la relation [10] :

$$C = |\Delta J| (1 - e^{-\tau}) \quad (3.39)$$

où τ représente l'épaisseur optique moyenne de la cellule et $|\Delta J|$ la différence entre les fonctions sources associées aux deux nœuds délimitant la cellule à découper. $|\Delta J|$ est une grandeur moyennée angulairement suivant la relation :

$$\begin{aligned} |\Delta J| &= \frac{2}{K_{\text{Ext}}(\mathbf{s}_1) + K_{\text{Ext}}(\mathbf{s}_2)} \sqrt{\frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} [K_{\text{Ext}}(\mathbf{s}_1)J(\mathbf{s}_1, \Omega) - K_{\text{Ext}}(\mathbf{s}_2)J(\mathbf{s}_2, \Omega)]^2 d\Omega} \\ &= \frac{2}{K_{\text{Ext}}(\mathbf{s}_1) + K_{\text{Ext}}(\mathbf{s}_2)} \sqrt{\frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^L \sum_{m=-M}^M [K_{\text{Ext}}(\mathbf{s}_1)J_l^m(\mathbf{s}_1) - K_{\text{Ext}}(\mathbf{s}_2)J_l^m(\mathbf{s}_2)]^2} \end{aligned} \quad (3.40)$$

où \mathbf{s}_1 et \mathbf{s}_2 désignent les positions respectives des deux nœuds de la grille délimitant la cellule mère considérée. D'après Evans [10], le découpage de cellules n'est pas toujours la garantie d'une précision accrue et la définition du critère de découpage n'est pas nécessairement optimale. L'usage de cette option est peu aisé quant à la gestion de la mémoire de stockage supplémentaire surtout dans le cas de milieux fortement hétérogènes comme les jets puisque le nombre de grandeurs radiatives à évaluer peut augmenter rapidement au cours du processus itératif.

3.2. Adaptations au cas particulier des jets

Le tableau suivant présente, pour comparaison, les principales caractéristiques des milieux atmosphériques pour lesquels la méthode SHDOM a été conçue par Evans [10] ainsi que les propriétés correspondantes pour les jets.

	Milieux atmosphériques	Jets de moteurs-fusées (à composites aluminisés)
Propriétés optiques des constituants du milieu	Absorption, émission thermique et diffusion des particules (gouttes d'eau des nuages...)	Absorption, émission thermique et diffusion des particules d'alumine Température des particules fonction de leur taille
	Emission thermique des gaz	Emission thermique des gaz négligeable dans l'UV Emission de chimiluminescence des gaz
Géométrie du milieu	Calculs en 1D, 2D ou 3D	Calculs en 3D
	Milieux infinis	Milieux finis
	Géométrie quelconque (⇒ grille de propriétés cartésiennes)	Milieux axisymétriques [6] [11]
	–	Masquage par la tuyère et le corps du propulseur
	Vue de type satellitale	Vues selon tous les angles d'aspect possibles
Grandeurs à calculer	Luminance Flux hémisphériques	Luminance Intensité

Tableau 3.1 - Principales caractéristiques des milieux atmosphériques (modèle SHDOM original [10]) et des jets

La prise en compte des particules ainsi que la possibilité d'effectuer des calculs de transfert radiatif en trois dimensions sont des fonctionnalités prévues par la méthode SHDOM dès sa conception [10] et leur application aux jets ne pose pas de problème particulier. Il faudra toutefois prendre garde au fait que la température des particules peut dépendre de leur taille. En revanche l'émission de chimiluminescence des gaz représente un terme supplémentaire dans l'ETR, qui devra être introduit dans le modèle. La géométrie des jets est en outre fort différente de celle de l'atmosphère. A la différence des vues satellitales d'une portion d'atmosphère planétaire supposée infinie pour lesquelles la méthode SHDOM a été initialement conçue [10], le jet est un milieu fini dont on souhaite calculer le rayonnement émis dans toutes les directions tant en luminance qu'en intensité. L'écriture de la grille de propriétés ainsi que le traitement de la luminance en fin de processus itératif devront donc prendre en compte la géométrie particulière des jets.

L'objet de ce paragraphe est donc de présenter l'ensemble des extensions permettant d'adapter le modèle au calcul de la signature UV d'un jet de moteur-fusée. Dans un premier temps, l'introduction du terme de chimiluminescence est présentée puis la méthode d'écriture

de la grille de propriétés est établie. Enfin, les adaptations aux jets du calcul de la luminance en fin du processus itératif sont présentées.

3.2.1. Introduction de l'émission de chimiluminescence des gaz

L'ETR dans les jets a pour forme (rappel de la relation (2.12)) :

$$\frac{1}{K_{\text{Ext}}} \frac{d}{ds} R_{\lambda}(\mathbf{s}, \Omega) = -R_{\lambda}(\mathbf{s}, \Omega) + (1 - \omega_0) L_0 + \frac{\hat{J}^C(\mathbf{s})}{K_{\text{Ext}}} + \frac{\omega_0}{4\pi} \int_{4\pi} P(\Omega', \Omega) R_{\lambda}(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \quad (3.41)$$

Dans cette relation, $\hat{J}^C(\mathbf{s})$ représente la puissance volumique angulaire de chimiluminescence émise par les gaz présents dans le jet. La valeur de ce terme dépend de la concentration et de la température des gaz (qui peut être différente de celle des particules). Selon la relation (3.41), le terme $\hat{J}^C(\mathbf{s})$ est divisé par le coefficient d'extinction afin d'être introduit dans la fonction source $J(\mathbf{s}, \Omega)$ de façon à être rendu homogène à une luminance selon la relation :

$$J(\mathbf{s}, \Omega) = (1 - \omega_0) L_0 + \frac{\hat{J}^C(\mathbf{s})}{K_{\text{Ext}}} + \frac{\omega_0}{4\pi} \int_{4\pi} P(\Omega', \Omega) R_{\lambda}(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \quad (3.42)$$

Dans les zones où le milieu est transparent, cette opération produit des erreurs numériques du type « division par zéro ». Pour remédier à ce problème, il suffit d'attribuer au coefficient d'extinction une valeur de seuil suffisamment basse pour que, dans les cellules concernées, l'absorption et la diffusion puissent être négligées. Pour un jet de propulseur d'une longueur $l = 2$ m, celle-ci peut être fixée à 10^{-5} m^{-1} , ce qui correspond à un facteur de transmission longitudinal de $e^{-K_{\text{Ext}} l} \approx 1 - 2 \cdot 10^{-5}$ soit une perte de rayonnement négligeable. A titre de comparaison, le coefficient d'extinction dans l'UV au centre de la zone de recombustion est de l'ordre de 10 m^{-1} .

Une autre solution aurait été d'utiliser dans le modèle la fonction source $\hat{J}(\mathbf{s}, \Omega)$ comme une puissance volumique angulaire définie par :

$$\hat{J}(\mathbf{s}, \Omega) = K_{\text{Ext}} \left[(1 - \omega_0) L_0 + \frac{\omega_0}{4\pi} \int_{4\pi} P(\Omega', \Omega) R_{\lambda}(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \right] + \hat{J}^C(\mathbf{s}) \quad (3.43)$$

Cependant, une telle modification de la méthode SHDOM n'augmenterait pas de manière substantielle la précision des calculs. En effet, l'utilisation d'un coefficient d'extinction minimal ne modifie pratiquement pas la cartographie du champ de luminance.

La puissance volumique angulaire de chimiluminescence dans l'UV est calculée selon un modèle spectral et thermique, et elle est proportionnelle au produit de la concentration des gaz à l'origine de cette source de rayonnement. Il existe donc deux manières d'introduire l'émission de chimiluminescence dans la grille de propriétés :

- Introduire directement les valeurs de $\hat{J}^c(\mathbf{s})$ dans la grille de propriétés. Cette méthode permet de définir des profils de chimiluminescence dont la dépendance spatiale est facilement paramétrable. Cette option est systématiquement utilisée dans cette étude pour définir des milieux à symétrie cylindrique représentant des sections de jets.
- Introduire dans la grille la température et les concentrations des gaz et calculer la puissance volumique angulaire de chimiluminescence à l'intérieur du modèle SHDOM. Cette solution est systématiquement adoptée pour les calculs de signatures de jets. Cette technique permet de recalculer la chimiluminescence de manière plus réaliste que la méthode précédente lorsque le découpage de cellules est activé. Comme cette dernière fonctionnalité nécessite une mémoire de stockage importante, elle n'a pas été utilisée pour les jets.

Des cas tests réalisés sur des exemples de jets réalistes ont montré l'équivalence de ces deux techniques.

3.2.2. Géométrie de la grille de propriétés

Les codes aérothermochimiques permettent de calculer les concentrations et les températures des constituants d'un jet de moteur-fusée, le plus souvent sous la forme de profils axisymétriques. D'un autre côté, la géométrie cartésienne de la grille spatiale du code SHDOM, conçue pour des milieux atmosphériques infinis, permet de bien distinguer la discrétisation spatiale et la résolution angulaire, ce qui est un des principes fondamentaux de la méthode SHDOM. Le but de ce paragraphe est donc de proposer un type de grille de propriétés compatibles avec le modèle SHDOM, décrivant le plus fidèlement possible la géométrie des jets.

Une première possibilité consiste à utiliser directement une grille de propriétés 2D de même discrétisation spatiale que les sorties de codes aérothermochimiques. Dans ce cas, le code SHDOM doit pouvoir utiliser un système de coordonnées cylindriques où les points sont

repérés par leur altitude z et leur distance radiale r par rapport à l'axe du jet. La première abscisse z est de type cartésien et ne pose aucun problème particulier. La compatibilité de la méthode SHDOM avec l'abscisse radiale r doit être testée. Pour simplifier la démonstration, la discussion sera limitée aux seules géométries circulaires 2D. La Figure 3.3 représente une ligne de visée quelconque traversant ce milieu.

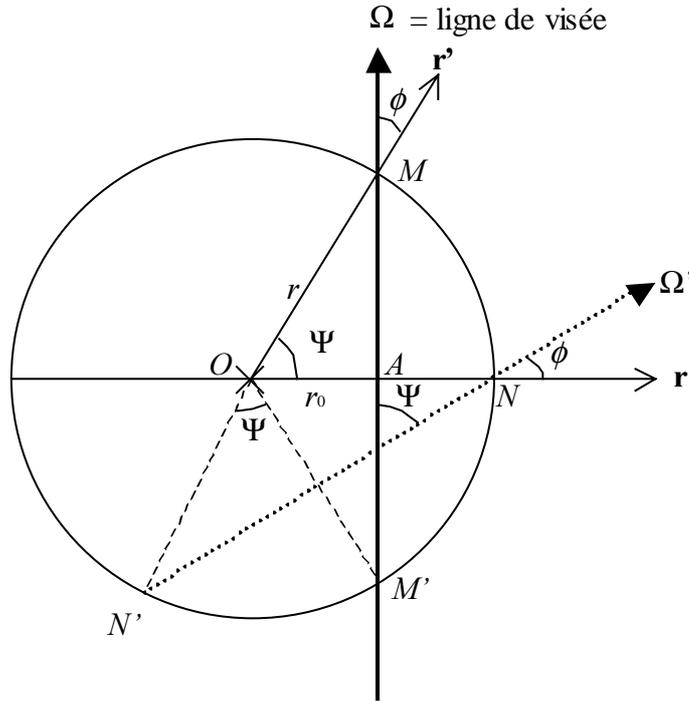


Figure 3.3 - Ligne de visée de direction Ω traversant au point M un milieu à symétrie circulaire de centre O

On souhaite calculer la luminance $R(M, \Omega)$ au point M dans la direction $\Omega = [M'M]$. Le point O correspond au centre du milieu circulaire. La droite (Or) désigne l'axe passant par le centre O coupant perpendiculairement la ligne de visée en A . Le point N de la droite (Or) et la direction $\Omega' = [N'N]$ sont obtenus par la rotation de centre O et d'angle $-\Psi$ respectivement du point M et de la direction de visée Ω . La droite (Or') est l'axe passant par le centre O et le point M . L'angle ϕ désigne l'angle entre les droites (Or') et (AM) . r et r_0 représentent les distances entre le centre O et respectivement les points M et A . Ceci étant posé, par construction, on peut écrire :

$$R(M, \Omega) = R(N, \Omega') = R(r, \phi) = R(r_0 / \sin \phi, \phi) \quad (3.44)$$

$$\phi = \frac{\pi}{2} - \Psi \quad (3.45)$$

Grâce à ces relations, il devient possible de réduire le nombre de coordonnées spatiales et angulaires utilisées pour décrire entièrement le champ de luminance de 3 $(x, y; \phi)$ à 2 (r, ϕ) , et d'utiliser directement la discrétisation spatiale du profil aérothermochimique tout en réduisant la mémoire de stockage. Cependant, cette approximation a des conséquences sur l'intégration spatiale de l'ETR le long de la ligne de visée considérée. L'abscisse s du point M sur la ligne de visée (AM) de direction Ω dépend de l'angle de rotation Ψ selon la relation :

$$s = AM = r_0 \tan \Psi = r_0 \tan \left(\frac{\pi}{2} - \phi \right) = r_0 \cot \phi \quad (3.46)$$

Comme r_0 est constant le long de la ligne de visée considérée, le membre de gauche de l'ETR devient par conséquent :

$$\frac{dR(M, \Omega)}{ds} \equiv \frac{dR(r, \phi)}{ds} \equiv \frac{dR(r_0/\sin \phi, \phi)}{d(r_0 \cot \phi)} \equiv -\frac{1}{r_0} \frac{dR(r_0/\sin \phi, \phi)}{(1 + \cot^2 \phi) d\phi} \quad (3.47)$$

Cette relation n'est valable qu'à condition que la dérivation spatiale soit effectuée dans la direction Ω . La forme de cette dernière relation montre qu'en coordonnées circulaires, la discrétisation spatiale est couplée avec la résolution angulaire. L'intégration spatiale de l'ETR devient alors très compliquée à effectuer. L'adaptation de la méthode SHDOM aux jets nécessite donc de transformer les profils axisymétriques issus des codes aérothermochimiques en une grille cartésienne 3D, au moyen de techniques d'interpolation spatiale telles que celles utilisées dans cette étude et présentées dans la suite de ce paragraphe.

Pour prendre en compte l'hétérogénéité des jets, une solution serait de définir une grille cartésienne au pas irrégulier dépendant de l'évolution locale de l'épaisseur optique et de la fonction source. Cette technique devrait notamment permettre d'optimiser la discrétisation spatiale dans certaines régions du jet et ainsi d'avoir une représentation plus fidèle du champ de rayonnement. Une étude a été réalisée en ce sens dans le cas d'un jet réaliste, et cette fonctionnalité a été ajoutée à la méthode SHDOM. Le champ de luminance en vue avant obtenu avec ce nouveau type de grille de propriétés, reproduisant les hétérogénéités de la grille de propriétés, n'était pas conforme à la géométrie du milieu. La solution d'utiliser une grille régulière a donc été retenue même si celle-ci ne favorise pas les régions du jet où les gradients du champ de luminance sont importants. Toutefois, ce type de grille évite les aberrations géométriques dans la cartographie du champ de rayonnement provenant d'une discrétisation spatiale lacunaire en certains endroits du milieu.

On appelle (X, Y, Z) la position d'un nœud quelconque de la grille de propriétés optiques dont le pas de discrétisation spatiale est arbitraire et où $(Z'Z)$ représente la direction de l'axe du jet. L'interpolation du profil sur la grille 3D en ce point se déroule selon les étapes suivantes :

1. On reporte la position des coordonnées du point (X, Y, Z) sur le profil axisymétrique à l'aide des relations suivantes :

$$z = Z_0 - Z \quad (3.48)$$

$$r = \sqrt{(X - X_0)^2 + (Y - Y_0)^2} \quad (3.49)$$

où (X_0, Y_0, Z_0) représente la position de l'intersection de l'axe du jet (X_0, Y_0) avec le plan de sortie de la tuyère d'équation $Z = Z_0$.

2. Les concentrations et les températures des constituants du jet sont évaluées au point (z, r) par interpolation bilinéaire du profil axisymétrique.
3. Après avoir défini la composition du jet en tout point de la grille 3D du modèle de transfert radiatif, les propriétés optiques du milieu sont évaluées en tenant compte des caractéristiques des différents constituants du jet.

L'algorithme utilisé pour réaliser la deuxième opération, est présenté en annexe (*cf.* annexe § 9.6).

L'émission de la tuyère (non prise en compte dans les cas tests effectués au cours de cette étude) et le masquage par le corps du propulseur peuvent être modélisés par un ensemble de cellules formant deux disques horizontaux, optiquement épais, centrés par rapport à l'axe du jet et entourés de cellules transparentes. La température de ces deux disques détermine le rayonnement qu'ils émettent. La tuyère sera donc représentée par un disque chaud et le corps du propulseur par un disque froid. L'utilisation de cette fonctionnalité peut induire des effets locaux de « fausse diffusion » [37] provenant des gradients importants de la fonction source et de l'extinction au voisinage de ces disques. En effet, comme les propriétés optiques du milieu sont interpolées entre les nœuds de la grille de propriétés, la transition entre une cellule transparente et une autre associée au masque peut être décrite sous la forme d'une droite dont la pente est inversement proportionnelle au pas de discrétisation spatiale. Dans ce cas, les disques de masquages ne représentent plus vraiment un corps de propulseur ou une tuyère mais plutôt un nuage optiquement épais évanescant sur ses bords. Cependant, ces effets

essentiellement locaux n'ont qu'une influence marginale sur le champ de rayonnement global du jet.

3.2.3. *Traitement de la luminance en fin de processus itératif*

La description de la signature d'un jet de moteur-fusée suppose que le rayonnement qu'il émet puisse être évalué non seulement sur des parois perpendiculaires à l'axe mais aussi sur les plans parallèles à ce dernier. Dans la suite, le jet sera supposé vertical de façon à ce que son axe de symétrie coïncide avec la direction privilégiée de la grille de propriétés, de la quadrature des ordonnées discrètes et de la base des harmoniques sphériques. La Figure 3.4 représente la géométrie de la grille de propriétés définissant le jet.

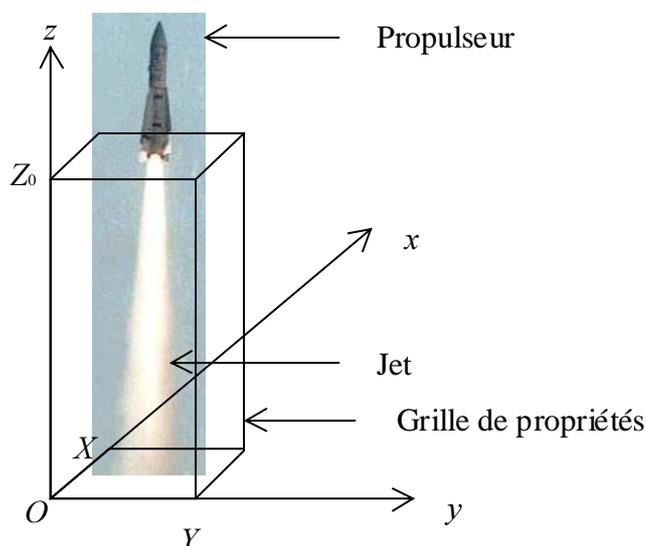


Figure 3.4 - Géométrie de la grille de propriétés optiques définissant le jet

Comme le jet est supposé axisymétrique, la connaissance du champ de rayonnement issu de l'une des parois verticales permet d'en déduire le champ provenant des autres parois par rotation successive de 90° . La méthode d'intégration spatiale de l'ETR à la fin du processus itératif a été améliorée afin de pouvoir calculer le champ de luminance issu du plan d'équation $x = X$. Les cellules situées sur les parois verticales de la grille représentent l'atmosphère environnant le jet. Leur fonction source et leur coefficient d'extinction seront supposés nuls dans cette étude. Ainsi, la contribution de ces parois au champ de rayonnement est négligeable et le risque d'erreurs induit par cette adaptation est faible. Les champs de luminance tels qu'ils seraient observés selon différents angles d'aspect sont reconstitués par concaténation des résultats issus des plans de sorties verticaux (d'équation $x = X$) et

horizontaux (d'équation $z = Z_0$) en prenant en compte l'effet de « perspective » comme cela est présenté sur la Figure 3.5. Dans ce cas, la discrétisation spatiale des plans de sortie, est modifiée selon les relations :

$$\Delta x' = \Delta x \cos \theta = \mu \Delta x \quad (3.50)$$

$$\Delta z' = \Delta z \sin \theta = \Delta z \sqrt{1 - \mu^2} \quad (3.51)$$

L'intensité $I(\Omega)$ représente la puissance lumineuse par unité d'angle solide émise par l'ensemble du jet dans la direction Ω . Elle est évaluée par l'intégration surfacique des champs de luminance concaténés selon le principe présenté ci-dessus d'après la relation :

$$I(\Omega) = \iint R(x', y', z' = Z_0; \Omega) dx' dy' + \iint R(x' = X, y', z'; \Omega) dy' dz' \quad (3.52)$$

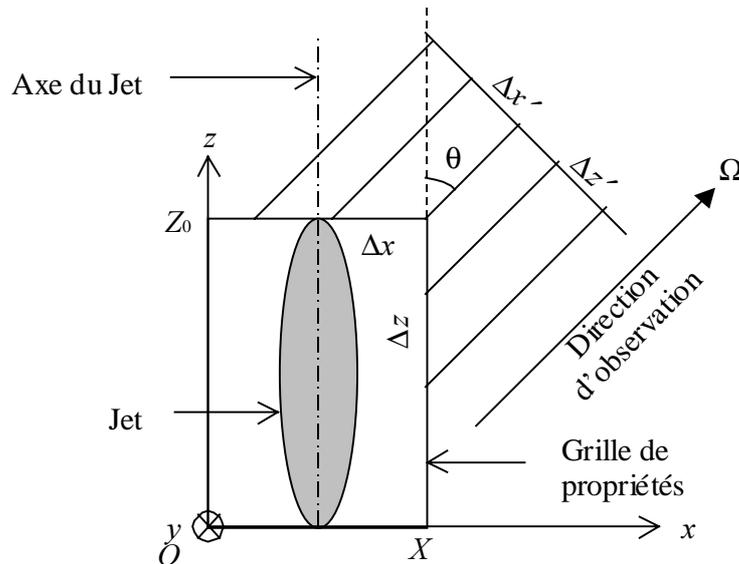


Figure 3.5 – Projection du champ de rayonnement sur un plan perpendiculaire à la direction d'observation : concaténation des résultats issus de plans de sortie différents

3.3. Conclusion

Une méthode des ordonnées discrètes itérative 3D, développée initialement pour l'étude des scènes atmosphériques, a été adaptée aux jets de moteur-fusée. La particularité de ce modèle de transfert radiatif réside dans l'utilisation des harmoniques sphériques pour évaluer l'intégrale de diffusion. Conçue pour calculer les champs de luminance plutôt que les flux radiatifs, la méthode SHDOM paraît donc être en mesure d'évaluer la signature des jets dans l'UV. En raison de son application première, le code SHDOM a dû être modifié de façon

à prendre en compte les caractéristiques optiques et géométriques des jets. On a montré la nécessité de transformer les profils axisymétriques donnant la composition des jets en grilles cartésiennes 3D régulières. Le champ de luminance obtenu en sortie du code SHDOM fait l'objet d'un traitement spécifique.

4. PHÉNOMÈNES PHYSICO-CHIMIQUES À L'ORIGINE DU RAYONNEMENT ULTRAVIOLET

Ce chapitre est consacré à la caractérisation des propriétés optiques locales des constituants des jets de propulseurs à propergols solides composites aluminisés (gaz et particules d'alumine) dans le domaine UV "*Solar Blind*". Dans ce domaine spectral, l'émission des jets provient principalement du radical hydroxyle (OH), de la recombinaison radiative du monoxyde de carbone (CO) avec l'oxygène atomique (O) et de l'émission thermique des particules d'alumine [2]. Ces particules sont, en outre, à l'origine des phénomènes d'absorption et de diffusion du rayonnement.

Dans une première partie (§ 4.1 et 4.2), les interactions entre le rayonnement et les gaz (le radical OH et le système CO + O) sont étudiées pour des concentrations et des températures représentatives du centre de la zone de post-combustion d'un jet de propulseur à propergol solide aluminisé. Cette région du jet a été choisie car elle contribue de façon importante à la signature UV des jets. Les mécanismes réactionnels conduisant à l'émission dite « de chimiluminescence » de ces espèces gazeuses, sont tout d'abord identifiés. Après une présentation succincte des propriétés spectroscopiques de OH et de CO + O, une modélisation des interactions entre ces molécules et le rayonnement dans le domaine UV, est proposée. Enfin, l'influence de ces dernières sur le rayonnement, est évaluée entre 240 nm et 280 nm. Dans cette étude, les ordres de grandeur des concentrations et des températures des gaz sont estimées d'après les résultats de calcul du code aérothermochimique SPF (Standard Plume Flowfield) [1].

Dans une seconde partie (§ 4.3), les propriétés optiques des particules d'alumine (coefficient d'extinction, albédo de diffusion simple et fonction de phase) sont évaluées. La théorie de Mie est utilisée pour calculer ces paramètres optiques à partir de l'indice complexe de réfraction et de la taille des particules en supposant que ces dernières sont sphériques et homogènes. L'indice complexe de l'alumine et les distributions granulométriques des particules sont étudiés à l'aide des données disponibles dans la littérature. Enfin, la variabilité des propriétés optiques des particules est évaluée en fonction des incertitudes sur la valeur de l'indice complexe et sur la taille des particules.

4.1. Chimiluminescence de OH

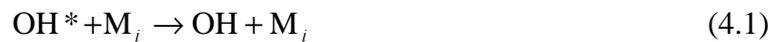
D'après Kolb *et al.* [2] et Lyons *et al.* [3], l'émission de chimiluminescence de OH contribue au rayonnement émis par les jets dans le proche UV. Cette émission provient de la désexcitation radiative de $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$ vers l'état fondamental $\text{OH}(X^2\Pi)$. Dans la suite, ces états moléculaires seront notés respectivement OH^* et OH. L'objet de ce paragraphe est d'évaluer les interactions du système OH-OH* avec le rayonnement UV dans les jets en prenant en compte la cinétique chimique de formation de OH^* et les propriétés spectroscopiques des états $\text{OH}(X^2\Pi)$ et $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$.

Dans cette partie du chapitre, les réactions chimiques conduisant à l'émission de OH^* sont identifiées. Les propriétés spectroscopiques de OH et de OH^* sont utilisées afin de calculer le coefficient d'absorption du système OH-OH* et la puissance volumique angulaire d'émission spontanée de OH^* . Ensuite, le mécanisme réactionnel de formation de OH^* est utilisé pour évaluer la population de cet état excité. Enfin, une étude des phénomènes d'émission et d'absorption permet d'évaluer l'influence du radical OH sur la signature des jets dans le domaine UV.

4.1.1. Mécanisme réactionnel contribuant à l'émission de chimiluminescence de OH^*

L'émission de chimiluminescence de OH^* dépend des processus de formation et de désactivation de OH^* qui peuvent être regroupés en différentes catégories [51] :

- La formation par voie chimique de OH^* ;
- La désactivation collisionnelle par une espèce gazeuse quelconque, notée M_i selon la réaction :



- L'émission spontanée :



- L'absorption du rayonnement par OH :



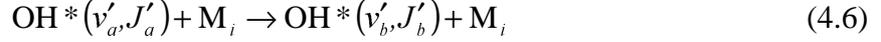
- L'émission stimulée :



- La prédissociation :



- Le changement de niveau rovibrationnel :



L'évolution temporelle de la concentration molaire $[\text{OH}^*]$ (en mol cm^{-3}) est régie par l'équation cinétique suivante :

$$\frac{dN_2}{dt} = F - N_2(Q + D) - N_2 A_{21} + N_1 B_{12} U - N_2 B_{21} U \quad (4.7)$$

où $N_1 = [\text{OH}]$ et $N_2 = [\text{OH}^*]$. F représente la vitesse de formation de OH^* par voie chimique et Q et D sont les taux respectifs de désactivation collisionnelle et de prédissociation. La population globale de l'état OH^* n'est pas affectée par les échanges de niveaux rovibrationnels dus aux collisions. Les coefficients d'Einstein A_{21} (en s^{-1}), B_{12} et B_{21} (en $\text{m}^3 \text{J}^{-1} \text{s}^{-2}$) sont respectivement associés aux probabilités d'émission spontanée, d'absorption et d'émission stimulée et U (en $\text{J m}^{-3} \text{Hz}^{-1}$) est la densité de rayonnement traversant le milieu.

Comme $B_{21} = \frac{g_1}{g_2} B_{12}$ où g_1 et g_2 sont les degrés de dégénérescence des états électroniques

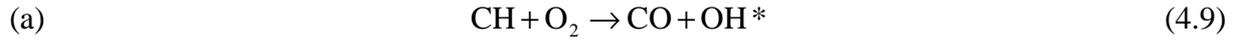
de OH , la relation (4.7) peut être réécrite sous la forme suivante :

$$\frac{dN_2}{dt} = F - N_2(Q + D + A_{21}) + \left(N_1 - N_2 \frac{g_1}{g_2} \right) B_{12} U \quad (4.8)$$

Dans la suite de ce paragraphe, le mécanisme contribuant à la formation de OH^* par voie chimique est étudié ainsi que les processus de désactivation de cet état excité par collision avec d'autres espèces gazeuses.

Levin *et al.* [51] ont constaté que la température vibrationnelle de OH^* pouvait s'élever jusqu'à 7000 K et la température rotationnelle jusqu'à 3000 K, voire 4000 K dans des plasmas hors d'équilibre thermodynamique local et des jets de moteurs-fusées à haute altitude. L'écart entre ces deux températures peut être expliqué par l'origine chimique de OH^* . De fait, il existe un consensus pour considérer que le rayonnement produit par OH^* est essentiellement de nature chimiluminescente et non pas thermique, sauf dans le cas des mélanges composés d'hydrogène et d'oxygène [52] [53]. Ce résultat a été confirmé par Wolfhard et Hinke [54] dans le cas de flammes $\text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{CO}$ pour des pressions de 10 mm Hg à 20 mm Hg environ, et dans des jets de moteurs-fusées sous une pression de

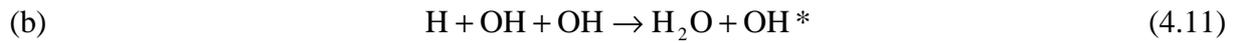
20 mm Hg, correspondant à une altitude de 30 km environ. Différentes études ont été menées depuis une quarantaine d'années afin de mettre en évidence le processus de formation de OH*, en particulier dans des flammes d'hydrocarbure à basse pression. Les mécanismes proposés par Porter *et al.* [55] (dans des flammes d'acétylène et de méthane à basse pression) et par Becker *et al.* [56] privilégient la réaction suivante :



dont la constante de réaction pour des températures comprises entre 800 K et 2000 K a pour valeur approchée [55] :

$$k_a = 1.10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1} \text{ molécule}^{-1} \quad (4.10)$$

Cette réaction est utilisée par Dandy et Vosen [57] pour modéliser l'émission chimiluminescente de OH* dans des flammes méthane-air. Cependant, Zeegers et Alkemade [58] ont établi que dans les flammes d'acétylène à la pression atmosphérique, OH* provenait plutôt de la réaction :



Malgré une dépendance en température constatée expérimentalement, Zeegers et Alkemade [58] ont attribué à la constante de vitesse de cette réaction la valeur suivante :

$$k_b = 2.10^{-32} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1} \text{ molécule}^{-2} \quad (4.12)$$

D'après Wolfhard et Hinke [54], dans les jets riches en combustible, deux autres réactions interviennent :



Ces auteurs ne donnent aucune constante de vitesse relative à ces réactions. Par ailleurs, d'autres mécanismes de formation de OH* sont proposés dans la littérature, par exemple :

- La collision entre H₂O et un gaz rare (Ar ou Kr) dans un état triplet métastable [59] ;
- La collision entre OH et une molécule d'azote dans un état excité N₂ (A³Σ_u⁺) [60].

Cependant, d'après les données issues des codes aérothermochimiques disponibles, il est difficile de connaître la concentration exacte de tous ces réactifs. Pour conclure, d'après

Lyons *et al.* [3], le mécanisme de formation de OH* le plus probable dans les jets de moteur-fusée à basse altitude est celui représenté par la réaction (4.11). En effet, les conditions de pression sont dans ce cas, proches des expériences réalisées par Zeegers et Alkemade [58].

Les constantes k_i (en $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$) de désactivation collisionnelle de OH* (*cf.* réaction 4.1) dépendent des sections efficaces σ_i associées aux différentes espèces gazeuses M_i et de la température des gaz selon les relations [57], [61] :

$$\left\{ \begin{array}{l} k_i = N_A \sigma_i \sqrt{\frac{8R}{\pi M_{\text{OH}}}} \sqrt{T} \sqrt{1 + \frac{M_{\text{OH}}}{M_{M_i}}} \\ = 2.13 \cdot 10^{11} \sigma_i \sqrt{T} \sqrt{1 + \frac{M_{\text{OH}}}{M_{M_i}}} \end{array} \right. \quad (4.15)$$

$$Q = \sum_i k_i [M_i]$$

où les sections efficaces de désactivation σ_i sont exprimées en Å^2 . D'après Garland et Crosley [61], l'évolution de ces grandeurs est telle que les constantes de réactions diminuent avec la température. En effet, ce mode de désexcitation de OH* nécessite des forces d'attraction entre les molécules, et plus l'énergie des collisions est basse, plus longtemps les molécules restent dans le puits de potentiel à l'intérieur duquel OH* cède son énergie électronique à M_i . Les sections efficaces σ_i calculées par Garland et Crosley [61] sont utilisées comme valeurs de référence dans les milieux chauds [57]. Celles associées aux principaux gaz présents dans les jets sont présentées sur le tableau suivant :

Température (K)	500.	1000.	1500.	2000.	2500.
$\sigma_{\text{NO}} (\text{Å}^2)$	32.	20.	14.	11.	8.5
$\sigma_{\text{CO}} (\text{Å}^2)$	28.	16.	11.	7.7	5.7
$\sigma_{\text{CO}_2} (\text{Å}^2)$	37.	20.	14.	9.6	7.1
$\sigma_{\text{H}_2\text{O}} (\text{Å}^2)$	62.	38.	28.	21.	17.
$\sigma_{\text{N}_2} (\text{Å}^2)$	1.8	0.8	0.5	0.3	0.2
$\sigma_{\text{O}_2} (\text{Å}^2)$	14.	8.9	6.5	4.9	3.8

Tableau 4.1 – Sections efficaces de désactivation de OH* par des gaz présents dans un jet de moteur-fusée [61]

D'autres auteurs ont évalué les sections efficaces σ_i associées à d'autres espèces chimiques comme NH_3 , N_2O , des terres rares, des hydrocarbures légers, *etc.* Daily [62] diffuse sur Internet une revue exhaustive de ces grandeurs physiques. Cependant, les données

présentées dans cette compilation ne sont pas exploitables dans le cas des jets chauds car la plupart d'entre elles ne sont valables qu'à température ambiante (298 K).

4.1.2. Propriétés spectroscopiques de OH et de OH*

L'objet de ce paragraphe est de décrire succinctement les propriétés des niveaux électroniques de OH et de présenter les hypothèses permettant d'évaluer l'intensité de chaque transition en s'appuyant sur la description par Herzberg [63] des caractéristiques physiques des molécules diatomiques.

L'état électronique d'une molécule est caractérisé par le moment cinétique orbital du nuage électronique. Pour $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$ et $\text{OH}(X^2\Pi)$, celui-ci vaut respectivement $\Lambda = 0$ et $\Lambda = 1$. L'exposant $2S + 1 = 2$ correspond à la multiplicité du spin $S = 1/2$ des électrons. Lorsque $\Lambda > 0$, il existe un champ magnétique interne induit par la rotation des électrons. Celui-ci est à l'origine d'une précession du spin dans la direction de l'axe internucléaire avec une composante constante donnée par le nombre quantique Σ qui, pour $\text{OH}(X^2\Pi)$, prend la valeur $+1/2$ et $-1/2$. Le nombre quantique du moment angulaire électronique total autour de l'axe internucléaire $\Omega = |\Lambda + \Sigma|$ permet de décrire la levée de dégénérescence du spin du doublet $\text{OH}(X^2\Pi)$. Pour cette molécule, Ω peut prendre les valeurs $1/2$ et $3/2$, et les deux états électroniques associés sont notés respectivement $\text{OH}(X^2\Pi_{1/2})$ et $\text{OH}(X^2\Pi_{3/2})$.

Pour les vibrations et les rotations d'une molécule dans les différents niveaux électroniques, on utilise le modèle du rotateur vibrant et on pose :

$$G_v = \omega_e \left(v + \frac{1}{2} \right) - \omega_e x_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots \quad (4.16)$$

$$f_v(J) = B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 \quad (4.17)$$

où v désigne les différents niveaux vibrationnels et $J \geq \Omega$ le moment cinétique total de rotation des noyaux. Si N désigne le moment de rotation nucléaire, alors on peut écrire pour les doublets $\text{OH}(A^2\Sigma^+)$, $\text{OH}(X^2\Pi_{1/2})$ et $\text{OH}(X^2\Pi_{3/2})$:

$$J = N + \Omega \quad (4.18)$$

Cette présence du spin électronique dans le moment cinétique total est à l'origine du dédoublement des niveaux rotationnels. Les valeurs des constantes ω_e et $\omega_e x_e$ pour

$\text{OH}(A^2\Sigma^+)$ et $\text{OH}(X^2\Pi)$ sont fournies par Herzberg [63], tandis que les énergies des niveaux rovibrationnels ont été évaluées par Coxon [64] en ajustant des lois polynomiales du type des relations (4.16) et (4.17) à des données expérimentales tirées de la littérature.

Les transitions ${}^2\Pi_{\Omega=1/2, 3/2} \leftrightarrow {}^2\Sigma^+$ obéissent aux règles suivantes :

$$\text{Moment cinétique total :} \quad \Delta J = J' - J'' = 0, \pm 1 \quad (4.19)$$

$$\text{Conservation du spin électronique :} \quad \Delta S = 0 \quad (4.20)$$

avec la restriction que les transitions $J' = 0 \leftrightarrow J'' = 0$ sont interdites.

L'intensité des raies est déterminée par les coefficients d'Einstein qui sont évalués à partir des intégrales de recouvrement des fonctions d'onde de l'état excité et de l'état fondamental. Ces dernières peuvent être décomposées en produit d'une fonction électronique et d'une fonction rovibrationnelle selon la relation [63] :

$$\psi(r, r_e) = \psi_e(r, r_e) \psi_{v,J}(r) \quad (4.21)$$

où r et r_e représentent les positions respectives des 2 noyaux (c'est-à-dire la distance internucléaire) et des 9 électrons. Les transitions électroniques sont caractérisées par un opérateur moment dipolaire $M_e(r, r_e)$. A partir de cette grandeur, on peut définir un moment de transition électronique par la relation [65] :

$$R_e(r) = \int \psi'_e(r, r_e) M_e(r, r_e) \psi''_e(r, r_e) dr_e \quad (4.22)$$

La probabilité de transition entre deux niveaux rovibrationnels est donnée par la relation [65] :

$$P_{v''J''}^{v'J'} = \left| \int_0^\infty \psi_{v'J'}(r) R_e(r) \psi_{v''J''}(r) dr \right|^2 \quad (4.23)$$

Le taux d'émission spontanée (en s^{-1}) de l'état $({}^2\Sigma^+)_{v'J'}$ vers l'état $({}^2\Pi_{\Omega=1/2, 3/2})_{v''J''}$, représenté par le coefficient d'Einstein $A_{v''J''}^{v'J'}$ (A_{21}), dépend de la probabilité de transition selon la relation [65] :

$$A_{v''J''}^{v'J'} = \frac{64\pi^4}{3hc^3} (\nu_{v''J''}^{v'J'})^3 P_{v''J''}^{v'J'} \frac{S_{J''}^{J'}}{2J'+1} \quad (4.24)$$

où $\nu_{v''J''}^{v'J'}$ représente la fréquence du rayonnement émis et $S_{J''}^{J'}$ l'intensité de la raie rotationnelle qui est normalisée par la relation [65] :

$$\sum_{J''} S_{J''}^{J'} = 2J + 1 \quad (4.25)$$

La puissance lumineuse émise par une molécule pour une raie donnée est égale au produit de l'énergie du photon émis par le taux d'émission selon la relation [63] :

$${}^E P_{\nu'' J''}^{\nu' J'} = n^{\nu' J'} h \nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'} A_{\nu'' J''}^{\nu' J'} \quad (4.26)$$

où $n^{\nu' J'}$ représente la population du niveau rovibrationnel associé de OH*. En prenant en compte la concentration de OH*, la puissance volumique angulaire émise par cette espèce, est donnée par la relation :

$${}^E I_{\nu'' J''}^{\nu' J'} = \frac{1}{4\pi} [\text{OH}^*] N_A n^{\nu' J'} h \nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'} A_{\nu'' J''}^{\nu' J'} \quad (4.27)$$

où N_A est le nombre d'Avogadro. Si on considère un profil spectral des raies $P(\nu, \nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'})$, l'émission spontanée de OH* est exprimée en puissance volumique angulaire spectrale par la relation :

$$\begin{aligned} \hat{J}_\nu^{\text{OH}} &= \sum_{\nu' J' \rightarrow \nu'' J''} {}^E I_{\nu'' J''}^{\nu' J'} P(\nu, \nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'}) \\ &= \frac{1}{4\pi} [\text{OH}^*] N_A h \sum_{\nu' J' \rightarrow \nu'' J''} n^{\nu' J'} \nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'} A_{\nu'' J''}^{\nu' J'} P(\nu, \nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'}) \end{aligned} \quad (4.28)$$

La nature de ce profil spectral est discutée au paragraphe suivant.

L'absorption d'un rayonnement incident est régie par le coefficient d'Einstein $B_{\nu'' J''}^{\nu' J'}$ (B_{12}) qui est relié à $A_{\nu'' J''}^{\nu' J'}$ par la relation [65] :

$$B_{\nu'' J''}^{\nu' J'} = \frac{1}{4\pi} \frac{2J' + 1}{2J'' + 1} \frac{c^3}{2h(\nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'})^3} A_{\nu'' J''}^{\nu' J'} \quad (4.29)$$

Si $U_{\nu'' J''}^{\nu' J'}(\mathbf{s}) = \frac{1}{c} \int_{4\pi} R_{\nu'' J''}^{\nu' J'}(\mathbf{s}, \Omega) d\Omega$ représente la densité d'énergie spectrale à la fréquence de transition $\nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'}$ et $n_{\nu'' J''}$ la population du niveau rovibrationnel de OH considéré, l'énergie absorbée par molécule, diminuée de l'émission stimulée a pour valeur [63] :

$${}^A P_{\nu'' J''}^{\nu' J'} = \left(n_{\nu'' J''} - n^{\nu' J'} \frac{g^{\nu' J'}}{g_{\nu'' J''}} \right) B_{\nu'' J''}^{\nu' J'} h \nu_{\nu'' J''}^{\nu' J'} U_{\nu'' J''}^{\nu' J'}(\mathbf{s}) \quad (4.30)$$

La puissance volumique angulaire absorbée localement est exprimée par la relation :

$${}^A I_{\nu''J''}^{\nu'J'} = N_A \left([\text{OH}] n_{\nu''J''} - [\text{OH}^*] n^{\nu'J'} \frac{g^{\nu'J'}}{g_{\nu''J''}} \right) B_{\nu''J''}^{\nu'J'} h \nu_{\nu''J''}^{\nu'J'} \frac{R_{\nu''J''}^{\nu'J'}(\mathbf{s}, \Omega)}{c} \quad (4.31)$$

En prenant en compte le profil des raies, on a :

$${}^A \tilde{I}_{\nu''J''}^{\nu'J'} = \frac{N_A}{c} \left([\text{OH}] n_{\nu''J''} - [\text{OH}^*] n^{\nu'J'} \frac{g^{\nu'J'}}{g_{\nu''J''}} \right) B_{\nu''J''}^{\nu'J'} h \nu_{\nu''J''}^{\nu'J'} \int P(\nu, \nu_{\nu''J''}^{\nu'J'}) R_{\nu}(\mathbf{s}, \Omega) d\nu \quad (4.32)$$

Le coefficient d'absorption de OH est donc défini par la relation :

$$K_{\text{Abs}}^{\text{OH}} = \frac{N_A}{c} \left[\begin{array}{l} \sum_{\nu''J'' \rightarrow \nu'J'} [\text{OH}] N_A n_{\nu''J''} B_{\nu''J''}^{\nu'J'} h \nu_{\nu''J''}^{\nu'J'} P(\nu, \nu_{\nu''J''}^{\nu'J'}) \\ - \sum_{\nu'J' \rightarrow \nu''J''} [\text{OH}^*] N_A n^{\nu'J'} \frac{g^{\nu'J'}}{g_{\nu''J''}} B_{\nu''J''}^{\nu'J'} h \nu_{\nu''J''}^{\nu'J'} P(\nu, \nu_{\nu''J''}^{\nu'J'}) \end{array} \right] \quad (4.33)$$

4.1.3. Evaluation du rayonnement émis et absorbé par OH

L'objet de ce paragraphe est d'évaluer les ordres de grandeur typiques des concentrations de OH et de OH* dans la zone de postcombustion d'un jet de propulseur à propergol solide composite en utilisant les données aérothermochimiques issues du code SPF [1] et d'en déduire l'influence des interactions entre ces espèces gazeuses et le rayonnement UV du jet. Dans cette région du jet, il règne une température de translation d'environ 2500 K, la pression est de l'ordre de 1 atm et les valeurs des concentrations des principales espèces gazeuses sont :

$$\begin{aligned} [\text{OH}] &= 1. \cdot 10^{-7} \text{ mol cm}^{-3}, [\text{H}] = 1. \cdot 10^{-7} \text{ mol cm}^{-3}, [\text{CO}] = 5. \cdot 10^{-7} \text{ mol cm}^{-3}, \\ [\text{CO}_2] &= 3.5 \cdot 10^{-7} \text{ mol cm}^{-3}, [\text{O}] = 2.5 \cdot 10^{-8} \text{ mol cm}^{-3}, [\text{H}_2\text{O}] = 1. \cdot 10^{-6} \text{ mol cm}^{-3}, \\ [\text{NO}] &= 1. \cdot 10^{-9} \text{ mol cm}^{-3}, [\text{HCl}] = 3.5 \cdot 10^{-7} \text{ mol cm}^{-3}. \end{aligned}$$

Les particules d'alumine sont considérées comme une phase condensée distincte des espèces gazeuses puisqu'elles sont traitées ainsi dans le code SPF. En raison de l'absence de données supplémentaires, le reste des molécules gazeuses majoritaires (de concentration d'environ $2.5 \cdot 10^{-6} \text{ mol cm}^{-3}$) sera supposé être constitué de N_2 . La prise en compte, dans ces molécules restantes de 20% de O_2 , ne modifie pas sensiblement les résultats présentés ci-dessous. Outre ces données, la population de l'état OH* sera supposée très faible devant celle de OH. Cette hypothèse, qui sera vérifiée plus bas, permet de :

- Considérer que la concentration [OH] est indépendante de la concentration [OH*]

- Négliger l'influence de l'émission stimulée devant l'absorption dans l'évaluation de $[\text{OH}^*]$ (*cf.* relation (4.8)) et dans le calcul du coefficient d'absorption (*cf.* relation (4.33)).

Les coefficients d'Einstein rovibrationnels utilisés dans cette étude ont été calculés par Chidsey et Crosley [65] et par Dimpfl et Kinsey [66] pour les bandes vibrationnelles 0-0, 1-0 et 1-1. Les coefficients d'Einstein vibrationnels $A_{v',v''}^v$ mesurés par Crosley et Lengel [67] ont été utilisés pour déterminer l'influence relative de 13 bandes vibrationnelles comprises entre 260 nm et 360 nm, sur l'émission et l'absorption de OH.

D'après la réaction (4.11), la vitesse de formation de OH^* par voie chimique est donnée par la relation :

$$F = K [\text{H}][\text{OH}]^2 \quad (4.34)$$

soit $F = 6 \cdot 10^{-6} \text{ mol cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$ environ au centre de la zone de post-combustion. Pour mettre en évidence le rôle de l'absorption dans la formation de OH^* (*cf.* réaction (4.3)), il est nécessaire de comparer la valeur du terme F avec celle de $N_1 B_{12}$ qui représente le taux de formation de cet état excité par absorption. Pour effectuer cette comparaison, il est intéressant d'évaluer la quantité de rayonnement nécessaire pour obtenir un taux de formation par absorption comparable à la valeur de F . Cette énergie radiative sera ensuite comparée aux valeurs des luminances émises par un jet dans l'UV. D'après Dimpfl et Kinsey [66], la valeur de B_{12} est inférieure à $10^{18} \text{ m}^3 \text{ J}^{-1} \text{ s}^{-2}$. Ainsi, en prenant en compte la concentration de OH, la valeur de U devrait donc être supérieure à $6 \cdot 10^{-17} \text{ J m}^{-3} \text{ Hz}^{-1}$, soit $2 \cdot 10^{-1} \text{ J m}^{-3} \mu\text{m}^{-1}$ ou encore une luminance de $5 \cdot 10^6 \text{ W m}^{-2} \mu\text{m}^{-1} \text{ sr}^{-1}$, ce qui est plus grand de plusieurs ordres de grandeurs que le rayonnement effectivement émis par les jets. L'absorption de OH n'a donc pratiquement aucune influence sur la formation de OH^* .

A l'aide de la relation (4.15), le taux de désexcitation radiative de OH^* (*cf.* réaction (4.1)) a été estimé à environ $Q = 4 \cdot 10^8 \text{ s}^{-1}$, soit trois ordres de grandeurs de plus que les coefficients d'Einstein A_{21} . Ainsi, la désactivation collisionnelle est prépondérante sur l'émission spontanée. Par comparaison, on obtient un taux de prédissoiation D (*cf.* réaction (4.5)) équivalent à Q lorsque $J' > 31.5$ pour $v' = 0$, $J' > 22.5$ pour $v' = 1$ et $J' > 12.5$ pour $v' = 2$ [51]. La population relative des niveaux rovibrationnels est représentée sur le tableau suivant pour une température vibrationnelle de 7000 K et rotationnelle de 3000 K.

	$v' = 0$		$v' = 1$		$v' = 2$	
Niveau rotationnel	$J' = 0$	$J' = 30.5$	$J' = 0$	$J' = 22.5$	$J' = 0$	$J' = 12.5$
Population relative	1	0.001	0.54	0.01	0.30	0.01

Tableau 4.2 – Population des niveaux rotationnels pour une température vibrationnelle de 7000 K et rotationnelle de 3000 K

Les niveaux rovibrationnels qui ne sont pas concernés par la prédissociation de OH* sont majoritairement peuplés. C'est pourquoi la valeur de [OH*] sera supposée ne pas dépendre de cette réaction. Le caractère prédissociatif des autres niveaux peut être pris en compte dans le calcul des interactions entre OH* et le rayonnement sous la forme d'absence d'émission des bandes spectrales associées.

D'après ces résultats, la formation par voie chimique et la désactivation collisionnelle sont les phénomènes prédominants dans la cinétique de OH*. En appliquant le principe d'évolution quasi-stationnaire ($\frac{d[\text{OH}^*]}{dt} = F - Q[\text{OH}^*] \equiv 0$) [68], la concentration de OH* a donc pour valeur $[\text{OH}^*] = \frac{F}{Q} = 1.5 \cdot 10^{-14} \text{ mol cm}^{-3}$. L'hypothèse consistant à supposer que [OH*] est très faible devant [OH] est ainsi vérifiée.

Le temps moyen entre deux échanges de niveaux rovibrationnels (*cf.* réaction (4.6)) est de l'ordre de la nanoseconde [51] puisque les sections efficaces associées à ce phénomène sont comparables à celles associées à la désactivation collisionnelle électronique σ_i . Cette durée est plus faible de trois ordres de grandeurs environ que le temps de vie radiatif de OH*. Mais les probabilités de transition dépendent de la nature de l'échange de niveaux provoqué par la collision. D'après les résultats expérimentaux de Levin *et al.* [51], les niveaux rovibrationnels se répartissent selon une température vibrationnelle plus élevée (pouvant atteindre 7000 K) que la température rotationnelle (3000 K environ). Comme la redistribution rotationnelle est efficace, la température de rotation sera supposée égale à la température de translation.

Dans la suite de ce paragraphe, le rôle de l'absorption de OH dans l'ETR est estimé et la puissance volumique angulaire émise par OH* est évaluée pour les concentrations de OH et de OH* déterminées ci-dessus et dans une gamme de températures représentatives de celles existant dans les jets.

Le profil spectral des raies $P(v, v', j')$ provient de deux phénomènes :

- La durée de vie des états $\tau^{v',j'}$ (en secondes) qui est à l'origine des profils Lorentz ;
- La vitesse d'agitation des molécules qui se manifeste par l'élargissement Doppler.

Le profil Lorentz est exprimé par une relation du type :

$$P_L(v, v_{v',j'}) = \frac{1}{4\pi^2 \tau_{v',j'} \left[(v - v_{v',j'})^2 + \frac{1}{(4\pi \tau_{v',j'})^2} \right]} \quad (4.35)$$

La largeur à mi-hauteur du profil Lorentz a pour valeur :

$$\Delta_L v = \frac{1}{2\pi \tau_{v',j'}} \quad (4.36)$$

D'après les résultats présentés ci-dessus, la durée de vie des niveaux rovibrationnels de OH* est de quelques nanosecondes. De ce fait, la largeur Lorentz est légèrement inférieure à 1 GHz.

Le profil Doppler dépend de la température de translation T selon la relation :

$$P_D(v, v_{v',j'}) = \frac{c}{v_0} \sqrt{\frac{M_{OH}}{2\pi R_b T}} \exp\left[-\frac{M_{OH} c^2}{2 R_b T} \left(\frac{v - v_{v',j'}}{v_{v',j'}}\right)^2\right] \quad (4.37)$$

La largeur Doppler à mi-hauteur est égale par conséquent à :

$$\Delta_D v = 2 v_{v',j'} \sqrt{\frac{2 R_b T}{M_{OH} c^2} \ln 2} = 1.737 \cdot 10^{-7} \sqrt{T} v_{v',j'} \quad (4.38)$$

où R_b est la constante des gaz parfaits et $M_{OH} = 0.017 \text{ kg mol}^{-1}$ la masse molaire de OH. $v_{v',j'}$ et $\Delta_D v$ sont exprimés dans la même unité spectrale et la température translationnelle T est en kelvins. Cet élargissement spectral est, dans le domaine UV, proche de 10 GHz, ce qui est plus grand que la largeur Lorentz. En première approximation, le profil de raie sera donc supposé être de type Doppler.

La Figure 4.1 représente le coefficient d'absorption molaire de OH évalué pour les bandes 0-0, 1-0 et 1-1. Les données aérothermochimiques disponibles fournissent la température de translation des gaz. Aucune information sur les températures vibrationnelles et rotationnelles n'est explicitement fournie. Comme la molécule OH est un radical très réactif formé par voie chimique, ces grandeurs sont difficiles à évaluer. C'est pourquoi la gamme de

températures rotationnelles et vibrationnelles utilisée ici est semblable à celle déterminée par Levin *et al.* [51] pour OH*.

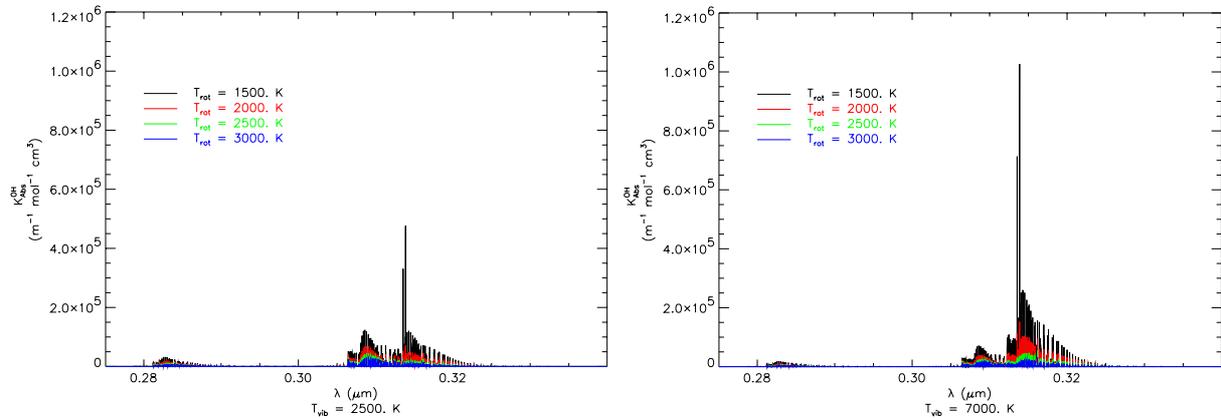


Figure 4.1 – Coefficient d'absorption molaire de OH en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures rotationnelles et vibrationnelles

L'absorption molaire diminue avec la température rotationnelle. L'influence de la bande 1-1 est prépondérante entre 310 nm et 320 nm. Dans ce domaine spectral, l'absorption est très sensible à la température vibrationnelle car, contrairement aux deux autres, la bande 1-1 dépend de la population du niveau $v''=1$. Sur les courbes présentés ici, seules trois bandes en dehors du domaine spectral "Solar Blind" ont été prises en compte. A partir des données fournies par Crosley et Lengel [67], il est possible de comparer l'absorption des bandes vibrationnelles comprises entre 240 nm et 280 nm, à celle de la bande 0-0.

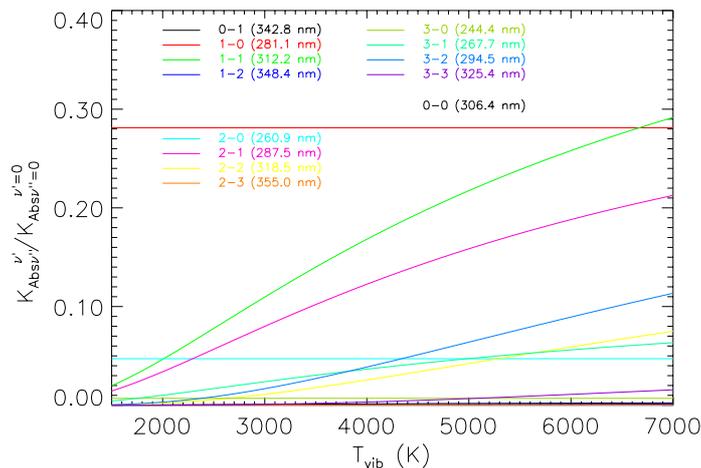


Figure 4.2 - Coefficients d'absorption relatifs à la bande 0-0 des bandes de OH

D'après les résultats présentés sur la Figure 4.2., le coefficient d'absorption des bandes 2-0, 3-0 et 3-1 ne représente au plus que 7% de celui de la bande 0-0, c'est pourquoi il est majoré par $10^5 \text{ m}^{-1} (\text{mol cm}^{-3})^{-1}$. Comme la concentration de OH est de l'ordre de $10^{-7} \text{ mol cm}^{-3}$, le coefficient d'absorption de OH est donc inférieur à 0.01 m^{-1} . En raison de la

faiblesse de cette valeur et comme la longueur d'un jet de propulseur est au plus de quelques mètres et son diamètre de quelques centimètres, l'absorption de OH est négligeable dans l'ETR.

La Figure 4.3 représente la puissance volumique molaire spectrale émise par les bandes 0-0, 1-0 et 1-1 pour une gamme de températures rotationnelles et vibrationnelles de OH*, représentative des jets de moteurs-fusées [51].

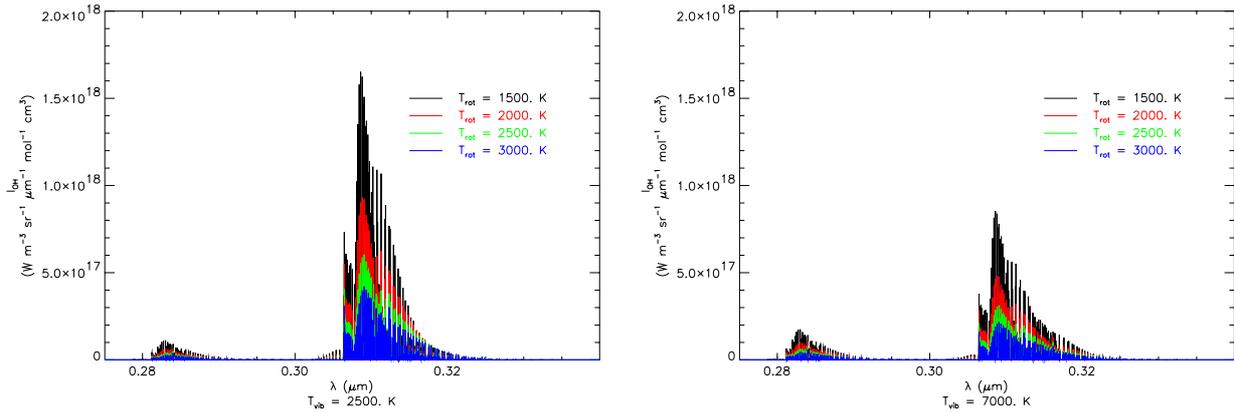


Figure 4.3 – Puissance volumique angulaire molaire spectrale émise par OH* pour différentes températures rotationnelles et vibrationnelles (bandes 0-0, 1-0 et 1-1)

Le rayonnement émis par OH* diminue avec la température rotationnelle. L'augmentation de l'émission de la bande 1-0 (entre 280 nm et 295 nm de longueur d'onde) est liée au peuplement du niveau $v' = 1$ tandis que la diminution de l'intensité des raies autour de 305 nm de longueur d'onde (bande 0-0) provient du dépeuplement du niveau $v' = 0$.

La Figure 4.4 représente la dépendance en température de la puissance volumique molaire émise par les bandes 0-0, 1-0 et 1-1 de OH* intégrée entre 275 nm et 340 nm de longueur d'onde. Cette intégration spectrale est rendue possible par l'hypothèse que OH n'absorbe pas.

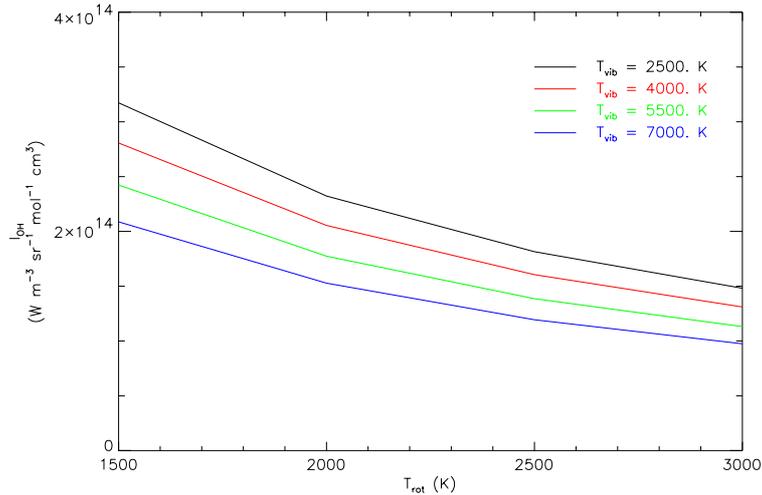


Figure 4.4 – Evolution en température de la puissance volumique molaire émise par OH* intégrée entre 275 nm et 340 nm (bandes 0-0, 1-0 et 1-1)

La puissance lumineuse émise par OH* diminue avec la température rotationnelle et vibrationnelle. Le rapport entre l'émission des principales bandes vibrationnelles avec celle de la bande 0-0, calculé à l'aide des coefficients d'Einstein $A_{v'v''}^v$ vibrationnels de Crosley et Lengel [67], est présenté sur la Figure 4.5.

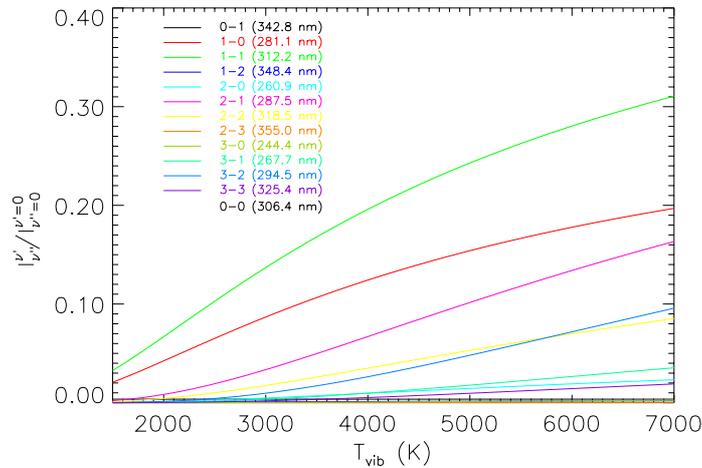


Figure 4.5 – Intensité relative à la bande 0-0 des bandes vibrationnelles d'émission de OH*

Les bandes appartenant au domaine spectral situé entre 240 nm et 280 nm sont 2-0, 3-0 et 3-1. Leur intensité ne dépasse pas 4% de celle de la bande 0-0. Or d'après la Figure 4.4, l'émission des bandes 0-0, 1-0 et 1-1 est de l'ordre de $3 \cdot 10^{14} \text{ W m}^{-2} \text{sr}^{-1} (\text{mol cm}^{-3})^{-1}$. Par comparaison entre la Figure 4.4 et la Figure 4.5, l'émission est donc inférieure à $10^{13} \text{ W m}^{-3} \text{sr}^{-1} (\text{mol cm}^{-3})^{-1}$ dans le domaine "Solar Blind". Dans la zone de postcombustion, la concentration de OH* est de $1.5 \cdot 10^{-14} \text{ mol}^{-1} \text{cm}^{-3}$ environ, ainsi l'émission de chimiluminescence dans le domaine "Solar Blind" sera majorée par la valeur $0.15 \text{ W m}^{-3} \text{sr}^{-1}$

entre 240 nm et 280 nm de longueur d'onde. Si on souhaite prendre en compte la prédissociation des niveaux $v' \geq 2$, alors cette limite supérieure doit encore être diminuée.

4.2. Chimiluminescence de CO+O

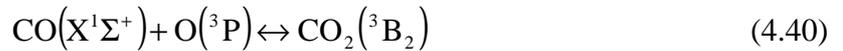
D'après Kolb *et al.* [2] et Lyons *et al.* [3], l'émission de chimiluminescence provenant de la recombinaison radiative de CO et de O, appelée « émission de flamme bleue de CO + O », contribue au rayonnement émis par les jets dans l'ultraviolet moyen selon le bilan réactionnel :



L'objet de ce paragraphe est de décrire et de quantifier l'émission de rayonnement provoquée par cette réaction. Dans un premier temps, le mécanisme réactionnel est étudié. Les caractéristiques du spectre d'émission sont ensuite présentées succinctement. Enfin, les interactions entre le « système » CO + O et le rayonnement sont évaluées à l'aide d'un modèle semi-empirique construit à partir de données disponibles dans la littérature.

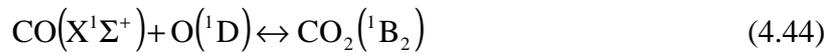
4.2.1. Mécanisme réactionnel

L'étude de la réaction (4.39) par Clyne et Trush [69] dans des tubes à décharge à température ambiante (293 K) ainsi que les expériences de Grillo et Slack [70] dans des ondes de choc à haute température (3000 K) ont fait apparaître que l'intensité du rayonnement était proportionnelle au produit entre la concentration de CO et celle de O. Ce résultat confirme que cette émission est produite par la recombinaison radiative de CO et de O. Connaissant les états moléculaires de CO₂, dont la corrélation [71] est représentée sur la Figure 4.6, il est possible d'établir le mécanisme conduisant à l'émission de chimiluminescence de CO + O suivant les réactions [72] [73] :



La règle de conservation des spins impose qu'après la recombinaison de CO + O, CO₂ soit dans un état triplet (réaction (4.40)). Après une transition « interdite » triplet-singulet (réaction (4.41)), CO₂(¹B₂) est désexcité par l'émission d'un photon (réaction (4.42)) ou bien

par collision (réaction (4.43)). La présence dans ce mécanisme réactionnel de l'absorption de $\text{CO}_2(\text{X}^1\Sigma_g^+)$ (inverse de la réaction (4.42)) n'est pas envisagée dans la littérature car, après l'émission du photon, le niveau d'énergie rovibrationnelle de $\text{CO}_2(\text{X}^1\Sigma_g^+)$ est très élevé. Eremin et Ziborov [73] ont étudié le mécanisme de la recombinaison radiative de $\text{CO} + \text{O}$ dans le cas d'ondes de choc (sous 0.4 MPa à 3.5 MPa de pression) à haute température (de 2600 K à 4600 K). Ces auteurs ont mis en évidence l'existence d'un autre canal réactionnel permettant la recombinaison directe de $\text{CO} + \text{O}$ dans l'état moléculaire $\text{CO}_2(^1\text{B}_2)$ lorsque la température des gaz dépasse 3000 K, selon la réaction :



D'après les expériences réalisées par Pravilov *et al.* [74] dans une sphère de 146 mm de diamètre, la réaction (4.40) ne dépend ni de la nature ni de la pression d'un troisième corps (He, Ar ou N_2 sous une pression partielle inférieure à 10 torr = 13 hPa et à 293 K) [72]. D'après l'étude effectuée par Slack et Grillo [75] dans des tubes à chocs, la désactivation collisionnelle de l'intensité émise par $\text{CO} + \text{O}$ par O_2 [72] est négligeable dans des conditions de température proches de celles rencontrées dans les jets ($T > 1300$ K).

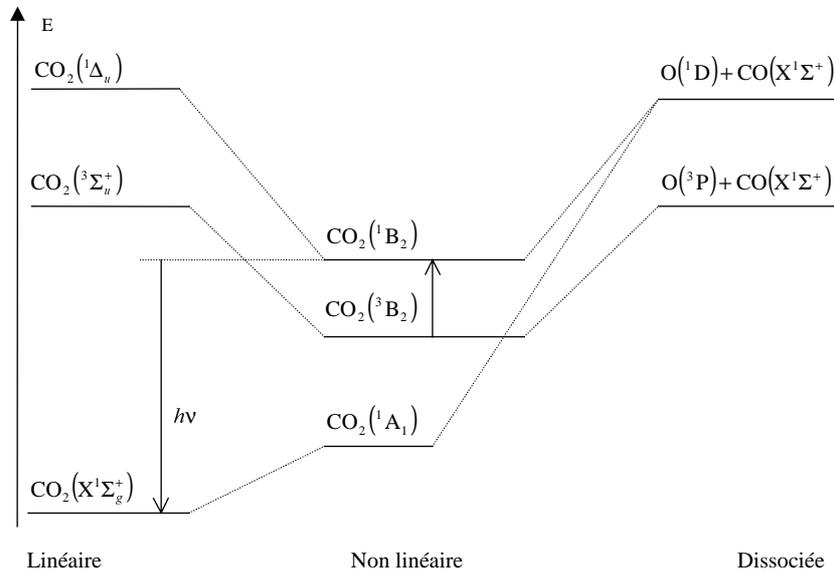


Figure 4.6 - Corrélation des états moléculaires de CO, O et CO_2 (les niveaux d'énergie ne sont pas à l'échelle)

[71]

4.2.2. Propriétés spectroscopiques de CO₂

Dans ce paragraphe, les propriétés spectroscopiques de CO₂(X¹Σ_g⁺) (molécule linéaire) et de CO₂(¹B₂) (molécule non linéaire), sont décrites succinctement afin de mettre en évidence les principales caractéristiques spectrales des transitions entre ces deux états moléculaires dans le domaine UV.

Dans ses différents états moléculaires, CO₂ est caractérisé par trois modes de vibration : symétrique, transverse et antisymétrique [76]. Lorsque la molécule est linéaire, le deuxième mode de vibration est dégénéré pour des raisons de symétrie et, de ce fait, il est nécessaire d'adjoindre à ce mode un moment angulaire de vibration noté l . En première approximation, les niveaux vibrationnels de CO₂(X¹Σ_g⁺) possèdent la structure rotationnelle suivante [76] :

$$f''(J) = B''J(J+1) \quad (4.45)$$

avec une constante B'' dépendant du niveau vibrationnel et du moment angulaire de vibration. Comme le spin des atomes ¹⁶O est nul, ceux-ci obéissent à la statistique de Bose-Einstein et, de ce fait, l'existence de certains niveaux rovibrationnels dépend de la parité du nombre quantique J [76].

Dans son état excité, CO₂(¹B₂) est une molécule non linéaire dont l'angle de valence est égal à (122 ± 2)° [76]. Comme cet angle est supérieur à 110°, la molécule se comporte, en première approximation, comme une toupie symétrique dont les niveaux rotationnels sont répartis selon les relations [76] :

$$f'(J) = \bar{B}'J(J+1) + (A' - \bar{B}')K^2 \quad (4.46)$$

$$\bar{B}' = \frac{B' + C'}{2} \quad (4.47)$$

Le nombre quantique K représente la projection du moment cinétique sur l'axe de symétrie de CO₂(¹B₂). Cette grandeur est similaire au moment angulaire de vibration l de l'état fondamental [76].

Les transitions avec $\Delta J = 0, \pm 1$ et $\Delta K = 0, \pm 1$ sont toutes autorisées, sauf les transitions parallèles telles que $\Delta K = \Delta J = K = 0$ [76]. Comme les valeurs des coefficients $(A' - \bar{B}') = (4.9 \pm 0.5) \text{ cm}^{-1}$ [76] et $\bar{B}' = 0.426 \text{ cm}^{-1}$ [76] sont petites et que les transitions

entre les niveaux rovibrationnels sont nombreuses, la densité des raies est très importante. De ce fait, le calcul direct du spectre d'émission de la transition $\text{CO}_2(\text{X}^1\Sigma_g^+) - \text{CO}_2(^1\text{B}_2)$ est particulièrement long et fastidieux. Or la signature UV des jets de moteurs-fusées est, dans cette étude, intégrée entre 240 nm et 280 nm. C'est pourquoi il n'est pas indispensable d'évaluer les interactions entre la matière et le rayonnement à haute résolution spectrale. Ces phénomènes physiques seront donc estimés par des lois semi-empiriques construites à partir de données expérimentales proposées par la littérature.

4.2.3. Evaluation du rayonnement émis et absorbé par CO_2

L'objet de ce paragraphe est la construction, à partir de données expérimentales proposées par la littérature, de lois semi-empiriques permettant d'évaluer les interactions entre le rayonnement et le système $\text{CO}_2(\text{X}^1\Sigma_g^+) - \text{CO}_2(^1\text{B}_2)$ dans le domaine UV. La contribution de l'absorption de $\text{CO}_2(\text{X}^1\Sigma_g^+)$ dans l'ETR a été tout d'abord estimée. Enfin, une loi permettant de calculer la puissance volumique angulaire émise par $\text{CO} + \text{O}$ est proposée.

L'absorption de la molécule $\text{CO}_2(\text{X}^1\Sigma_g^+)$ dans un domaine spectral compris entre l'UV lointain (140 nm de longueur d'onde) et le proche UV se traduit par l'excitation de cette espèce dans l'état $\text{CO}_2(^1\text{B}_2)$ [77]. Eremin *et al.* [78] ont évalué expérimentalement le coefficient d'absorption pour une longueur d'onde de (285.5 ± 6.6) nm en prenant en compte la relation suivante :

$$K_{\text{Abs}}^{\text{CO}_2} = [\text{CO}_2(\text{X}^1\Sigma_g^+)] \sigma_{\text{Eff}}^{\text{CO}_2} \frac{\exp(-\varepsilon_1/kT)}{Z} \quad (4.48)$$

où Z est la fonction de partition vibrationnelle définie par la relation :

$$Z = \frac{1}{[1 - \exp(-\Theta_1/T)][1 - \exp(-\Theta_2/T)]^2 [1 - \exp(-\Theta_3/T)]} \quad (4.49)$$

avec $\Theta_1 = 1997$ K, $\Theta_2 = 960$ K et $\Theta_3 = 3380$ K. $\sigma_{\text{Eff}}^{\text{CO}_2}$ est la section efficace effective d'absorption et ε_1 représente l'énergie du niveau fondamental de la transition. D'après les mesures d'Eremin *et al.* [78] dans des ondes de chocs entre 1700 K et 3000 K sous des pressions de 13 atm à 32 atm, ces deux grandeurs ont pour valeurs respectives $\sigma_{\text{Eff}}^{\text{CO}_2} = (5 \pm 2) 10^{-17} \text{ cm}^2$ et $\varepsilon_1 = (1.62 \pm 0.03) \text{ eV}$. En utilisant les ordres de grandeurs de température et de concentrations présentés dans l'étude de OH, on obtient un coefficient

d'absorption de l'ordre de 0.02 m^{-1} . En supposant que ce paramètre optique varie peu entre 240 nm et 280 nm de longueur d'onde, on peut considérer que l'absorption de $\text{CO}_2(X^1\Sigma_g^+)$ n'a pas d'influence sur le rayonnement émis par les jets dans le domaine spectral "Solar Blind".

La Figure 4.7 représente le spectre d'émission de chimiluminescence de $\text{CO} + \text{O}$ à différentes températures d'après des mesures réalisées par différents auteurs.

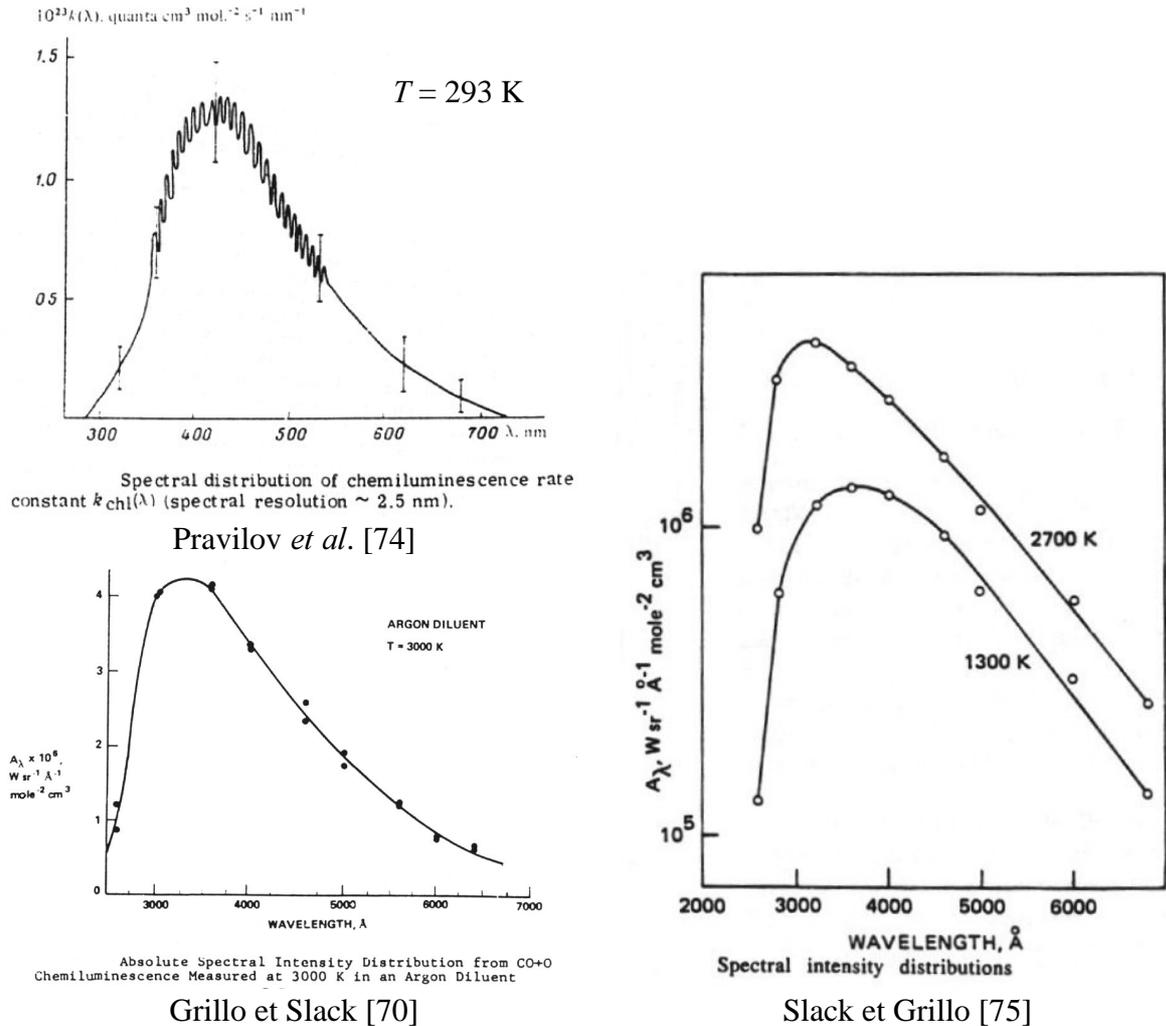


Figure 4.7 – Spectres expérimentaux de l'émission de chimiluminescence de $\text{CO} + \text{O}$ à différentes températures

D'après ces données, le spectre d'émission de chimiluminescence de $\text{CO} + \text{O}$ se présente, à basse résolution spectrale, comme un « continuum ». On peut remarquer en outre que lorsque la température augmente, le maximum d'émission de chimiluminescence subit un « décalage vers le bleu », mais dans une gamme de longueurs d'onde qui reste supérieure à 300 nm. De ce fait, l'émission de chimiluminescence augmente dans le domaine spectral "Solar Blind" avec la température et la longueur d'onde.

Slack et Grillo [75] ont mesuré dans des tubes à chocs entre 1300 K et 2700 K, le taux d'émission de photons UV et visibles (entre 260 nm et 700 nm) par un mélange de gaz contenant du monoxyde de carbone et de l'oxygène atomique. Une loi de type « Arrhenius » permettant de calculer cette grandeur radiative, a été ajustée aux résultats expérimentaux obtenus par ces auteurs et elle est exprimée en $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$ par la relation :

$$R_0^C = 6.8(\pm 0.6) \times 10^5 \exp(-1960/T) \quad (4.50)$$

où T est la température des gaz en kelvins. La valeur du numérateur de l'exposant (1960 K) correspond à l'énergie d'activation de la recombinaison de $\text{CO}_2(^3\text{B}_2)$ (cf. réaction (4.40)). La dépendance spectrale et thermique de l'émission de chimiluminescence de $\text{CO} + \text{O}$, a été ajustée par une loi de type Arrhenius dont les coefficients dépendent de la longueur d'onde selon la relation :

$$I_{0,\lambda}^C = \exp\left[a(\lambda) - \frac{b(\lambda)}{T}\right] \quad (4.51)$$

Les paramètres $a(\lambda)$ et $b(\lambda)$ sont évalués à partir de la synthèse des résultats expérimentaux disponibles présentée sur la Figure 4.8.

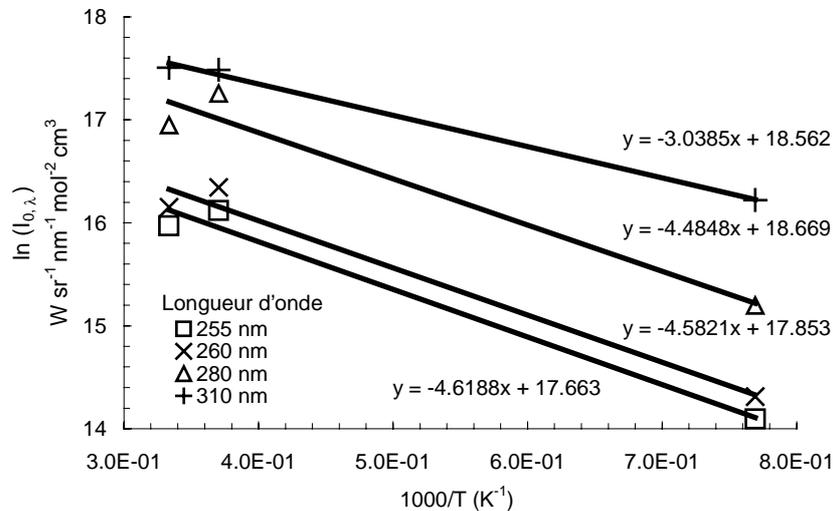


Figure 4.8 – Ajustement par une loi de type Arrhenius de la dépendance en température de l'émission de chimiluminescence de $\text{CO} + \text{O}$ pour différentes longueurs d'onde (les symboles représentent les résultats expérimentaux de Grillo et Slack [70] et de Slack et Grillo [75])

Les valeurs de ces paramètres sont présentées sur le tableau suivant.

λ (nm)	$a(\lambda)$	$b(\lambda)$ (K)
255.	17.66	4619.
260.	17.85	4582.
280.	18.67	4485.
310.	18.56	3039.

Tableau 4.3 – Paramètres expérimentaux de l'émission de chimiluminescence de CO + O selon la loi d'Arrhenius donnée par la relation (4.51). Le résultat est exprimé en $\text{W nm}^{-1} \text{sr}^{-1} \text{mol}^{-2} \text{cm}^3$.

A partir de ces données, l'émission de CO + O peut être calculée pour une gamme de températures représentatives des conditions rencontrées dans les jets. D'après les exemples de spectres présentés sur la Figure 4.9, la puissance lumineuse émise dans le domaine spectral "Solar Blind" par la recombinaison radiative de CO + O, augmente avec la longueur d'onde et la température.

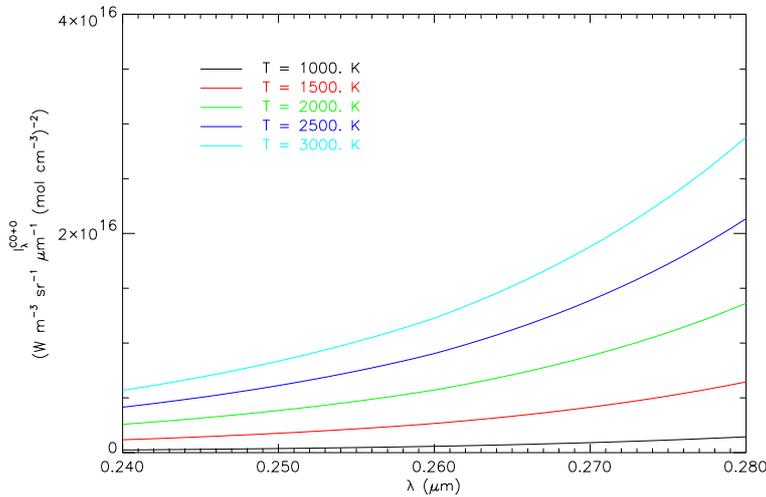


Figure 4.9 – Puissance volumique angulaire spectrale molaire émise par CO + O pour différentes températures

La Figure 4.10 représente, en fonction de la température, le résultat de l'intégration spectrale entre 240 nm et 280 nm des courbes présentées sur la Figure 4.9. Une telle opération est rendue possible par l'hypothèse que CO_2 n'absorbe pas. En prenant en compte les concentrations respectives de CO et de O précédentes (cf. § 4.1.3), la puissance volumique angulaire émise par la recombinaison radiative de CO + O dans la zone de postcombustion s'élève, d'après cette courbe, à $1 \text{ W m}^{-3} \text{sr}^{-1}$ environ après intégration dans le domaine UV "Solar Blind". Cette valeur est environ 10 fois plus grande que l'émission de chimiluminescence de OH. Dans le calcul de la signature des jets, cette dernière source de rayonnement peut donc être négligée devant « l'émission de flamme bleue de CO + O » avec un risque d'erreurs limité.

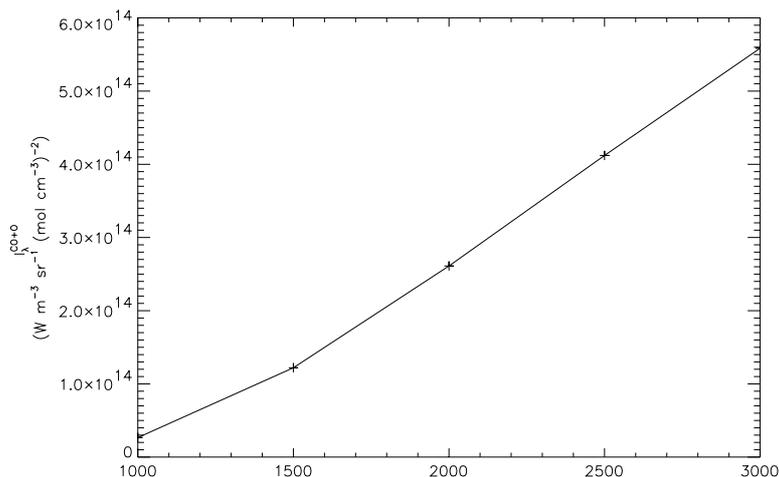


Figure 4.10 - Puissance volumique molaire émise par CO + O intégrée entre 240 nm et 280 nm en fonction de la température

4.3. Propriétés optiques des particules d'alumine présentes dans les jets de propulseurs

Ce paragraphe est consacré à la description des propriétés optiques permettant de quantifier l'absorption et la diffusion des particules d'alumine présentes dans les jets de propulseurs composites aluminisés. Dans un premier temps, le processus de formation des particules est brièvement présenté. La théorie de Mie est introduite afin de relier les propriétés optiques des particules à leurs caractéristiques physiques telles que leurs tailles et l'indice de réfraction du matériau dont elles sont constituées. Ce paramètre optique est estimé d'après des données issues de la littérature. Une étude sur les distributions en tailles des particules est effectuée. Enfin, le domaine de variation des propriétés optiques de l'alumine est évalué.

4.3.1. Formation des particules d'alumine

Afin d'augmenter les performances énergétiques des propulseurs, des particules d'aluminium (métal très réducteur) sont ajoutées à la composition de certains propergols composites. Leur oxydation dans la chambre de combustion produit des particules d'alumine (Al_2O_3) qui peuvent être de taille micronique. La forme et les dimensions de ces particules sont liées à la manière dont elles ont été formées. D'après Kuentzmann [79], l'oxydation de l'aluminium se déroule selon les deux processus suivants :

- Une calotte d'alumine apparaît à la surface des particules d'aluminium, du fait de l'alumine initiale et de l'oxydation partielle de ce métal en phase condensée. La

dislocation de cette calotte est à l'origine des particules de forme irrégulière dont le diamètre est supérieur à $1\ \mu\text{m}$ [4].

- La combustion de l'aluminium en phase vapeur donne lieu à la formation de particules sphériques dont les dimensions ne dépassent pas $1\ \mu\text{m}$.

Compte tenu de la température de fusion de l'alumine (2328 ± 7) K [80], les particules peuvent être sous forme liquide ou solide, suivant leur position dans le jet. Lors du processus de solidification, l'alumine passe par différentes phases cristallines (γ , θ , δ , α) dont les deux plus importantes sont la phase γ , cubique et métastable et la phase α , hexagonale et stable [81], encore appelée « corindon ». En règle générale, le terme « saphir » désigne le corindon bleu et le mot « rubis » le corindon rouge. Ces deux cristaux correspondent respectivement au dopage de la phase α par du chrome et du titane [4].

Les transitions de phases de l'alumine résultent de phénomènes de recuit [82]. Or les particules submicroniques ont une vitesse de refroidissement comparable à celle des gaz environnants (de l'ordre de $10^6\ \text{K s}^{-1}$). Pour cette raison, il est généralement impossible que l'état cristallin des particules submicroniques puisse se stabiliser en corindon. C'est pourquoi, on observe communément que ces particules appartiennent à la phase γ de l'alumine [83] [84] [85]. Toutefois, cette détermination de la phase cristalline dans laquelle l'alumine s'est solidifiée est essentiellement expérimentale et les processus physiques participant à la cristallisation de cet oxyde font encore l'objet d'études [82].

4.3.2. Théorie de la diffusion

D'après Emslie et Aronson [31], la rugosité provenant de l'agglomération des particules entre elles ou de l'abrasion du matériau augmente sensiblement l'absorption. D'après ces auteurs, ces aspérités, petites devant la longueur d'onde, se comportent comme des dipôles électriques absorbant directement une partie du rayonnement. Cependant, ces effets sont difficiles à quantifier en regard des incertitudes sur les propriétés optiques de l'alumine puisque ces défauts de surface peuvent être assimilés à une couche intermédiaire dont les propriétés optiques varient entre l'intérieur de la particule et le milieu extérieur. Aussi la forme des particules d'alumine sera-t-elle approchée par des sphères parfaites et homogènes de façon à pouvoir utiliser la théorie de Mie [86] [87] [88], tout en sachant que l'absorption due à la rugosité des particules ne sera pas prise en compte.

Dans un jet, les particules sont suffisamment éloignées les unes des autres pour considérer que la diffusion est incohérente. De ce fait, on peut considérer que les particules interagissent avec le rayonnement indépendamment les unes des autres. Ainsi, les propriétés optiques des particules peuvent être sommées localement en tout point du jet du moteur-fusée étudié.

Les caractéristiques d'une particule nécessaires à un calcul de diffusion de Mie dans le cas d'une particule sphérique isolée éclairée par une onde plane de longueur d'onde λ , sont [86] :

- Sa taille représentée par le rayon r ou par le paramètre de taille $x = \frac{2\pi r}{\lambda}$;
- Son indice complexe de réfraction $\tilde{n} = n - im$. Ce paramètre définit les conditions selon lesquelles le rayonnement interagit avec la particule en prenant en compte les caractéristiques de sa composition et du domaine spectral. Dans le cas d'ondes planes se propageant dans un milieu infini et homogène selon un vecteur d'onde \mathbf{k} , on montre que les champs électromagnétiques sont proportionnels à un facteur ψ donné par la relation [87] :

$$\psi = e^{i(\tilde{n}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x} + \omega t)} \quad (4.52)$$

Si la propagation du rayonnement est supposée se faire selon l'axe z , le facteur de propagation ψ devient :

$$\psi = e^{i(\tilde{n}kz + \omega t)} = e^{i(nkz + \omega t)} e^{mkz} \quad (4.53)$$

Le facteur ψ se décompose en produit d'un facteur de propagation $e^{i(nkz + \omega t)}$ et d'un facteur d'atténuation e^{mkz} dépendant respectivement des parties réelles et imaginaires de l'indice de réfraction de l'alumine. Ainsi, la partie réelle est associée à la réfraction du rayonnement et la partie imaginaire, provenant de la conductivité électrique du matériau, aux phénomènes d'absorption.

Lorsque la polarisation du rayonnement n'est pas prise en compte, les propriétés optiques de la particule déduites (appelées aussi : « paramètres de diffusion ») sont :

- Le facteur d'efficacité d'extinction $Q_{\text{Ext}} = \frac{\sigma_{\text{Ext}}}{\pi r^2}$ où σ_{Ext} est la section efficace d'extinction ;

- Le facteur d'efficacité de diffusion $Q_{\text{Diff}} = \frac{\sigma_{\text{Diff}}}{\pi r^2}$ où σ_{Diff} est la section efficace de diffusion ;
- La fonction de phase $P(\cos \Theta)$.

La théorie de Mie repose sur l'application rigoureuse des équations de Maxwell aux conditions de transmission et de réflexion des champs électromagnétiques par la paroi d'une particule sphérique supposée homogène qui est suffisamment éloignée de l'observateur. La matrice de diffusion \mathbf{S} du vecteur champ électrique peut s'écrire sous la forme [86] [87] :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{E}_d^s \\ \mathbf{E}_g^s \end{pmatrix} = \frac{e^{ik(z-s)}}{i k s} \begin{pmatrix} S_1(\Theta) & 0 \\ 0 & S_2(\Theta) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{E}_d^i \\ \mathbf{E}_g^i \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

où \mathbf{E}^i et \mathbf{E}^s désignent respectivement le champ électrique incident et diffusé, les indices g et d les deux directions de polarisation du rayonnement, s la distance de l'observateur par rapport à la particule et Θ l'angle de diffusion. Le facteur e^{ikz} représente la phase de l'onde plane avant qu'elle n'ait été diffusée par la particule. En utilisant la théorie de l'électromagnétisme de Maxwell, on montre que les éléments de la matrice de diffusion \mathbf{S} , appelés « fonctions d'amplitude », ont la forme suivante [86] [87] [88] :

$$S_1(\Theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [a_n \pi_n(\cos \Theta) + b_n \tau_n(\cos \Theta)] \quad (4.55)$$

$$S_2(\Theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} [b_n \pi_n(\cos \Theta) + a_n \tau_n(\cos \Theta)] \quad (4.56)$$

où les coefficients de diffusion a_n et b_n dépendent de l'indice complexe de réfraction et du paramètre de taille. Les fonctions $\pi_n(\cos \Theta)$ et $\tau_n(\cos \Theta)$ sont définies, à partir des polynômes de Legendre $p_n(\cos \Theta)$ et des fonctions associées $p_n^1(\cos \Theta)$, par les relations [86] [88] :

$$\pi_n(\cos \Theta) = \frac{1}{\sin \Theta} p_n^1(\cos \Theta) = \frac{d p_n(\cos \Theta)}{d(\cos \Theta)} \quad (4.57)$$

$$\tau_n(\cos \Theta) = \frac{d}{d\Theta} p_n^1(\cos \Theta) = \cos \Theta \pi_n(\cos \Theta) - \sin^2 \Theta \frac{d \pi_n(\cos \Theta)}{d(\cos \Theta)} \quad (4.58)$$

Si le rayonnement n'est pas polarisé, la section efficace de diffusion s'écrit [87] :

$$\sigma_{\text{Diff}} = \frac{\lambda^2}{8\pi^2} \int_0^\pi [S_1(\Theta)S_1^*(\Theta) + S_2(\Theta)S_2^*(\Theta)] \sin \Theta \, d\Theta \quad (4.59)$$

On peut déduire de cette relation la valeur du facteur d'efficacité de diffusion [86] [87] [88] :

$$Q_{\text{Diff}} = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) [|a_n|^2 + |b_n|^2] \quad (4.60)$$

La fonction de phase est donnée par la relation [86] :

$$P(\cos \Theta) = \frac{\lambda^2}{\pi \sigma_{\text{Diff}}} \frac{S_1(\Theta)S_1^*(\Theta) + S_2(\Theta)S_2^*(\Theta)}{2} \quad (4.61)$$

Enfin, le facteur d'efficacité d'extinction s'écrit [86] [87] [88] :

$$Q_{\text{Ext}} = \frac{4}{x^2} \text{Re}[S(0)] = \frac{2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) \text{Re}(a_n + b_n) \quad (4.62)$$

Dans le code de diffusion de Mie développé par Evans [10] pour évaluer les données d'entrée de la méthode SHDOM, le nombre de termes N_s utilisés dans les séries pour évaluer les fonctions d'amplitudes $S_1(\theta)$ et $S_2(\theta)$, est proche de la valeur du paramètre de taille [88]. La fonction de phase est échantillonnée selon une quadrature angulaire de Gauss-Legendre à $2N_s + 1$ angles de diffusion. Les $2N_s$ coefficients du développement en polynômes de Legendre de cette grandeur optique sont ensuite évalués à l'aide de la relation suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \chi_l = \left(l + \frac{1}{2} \right) \int_0^\pi P(\cos \Theta) p_l(\cos \Theta) d(\cos \Theta) \\ = \left(l + \frac{1}{2} \right) \sum_{j=1}^{2N_s+1} P(\cos \Theta_j) p_l(\cos \Theta_j) \omega_j \end{array} \right. \quad (4.63)$$

où les Θ_j représentent les angles de l'échantillonnage. Cette procédure est effectuée pour chaque rayon des particules. Lorsque plusieurs tailles de particules sont prises en compte, les résultats du calcul de diffusion de Mie sont alors sommés à l'aide de relations présentées ci-dessous.

4.3.3. Partie réelle de l'indice

Ce paragraphe est consacré à l'évaluation de la partie réelle de l'indice optique de l'alumine à l'aide de modèles de dispersion spectrale développés dans la littérature. Une

comparaison est effectuée entre les résultats fournis par ces modèles et les mesures de Krishnan *et al.* [89].

L'indice réel de l'alumine dépend principalement de la longueur d'onde, de la température et de la phase cristalline de la particule. A partir de mesures réalisées avec un saphir de synthèse, Malitson [90] propose un modèle de dispersion de la valeur de l'indice réel de la phase α de l'alumine entre 0.2652 μm et 5.577 μm à 24°C (297 K) selon une relation à trois termes de « Sellmeier » :

$$n^2 - 1 = \sum_{i=1}^3 \frac{A_i \lambda^2}{\lambda^2 - \lambda_i^2} \quad (4.64)$$

Les coefficients A_i de cette relation ainsi que les longueurs d'onde associées λ_i , sont donnés dans le tableau suivant.

A_i	λ_i (μm)
1.023 798	0.061 448 21
1.058 264	0.110 699 7
5.280 792	17.926 56

Tableau 4.4 - Indice réel de l'alumine : coefficients de la relation de Malitson [90] (relation (4.64))

Dans ce modèle, n vaut 1.83 à 0.2625 μm et 1.58 à 5.577 μm et cette dépendance spectrale est en accord avec les données expérimentales fournies par Bauer et Carlson [91]. Gryvnach et Burch [92] ont mesuré la variation thermique de l'indice de réfraction de l'alumine entre la température ambiante et 1700 °C (1973 K) dans un domaine spectral compris entre 0.56 μm et 4 μm . En utilisant leurs résultats et le modèle de dispersion spectrale de Malitson [90], Plass [93] a évalué la valeur de l'indice réel en supposant que cette dernière augmentait avec la température selon un coefficient thermique égal à $2.9 \cdot 10^{-5} \text{ K}^{-1}$ jusqu'à 2020 °C (2293 K) entre 0.5 μm et 6 μm . Les valeurs proposées par cet auteur ont été utilisées par Lyons *et al.* [8] [9] pour effectuer des calculs de signature de jets de propulseurs.

Parry et Brewster [94] ont évalué l'indice réel de l'alumine liquide n_l à partir de celui de l'alumine solide n_s fourni par Plass [93] au voisinage du point de fusion, et du rapport de densité des phases liquide et solide selon la relation :

$$\frac{n_l - 1}{n_s - 1} = A \frac{\rho_l}{\rho_s} \quad (4.65)$$

avec :

$$\rho_1 = 3.01 \left(1 - \frac{T - T_m}{2684} \right) \quad (4.66)$$

et : $T_m = 2320 \text{ K}$, $\rho_s = 3.93 \text{ g cm}^{-3}$ à 2300 K , ρ_l en g cm^{-3} et $A \approx 1$.

La dépendance spectrale de la partie réelle de l'indice de l'alumine solide au voisinage du point de fusion est semblable à celle qui a été déterminée par Plass [93].

Krishnan *et al.* [89] ont montré expérimentalement que l'indice réel de l'alumine liquide était peu sensible à la nature du milieu environnant (O_2 , Ar) pour une longueur d'onde de $0.6328 \mu\text{m}$ et une température comprise entre 2327 K et 2600 K . Ces auteurs ont en outre mesuré l'indice de l'alumine solide (sous forme de rubis) sous une atmosphère d'oxygène entre 298 K et 2300 K . La Figure 4.11 représente les valeurs expérimentales de Krishnan *et al.* [89], accompagnées des résultats fournis par la modélisation de Malitson [90], de Plass [93] et de Parry et Brewster [94].

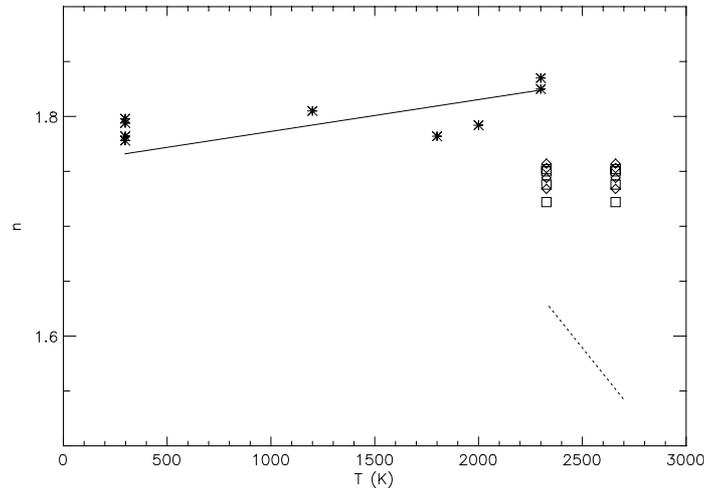


Figure 4.11 - Indice réel de l'alumine à $0.6328 \mu\text{m}$: mesures de Krishnan *et al.* [89] : * alumine solide sous atmosphère de O_2 , \diamond alumine liquide sous atmosphère de O_2 , \square alumine liquide sous atmosphère de Ar ; — alumine solide (Malitson [90] et Plass [93]), - - - alumine liquide (Parry et Brewster [94])

Les résultats des modèles numériques de Malitson [90] et de Plass [93] sont proches des valeurs mesurées par Krishnan *et al.* [89] pour l'alumine solide. D'après ces dernières, l'indice de réfraction augmente avec la température d'un coefficient thermique de $(1.5 \pm 1.2) 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, dont la valeur est compatible avec celle de Plass [93]. D'après la banque de données OPTROCK de la *Northrop Grumman Corporation* (Etats-Unis) [95], l'indice réel de l'alumine diminue indépendamment de la température de 1.75 à 1.5 environ, lorsque la longueur d'onde varie de $0.2 \mu\text{m}$ jusqu'à $7.5 \mu\text{m}$. Cette banque OPTROCK contient des valeurs de référence pour l'indice complexe de l'alumine. La méthode selon laquelle ces

données ont été obtenues, n'est pas publiée. Les valeurs issues de cette banque sont conformes à celles de Plass [93] pour la dépendance spectrale. Pour l'alumine liquide, les valeurs estimées par le modèle proposé par Parry et Brewster [94] sont éloignées de celles de Krishnan *et al.* [89] pour lesquelles l'indice réel vaut $n = 1.744 \pm 0.016$ à $0.6328 \mu\text{m}$.

Selon Kim *et al.* [83], l'indice réel de la phase γ de l'alumine pure vaut 1.665 dans le domaine visible. Cette valeur unique ne prend pas en compte la dépendance en longueur d'onde et en température de ce paramètre optique. Pour les particules submicroniques situées en périphérie d'un jet de propulseur de faible dimension, ces auteurs et Laredo *et al.* [85] ont mesuré des indices réels respectivement égaux à $n = 1.63 \pm 0.13$ [83] et $n = 1.64 \pm 0.04$ [85], caractéristiques de cette forme métastable de l'alumine.

4.3.4. *Partie imaginaire de l'indice*

Afin de quantifier l'absorbance des particules d'alumine présentes dans les jets, il est nécessaire d'évaluer leur indice imaginaire. Dans ce paragraphe, les phénomènes physiques à l'origine de l'absorption sont tout d'abord identifiés. Des modèles semi-empiriques issus de la littérature permettant d'évaluer la dispersion spectrale et thermique de l'indice imaginaire sont ensuite proposés. Enfin, leurs résultats sont comparés à la banque OPTROCK [95] et aux mesures de Mularz et Yuen [96].

L'absorption d'un cristal semi-conducteur comme l'alumine dépend de l'occupation par les électrons des deux niveaux d'énergie suivants :

- La « bande de valence » où les électrons sont liés aux liaisons cristallines ;
- La « bande de conduction » dans laquelle les électrons peuvent se déplacer librement à travers le réseau cristallin en formant un « gaz » qui est à l'origine de la conductivité électrique de l'alumine.

Ces deux niveaux étant séparés par une bande interdite, l'alumine peut être considérée comme un matériau semi-conducteur. Dans ce cas, la bande de valence est, en règle générale, remplie et la bande de conduction est vide. Aussi un cristal pur est-il transparent pour une gamme de longueur d'onde importante en raison de sa faible conductivité électrique. Les impuretés telles que les défauts du réseau cristallin, la présence d'ions métalliques autres que Al^{3+} ou les écarts à la stoechiométrie, sont toutefois susceptibles d'accroître cette conductivité en modifiant le nombre de porteurs libres. Ces phénomènes qui sont à l'origine des

incertitudes sur la valeur de l'absorbance de l'alumine, dépendent du processus de formation des particules et de leur environnement gazeux.

Compte tenu des propriétés physiques de l'alumine, on dénombre quatre mécanismes à l'origine de l'absorption des particules dans les différentes parties du domaine optique [4] [81] :

- La bande électronique fondamentale correspondant à l'excitation des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction. Ce phénomène est responsable de la forte absorption dans le domaine UV situé en dessous de 135 nm.
- L'absorption dans le proche UV et le domaine visible résultant du couplage entre les phonons et la bande électronique fondamentale [97] [98]. Ce phénomène, appelé « queue d'Urbach », persiste lorsque la particule est liquide.
- L'absorption dans le domaine visible et infrarouge (IR) proche due aux porteurs libres ;
- L'absorption des phonons du réseau cristallin aux longueurs d'onde situées au-delà de 5 μm .

L'absorption dans le domaine ultraviolet peut être considérée comme un processus essentiellement intrinsèque. Les données expérimentales sur la partie imaginaire de l'indice restent cependant rares et assez peu précises. De plus, les modifications du fait d'impuretés, de l'énergie de transition entre la bande de valence et la bande de conduction, sont à l'origine d'incertitudes sur la valeur de l'indice imaginaire dans ce domaine spectral. Dans le domaine visible et proche infrarouge, l'absorption est liée à la quantité de porteurs libres au sein du réseau cristallin qui dépend largement de l'historique des particules et de leur environnement gazeux. Par exemple, Konopka *et al.* [99] ont remarqué que, dans le proche infrarouge (1 μm à 5 μm), la présence de traces métalliques multipliait l'indice imaginaire de l'alumine solide d'un facteur pouvant aller jusqu'à 10^3 par rapport à un échantillon commercial d'alumine pure. De plus, Reed et Calia [4] soulignent que l'accroissement de la conductivité de l'alumine provoquée par de faibles quantités d'aluminium non brûlé augmente significativement l'absorption. Ceci rend la modélisation des propriétés optiques de ces particules dans l'infrarouge très délicate. Le caractère extrinsèque de l'absorption infrarouge tend à diminuer lorsque la particule est liquide, car la densité de porteurs libres dépend alors de façon plus importante de la température [99]. Cependant, les gaz environnants peuvent aussi modifier la

valeur de l'indice imaginaire en se dissolvant dans la particule, ce qui provoque alors un écart à la stœchiométrie [100].

Anfimov *et al.* [81] ont modélisé l'indice imaginaire de l'alumine sans en distinguer les phases cristallines selon la relation ci-dessous et le tableau suivant :

$$m = \kappa_0 + \kappa_1 + \kappa_2 + \kappa_3 \quad (4.67)$$

Absorption par le réseau cristallin (phonons)	$\kappa_0 = 7.93 \cdot 10^{-4} \lambda \exp\left[-\frac{6.07 \cdot 10^{-3}}{T} \left(\frac{10^4}{\lambda} - 1333\right)^2\right]$ $\times \left[1 - \exp\left(-\frac{1.917 \cdot 10^3}{T}\right)\right]$
Absorption par les électrons libres	$\kappa_1 = 1.0 \cdot 10^{-2} \frac{\lambda}{n} \exp\left(-\frac{7.2 \cdot 10^3}{T \lambda_g}\right)$
Absorption dans la bande électronique fondamentale	$\kappa_2 = 2.110^{-6} \lambda \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_g}\right)^2 T^2 + 1.5 \cdot 10^{-2} \frac{\lambda_g}{2} \text{ si } \lambda \leq \frac{\lambda_g}{2}$
Queue d'Urbach de la bande fondamentale	$\kappa_3 = 1.5 \cdot 10^{-2} \lambda \exp\left[-\frac{2.8 \cdot 10^3}{T} \left(\frac{2}{\lambda_g} - \frac{1}{\lambda}\right)\right] \text{ si } \lambda > \frac{\lambda_g}{2}$

Tableau 4.5 - Modélisation de l'indice imaginaire de l'alumine (λ en μm et T en K) (Anfimov *et al.* [81])

Avec :

$$\frac{1}{\lambda_g} = 0.6916 \left(\frac{1.289 \cdot 10^4}{T} - 3.233 \right) \quad (4.68)$$

D'après la Figure 4.12 représentant l'évolution spectrale de l'indice imaginaire à différentes températures, le modèle d'Anfimov *et al.* [81] est assez proche des valeurs de la banque OPTROCK [95], surtout dans l'UV et l'IR moyen.

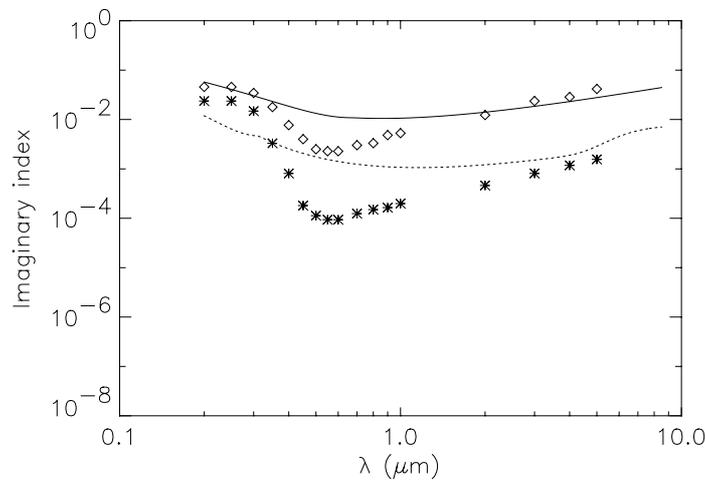


Figure 4.12 – Indice imaginaire de l'alumine : alumine liquide (3000 K) : — Anfimov *et al.* [81],

◇ OPTROCK [95] ; alumine solide (2320 K) : Anfimov *et al.* [81], * OPTROCK [95]

Selon la Figure 4.13 représentant les composantes de l'indice imaginaire du modèle d'Anfimov *et al.* [81], lorsque l'alumine est liquide, la bande d'absorption vibrationnelle est absente puisque le réseau cristallin est rompu. Tant pour l'alumine liquide que solide, l'indice imaginaire ne dépend que des transitions entre la bande fondamentale et la bande de conductivité, et de la queue d'Urbach. Ces deux composantes de l'indice imaginaire sont situées sur la même courbe. L'absorption par le gaz d'électrons libres est négligeable et l'influence de la bande vibrationnelle n'est significative que dans l'infrarouge moyen.

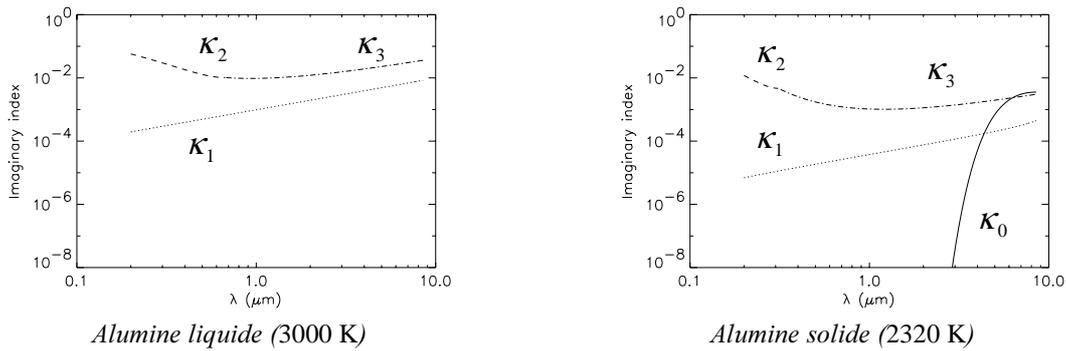


Figure 4.13 - Modèle d'Anfimov *et al.* [81] : composantes de l'indice imaginaire (— vibrations du réseau cristallin (κ_0), mouvements du gaz d'électrons libres (κ_1), ---- bande d'absorption fondamentale (κ_2), queue d'Urbach (κ_3))

A partir d'expériences réalisées sur des particules d'alumine de 1.48 μm de diamètre et pesant 5.5 mg, Plastinin *et al.* [101] ont proposé très récemment un modèle de dispersion thermique et spectrale pour évaluer l'indice imaginaire des particules en distinguant les phases liquides et solides (α et γ) de l'alumine selon les relations et les paramètres présentés ci-dessous.

Absorption par le réseau cristallin (phonons)	$\kappa_0 = h \lambda \exp\left[-6.07 \cdot 10^{-3} \left(10^4/\lambda - \omega_0\right)^2 / T\right] \times [1 - \exp(-1.438 \omega_0 / T)]$
Absorption par les électrons libres	$\kappa_1 = \frac{d \lambda}{n [1 + (e/\lambda)^2]} \exp\left(-\frac{6875}{T \lambda_g}\right)$
Absorption dans la bande électronique fondamentale	$\kappa_2 = a \lambda^2 \left[\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{\text{opt}}} \right) T \right]^2 \text{ si } \lambda \leq \lambda_{\text{opt}}$
Queue d'Urbach de la bande fondamentale	$\kappa_3 = b \lambda \exp\left[\frac{c}{T} \left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_{\text{opt}}} \right) \right] \text{ si } \lambda > \lambda_{\text{opt}}$

Tableau 4.6 - Modélisation de l'indice imaginaire de l'alumine (λ en μm et T en K) (Plastinin *et al.* [101])

avec pour l'alumine liquide :

$$\lambda_{\text{opt}} = \lambda_g = \frac{1}{-E_0 + \frac{f}{T}} \quad (4.69)$$

et pour l'alumine solide :

$$\lambda_g = \frac{1}{E_0 - f T} \quad (4.70)$$

$$\lambda_{\text{opt}} = \frac{1}{E_0 + E_{\text{pol}} - f T} \quad (4.71)$$

Paramètres	Alumine liquide	Phase γ	Phase α
a (K^{-2})	$2.1 \cdot 10^{-7}$	$2.1 \cdot 10^{-7}$	$2.1 \cdot 10^{-7}$
E_0 (μm^{-1})	4.472	6.25	6.82
f	$1.784 \cdot 10^4 \text{ K } \mu\text{m}^{-1}$	$1.3 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$	$8.8 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$
E_{pol} (correction de polarisation) (μm^{-1})	—	0.53	0.53
b (μm^{-1})	$2.5 \cdot 10^{-2}$	$2.5 \cdot 10^{-2}$	$2.5 \cdot 10^{-2}$
c (μm^{-1})	6800	6800	6800
c (μm^{-1})	2.0	2.0	1.6
e (μm)	0.95	0.95	0.95
h (μm^{-1})	—	$7.93 \cdot 10^{-4}$	$7.93 \cdot 10^{-4}$
ω_0 (μm^{-1})	—	1333	1333

Tableau 4.7 - Coefficients des relations de Plastinin et al. [101]

L'indice imaginaire calculé à l'aide du modèle de Plastinin *et al.* [101] a été comparé aux données de la banque OPTROCK [95]. Les résultats sont représentés sur la Figure 4.14.

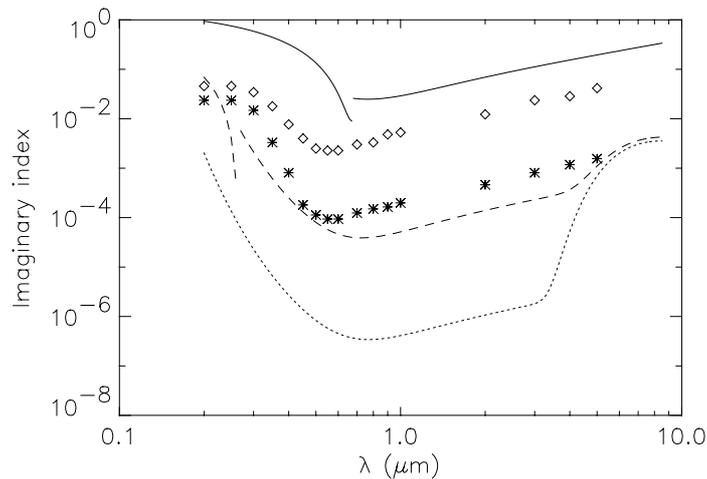
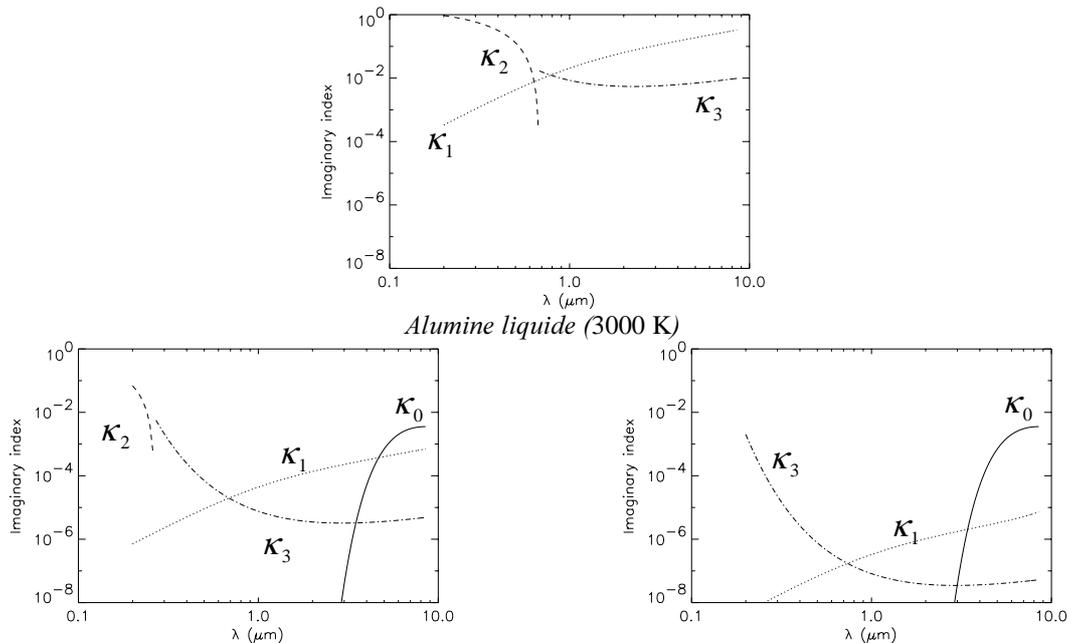


Figure 4.14 - Indice imaginaire de l'alumine : alumine liquide (3000 K) : — Plastinin et al. [101], \diamond OPTROCK [95] ; alumine solide (2320 K) : - - - Plastinin et al. [101] (phase γ), Plastinin et al. [101] (phase α), * OPTROCK [95]

Les discontinuités observées sur les courbes issues du modèle de Plastinin *et al.* [101], sont des artefacts liés au changement du mode d'absorption entre la bande fondamentale et la

queue d'Urbach lorsque la longueur d'onde est proche de la valeur de seuil λ_g . Pour la phase métastable de l'alumine à 2320 K, une telle discontinuité apparaît à 266 nm. De ce fait, le modèle de Plastinin *et al.* [101] est difficilement utilisable pour évaluer l'indice imaginaire de la phase γ dans le domaine UV. Dans le domaine visible et infrarouge, les valeurs « théoriques » de l'indice imaginaire de cette forme d'alumine, sont proches des données fournies par la banque OPTROCK [95]. Ce résultat peut s'expliquer par le fait que l'alumine se condense d'abord dans la phase γ . A l'inverse, l'écart entre le modèle de Plastinin *et al.* [101] et la banque OPTROCK [95] est très important dans le cas du corindon et de l'alumine liquide.

La Figure 4.15 représente les composantes de l'indice imaginaire du modèle de Plastinin *et al.* [101].



Alumine liquide (3000 K) Alumine solide (phase α à 2320 K)

Alumine solide (phase γ à 2320 K)

Figure 4.15 – Modèle de Plastinin *et al.* [101] : composantes de l'indice imaginaire (— vibrations du réseau cristallin (κ_0), mouvements du gaz d'électrons libres (κ_1), ---- bande d'absorption fondamentale (κ_2), queue d'Urbach (κ_3))

La bande vibrationnelle de l'alumine liquide n'est pas présente du fait de l'absence de réseau cristallin. Dans le domaine UV et visible, l'absorption provient de la bande fondamentale tandis que dans l'IR, l'absorption par le gaz de porteurs libres prédomine. Pour l'alumine solide métastable, la bande fondamentale n'a d'influence qu'aux longueurs d'onde proches de 0.2 μm . Au-delà, le phénomène le plus important est la queue d'Urbach jusqu'à

0.7 μm , puis l'absorption par le gaz de porteurs libres jusqu'à 4 μm et enfin, l'absorption par les phonons. Dans le cas du corindon, la bande fondamentale n'a pas d'influence et la queue d'Urbach et le gaz d'électrons libres absorbent moins. De ce fait, l'absorption des phonons devient majoritaire à partir de 2 μm . Par comparaison avec la Figure 4.13, on peut conclure que, dans l'UV, l'absorption provient principalement de la bande fondamentale et de la queue d'Urbach.

Les courbes présentées ci-dessus fournissent des valeurs d'indice imaginaire qui dépendent fortement des lois semi-empiriques utilisées pour estimer les phénomènes physiques à l'origine de l'absorption de l'alumine. Il est donc nécessaire de comparer ces modèles entre eux, mais aussi avec d'autres sources de données telles que la banque OPTROCK [95] et les mesures de Mularz et Yuen [96]. Cette comparaison est présentée en fonction de la longueur d'onde pour différentes températures sur la Figure 4.16 dans le domaine UV.

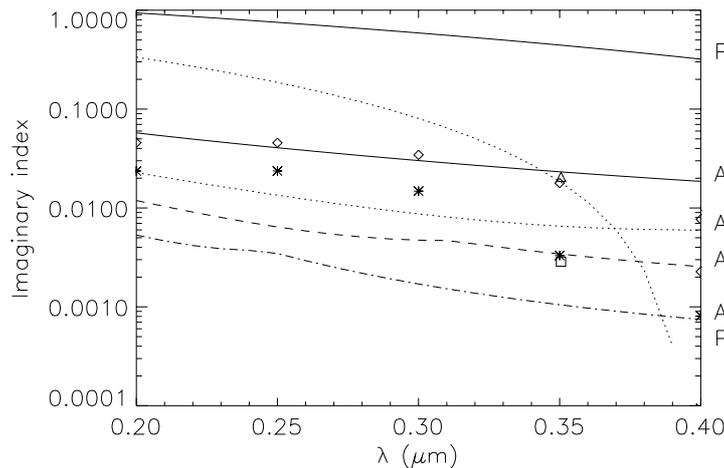


Figure 4.16 – Indice imaginaire de l'alumine dans l'ultraviolet selon la banque de données OPTROCK [95], les mesures de Mularz et Yuen [96] et les modèles numériques d'Anfimov et al. [81] (A) et de Plastinin et al. [101]

(P) :

- alumine liquide à 3000 K : ——— modèles numériques, \diamond OPTROCK [95] ;
- alumine liquide à 2550 K : modèles numériques, \triangle Mularz et Yuen [96] ;
- alumine solide à 2320 K : - - - - modèles numériques, \ast OPTROCK [95] ;
- alumine solide à 2090 K : - . - . - modèles numériques, \square Mularz et Yuen [96]

Dans le cas du modèle de Plastinin *et al.* [101], seul l'indice imaginaire de l'alumine liquide a été représenté car pour la phase solide, les valeurs fournies par ce modèle ne sont pas pertinentes (discontinuités « spectrales » pour la phase métastable et valeurs trop faibles pour le corindon). D'après ces résultats, l'indice imaginaire évalué par le modèle d'Anfimov *et al.* [81] pour l'alumine liquide, est peu éloigné des données de la banque OPTROCK [95] à la

différence de celui de Plastinin *et al.* [101]. En revanche, ce dernier fournit des résultats proches des mesures de Mularz et Yuen [96]. Pour l'alumine solide, les valeurs fournies par le modèle d'Anfimov *et al.* [81] sont un peu plus faibles que les données de la banque OPTROCK [95] et les mesures de Mularz et Yuen [96].

La Figure 4.17 représente l'évolution thermique de l'indice imaginaire dans le visible selon les données expérimentales de Mularz et Yuen [96] et les modèles d'Anfimov *et al.* [81] et de Plastinin *et al.* [101]. Pour les mêmes raisons que précédemment, le modèle de Plastinin *et al.* [101] n'a pas été représenté dans le cas de l'alumine solide. D'après ces courbes, la dépendance thermique de l'indice imaginaire est correctement décrite par la corrélation d'Anfimov *et al.* [81] pour l'alumine solide et par celle de Plastinin *et al.* [101] pour l'alumine liquide.

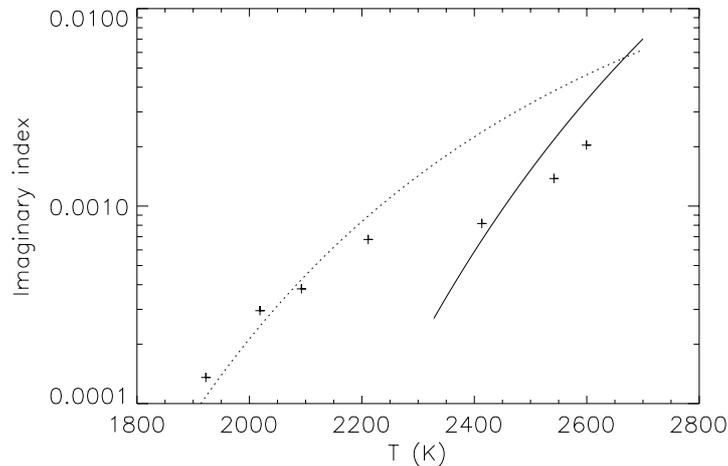


Figure 4.17 - Dépendance thermique de l'indice imaginaire de l'alumine à $0.546 \mu\text{m}$ selon : + les données expérimentales Mularz et Yuen [96], le modèle d'Anfimov *et al.* [81], — le modèle de Plastinin *et al.* [101] (alumine liquide)

Ces différents résultats montrent qu'il est difficile de définir un modèle numérique donnant l'évolution de l'indice imaginaire des particules d'alumine dans les jets de propulseurs, même dans l'ultraviolet où l'indice est plus sensible aux processus intrinsèques que dans l'infrarouge ou le visible. En conséquence, **il convient de rester très prudent sur la représentativité de ces lois empiriques en raison de l'importance des écarts sur la valeur de l'indice imaginaire dans le domaine UV entre les différentes sources de données.** Toutefois, la corrélation empirique d'Anfimov *et al.* [81] paraît être la mieux adaptée aux calculs de l'indice imaginaire de l'alumine car elle fournit des résultats assez proches des données de la banque OPTROCK [95] et des mesures de Mularz et Yuen [96]. C'est pourquoi elle a été retenue pour estimer la valeur de ce paramètre optique pour

l'alumine liquide. En ce qui concerne l'alumine solide, l'absorbance des particules dépend fortement de leur forme (rugosités...), de la phase cristalline et des impuretés. Ces sources d'incertitudes, qui sont très sensibles à l'historique des particules et à leur environnement gazeux, peuvent faire augmenter fortement la valeur de l'indice imaginaire. C'est pourquoi ce paramètre optique est très difficile à évaluer. Aussi ce dernier sera-t-il supposé, en première approximation, constant pour des températures inférieures au point de fusion de l'alumine (2320 K environ). Du fait de cette méconnaissance sur l'absorbance des particules, des études paramétriques sont nécessaires pour évaluer la dépendance du champ de rayonnement émis par un jet en fonction des hypothèses sur la valeur de l'indice imaginaire.

4.3.5. Distribution granulométrique

Ce paragraphe est consacré à l'étude des distributions granulométriques qui représentent la population des particules des jets de moteurs-fusées en fonction de leurs tailles respectives. Dans un premier temps, les méthodes de mesures de la taille des particules sont brièvement présentées afin d'en connaître les principales limitations. Puis, les fonctions mathématiques usuellement utilisées sont présentées.

Depuis une quarantaine d'années, la détermination de la taille des particules d'alumine présentes dans les jets de moteurs-fusées a fait l'objet de nombreuses études. Koo [102] présente une revue des différentes méthodes de mesures granulométriques utilisables pour ces milieux, qui sont de type mécanique (collecte *in situ* et analyse d'échantillons) ou optique. Les méthodes mécaniques sont susceptibles de produire des mesures biaisées en raison de la technique de prélèvement (agglomération des particules lors de la collecte des échantillons...) ou lors du comptage des particules. Ces techniques, souvent très fastidieuses, sont utilisées pour vérifier qualitativement (en taille et en morphologie) les granulométries obtenues à l'aide d'autres méthodes [83].

Parmi les techniques optiques disponibles, la photographie et l'holographie [103] permettent d'observer les particules dont le diamètre est plus grand que 5 μm . Les autres méthodes optiques couramment utilisées dans le cas des jets de moteurs-fusées sont globales, et elles reposent sur la mesure des propriétés optiques telles que l'extinction polychromatique [83] [85] [104] ou la diffusion monochromatique selon plusieurs directions discrètes [105]. L'inversion des données expérimentales permet d'évaluer la distribution granulométrique (dont la forme mathématique peut être choisie au préalable [83]) sous certaines hypothèses sur

les propriétés optiques des particules (indice complexe de réfraction, forme et homogénéité des particules...) à l'aide de techniques mathématiques d'inversion appropriées [106] [107] [108]. De ce fait, les distributions obtenues sont des résultats relatifs aux longueurs d'ondes utilisées et aux hypothèses effectuées sur les propriétés optiques des particules [108].

Les distributions granulométriques en nombres $N(r)$ sont normalisées par la relation [109] :

$$\int_0^{+\infty} N(r) dr = 1 \quad (4.72)$$

Elles peuvent être caractérisées par les paramètres suivants : le rayon le plus probable (position du maximum de la distribution en nombres), les rayons « moyens » et la variance. Les rayons moyens sont définis par la relation [109] :

pour m et n entiers :

$$r_{mn} = \left[\frac{\int_0^{+\infty} N(r) r^m dD}{\int_0^{+\infty} N(r) r^n dD} \right]^{\frac{1}{m-n}} \quad (4.73)$$

Parmi les autres grandeurs caractéristiques des distributions granulométriques, on peut citer le rayon géométrique moyen défini par [110] :

$$r_g = \exp \left[\int_0^{+\infty} N(r) \ln r dr \right] \quad (4.74)$$

et la déviation standard géométrique qui s'écrit [110] :

$$\sigma_g = \exp \left[\int_0^{+\infty} N(r) \left(\ln \frac{r}{r_g} \right)^2 dD \right] \quad (4.75)$$

En supposant que la masse volumique de l'alumine $\rho_{Al_2O_3}$ est indépendante de la taille et de la température des particules, on peut montrer que les coefficients d'extinction, d'absorption et de diffusion peuvent être calculés par des relations du type :

$$K_{Ext,Abs,Diff} = \left\langle Q_{Ext,Abs,Diff} \right\rangle \frac{3Y_{Al_2O_3} \rho}{4\rho_{Al_2O_3} r_{32}} \quad (4.76)$$

où $Y_{Al_2O_3}$ désigne la fraction massique des particules et ρ la masse volumique moyenne des constituants du jet. r_{32} qui est appelé « rayon moyen de Sauter », correspond au rayon moyen

de la distribution surfacique des particules. Les facteurs d'efficacité moyens $\langle Q_{\text{Ext,Abs,Diff}} \rangle$ peuvent être calculés par des relations du type :

$$\langle Q_{\text{Ext,Abs,Diff}} \rangle = \frac{\int_0^{\infty} N(r) Q_{\text{Ext,Abs,Diff}}(r) \pi r^2 dr}{\int_0^{\infty} N(r) \pi r^2 dr} \quad (4.77)$$

La fonction de phase moyenne est définie par la relation :

$$\langle P(\cos \Theta) \rangle = \frac{\int_0^{\infty} N(r) P(r, \cos \Theta) Q_{\text{Diff}}(r) \pi r^2 dr}{\int_0^{\infty} N(r) Q_{\text{Diff}}(r) \pi r^2 dr} \quad (4.78)$$

Différentes mesures ont mis en évidence le caractère multimodal des distributions granulométriques des particules d'alumine présentes dans les jets [84] [105]. Ce résultat se manifeste par l'observation de plusieurs maximums dans la distribution volumique qui est proportionnelle à $(4/3)\pi r^3 N(r)$. Ce phénomène provient des deux mécanismes de formation de l'alumine lors de la combustion des particules d'aluminium, mis en évidence par Kuentzmann [79]. Par ailleurs, ces distributions résultent aussi des ruptures et des coalescences de particules qui se produisent dans la tuyère [105]. Pour simplifier les calculs des propriétés optiques de l'alumine, les distributions granulométriques peuvent être approchées par des sommes de fonctions mathématiques monomodales semblables à celles présentées sur le Tableau 4.8.

Des corrélations empiriques permettent de relier le rayon moyen en volume (ou en masse) r_{43} avec les conditions régnant dans la chambre de combustion. D'après Hermsen [113], la relation la mieux appropriée peut s'écrire :

$$2r_{43} = 3.6304 D_t^{0.2932} [1 - \exp(-0.0008163 \xi_c P_c \tau)] \quad (4.79)$$

où D_t représente le diamètre du col de la tuyère en pouce (1 pouce = 2.54 cm), P_c la pression absolue dans la chambre en livres par pouce carré (PSI) (1 PSI = 6895 Pa), ξ_c la concentration d'alumine en g mol/100 g, τ le temps de résidence moyen des particules dans la chambre en ms, et r_{43} est exprimé en μm . D'après les résultats présentés par Hermsen [113], cette relation est correcte pour des diamètres de col de tuyère supérieurs à 10 cm, ce qui

représente des r_{43} supérieurs à 3 μm . Cette relation est donc réservée aux propulseurs de grande dimension, exclus de cette étude.

Nom	$N(r)$	r_{mn}	Sources bibliographiques
Log-normale	$\frac{\exp\left[-\frac{\ln r - \ln r_g}{2 \ln \sigma_g}\right]}{r \sqrt{2\pi \ln \sigma_g}}$	$r_g \sigma_g^{\frac{m+n}{2}}$	Konopka <i>et al.</i> [99]
Exponentielle (ou de « Worster »)	$\frac{e^{-\frac{r}{r_0}}}{r_0}$	$r_0 \left(\frac{m!}{n!}\right)^{\frac{1}{m-n}}$	Lyons <i>et al.</i> [3] [8] Cofer <i>et al.</i> [111] (normalisation : Caldas et Semião [112])
Gamma	$\frac{\left(\frac{r}{r_0}\right)^p}{r_0 \Gamma(p+1)} e^{-\frac{r}{r_0}}$	$r_0 \left(\frac{\Gamma(p+m+1)}{\Gamma(p+n+1)}\right)^{\frac{1}{m-n}}$	Bauer et Carlson [91] Parry et Brewster [94] Konopka <i>et al.</i> [99] (normalisation : Caldas et Semião [112])
Rosin- Rammler	$\frac{p \left(\frac{r}{r_0}\right)^{p-4}}{r_0 \Gamma\left(\frac{p-3}{p}\right)} e^{-\left(\frac{r}{r_0}\right)^p}$	$r_0 \left[\frac{\Gamma\left(1+\frac{m-3}{p}\right)}{\Gamma\left(1+\frac{n-3}{p}\right)}\right]^{\frac{1}{m-n}}$	Edwards et Babikan [17] Golovitchev [114] (normalisation : Caldas et Semião [112])

Tableau 4.8 – Fonctions de distribution granulométrique utilisées dans les jets de propulseurs

Des valeurs typiques de r_{mn} ont été évaluées par Laredo et Netzer [84] à partir de mesures effectuées pour des propulseurs de petite taille (5 mm de diamètre de col de tuyère). Selon leurs résultats, le rayon moyen en volume r_{43} est compris entre 0.2 μm et 3 μm et le rayon moyen de Sauter r_{32} entre 0.2 μm et 1.5 μm . Dans le cas des propulseurs d'appoint d'Ariane 5, Traineau *et al.* [105] ont mis en évidence à l'intérieur du moteur-fusée, trois modes de distribution granulométrique centrés respectivement en $r = 1 \mu\text{m}$, en $r = 5 \mu\text{m}$ et en $r = 15 \mu\text{m}$. Ces résultats obtenus par mesure dans le jet après refroidissement de l'alumine en injectant de l'hélium dans le propulseur, ne sont pas directement applicables à l'étude des signatures de jets.

La périphérie des jets est une zone où la distribution granulométrique des particules est assez peu étudiée. Toutefois, d'après les mesures d'extinction multispectrale dans le visible, effectuées par Kim *et al.* [83] pour un diamètre de col de tuyère de 0.51 cm, la distribution en tailles est de type log-normale avec un diamètre moyen de Sauter égal à $2r_{32} = (0.150 \pm 0.006) \mu\text{m}$ et une déviation standard géométrique de $\sigma_g = 1.50 \pm 0.04$ pour

un indice réel égal à $n = 1.63 \pm 0.13$. D'après les mesures de Laredo *et al.* [85] effectuées autour de la même zone de ce jet, on a $2r_{32} = (0.30 \pm 0.02) \mu\text{m}$ et $\sigma_g = 1.52 \pm 0.12$ pour un indice réel de $n = 1.64 \pm 0.04$. On rappelle que la valeur de l'indice réel déduite de ces expériences se rapporte à la phase métastable de l'alumine. La différence observée pour la valeur de r_{32} provient de la forte dépendance spatiale de la taille des particules à la périphérie des jets.

D'après Beiting [115], les distributions multimodales peuvent être approchées par une fonction monomodale sans erreurs importantes lorsque les paramètres de diffusion sont évalués dans le domaine IR dans le cas des jets de propulseurs de taille importante (Titan, Navette Spatiale, Ariane). Pour cet auteur, cette approximation consistant à négliger la forme réelle de la distribution peut être encore valable dans l'UV. Toutefois, comme dans ce domaine spectral, le paramètre de taille est plus grand que dans l'infrarouge, les propriétés optiques des particules sont alors plus sensibles aux incertitudes sur leur taille. De ce fait, cette approximation qui facilite les calculs de diffusion de Mie, doit être utilisée avec prudence dans le cas d'un calcul réaliste de la signature d'un jet de moteur-fusée. Cependant, ce type d'hypothèse permet d'étudier facilement les effets, sur le rayonnement, des incertitudes relatives au rayon moyen des particules.

Dans la suite, la distribution granulométrique sera supposée indépendante de la position dans le jet étudié, monomodale et de type log-normal avec une déviation standard géométrique typique égale à $\sigma_g = 1.1$ et un rayon géométrique moyen r_g compris entre $0.1 \mu\text{m}$ et $10 \mu\text{m}$ de façon à prendre en compte de manière réaliste la gamme des tailles de particules susceptibles d'être rencontrées.

4.3.6. Etude paramétrique des grandeurs optiques

L'étude bibliographique présentée ci-dessus met en évidence les difficultés inhérentes à l'évaluation des propriétés optiques et granulométriques des particules. Il est donc nécessaire d'étudier l'évolution des paramètres de diffusion des particules en fonction de leur taille et de leur indice optique. Pour cela, deux hypothèses sur la taille des particules ont été considérées : la monodispersion puis la polydispersion.

4.3.6.1. Calcul des paramètres de diffusion en monodispersion

Des calculs de diffusion de Mie ont été effectués pour des particules supposées sphériques ayant un indice typique de celui de l'alumine des jets de moteurs-fusées ($\tilde{n} = 1.75 - i10^{-2}$) à 280 nm. Les paramètres de diffusion obtenus (facteurs d'efficacité d'extinction et d'absorption, albédo de diffusion simple et paramètre d'asymétrie de la fonction de phase) ont été représentés en fonction de la taille des particules sur la Figure 4.18.

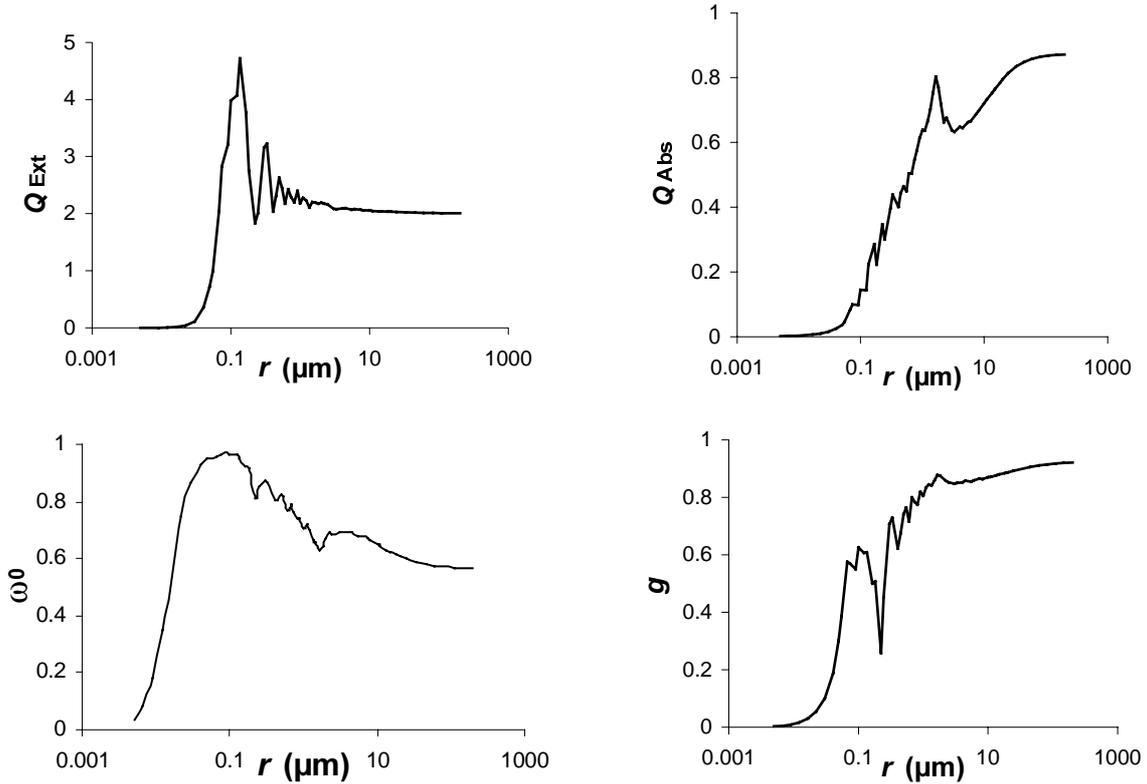


Figure 4.18 - Facteurs d'efficacité d'extinction Q_{Ext} et d'absorption Q_{Abs} , albédo de diffusion simple ω_0 et paramètre d'asymétrie g à 280 nm pour une sphère de taille variable et d'indice $\tilde{n} = 1.75 - i10^{-2}$

D'après ces résultats, la valeur du facteur d'efficacité d'extinction devient presque nulle dans le cas des très petites particules du fait de leur très faible interaction avec le rayonnement. Ce paramètre optique augmente brutalement lorsque le rayon des particules dépasse 0.1 μm environ et oscille ensuite jusqu'à atteindre la valeur asymptotique 2 dans le cas des grosses particules. La section efficace d'absorption augmente avec le volume de la particule où pénètre le rayonnement. Aussi le facteur d'efficacité d'absorption croît-il avec la taille des particules jusqu'à la valeur asymptotique 1. L'albédo de diffusion simple qui est petit pour les petites particules possède une valeur maximale proche de 1 pour un rayon de 0.1 μm . Au-delà de cette valeur, l'albédo de diffusion simple décroît lentement vers la valeur

asymptotique de 0.5 correspondant au cas où le rayonnement pénétrant à l'intérieur de la particule serait entièrement absorbé. Hormis quelques singularités (dont la principale est associée à un rayon de 0.2 μm environ), le paramètre d'asymétrie augmente avec la taille des particules.

4.3.6.2. Calcul des paramètres de diffusion en polydispersion

Les calculs des paramètres de diffusion dans les cas tests présentés dans cette étude, ont été réalisés pour différentes distributions log-normales caractérisées par la variance géométrique $\sigma_g = 1.1$ et par différents rayons moyens géométriques r_g . Dans la suite de cette étude, les distributions granulométriques seront supposées obéir à une loi log-normale dont le maximum correspond au rayon défini par :

$$r_{\max} = \frac{r_g}{\sigma_g} \quad (4.80)$$

Dans ce cas, les rayons à mi-hauteur sont définis par les relations :

$$\begin{cases} r_{-1/2} = r_{\max} \exp\left(-\sqrt{2 \ln 2} \ln \sigma_g\right) = 0.632 r_g \\ r_{+1/2} = r_{\max} \exp\left(+\sqrt{2 \ln 2} \ln \sigma_g\right) = 1.308 r_g \end{cases} \quad (4.81)$$

Les 21 rayons utilisés pour le calcul des paramètres de diffusion sont répartis selon une échelle logarithmique entre $r_g e^{-3}$ et $r_g e^3$. L'intégration est effectuée au moyen de la méthode des trapèzes. Afin de déterminer la précision de cet échantillonnage, on a calculé les 20 premiers moments de la distribution granulométrique définis par la relation :

$$M_n^{(N)} = \int_0^{\infty} N(r) r^n dx = r_g^n \sigma_g^{n^2/2} \quad (4.82)$$

Par comparaison avec les solutions analytiques, l'erreur produite par l'intégration numérique sur tous les moments est inférieure à 1.5%.

D'après le Tableau 4.8, l'évolution des paramètres de diffusion en fonction de la taille des particules est semblable à celle observée en monodispersion. On peut déduire de ces résultats et de la relation (4.77) que les coefficients d'extinction et de diffusion diminuent avec la taille des particules à concentration massique d'alumine égale.

r_g (μm)	$\langle Q_{\text{Ext}} \rangle$	$\langle Q_{\text{Abs}} \rangle$	$\langle \omega_0 \rangle$	$\langle g \rangle$
0.1	3.82	0.19	0.95	0.59
1.0	2.17	0.67	0.69	0.83
10.0	2.05	0.74	0.64	0.87

Tableau 4.9 – Paramètres de diffusion moyens à 280 nm pour des sphères d'indice $\tilde{n} = 1.75 - i10^{-2}$ selon différentes distributions log-normales caractérisées par la variance géométrique $\sigma_g = 1.1$ et par différents rayons moyens géométriques r_g

Le modèle SHDOM n'utilise pas les valeurs « exactes » de la fonction de phase mais un développement en polynômes de Legendre dont la troncature dépend de la résolution angulaire zénithale (cf. relations (3.16) et (3.21)). D'après Evans [10], cette dernière est optimale pour les calculs de luminance lorsque $N_\mu = 16$ angles zénithaux sont utilisés. Cette valeur impose que les fonctions de phases soient tronquées jusqu'au polynôme de Legendre d'ordre $L = 15$. Les effets de cette troncature sur la fonction de phase ont donc été représentés sur la Figure 4.19 avec les valeurs « exactes » des fonctions, pour les distributions granulométriques étudiées ici. D'après ces résultats, plus les particules sont grosses, plus la fonction de phase « exacte » est piquée. Le nombre de maximums secondaires dus à la diffraction augmente avec la taille des particules. Ils sont cependant beaucoup moins marqués que dans le cas de la monodispersion en raison d'un lissage de type « effet de moyenne ».

Dans le cas des particules microniques ($r_g \geq 1\mu\text{m}$), on peut remarquer que la troncature du développement de Legendre de la fonction de phase, produit des artefacts numériques indésirables tels que des valeurs négatives. La méthode Delta- M [42] remédie à ces défauts tout en lissant les courbes. Dans le cas des petites particules ($r_g = 0.1\mu\text{m}$), aucune différence n'est observée entre les valeurs « exactes » et celles issues de la troncature du développement de Legendre, que la méthode Delta- M soit utilisée ou non. Ceci provient du fait que lorsque la fonction de phase est peu piquée, peu de polynômes de Legendre suffisent à la décrire entièrement.

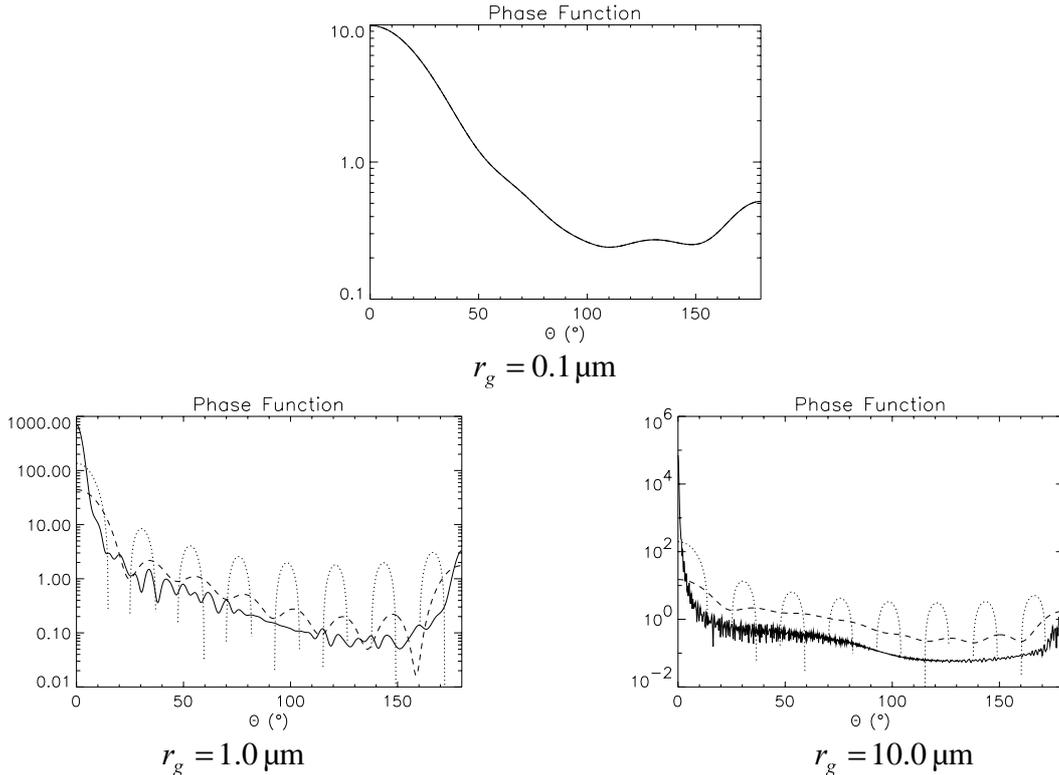


Figure 4.19 - Fonctions de phases à 280 nm pour des sphères d'indice $\tilde{n} = 1.75 - i10^{-2}$ selon différentes distributions log-normales caractérisées par la variance géométrique $\sigma_g = 1.1$ et par différents rayons

géométriques moyens r_g :

— valeur « exacte »

..... troncature du développement en polynômes de Legendre à l'ordre $L = 15$

---- troncature du développement en polynômes de Legendre à l'ordre $L = 15$ reconditionnée par la méthode Delta-M

L'étude bibliographique présentée ci-dessus (cf. § 4.3.3 & § 4.3.4) a montré que la valeur de l'indice complexe de réfraction des particules dans un jet dépendait de leur historique, de leur environnement gazeux et de leur température. Il est donc nécessaire de déterminer dans quelle gamme évoluent les paramètres de diffusion par rapport aux incertitudes sur les parties réelles et imaginaires de l'indice de l'alumine dans le cas des distributions granulométriques étudiées ici.

La Figure 4.20 représente les variations des paramètres optiques moyens en fonction de l'indice réel pour différents rayons géométriques moyens.

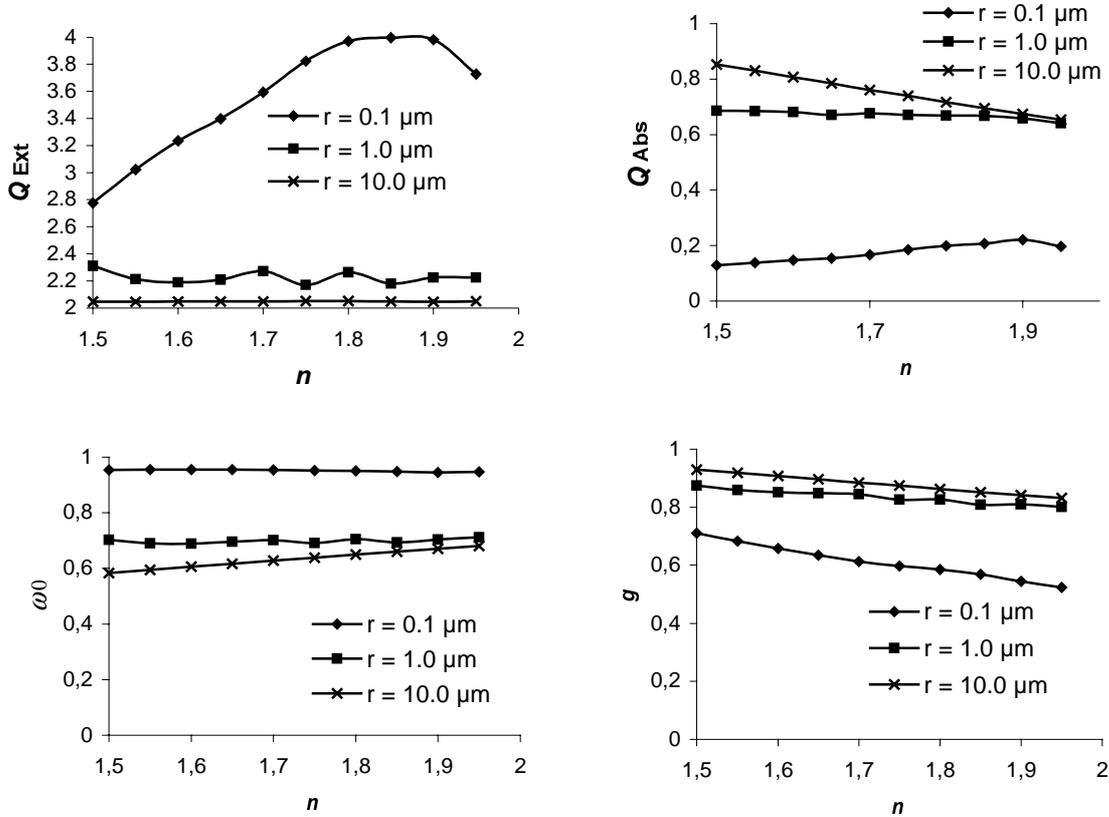


Figure 4.20 – Facteurs d'efficacité d'extinction et d'absorption, albédo de diffusion simple et paramètre d'asymétrie, calculés pour différentes distributions log-normales définies par leur rayon géométrique moyen en fonction de l'indice réel (l'indice imaginaire a été fixé à $m = 10^{-2}$)

D'après ces courbes, le facteur d'efficacité d'extinction est quasiment constant par rapport à l'indice réel et il reste proche de la valeur 2, sauf dans le cas des petites particules ($r_g = 0.1 \mu\text{m}$) où ce paramètre optique est très sensible à la valeur de l'indice réel. Ce dernier a une influence assez faible sur les valeurs respectives du facteur d'efficacité d'absorption et de l'albédo de diffusion simple. Enfin, le paramètre d'asymétrie diminue lorsque l'indice réel augmente.

La Figure 4.21 représente les variations des paramètres optiques moyens en fonction de l'indice imaginaire pour différents rayons géométriques moyens.

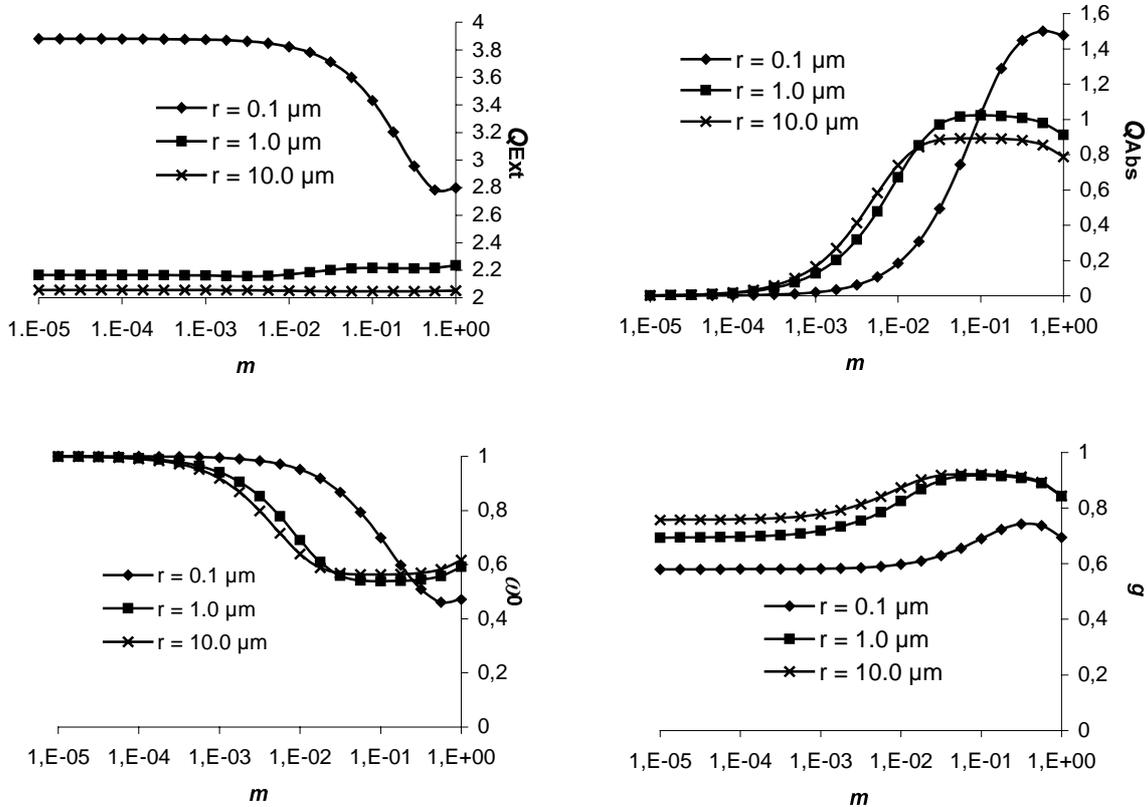


Figure 4.21 – Facteurs d'efficacité d'extinction et d'absorption, albédo de diffusion simple et paramètre d'asymétrie, calculés pour différentes distributions log-normales définies par leur rayon géométrique moyen en fonction de l'indice imaginaire (l'indice réel a été fixé à $n = 1.75$)

Selon ces résultats, le facteur d'efficacité d'extinction est indépendant de l'indice imaginaire sauf dans le cas des petites particules où Q_{Ext} décroît lorsque $m > 10^{-2}$. Si l'indice imaginaire est inférieur à 10^{-4} , l'albédo de diffusion simple a une valeur proche de 1 et celle du facteur d'efficacité d'absorption est très faible ; les particules sont alors purement diffusantes. Au-delà de ce seuil, le facteur d'efficacité d'absorption augmente avec l'indice imaginaire et l'albédo de diffusion simple diminue. Dans le cas des particules microniques, ces deux paramètres optiques atteignent des valeurs asymptotiques valant respectivement 1 et 0.5 environ. Ce phénomène est lié à l'augmentation de l'absorbance des particules avec l'indice imaginaire. Enfin, le paramètre d'asymétrie de la fonction de phase n'est sensible à la valeur de l'indice imaginaire que lorsque ce dernier est plus grand que 10^{-2} .

4.4. Conclusion

L'émission de « chimiluminescence » de OH dans le domaine UV provient de la désexcitation radiative du premier état moléculaire électronique excité, noté « OH* » qui est produit par une réaction de recombinaison entre H et OH et qui est désactivé principalement par collision avec les autres espèces gazeuses présentes dans le jet. D'après les résultats obtenus pour une composition moléculaire représentative de la zone de postcombustion d'un jet de moteur-fusée à propergol solide en phase de croisière, l'absorption et l'émission stimulée ne jouent aucun rôle sur les concentrations respectives de OH et de OH* et n'ont qu'une influence marginale sur le rayonnement.

Le mécanisme réactionnel de la recombinaison radiative de CO + O fait intervenir différents états électroniques de CO₂. L'absorption de CO₂ dans son état fondamental n'a pratiquement aucun effet sur le rayonnement et sur la cinétique des réactions. Si la résolution spectrale est faible, le spectre d'émission peut être assimilé à un continuum, en raison de la forte densité de raies. La dépendance en température et en longueur d'onde de ce spectre, est approchée à l'aide d'une loi de type Arrhenius ajustée à l'aide de résultats expérimentaux issus de la littérature. Intégrée entre 240 nm et 280 nm, l'émission de chimiluminescence de CO + O dans la zone de postcombustion d'un jet est au moins 10 fois plus intense que celle de OH* dans le même domaine spectral. Pour cette raison, cette dernière source de rayonnement ne sera pas prise en compte pour le calcul de la signature UV des jets.

Les particules d'alumine sont produites à l'intérieur du propulseur, lors de la combustion de l'aluminium présent dans la composition du propergol solide. L'alumine peut être présente dans le jet sous au moins trois phases différentes : liquide, solide métastable et corindon (phase stable de l'alumine). Les propriétés optiques des particules peuvent être calculées par la théorie de Mie en assimilant ces corps à des sphères homogènes. L'indice réel dépend des phases cristallines de l'alumine et de la température. L'indice imaginaire est beaucoup plus difficile à évaluer en raison de sa grande sensibilité à l'environnement gazeux et aux impuretés produites lors de la combustion de l'aluminium. On a choisi de décrire ce paramètre optique par le modèle semi-empirique d'Anfimov *et al.* [81] et de le supposer constant en dessous du point de fusion de l'alumine (2320 K environ).

Le caractère multimodal des distributions granulométriques reflète les différents processus de formation des particules présentes dans les jets. Dans le cadre de cette étude, ces distributions sont supposées monomodales en première approximation, et elles sont

modélisées par une fonction log-normale dont le rayon géométrique moyen r_g est compris entre $0.1 \mu\text{m}$ et $10 \mu\text{m}$ et dont la déviation standard géométrique σ_g est égale à 1.1. L'étude paramétrique que l'on a effectuée dans le domaine UV, montre que le facteur d'efficacité d'extinction dépend surtout de la taille des particules. Le facteur d'efficacité d'absorption augmente avec la taille et avec l'indice imaginaire. On peut aussi remarquer que plus les particules sont grosses, plus elles diffusent vers l'avant. Enfin, les variations de l'indice réel ont peu d'effet sur les propriétés optiques des particules, sauf si celles-ci sont submicroniques. On a donc mis en évidence deux régimes distincts suivant la taille moyenne des particules.

5. APPLICATION DE LA MÉTHODE SHDOM À DES GÉOMÉTRIES SIMPLES

Dans ce chapitre, l'intérêt et les limitations du modèle SHDOM pour le calcul du champ de rayonnement émis par des milieux 1D, 2D et 3D, sont étudiés. Dans un premier temps, les résultats de calcul fournis par la méthode SHDOM sont comparés à des solutions de référence issues de la littérature pour des milieux « plans parallèles » et des enceintes carrées. Ensuite, des comparaisons avec des modèles approchés tels que les formulations 2-flux utilisées pour l'évaluation du rayonnement émis par les jets [6], sont effectuées pour des géométries « plans parallèles » et des milieux à symétrie cylindrique représentatifs de la zone de postcombustion d'un jet de propulseur à propergol aluminisé. Dans ce dernier cas, l'adaptation du code SHDOM aux jets de moteur-fusée est utilisée. Enfin, pour ce dernier type de milieu, le champ de rayonnement est calculé en prenant en compte les incertitudes sur les propriétés optiques des particules d'alumine, qui ont été identifiées au chapitre précédent.

5.1. Comparaison de la méthode SHDOM avec des modèles de transfert radiatif de référence

Afin de déterminer les sources d'incertitudes des calculs effectués avec la méthode SHDOM en fonction du type de maillage de la grille de propriétés et du nombre d'ordonnées discrètes utilisées pour résoudre l'ETR, les résultats de ce code ont été comparés à des solutions de référence disponibles dans la littérature pour deux géométries : des milieux « plans parallèles » d'après un problème résolu par van de Hulst [117] et des enceintes carrées [19].

5.1.1. Comparaison avec une solution analytique exacte de l'ETR

A l'aide d'une solution analytique exacte de l'ETR, van de Hulst [117] a calculé la dépendance angulaire de la luminance émise par différents milieux « plans parallèles » homogènes, absorbants et diffusants possédant une source interne de rayonnement isotrope. L'épaisseur optique du milieu est supposée être égale à 1 et la fonction de phase de diffusion est isotrope. La Figure 5.1 présente la géométrie du problème.

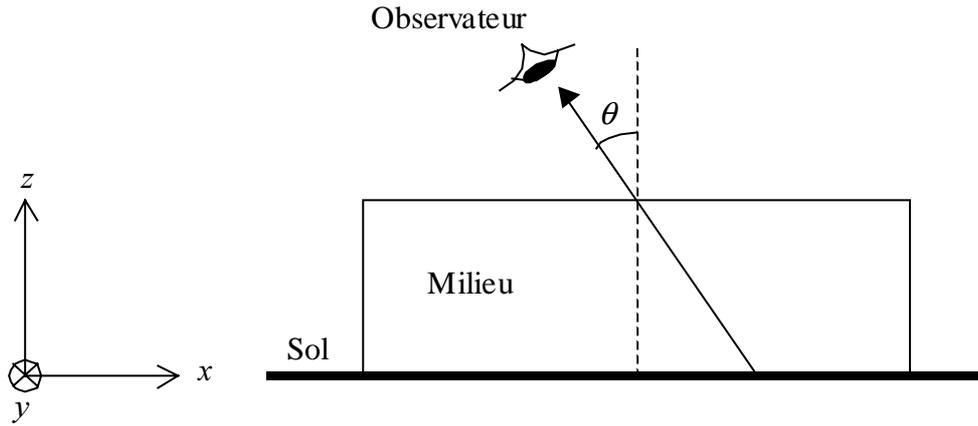


Figure 5.1 – Milieu « plans parallèles » : géométrie utilisée pour le calcul de la dépendance angulaire de la luminance

Les résultats du code SHDOM ont été comparés à ceux de van de Hulst [117] pour différentes résolutions angulaires et discrétisations spatiales. Pour les calculs effectués à l'aide de la méthode SHDOM, les milieux ont été définis dans une grille de propriétés cubique. Les pas de la grille selon les axes du repère (x, y, z) sont définis ici en terme d'épaisseur optique et ils sont notés respectivement $\Delta\tau_x$, $\Delta\tau_y$ et $\Delta\tau_z$. Les conditions aux limites sur les parois verticales sont périodiques. Dans le cas purement diffusant ($\omega_0 = 1$), le rayonnement source du milieu est fixé à $\check{J} = L_0$, et dans les autres cas à $\check{J} = (1 - \omega_0)L_0$. La valeur de seuil du « résidu de convergence » (appelée aussi « critère de convergence », cf. § 3.1) a été fixée à $\Delta_{\text{sol}} = 10^{-6}$. La valeur de seuil du « paramètre d'hétérogénéité » (désignée sous le nom de « critère de découpage », cf. § 3.1.2) est :

- Soit infinie (absence de découpage de cellules) ;
- Soit égale à $C = C_0 \frac{\check{J}}{L_0}$ avec $C_0 = 1$ unité arbitraire (u. a.) (découpage de cellules activé) de façon à ce que le rapport entre la valeur du critère de découpage et celle du rayonnement source du milieu ne dépende pas de la valeur de l'albédo de diffusion simple. Ainsi, si $\omega_0 = 1$, alors $C = C_0$, et, dans les autres cas, $C = (1 - \omega_0)C_0$.

Enfin, la méthode d'accélération de la convergence est activée.

La Figure 5.2 représente la luminance en fonction de l'angle d'aspect $\mu = \cos \theta$ obtenue par van de Hulst [117] pour plusieurs albédos de diffusion simple, et celle calculée

par le code SHDOM utilisant une résolution angulaire définie par $N_\mu = 16$ angles zénithaux et $N_\phi = 32$ angles azimutaux pour différentes résolutions spatiales de la grille de propriétés optiques. Les luminances présentées ci-dessous sont normalisées en les divisant par le terme source du milieu \tilde{J} . Les angles zénithaux correspondant aux différents points de calculs ne sont pas ceux utilisés dans le schéma de quadrature. Leur choix arbitraire (selon un pas égal à $\Delta\mu = 0.1$) est autorisé par l'utilisation de la base d'harmoniques sphériques qui permet d'interpoler angulairement le champ de luminance à l'issue du processus itératif (*cf.* § 3.1.2).

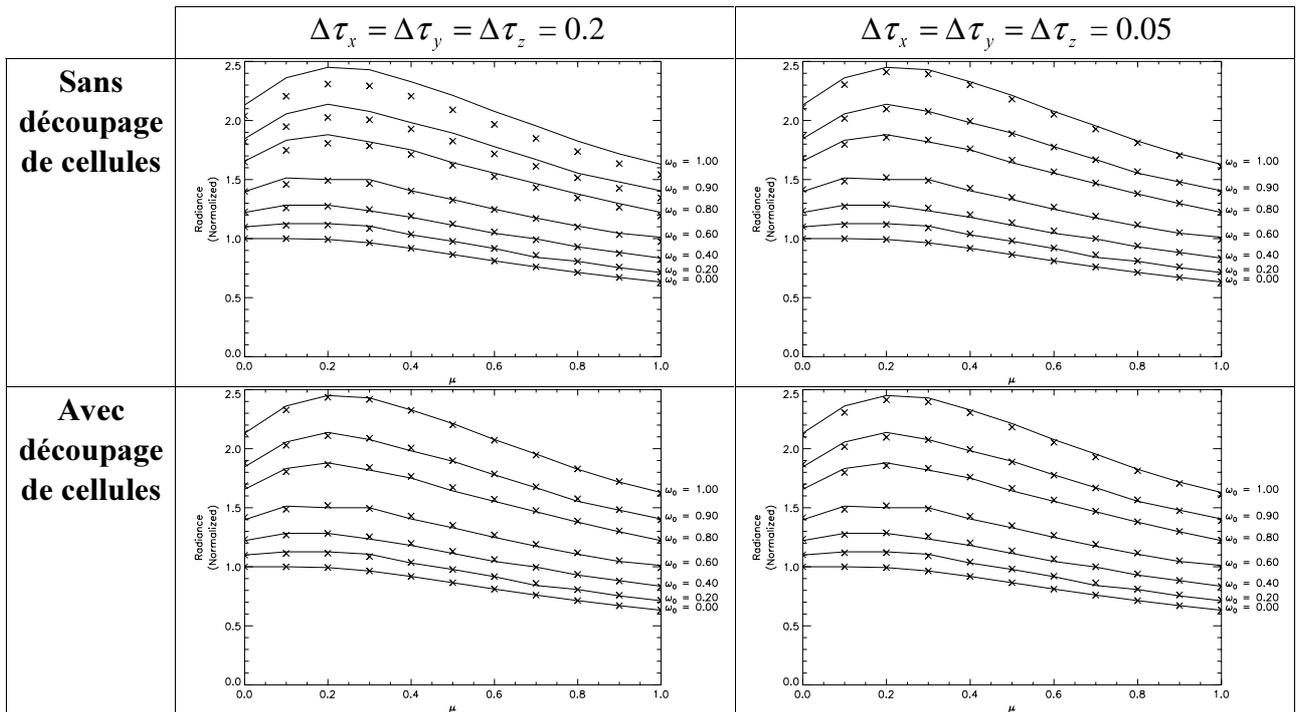


Figure 5.2 – Milieu « plans parallèles » : dépendance angulaire normalisée de la luminance :

— : calculs analytiques de van de Hulst [117]

× : résultats du code SHDOM ($N_\mu = 16$, $N_\phi = 32$) pour différentes discrétisations spatiales

Le rayonnement augmente en valeur absolue avec l'albédo de diffusion simple en raison d'une diminution de l'absorption. La luminance du cas sans diffusion ($\omega_0 = 0$) croît quand l'angle d'observation μ diminue car l'épaisseur du milieu augmente (*cf.* relation (2.42)). Pour un albédo de diffusion simple donné, le rapport entre la luminance évaluée dans le cas général et celle évaluée en absence de diffusion ($\omega_0 = 0$) dépend peu de la valeur de l'angle zénithal. Ceci signifie que le rapport entre le rayonnement diffusé et celui n'ayant subi aucune diffusion, varie faiblement avec la direction d'observation. De ce fait, la luminance est maximale pour un angle d'observation proche de l'horizontale dont la position $\mu = \mu_0$

augmente avec l'albédo de diffusion simple d'après les résultats de van de Hulst [117]. Cette variation ne peut pas être décrite par la Figure 5.2 en raison du nombre insuffisant de points de calcul. L'augmentation de la luminance avec $\mu = \cos\theta$ dans l'intervalle $[0, \mu_0]$ est due aux pertes radiatives du milieu par diffusion en visée horizontale.

La précision des résultats fournis par la méthode SHDOM dépend de l'albédo de diffusion simple et de la qualité de la discrétisation spatiale. Lorsque le pas est suffisamment fin ($\Delta\tau = 0.05$) ou que le découpage de cellules est activé, les luminances calculées par le modèle SHDOM sont très proches des résultats de van de Hulst [117]. Cependant, en absence de découpage de cellules, si le maillage initial de la grille est trop large ($\Delta\tau = 0.2$), les résultats obtenus par la méthode SHDOM peuvent s'éloigner du calcul analytique lorsque le milieu est très diffusant ($\omega_0 > 0.8$). Toutefois, la forme de la dépendance angulaire est conservée et l'erreur relative commise est seulement d'environ 5%. Ces résultats montrent qu'avec une discrétisation spatiale insuffisante, les hétérogénéités de la fonction source provenant ici des phénomènes de diffusions multiples, ne sont pas décrites correctement. Les erreurs produites par un maillage insuffisamment fin de la grille de propriétés au départ du calcul, peuvent cependant être corrigées par l'activation du découpage de cellules. Lorsque cette option n'est pas activée, les incertitudes des calculs effectués par la méthode SHDOM sont cependant limitées car les hétérogénéités de la fonction source dues à la diffusion sont relativement faibles pour ce type de milieu.

Afin de comprendre l'influence de la grille adaptative sur la précision des résultats, l'évolution du nombre de points de la grille au cours du processus itératif a été représentée sur la Figure 5.3. Le cas sans diffusion ($\omega_0 = 0$) n'est pas représenté du fait que l'intégrale de diffusion est nulle et qu'une seule itération est nécessaire pour résoudre l'ETR.

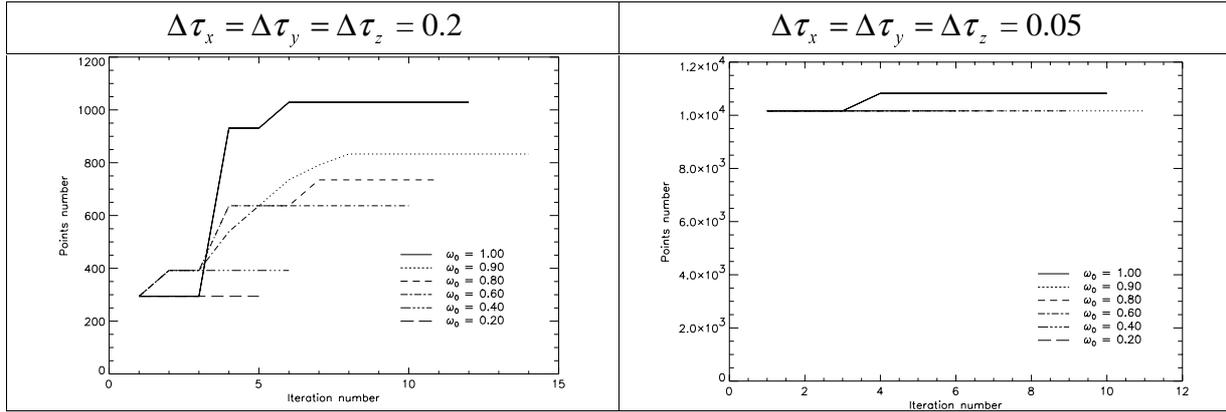


Figure 5.3 – Milieu « plans parallèles » : évolution du nombre de points de la grille adaptative de SHDOM pour deux discrétisations spatiales initiales

En règle générale, le nombre d'itérations nécessaires pour obtenir la convergence des résultats augmente avec l'albédo de diffusion simple. L'influence du choix de la discrétisation spatiale sur ce nombre est assez faible. Lorsque le pas de discrétisation spatiale initial est fin ($\Delta\tau = 0.05$), le nombre de points est élevé en raison des échantillonnages horizontaux et verticaux de la grille de propriétés. Ce nombre n'évolue pas, sauf dans le cas d'un milieu purement diffusant ($\omega_0 = 1$) où il croît faiblement. Par contre, pour un milieu n'utilisant pas une discrétisation spatiale fine comme pour le cas $\Delta\tau = 0.2$ de la Figure 5.3, le nombre de points augmente d'autant plus vite que le milieu est diffusant. En raison de la géométrie du milieu, ce découpage de cellules est vertical et de ce fait, la hauteur moyenne des cellules résultant d'un remaillage au cours du calcul s'élève à $\langle \Delta\tau_z \rangle \approx 0.07$ environ, si le milieu est purement diffusant ($\omega_0 = 1$).

Au cours du processus itératif qui est conçu pour obtenir la convergence de l'intégrale de diffusion, les interpolations trilineaires effectuées par la méthode SHDOM dans la grille adaptative, utilisent la fonction source incluant l'intégrale de diffusion évaluée lors de l'itération précédant le découpage de cellules. Dans le cas d'un milieu « plans parallèles » homogène, le nombre d'itérations nécessaires dépend principalement du caractère diffusant du milieu et non du maillage de la grille de propriétés initiale, appelée aussi « grille de base ». L'augmentation du nombre final de points avec l'albédo de diffusion simple provient de l'accroissement des gradients de la fonction source, du fait d'une discrétisation spatiale insuffisante près des parois horizontales du milieu pour décrire correctement les hétérogénéités de la fonction source produites par la diffusion.

La Figure 5.4 représente l'évolution du résidu de convergence et du paramètre d'hétérogénéité au cours du processus itératif, avec et sans découpage de cellules lorsque le maillage de la grille de propriétés est large. Le paramètre d'hétérogénéité est normalisé par rapport à sa valeur de seuil C .

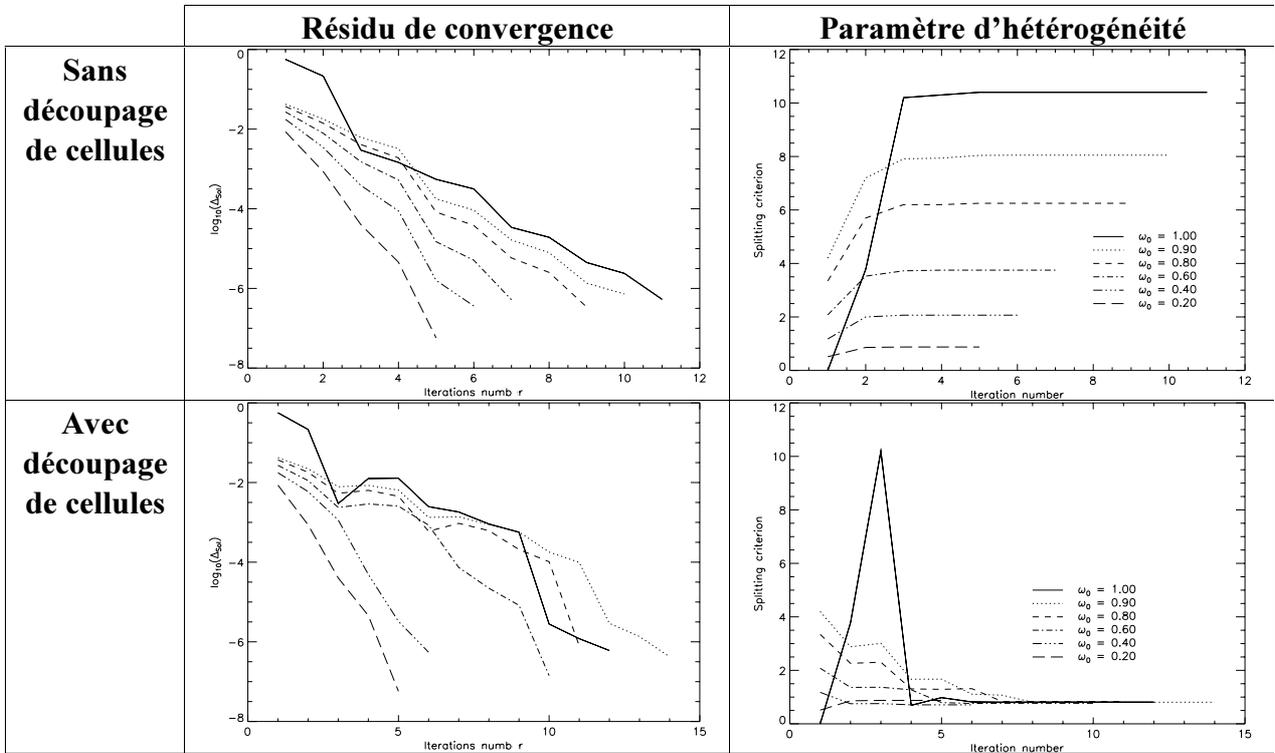


Figure 5.4 – Milieu « plans parallèles » : évolution du résidu de convergence et du paramètre d'hétérogénéité (en u. a.)

Sur ces courbes, on peut constater qu'en absence de découpage de cellules, le résidu de convergence diminue suivant une progression quasi-géométrique et le paramètre d'hétérogénéité atteint très rapidement une valeur de seuil qui augmente avec l'albédo de diffusion simple. Le nombre d'itérations est légèrement plus important en cas d'activation du découpage de cellules et l'évolution du résidu de convergence est plus irrégulière que dans le cas précédent. En particulier, lorsque le milieu est très diffusant, le résidu de convergence peut légèrement augmenter lors des premiers remaillages. Lorsque la grille adaptative est activée, le paramètre d'hétérogénéité converge par paliers vers la valeur de référence C choisie par l'utilisateur. Cependant, dans le cas purement diffusant, ce paramètre passe par un maximum avant de converger rapidement vers la valeur de seuil C .

L'influence du rayonnement ayant été diffusé vers la direction d'observation diminue avec l'ordre de diffusion considéré. Comme ce dernier augmente avec le nombre d'itérations, l'écart résiduel entre deux fonctions sources calculées lors de deux itérations successives, et

donc le résidu de convergence décroissent au cours du processus itératif. L'augmentation du paramètre d'hétérogénéité quand la grille adaptative n'est pas activée, provient de l'accroissement des gradients de la fonction source produits par les phénomènes de diffusions multiples. Si la grille adaptative est utilisée, l'évolution irrégulière du résidu de convergence et du paramètre d'hétérogénéité est due à la simultanéité des processus d'optimisation de la discrétisation spatiale et de convergence de la fonction source. Le nombre final d'itérations est cependant assez peu sensible à l'activation du remaillage du milieu du fait que les fonctions sources des nouvelles cellules sont calculées à partir de l'interpolation aux points nouvellement créés, de celles estimées lors des itérations précédentes. D'après ces résultats, on peut conclure que l'évolution au cours du calcul de la discrétisation spatiale du milieu, du résidu de convergence et du paramètre d'hétérogénéité, dépend du type de milieu étudié et notamment de son caractère diffusant. Par conséquent, il est difficile de dimensionner *a priori* le temps de calcul et la taille nécessaire du calculateur, en fonction de la précision des résultats souhaitée.

Afin de mettre en évidence les effets de la résolution angulaire sur la précision du calcul, des cas tests ont été effectués avec différents nombres d'angles zénithaux et d'azimuts. La Figure 5.5 représente les résultats obtenus avec un pas de discrétisation spatiale défini par $\Delta\tau = 0.2$ lorsque le découpage de cellules est activé. Lorsque l'albédo de diffusion simple est supérieur à 0.4, la luminance peut être fortement minorée si l'échantillonnage angulaire est insuffisant. En effet, pour le calcul de l'intégrale de diffusion, il est nécessaire de prendre en compte la contribution de la plupart des cellules du milieu. C'est pourquoi, lorsque le nombre d'ordonnées discrètes prises en compte est trop petit, les interactions entre les différentes zones du milieu ne sont pas correctement modélisées. Cette source d'erreurs de type « effet de rayon » [37] explique que pour $N_\mu = 2$ et $N_\mu = 4$, la luminance peut être fortement minorée lorsque le milieu est diffusant. Les résultats du code SHDOM sont toutefois équivalents aux solutions analytiques, dès que $N_\mu = 8$ angles zénithaux et $N_\phi = 16$ azimuts sont utilisés. Ces valeurs sont préconisées par Evans [10] pour le calcul des flux. Pour l'évaluation des luminances dans des milieux 2D ou 3D, l'auteur suggère d'utiliser $N_\mu = 16$ angles zénithaux et $N_\phi = 32$ azimuts. Cette augmentation de la résolution angulaire n'améliore pas sensiblement la précision des résultats présentés ici, dans le cas d'une géométrie « plans parallèles ».

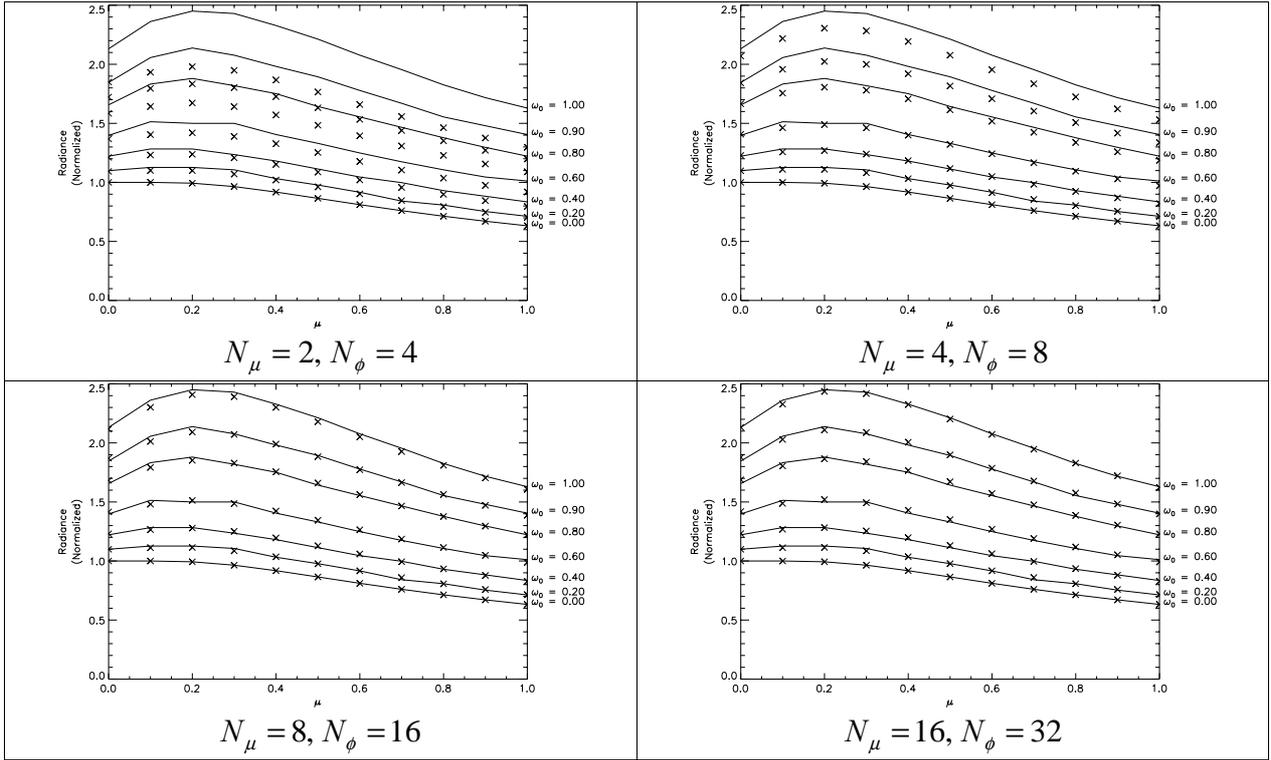


Figure 5.5 – Milieu « plans parallèles » : dépendance angulaire normalisée de la luminance :

—— calculs analytiques de van de Hulst [117]

× résultats du code SHDOM ($\Delta\tau_x = \Delta\tau_y = \Delta\tau_z = 0.2$, découpage de cellules activé) pour différentes résolutions angulaires

Le rôle spécifique de la résolution azimutale n'a pas été testé ici puisqu'en géométrie 1D, le champ de luminance est axisymétrique en tout point. Il est toutefois important de souligner que dans les milieux 2D ou 3D hétérogènes, le nombre d'azimuts doit être suffisamment élevé afin de prendre correctement en compte les interactions entre les différentes cellules du milieu.

5.1.2. Enceintes carrées

Les calculs présentés ci-dessous ont été effectués pour établir la précision de la méthode SHDOM par rapport à des méthodes exactes dans le cas de milieux 2D homogènes infinis suivant une direction et de section carrée de 1 m de côté. Les solutions de référence proposées par Liu *et al.* [19] ont été calculées au moyen de la méthode de zones. C'est pourquoi ces données sont exprimées en termes de flux hémisphériques. Leur comparaison avec les flux obtenus par la méthode SHDOM permet d'évaluer la précision du schéma de quadrature utilisé par ce code, pour effectuer des intégrations angulaires semblables au calcul

de l'intégrale de diffusion. Deux cas tests dont la géométrie est représentée sur la Figure 5.6, ont été étudiés :

- Un milieu 2D thermiquement émissif (à la température T_0) et non-diffusant ;
- Un milieu 2D purement diffusant (avec une fonction de phase isotrope) illuminé par la paroi horizontale inférieure à la température T_0 .

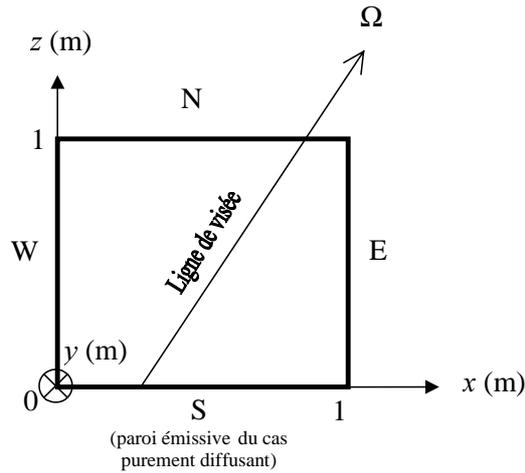


Figure 5.6 – Géométrie des enceintes carrées

Dans ces deux exemples, les bords froids et absorbants parallèles au plan (yOz) ont été représentés par des cellules non-émisives optiquement épaisses. Les conditions aux limites sont périodiques selon la direction $(y'y)$ pour que le milieu puisse être considéré comme infini selon cet axe. Le pas de discrétisation spatiale est de 0.02 m. Le découpage de cellules n'est utilisé que dans le cas du milieu diffusant puisqu'en absence de diffusion, la fonction source du milieu est homogène. Les résultats sont normalisés par rapport au flux hémisphérique πL_0 émis par un corps noir à la température T_0 .

Dans le premier cas test (milieu émissif non-diffusant), le calcul « exact » a été effectué par l'intégration angulaire du champ de luminance calculé au moyen d'une formule analytique exacte. Lors de ce calcul, 100 angles zénithaux et 200 azimuts ont été utilisés afin d'obtenir des résultats d'une grande précision. Ces derniers sont identiques à ceux obtenus par Liu *et al.* [19] avec la méthode de zones. Le milieu est supposé optiquement fin ($K_{\text{Ext}} = K_{\text{Abs}} = 0.1 \text{ m}^{-1}$) de façon à ce que la valeur de la luminance dépende fortement de la longueur des lignes de visée. La Figure 5.7 représente le flux hémisphérique $F^+(x, z = 1 \text{ m})$ déterminé sur la paroi de l'enceinte (appelé aussi « flux hémisphérique pariétal ») à l'aide du

calcul « exact » et du modèle SHDOM utilisant différentes résolutions angulaires. En raison de la géométrie du milieu, le rayonnement émis par le milieu est plus important au voisinage de l'axe du milieu. Tandis que le pseudo-2-flux ($N_\mu = 2, N_\phi = 1$) et 8-flux ($N_\mu = 2, N_\phi = 4$) minorent et majorent respectivement la valeur des flux hémisphériques, ces derniers sont correctement évalués par les autres schémas de quadrature.

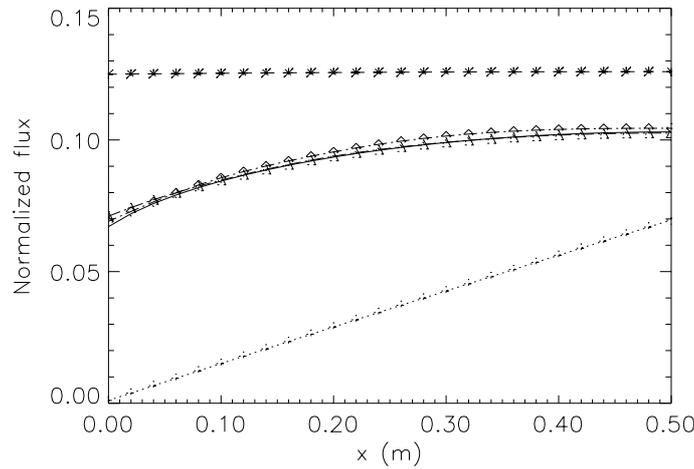


Figure 5.7 – Enceinte carrée émissive non-diffusante ($K_{\text{Ext}} = K_{\text{Abs}} = 0.1 \text{ m}^{-1}$) : flux hémisphérique pariétal

$F^+(x, z = 1 \text{ m})$: — calcul « exact » ; SHDOM : $N_\mu = 2, N_\phi = 1$; *-* $N_\mu = 2, N_\phi = 4$;
 ◆◆◆ $N_\mu = 8, N_\phi = 16$; ▲▲▲ $N_\mu = 16, N_\phi = 32$

Dans le second cas (milieu purement diffusant), les résultats exacts ont été obtenus par la méthode de zones [19] pour un coefficient d'extinction égal à $K_{\text{Ext}} = K_{\text{Diff}} = 1 \text{ m}^{-1}$. Les caractéristiques du milieu ont été choisies de manière à comparer les résultats du modèle à ceux de la publication de Liu *et al.* [19]. Pour les calculs effectués au moyen de la méthode SHDOM, le critère de convergence a été fixé à $\Delta_{\text{Sol}} = 10^{-2}$ et le découpage de cellules a été activé afin de prendre en compte correctement les hétérogénéités de la fonction source provenant des diffusions multiples. La Figure 5.8 représente les flux hémisphériques nets au sol $\pi L_0 - F^-(x, z = 0)$ calculés par les méthodes de zones et SHDOM pour différentes résolutions angulaires. En raison des diffusions multiples et de la géométrie du milieu, les pertes de rayonnement sont plus importantes près des parois qu'au centre du milieu. De ce fait, le rayonnement diffusé vers le « sol » est plus important lorsqu'il parvient au milieu de la paroi inférieure. Ceci explique que le flux hémisphérique net pariétal est plus important sur les bords du milieu. Les flux hémisphériques pariétaux sont respectivement majorés et minorés par le pseudo-2-flux ($N_\mu = 2, N_\phi = 1$) et 8-flux ($N_\mu = 2, N_\phi = 4$). Par contre, avec

les autres résolutions angulaires, les différences entre les calculs effectués à l'aide du modèle SHDOM et ceux obtenus par la méthode de zones, sont de 2% environ.

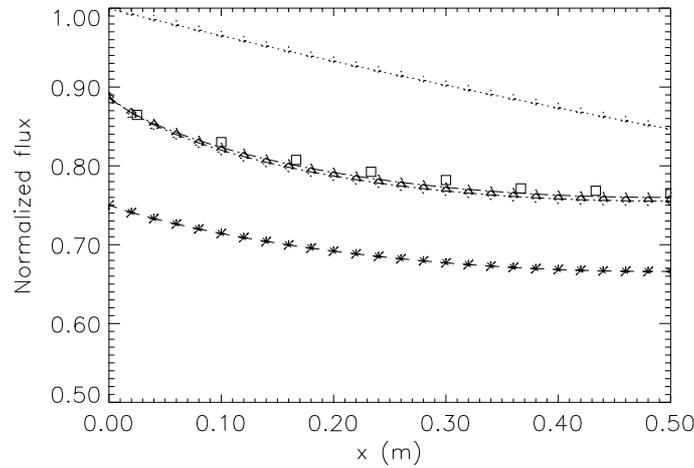


Figure 5.8 - Enceinte carrée purement diffusante (fonction de phase isotrope, $K_{\text{Ext}} = K_{\text{Diff}} = 1 \text{ m}^{-1}$) éclairée par un sol lambertien : flux hémisphérique net au sol ($\pi L_0 - F^-(x, z = 0)$) : \square \square méthode de zones [19] ;

SHDOM : \cdots $N_\mu = 2, N_\phi = 1$; $* - *$ $N_\mu = 2, N_\phi = 4$; $\triangle - \triangle$ $N_\mu = 8, N_\phi = 16$;

$\nabla - \nabla$ $N_\mu = 16, N_\phi = 32$

Dans le cas émissif et non-diffusant, les luminances calculées par la méthode SHDOM sont exactes car l'intégrale de diffusion est nulle. La précision des calculs dépend par conséquent de la façon dont le schéma de quadrature utilisé pour évaluer les flux prend en compte la géométrie du milieu. Dans le cas purement diffusant, cette source d'erreurs de type « effet de rayon » [37] a aussi une influence sur l'évaluation de l'intégrale de diffusion. A la différence du schéma S_N [34] [38] (cf. Figure 2.6), l'utilisation par la méthode SHDOM de la quadrature de Gauss-Legendre, permet de réduire les erreurs de calcul numérique lorsque la résolution angulaire devient plus fine. Ce phénomène peut être expliqué par les « qualités » géométriques de cette quadrature. En effet, si dans le schéma S_N , seuls un ou deux angles zénithaux sont inférieurs à 45° pour $N_\mu \leq 12$, avec la quadrature de Gauss-Legendre, il existe autant d'angles situés de part et d'autre de la direction $\theta = 45^\circ$. Ceci permet à ce schéma de quadrature d'évaluer avec une assez bonne précision les interactions entre les cellules de milieux dont la géométrie est relativement complexe comme dans le cas des enceintes carrées étudiées ici.

5.1.3. Conclusion

Les cas tests relatifs aux milieux « plans parallèles » et aux enceintes carrées présentés dans ce paragraphe ont montré que les résultats de calcul du code SHDOM peuvent être très proches de données de référence issues de la littérature, à condition que la résolution angulaire et la discrétisation spatiale soient suffisamment fines. Pour les calculs de luminance, une bonne résolution angulaire est nécessaire pour évaluer les gains de rayonnement par diffusion afin de réduire notamment les erreurs de type « effet de rayon » [37]. D'après les cas tests présentés ici, la quadrature de Gauss-Legendre est bien adaptée pour restreindre ce type d'incertitudes en raison de ses « qualités » géométriques dont, par exemple, l'égalité du nombre d'angles zénithaux situés de part et d'autre de la direction $\theta = 45^\circ$. Le nombre de directions angulaires recommandé par Evans [10] en fonction du type de résultats désiré a été vérifié sur ces cas de calcul.

Lorsque la discrétisation spatiale initiale est trop grossière, le remaillage de la grille de propriétés permet d'améliorer la précision du calcul en réduisant les gradients entre fonctions sources voisines. Toutefois, les erreurs provoquées par des dimensions de cellules trop grandes, sont de quelques pour-cent par rapport aux résultats exacts. Cette remarque dépend fortement du type et de la géométrie du milieu étudié. C'est pourquoi il est difficile de déterminer le nombre de points qui seront engendrés par le découpage de cellules avant l'exécution du code SHDOM. De ce fait, les limites imposées par les capacités du calculateur pour le choix des valeurs respectives des critères de convergence et de découpage ne peuvent pas être prédites *a priori*. Cependant, la comparaison de la valeur finale du paramètre d'hétérogénéité avec celle des flux issus du milieu étudié peut fournir l'ordre de grandeur des erreurs dues au sous-échantillonnage spatial.

5.2. Comparaison de la méthode SHDOM avec des approches simplifiées

La signature UV des jets peut être évaluée à l'aide de modèles de transfert radiatif simplifiés tels que les approches 2-flux [6]. Dans cette étude, le modèle 2-flux utilisé est de type « approximation de la quadrature » (*cf.* § 2.4.1.2) définie à l'aide de la relation (2.38) car cette formulation permet la prise en compte de tous les types de fonctions de phase et de la dépendance angulaire du champ de rayonnement. Afin de mettre en évidence les principales limitations de ces modèles simplifiés, les résultats fournis par ces méthodes de résolution de l'ETR pour des géométries 1D, 2D et 3D ont été comparés aux calculs effectués par la

méthode SHDOM dont les résultats sont considérés, d'après les cas tests présentés ci-dessus (cf. § 5.1.1), comme équivalents à ceux issus de modèles de transfert radiatif de référence. Dans un premier temps, des calculs ont été effectués dans le cas des milieux « plans parallèles » afin d'évaluer, pour une géométrie simple, les incertitudes propres au calcul de la luminance par le modèle 2-flux. Enfin, un milieu à symétrie cylindrique représentant une section de la zone de post-combustion d'un jet de propulseur, a été étudié dans le but de déterminer le rôle de la diffusion dans ce type de milieu et les erreurs induites par l'utilisation de ce même modèle 2-flux. Dans ce cas, l'adaptation du code SHDOM aux jets de moteurs-fusées a été utilisée.

5.2.1. Cas des milieux « plans parallèles »

Dans ce paragraphe, le modèle 2-flux est comparé avec la méthode SHDOM ainsi qu'avec des approches 6- et N -flux ($N \gg 6$) définies par Freeman *et al.* [6] pour l'évaluation de la luminance émise normalement à surface de milieux « plans parallèles ». Puis, la dépendance angulaire de la luminance calculée par le modèle 2-flux dans ces géométries est comparée aux résultats de référence fournis par la méthode SHDOM.

5.2.1.1. Comparaison avec les modèles 2-flux, 6-flux et N -flux

A l'aide de modèles 2-flux, 6-flux et N -flux ($N \gg 6$), Freeman *et al.* [6] ont calculé le rayonnement émis par des milieux « plans parallèles » homogènes, absorbants, diffusants, dont la fonction de phase de diffusion est isotrope, et possédant une source de rayonnement interne de type thermique. Ce paragraphe présente la comparaison de leurs résultats avec des calculs effectués avec la méthode SHDOM. Pour ces derniers, le maillage de la grille de propriétés est de $5 \times 5 \times 6$ points. La résolution angulaire est fixée à $N_\mu = 16$ angles zénithaux et $N_\phi = 32$ azimuts, et le découpage de cellules est activé. Trois valeurs d'épaisseur optique ont été étudiées : $\tau = 0.1$, $\tau = 1$ et $\tau = 10$. Les conditions aux limites horizontales sont périodiques.

La Figure 5.9 représente la luminance normale à la surface du milieu évaluée par la méthode SHDOM ainsi que par les modèles de transfert radiatif développés par Freeman *et al.* [6] pour différentes épaisseurs optiques. Les résultats sont normalisés par rapport au cas non diffusant.

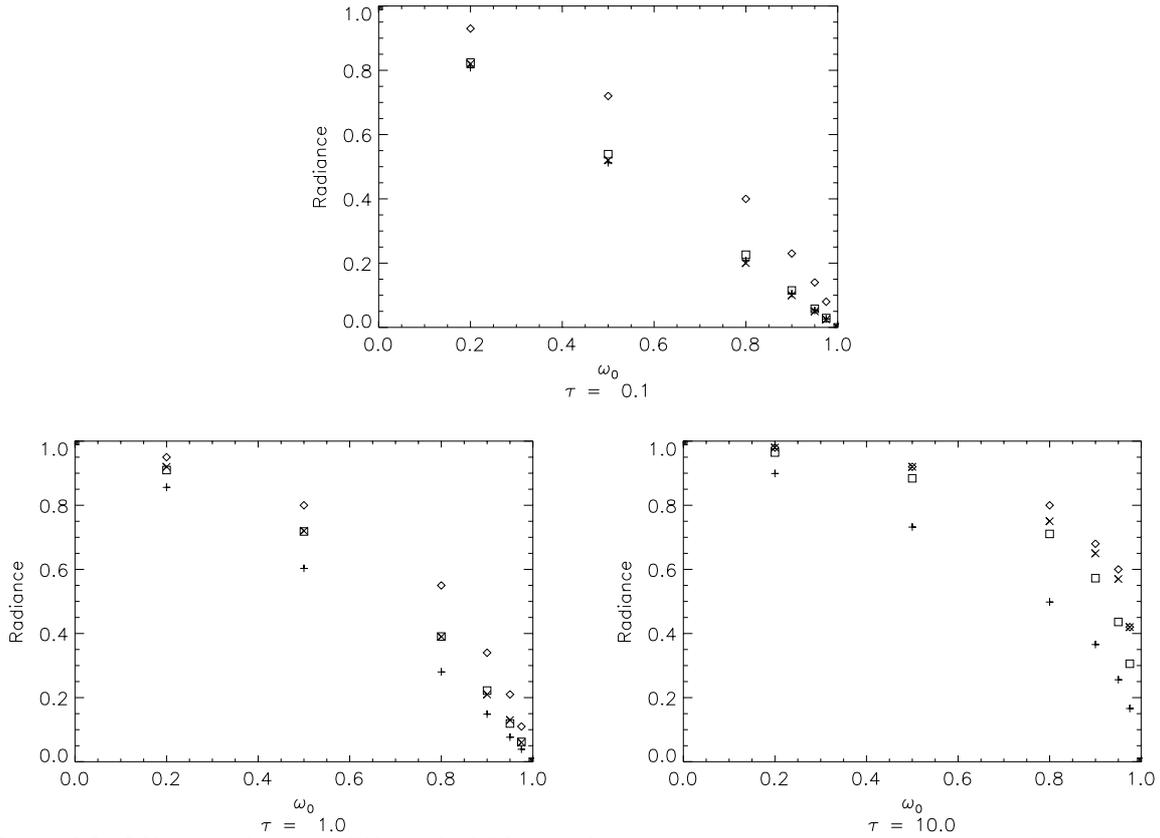


Figure 5.9 - Milieux « plans parallèles » de différentes épaisseurs optiques τ : luminance normale en fonction de l'albédo de diffusion simple : \square SHDOM, $+$ modèle 2-flux, \diamond modèle 6-flux [6], \times modèle N-flux [6]

Dans le cas optiquement mince ($\tau = 0.1$), la luminance est ici proportionnelle à $1 - \omega_0$ car la source de rayonnement du milieu est égale à $\tilde{J} = (1 - \omega_0)L_0$. Dans les autres cas ($\tau \geq 1$), la luminance normalisée est supérieure au facteur $1 - \omega_0$ en raison des gains de rayonnement par diffusion.

Les résultats fournis par les modèles N-flux et SHDOM sont très proches, sauf dans le cas d'un milieu optiquement épais ($\tau = 10$) où, selon la valeur de l'albédo de diffusion simple, les phénomènes de diffusion peuvent être très importants. Du fait que la résolution angulaire du modèle N-flux n'est pas précisée dans l'étude de Freeman *et al.* [6], ces différences peuvent être dues à une résolution angulaire insuffisante pour ce type de problème. Les modèles 2-flux et 6-flux minorent et majorent respectivement la valeur de la luminance. Dans le cas général, les modèles SHDOM et N-flux modélisent de façon similaire les phénomènes de diffusion car ces deux méthodes utilisent un échantillonnage angulaire de type « ordonnées discrètes ». Par construction, le modèle 2-flux ne prend pas en compte les échanges par diffusion latérale et c'est pourquoi le rayonnement estimé par cette méthode est inférieur à celui qui a été calculé par des méthodes de référence utilisant une résolution

angulaire plus importante. A l'inverse, le modèle 6-flux majore l'influence des échanges d'énergie radiative par diffusion latérale.

5.2.1.2. Comparaison avec le modèle 2-flux : dépendance angulaire de la luminance

L'objet de ce paragraphe est d'étudier les limitations du modèle 2-flux pour le calcul de la dépendance angulaire de la luminance issue de milieux « plans parallèles ». La méthode SHDOM est utilisée ici comme modèle de référence avec la même discrétisation spatiale et la même résolution angulaire que précédemment. Deux cas ont été envisagés :

- Un milieu homogène, non émissif, absorbant et diffusant qui est éclairé par un sol lambertien ;
- Un milieu homogène, émissif thermiquement, absorbant et diffusant. Ce cas correspond au milieu étudié ci-dessus au paragraphe § 5.1.1, pour une fonction de phase isotrope.

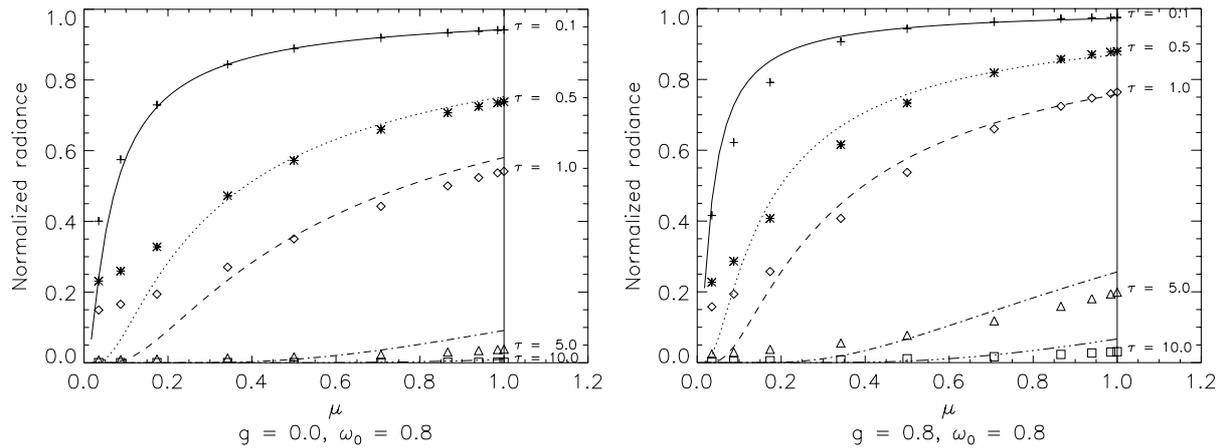


Figure 5.10 – Milieux « plans parallèles » non émissifs de différentes épaisseurs optiques τ : dépendance angulaire du champ de luminance. Les symboles représentent les résultats de SHDOM et les lignes ceux du modèle 2-flux.

La Figure 5.10 représente la dépendance angulaire, normalisée par rapport à l'émission du sol lambertien, dans le cas du milieu non émissif avec une fonction de phase isotrope et avec une fonction de phase de type Henyey-Greenstein. Celle-ci est définie par son développement en polynômes de Legendre :

$$\chi_l = (2l+1)g^l \quad (5.1)$$

avec un paramètre d'asymétrie $g = 0.8$. Dans ce second cas, la méthode Delta- M est utilisée. La valeur de l'albédo de diffusion simple est fixée à $\omega_0 = 0.8$ et elle est typique de celle des

particules d'alumine des jets dans le domaine UV. Les conventions d'angle sont identiques à celles du paragraphe § 5.1.1.

La luminance diminue quand le milieu devient optiquement épais, en raison de l'augmentation des phénomènes d'extinction. Pour les mêmes raisons, la luminance diminue quand l'angle d'observation se rapproche de l'horizontale. Lorsque le milieu est optiquement mince, les résultats du modèle 2-flux sont proches de ceux fournis par la méthode SHDOM. Pour des épaisseurs optiques plus grandes, le modèle 2-flux majore la luminance en vue perpendiculaire ($\mu = 1$) puisqu'il ne prend pas en compte les pertes de rayonnement dues aux échanges par diffusion latérale. En revanche, en vue rasante ($\mu = 0$), le modèle 2-flux minore la valeur de la luminance puisqu'il néglige une partie des gains d'énergie radiative provenant des échanges par diffusion latérale. Lorsque la fonction de phase est piquée vers l'avant, les erreurs du modèle 2-flux sont moins importantes, du fait des effets plus faibles de la diffusion latérale.

La Figure 5.11 représente le même type de calcul que la Figure 5.10 dans le cas du milieu émissif.

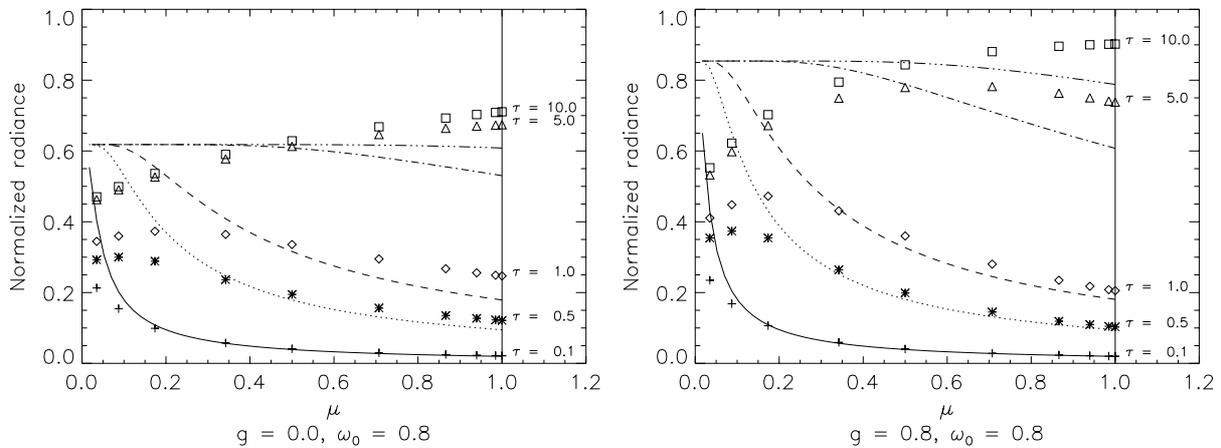


Figure 5.11 - Milieux « plans parallèles » émissifs de différentes épaisseurs optiques τ : dépendance angulaire du champ de luminance. Les symboles représentent les résultats de SHDOM et les lignes ceux du modèle 2-flux.

D'après ces courbes, plus le milieu est optiquement épais, plus le rayonnement émis par ce dernier est important. A la différence de la Figure 5.2 où la luminance est normalisée par rapport au rayonnement source interne du milieu, la luminance présentée sur la Figure 5.11 est rapportée à celle qui serait émise normalement à la surface d'un milieu « plans parallèles » d'épaisseur optique infinie. Lorsque l'épaisseur optique vaut 1 et que la diffusion est isotrope, la dépendance angulaire du champ de luminance est par conséquent semblable à celle du milieu « plans parallèles » étudié sur la Figure 5.2. La position du maximum de

luminance croît avec la valeur de l'épaisseur optique, en raison de l'augmentation des échanges par diffusion latérale. Cependant, cet effet est moins marqué quand la fonction de phase est piquée vers l'avant, du fait d'une diffusion latérale plus faible.

Pour un milieu optiquement mince et une direction de visée normale à la surface, les résultats des modèles 2-flux et SHDOM sont très proches. En revanche, lorsque l'épaisseur optique augmente, le modèle 2-flux minore la luminance. Les différences observées entre les modèles 2-flux et SHDOM s'estompent toutefois lorsque la fonction de phase est piquée vers l'avant, en raison d'une influence plus faible des échanges par diffusion latérale que ne prend pas en compte le modèle 2-flux. En visée verticale ($\mu = 1$), le modèle 2-flux néglige les gains de rayonnement par diffusion latérale tandis qu'en visée rasante ($\mu = 0$), les pertes par diffusion latérale ne sont pas prises en compte. Lorsque le modèle 2-flux est utilisé, la valeur limite de la luminance en $\mu = 0$ est indépendante de l'épaisseur optique du milieu car les résultats fournis par cette approche ne dépendent que de l'épaisseur optique effectivement traversée par la ligne de visée considérée. En comparant la Figure 5.11 avec la Figure 5.5, on observe une différence entre le modèle 2-flux et le code SHDOM utilisant $N_\mu = 2$ angles zénithaux. Cet écart provient du type d'échantillonnage angulaire utilisé par ces approches. De fait, si le modèle 2-flux est utilisé, l'ETR est alors résolue suivant la direction selon laquelle on souhaite obtenir la luminance. En revanche, pour évaluer la fonction source, le code SHDOM prend en compte des directions fixes définies par une quadrature de Gauss-Legendre, soit $|\mu| = 1/\sqrt{3} \approx 0.58$ si $N_\mu = 2$.

5.2.2. Milieux à symétrie cylindrique

L'adaptation de la méthode SHDOM au calcul de la signature UV des jets de moteurs-fusées, est utilisée ici pour calculer le rayonnement émis par un milieu à symétrie cylindrique représentant une section de la zone de postcombustion d'un jet de propulseur à propergol solide aluminisé, afin de mettre en évidence le rôle de la diffusion des particules d'alumine. En outre, les résultats obtenus sont comparés à ceux fournis par un calcul 2-flux, afin de mettre en évidence les limitations de ce modèle approché. La température et les concentrations des gaz et des particules ont été obtenues à partir des résultats du code aérothermochimique AJAX-PNS (Analyse de Jet Axisymétrique par Technique de Parabolisation des Equations de Navier-Stokes) [116]. Celui-ci considère les particules comme un « gaz équivalent ». Une telle approximation permet d'effectuer des calculs de

signature de jet en prenant en compte les incertitudes sur la taille des particules pour une même concentration massique d'alumine. Le coefficient d'extinction est estimé en supposant que les particules mesurent $1\ \mu\text{m}$ de rayon. L'étude préliminaire de ce cas test a fait l'objet d'un article publié dans le *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* [118] et reporté en annexe (*cf.* § 9.7). Une étude plus détaillée prenant en compte les incertitudes sur les dimensions des particules est réalisée dans la dernière partie de ce chapitre. La longueur d'onde est fixée à $280\ \text{nm}$.

Les profils radiaux de propriétés optiques représentés sur la Figure 5.12, correspondent à l'ajustement de ces grandeurs par des fonctions mathématiques simples.

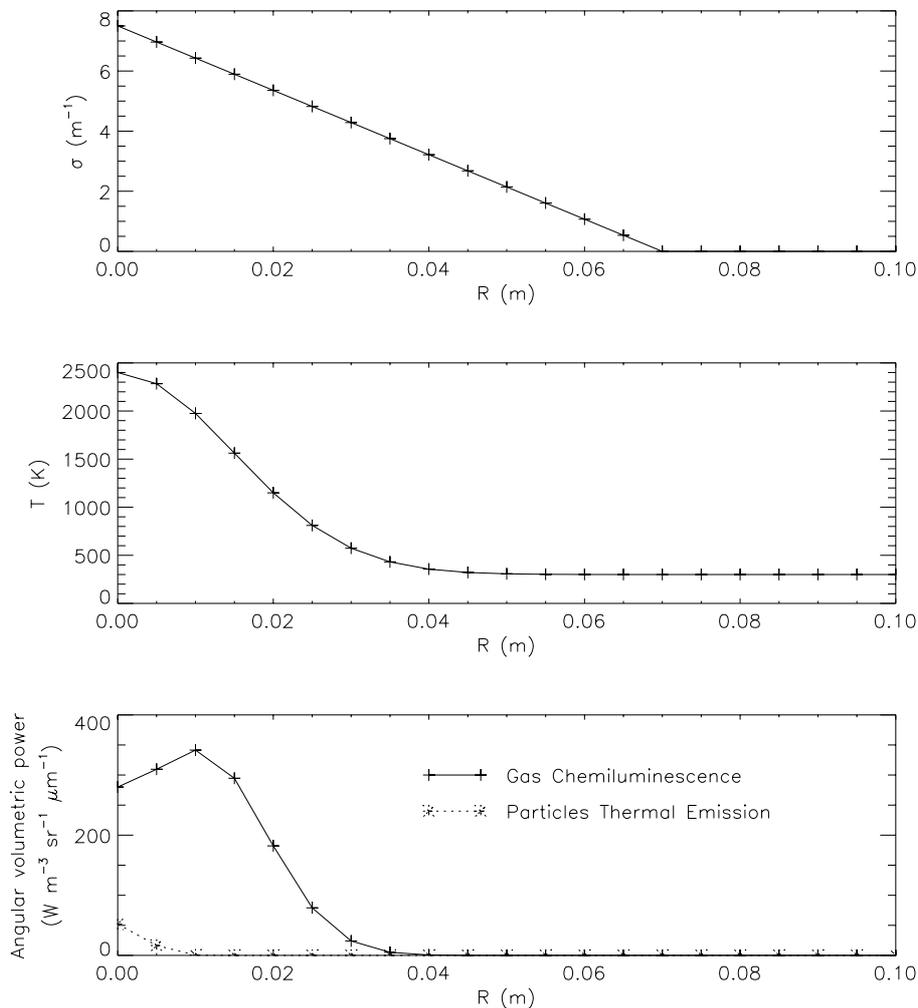


Figure 5.12 – Milieu à symétrie cylindrique : profils radiaux de coefficient d'extinction, de température, de puissance volumique angulaire de chimiluminescence et d'émission thermique des particules à $280\ \text{nm}$

Le profil du coefficient d'extinction évolue ici comme une droite affine dont la valeur sur l'axe est de $7.5\ \text{m}^{-1}$ et de $10^{-5}\ \text{m}^{-1}$ pour un rayon supérieur à $7\ \text{cm}$. Le profil de température est une gaussienne centrée sur l'axe et dont le maximum s'élève à $2400\ \text{K}$ et la largeur à mi-

hauteur à 3.5 cm. Quant au profil de chimiluminescence, il est décrit par la somme de deux gaussiennes excentrées par rapport à l'axe, dont le maximum à $r = 1$ cm est de $340 \text{ W m}^{-3} \text{ sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$ et dont la valeur axiale s'élève à $280 \text{ W m}^{-3} \text{ sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$. Cette fonction est définie par la relation :

$$J^C(r) = J^C(r=0) \frac{e^{-(r+r_0)^2/B} + e^{-(r-r_0)^2/B}}{2e^{-r_0^2/B}} \quad (5.2)$$

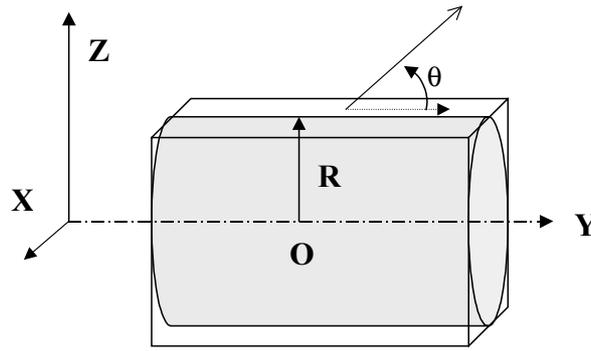
où les paramètres B et r_0 sont déterminés d'après la valeur et la position du maximum du profil radial. Dans tout le milieu, l'albédo de diffusion simple des particules est de 0.8 et la fonction de phase est de type Henyey-Greenstein avec un paramètre d'asymétrie égal à 0.8. Ces deux valeurs sont typiques des particules d'alumine rencontrées dans les jets (*cf.* § 4.3.6). Pour le domaine spectral d'étude, le rayonnement thermique des particules est faible devant l'émission de chimiluminescence.

Les calculs réalisés avec la méthode SHDOM ont été effectués à l'aide d'une grille de propriétés dont la largeur totale vaut 20 cm. La longueur de la grille et la discrétisation spatiale sont précisées dans les paragraphes décrivant les résultats des calculs. Le découpage de cellules n'est pas activé car cette fonctionnalité nécessite une taille mémoire supérieure à celle des calculateurs utilisés dans cette étude. La résolution angulaire a été définie par $N_\mu = 16$ angles zénithaux et $N_\phi = 32$ angles azimutaux.

Deux cas tests ont été envisagés :

- Un milieu infini orienté selon une direction horizontale. Ce cas correspond à l'étude d'une section de jet isolée.
- Un milieu fini d'axe vertical de 0.8 m de longueur, qui permet d'étudier la dépendance spatiale et angulaire du champ de rayonnement dans une situation assez proche d'un cas de jet « réaliste ».

5.2.2.1. Milieu infini



θ = angle d'aspect dans le plan (YOZ)

Figure 5.13 – Milieu à symétrie cylindrique infini : géométrie de la grille de propriétés

Le caractère infini du milieu cylindrique représenté sur la Figure 5.13, est obtenu par des conditions aux limites périodiques selon l'axe ($y'y$). De ce fait, le calcul de transfert radiatif peut être considéré comme bidimensionnel puisque le rayonnement s'échappant d'un plan (x,z) est réutilisé comme rayonnement incident sur la face opposée à ce même plan. Outre ce type de calcul, on utilise l'approximation des pixels indépendants (IPA) où les colonnes parallèles à ($z'z$) sont traitées comme des milieux « plans parallèles » indépendants les uns des autres. Le pas radial de la grille de propriétés est de $\Delta x = \Delta z = 2.5$ mm, et le pas longitudinal est de $\Delta y = 10$ mm. 81 points sont utilisés en x et en z pour définir la grille et 2 points en y . La Figure 5.14 représente les profils « radiaux » de luminance en vue de côté, calculés avec les modèles SHDOM et 2-flux sur le plan tangent à la surface du cylindre. L'abscisse correspond à l'éloignement par rapport à la projection de l'axe du jet sur ce plan.

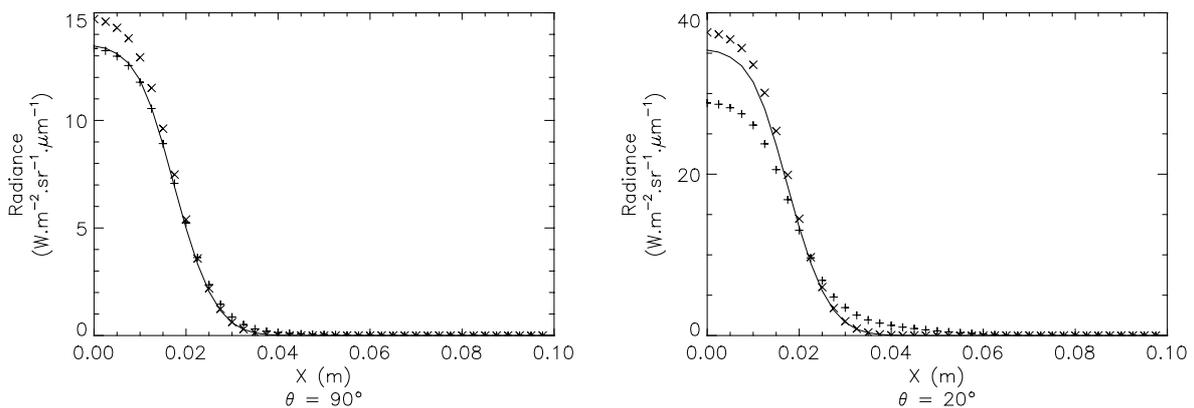


Figure 5.14 - Milieu à symétrie cylindrique infini : profil radial de luminance pour différents angles d'aspects :
+ SHDOM (2D) ; × SHDOM (IPA) ; — modèle 2-flux

L'augmentation de la luminance lorsque l'angle d'aspect décroît, provient du fait que le milieu est optiquement mince et émissif et que, dans ce cas, l'émission du milieu augmente

avec l'épaisseur optique traversée par la ligne de visée. En raison de l'intégration de la fonction source le long des lignes de visée, aucun maximum latéral, dû au pic excentré du profil radial de l'émission de chimiluminescence, n'est observé.

Lorsque la direction d'observation est perpendiculaire à l'axe du cylindre, les modèles 2-flux et SHDOM (2D) sont très proches puisque le milieu est optiquement fin ($\tau = 0.525$). Sur l'axe du milieu, la méthode SHDOM en mode IPA surestime la valeur de la luminance, en raison de l'application de conditions aux limites périodiques sur les parois verticales des colonnes. Au voisinage de l'axe, les modèles 2-flux et SHDOM en mode IPA majorent la luminance lorsque l'angle d'aspect diminue puisqu'ils ne prennent pas en compte les pertes de rayonnement par diffusion latérale. En revanche, ces deux modèles minorent la valeur des pieds du profil radial de luminance. En effet, la méthode SHDOM en mode IPA et le modèle 2-flux considèrent chaque colonne verticale comme plongée dans un milieu « plans parallèles » indépendant. Par conséquent, ces méthodes de résolution de l'ETR ne peuvent pas prendre en compte la diffusion par les particules, du rayonnement produit le long de l'axe, vers les bords du milieu. Ainsi, le rayonnement émis au bord du milieu n'est pas correctement évalué par ces modèles approchés.

5.2.2.2. Milieu fini

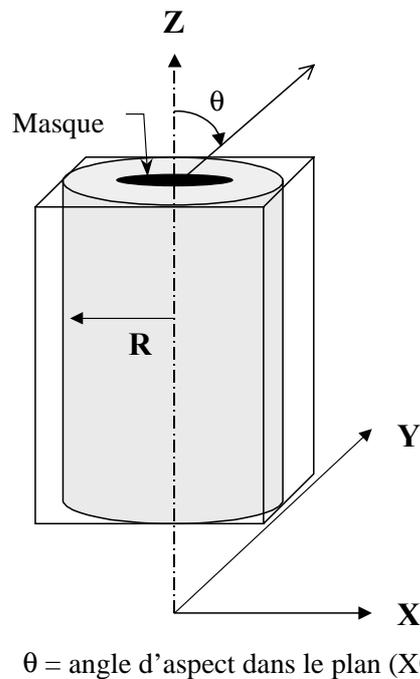


Figure 5.15 - Milieu à symétrie cylindrique fini : géométrie de la grille de propriétés

L'axe du milieu cylindrique fini représenté sur la Figure 5.15 est vertical pour utiliser les conditions aux limites ouvertes sur les parois longitudinales à l'axe. Dans ce cas, l'ETR est résolue en mode 3D par le code SHDOM adapté aux jets, afin de prendre en compte l'ensemble des interactions entre les différentes cellules du milieu, de façon la plus réaliste possible. Ainsi, les phénomènes de diffusions multiples seront correctement modélisés. La longueur du cylindre est de 0.8 m et le pas de discrétisation axiale Δz est de 2 cm alors que le pas radial de la grille de propriétés est de $\Delta x = \Delta y = 5$ mm. 41 points sont utilisés en x , en y , et en z pour définir la grille. Afin de mettre en évidence le rôle de la diffusion, les propriétés des particules ont été considérées de quatre manières différentes :

- Cas de référence évalué par la méthode SHDOM où les particules sont absorbantes et diffusantes ;
- Cas de référence évalué par le modèle 2-flux ;
- Cas sans diffusion où l'albédo de diffusion simple est supposé nul (dans ce cas, $K_{\text{Ext}} \equiv K_{\text{Abs}}$) ;
- Cas sans particules où le coefficient d'extinction est nul.

La Figure 5.16 décrit les grandeurs les plus représentatives du champ de rayonnement émis par le milieu cylindrique dans ces quatre cas de calculs, à savoir :

- (a) L'intensité en fonction de l'angle d'aspect (les valeurs choisies sont 0, 10°, 20°, 30°, 45°, 60°, 70°, 80° et 90°). Aucun masquage n'est pris en compte.
- (b) Le profil radial de luminance en vue de côté ;
- (c) Le profil radial de luminance en vue avant ;
- (d) L'intensité du jet en vue avant $I(r > r_M, z = Z; \theta = 0)$ en fonction du rayon r_M d'un masque placé au centre d'une des bases du cylindre comme le montre la Figure 5.15. Dans le cas d'un jet réel, ce masque représenterait le corps du propulseur, en vue avant. La valeur de cette intensité est obtenue en intégrant par la méthode des trapèzes le champ de luminance en vue avant situé au delà de r_M selon la relation :

$$I(r > r_M, z = Z; \theta = 0) = 2\pi \int_{r_M}^{\infty} R(r, z = Z; \theta = 0) r dr \quad (5.3)$$

où $R(r, z = Z; \theta = 0)$ représente la luminance émise en vue avant en un point du plan $z = Z$ situé à la distance r de l'axe du cylindre.

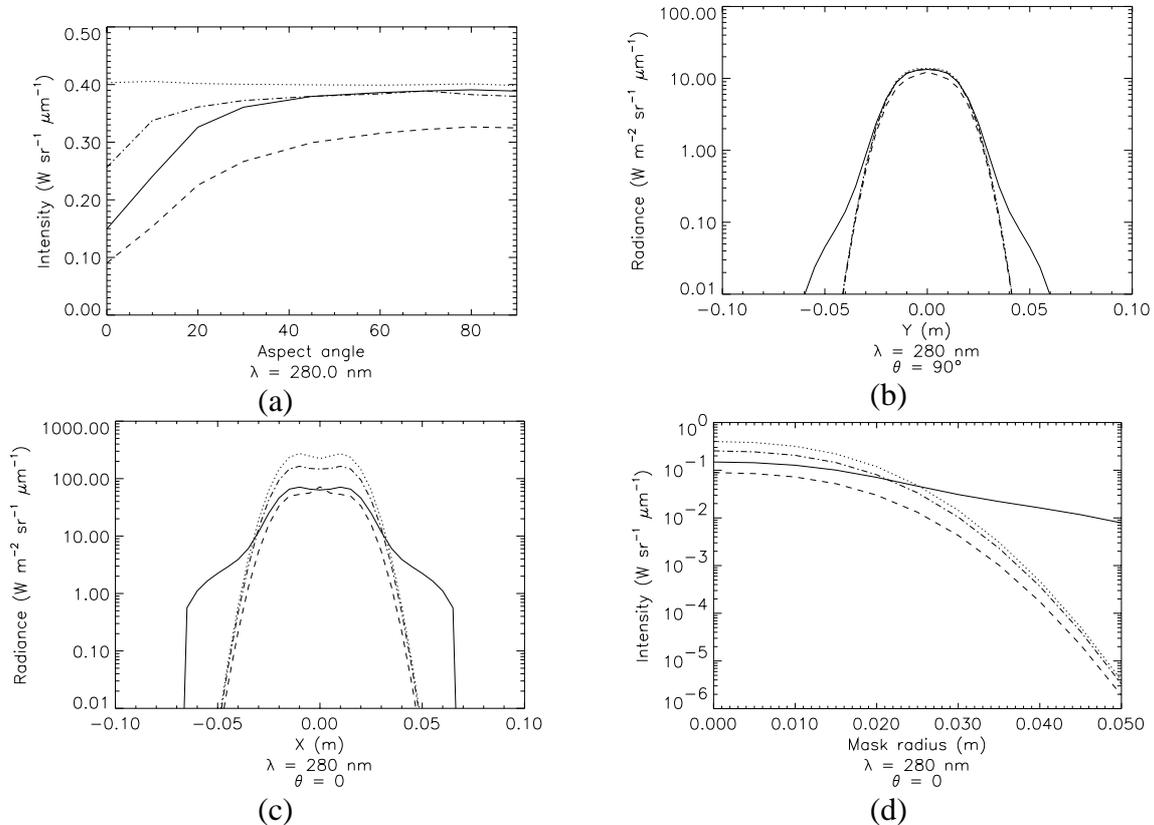


Figure 5.16 – Milieu à symétrie cylindrique fini : (a) intensité en fonction de l'angle d'aspect ; (b) profil radial de luminance en vue de côté ; (c) profil radial de luminance en vue avant ; (d) intensité en vue avant en fonction du rayon de masquage : — SHDOM (cas de référence) ; --- SHDOM (cas sans diffusion) ; SHDOM (cas sans particules) ; -.-.- modèle 2-flux

D'après la Figure 5.16 (a), l'intensité croît avec l'angle d'aspect en raison d'une diminution de l'épaisseur optique selon la direction de visée. Inversement, lorsque les interactions entre les particules et le rayonnement ne sont pas prises en compte, l'intensité est constante en raison de l'absence des phénomènes d'extinction. En l'absence de diffusion, l'intensité calculée est systématiquement plus faible que dans le cas de référence, du fait d'une valeur du coefficient d'absorption plus importante. Les échanges de rayonnement par diffusion latérale, de l'axe vers les bords du milieu, n'ont pas été pris en compte par le modèle 2-flux et l'intensité en vue avant est supérieure à celle estimée dans le cas de référence. Pour des raisons similaires, l'intensité en vue de côté évaluée par le modèle 2-flux est légèrement plus faible que dans celle du cas de référence.

Selon la Figure 5.16 (b), peu de différences sur la valeur de la luminance émise en vue de côté au voisinage de l'axe sont observées, tandis que la luminance émise sur les bords

dépend fortement de la façon dont la diffusion latérale est prise en compte. Pour cette raison, les pieds du profil radial de luminance évalué par le modèle 2-flux sont semblables à ceux des cas sans diffusion et sans particules, à la différence du profil de référence qui est plus large.

On peut constater sur la Figure 5.16 (c) que la luminance émise en vue avant au voisinage de l'axe du jet est la plus importante lorsqu'il n'y a pas de particules. Deux maximums symétriques provenant de la forme du profil de l'émission de chimiluminescence sont alors observés. Cette structure est encore mise en évidence dans les autres cas, à l'exception du calcul effectué sans diffusion en raison de la forte valeur de l'absorption. Dans ce cas, la luminance émise en vue avant est, au voisinage de l'axe, légèrement inférieure à celle du calcul de référence, sauf sur l'axe même, où l'on observe un pic central provenant de l'émission thermique des particules qui est 5 fois plus importante que dans le calcul de référence. Les pieds des profils sont tous semblables sauf ceux du cas de référence où le champ de rayonnement est plus étendu du fait de la prise en compte de la diffusion du rayonnement émis le long de l'axe vers les bords du milieu. Le milieu n'émet plus aucun rayonnement au delà de 6.5 cm de l'axe, ce qui, d'après la Figure 5.12, correspond au rayon du profil radial du coefficient d'extinction (7 cm), auquel on aurait retranché la largeur d'une cellule (0.5 cm).

Du fait de la prise en compte de la diffusion du rayonnement de l'axe vers les bords du milieu, on observe sur la Figure 5.16 (d) que l'intensité en vue avant en fonction du rayon de masquage, décroît beaucoup plus lentement dans le calcul de référence que dans les autres cas. Ces courbes montrent donc clairement que le modèle 2-flux est inadapté au calcul du champ de luminance en vue avant.

Ces résultats montrent que la dépendance angulaire de l'intensité et la luminance émise en vue avant au voisinage de l'axe par le milieu cylindrique fini, dépendent des hypothèses selon lesquelles les particules sont supposées interagir avec le rayonnement. On peut aussi remarquer que la prise en compte de la diffusion du rayonnement produit le long de l'axe par chimiluminescence vers les bords du milieu, étend sensiblement les dimensions des profils radiaux de luminance en vue avant et de côté. C'est pourquoi l'intensité en vue avant est moins sensible à la taille du masque lorsque le milieu est supposé diffusant que dans les autres cas.

Les différences entre les résultats des modèles SHDOM et 2-flux, s'accroissent lorsque l'angle d'aspect diminue, en raison d'une augmentation de la contribution de la diffusion

latérale. De ce fait, la luminance émise en vue avant au voisinage de l'axe est mal estimée par ce dernier modèle, car les échanges de rayonnement par diffusion ne sont pas correctement évalués. De plus, le modèle 2-flux minore la valeur de la luminance émise sur les bords du milieu, tant en vue de côté qu'en vue avant, du fait de l'absence de prise en compte de la diffusion du rayonnement produit au voisinage de l'axe vers les couches externes du cylindre. Ces résultats montrent que le modèle 2-flux ne peut fournir qu'une estimation approximative du champ de rayonnement et qu'il ne prédit pas correctement les effets de bords dans des milieux cylindriques proches des jets.

5.2.3. Conclusion

En ce qui concerne l'étude de la transmittivité et de l'émissivité de milieux « plans parallèles » diffusants, le modèle 2-flux fournit des résultats peu précis lorsque la direction d'observation est horizontale et/ou quand le milieu est optiquement épais. Ce type d'erreurs provient de l'absence de prise en compte de la diffusion latérale par ce modèle approché. Dans le cas d'un milieu à symétrie cylindrique représentatif d'un jet de propulseur à propergol solide aluminisé, la comparaison des calculs effectués par le modèle 2-flux avec ceux issus du code SHDOM adapté aux jets, a démontré la nécessité d'utiliser un modèle 3D élaboré pour évaluer correctement le champ de luminance en vue avant ainsi que les effets de bords dus à la diffusion du rayonnement vers les couches externes du cylindre.

5.3. Milieux cylindriques : effets des incertitudes sur les propriétés optiques des particules

Le champ de rayonnement émis par un milieu à symétrie cylindrique représentatif de la zone de postcombustion d'un jet est étudié ici en prenant en compte les incertitudes sur la répartition en tailles et sur l'indice complexe de réfraction des particules. La résolution angulaire et la géométrie de la grille de propriétés sont semblables au cas du milieu cylindrique étudié ci-dessus (*cf.* § 5.2.2.2). Les profils radiaux de propriétés sont les mêmes que ceux du milieu cylindrique étudié précédemment (*cf.* § 5.2.2) en ce qui concerne la température des particules et l'émission de chimiluminescence des gaz. Les calculs sont effectués à 280 nm.

La concentration massique de l'alumine constituant les particules évolue selon la position radiale comme une droite affine dont la valeur sur l'axe est de 0.02 kg m^{-3} et nulle pour un rayon égal à $r = 7 \text{ cm}$. Dans cette étude, l'alumine est supposée posséder une masse

volumique constante égale à $3.8 \cdot 10^{-3} \text{ kg m}^{-3}$. Cette valeur correspond à la densité du corindon à température ambiante. Expérimentalement, on observe que l'alumine est 25% moins dense en phase liquide [119]. D'après la relation (4.76), le coefficient d'extinction est donc minoré dans cette étude de 25% au plus, à distribution granulométrique constante. Cependant, l'influence sur le coefficient d'extinction des incertitudes dues à cette approximation est moins importante que celle liée à la taille des particules. A distribution granulométrique constante, la masse volumique de l'alumine ne joue aucun rôle direct dans l'évaluation de l'albédo de diffusion simple et de la fonction de phase si on suppose que l'indice complexe de réfraction de l'alumine est indépendant de la densité de cet oxyde.

Dans cette étude, la taille des particules est définie par une distribution log-normale identique à celle présentée au chapitre précédent (*cf.* § 4.3.6.2). L'indice réel de réfraction des particules est fixé à 1.75 et l'indice imaginaire est estimé d'après les formulations d'Anfimov *et al.* [81] (*cf.* § 4.3.4) en supposant que cette grandeur optique ne varie pas pour des températures inférieures au point de fusion de l'alumine (soit environ 2320 K). La valeur de ce paramètre optique est donc proche de $5 \cdot 10^{-3}$.

5.3.1. Influence de la taille des particules

On a cherché ici à étudier les variations du champ de rayonnement émis par le milieu à symétrie cylindrique en fonction des incertitudes sur la taille des particules. Le tableau suivant représente, pour différents rayons géométriques moyens susceptibles d'être rencontrés dans les jets de propulseurs, l'épaisseur optique radiale du milieu et les valeurs minimales respectives de l'albédo de diffusion simple et du paramètre d'asymétrie de la fonction de phase. Ces résultats montrent que, plus les particules sont petites, plus le milieu est optiquement épais et diffusant. En outre, comme cela a été montré sur le Tableau 4.9 et sur la Figure 4.19, le caractère de diffusion vers l'avant des fonctions de phase augmente avec la taille des particules.

r_g (μm)	$\tau/2$	ω_0	g
0.1	4.19	0.97	0.58
1.0	0.24	0.76	0.71
10.0	0.02	0.70	0.77

Tableau 5.1- Milieu cylindrique : épaisseur optique radiale $\tau/2$ et valeurs minimales de l'albédo de diffusion simple et du facteur d'asymétrie de la fonction de phase à 280 nm de longueur d'onde en fonction du rayon moyen géométrique r_g des particules

La Figure 5.17 représente, pour ces différents rayons moyens, les mêmes grandeurs radiatives que sur la Figure 5.16.

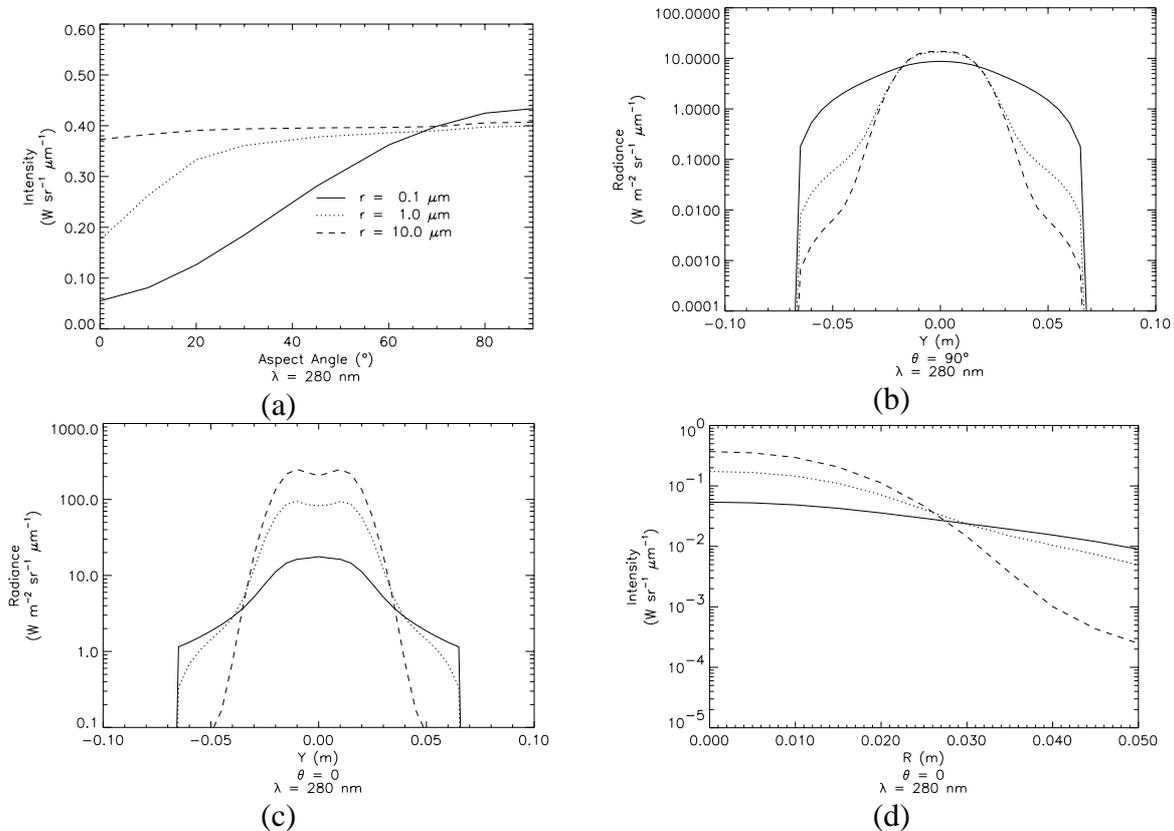


Figure 5.17 - Milieu à symétrie cylindrique fini pour des distributions granulométriques log-normales ($\sigma_g = 1.1$) définies à l'aide de différents rayons géométriques moyens : (a) intensité en fonction de l'angle d'aspect ; (b) profil radial de luminance en vue de côté ; (c) profil radial de luminance en vue avant ; (d) intensité en vue avant en fonction du rayon de masquage

D'après la Figure 5.17 (a), plus les particules sont petites, plus l'intensité dépend de la valeur de l'angle d'aspect en raison d'une augmentation des phénomènes d'extinction en vue avant. A l'inverse, dans l'hypothèse des très grosses particules ($r_g = 10 \mu\text{m}$), l'intensité est semblable à celle d'un milieu sans particules. En général, la valeur de l'intensité croît avec la taille des particules. Toutefois, dans le cas des particules submicroniques ($r_g = 0.1 \mu\text{m}$), on peut remarquer que l'intensité en vue de côté est la plus grande. Dans ce cas, on constate une diffusion importante, vers les bords du milieu, du rayonnement produit le long de l'axe par chimiluminescence. Ce comportement provient : d'un coefficient de diffusion plus grand, d'un albédo de diffusion simple proche de 1, et d'une fonction de phase moins piquée. De ce fait, le rayonnement produit parallèlement à l'axe est très diffusé vers les directions

perpendiculaires, ce qui explique que l'intensité émise en vue de côté soit plus importante sous l'hypothèse des petites particules que dans les autres cas.

Selon la Figure 5.17 (b), la luminance émise en vue de côté au voisinage de l'axe ne dépend plus des hypothèses sur la taille des particules lorsque leur rayon géométrique moyen est supérieur à $1\ \mu\text{m}$. Dans le cas des particules submicroniques ($r_g = 0.1\ \mu\text{m}$), cette luminance est cependant plus faible en raison d'une absorption plus importante. Les discontinuités aux bords des profils radiaux de luminance émise en vue de côté, proviennent des limites du profil de concentration de l'alumine comme dans le calcul de référence de la Figure 5.16 (c). Du fait de la diminution des phénomènes de diffusion latérale, ces profils de luminance sont d'autant plus « piqués » que les particules sont supposées grosses et de ce fait, la luminance émise à plus de 3 cm de l'axe diminue lorsque le rayon géométrique moyen des particules augmente.

D'après la Figure 5.17 (c), la luminance émise en vue avant au voisinage de l'axe augmente avec la taille des particules en raison d'une diminution des phénomènes d'extinction. Dans le cas des particules microniques ($r_g \geq 1\ \mu\text{m}$), les deux maximums provenant de la forme du profil d'émission de chimiluminescence sont observés. Cependant, sous l'hypothèse submicronique ($r_g = 0.1\ \mu\text{m}$), cette structure disparaît du fait de l'absorption et de la diffusion. La luminance émise en vue avant sur les bords du milieu est d'autant plus faible que les particules sont supposées grosses, du fait d'une diminution des phénomènes de diffusion latérale liée à celle du coefficient de diffusion et à l'augmentation du pic de diffusion avant de la fonction de phase. De la même façon qu'en vue de côté (cf. Figure 5.17 (b)), le champ de luminance est toutefois limité par les dimensions du profil de concentration des particules. Les différents profils radiaux de luminance se croisent à environ 2.7 cm de l'axe où les phénomènes d'extinction sont compensés par la contribution de la diffusion latérale.

D'après la Figure 5.17 (d), l'intensité en vue avant augmente avec le rayon géométrique moyen des particules du fait d'une diminution des phénomènes d'extinction. Cependant, pour des rayons de masquage supérieurs à 2.7 cm, le phénomène contraire est observé en raison d'une diffusion plus faible du rayonnement vers les bords du milieu. Par un effet de compensation entre les pertes par extinction et les gains par diffusion, l'intensité en

vue avant est indépendante de la taille des particules lorsque le rayon de masquage est égal à 2.7 cm.

5.3.2. Influence des incertitudes sur l'indice réel des particules d'alumine

La partie réelle de l'indice de réfraction de l'alumine est fonction de la température, de la longueur d'onde et de la phase cristalline de l'alumine qui dépend du processus de formation des particules (*cf.* § 4.3.3). D'après la Figure 5.18 représentant les mêmes types de résultats que la Figure 5.17 pour différentes pondérations de l'indice réel de l'alumine lorsque le rayon géométrique moyen des particules vaut 1 μm , les incertitudes sur la valeur de l'indice réel n'ont pratiquement aucune influence sur le rayonnement émis par le milieu cylindrique. Ce phénomène, observé quelle que soit la taille des particules, provient de la faible sensibilité de leurs paramètres optiques (facteur d'efficacité d'extinction, albédo de diffusion simple et fonction de phase) à l'indice réel de l'alumine dans ce domaine spectral (*cf.* Figure 4.20).

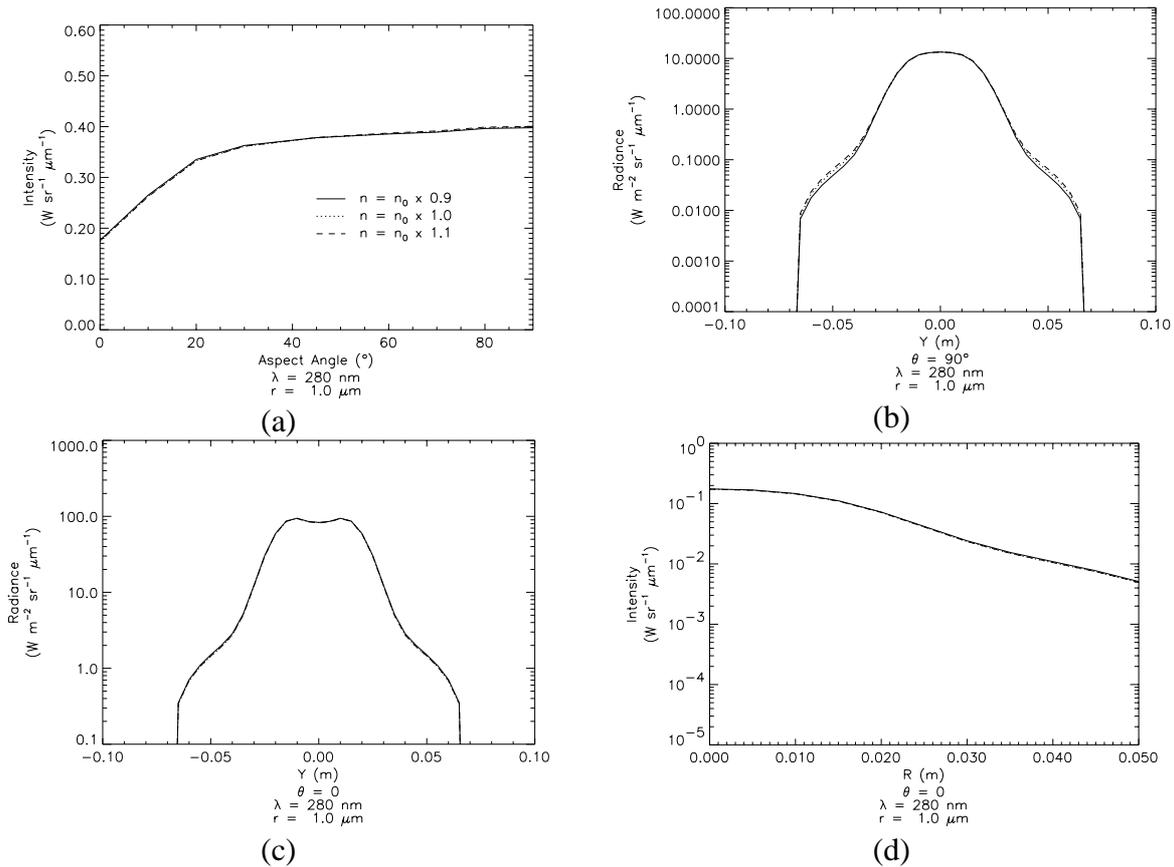


Figure 5.18 - Milieu à symétrie cylindrique fini (distribution granulométrique log-normale de particules : $\sigma_g = 1.1$, $r_g = 1 \mu\text{m}$) défini avec différentes pondérations de l'indice réel de l'alumine : (a) intensité en fonction de l'angle d'aspect ; (b) profil radial de luminance en vue de côté ; (c) profil radial de luminance en vue avant ; (d) intensité en vue avant en fonction du rayon de masquage

5.3.3. Influence des incertitudes sur l'indice imaginaire des particules d'alumine

Les incertitudes sur l'absorbance des particules dépendent de la composition du propergol et de l'historique des particules et elles peuvent atteindre plusieurs ordres de grandeur (*cf.* § 4.3.4). Les conséquences de cette méconnaissance de l'indice imaginaire de l'alumine sur les propriétés optiques du milieu sont d'autant plus importantes que les particules sont petites (*cf.* relation (4.76) et Figure 4.21). Il est donc nécessaire de mettre en évidence l'influence de cette source d'erreurs sur le calcul du rayonnement émis par le milieu cylindrique étudié. La Figure 5.19 représente les mêmes types de résultats que la Figure 5.18 pour différentes pondérations de l'indice imaginaire de l'alumine lorsque le rayon géométrique moyen des particules vaut $0.1 \mu\text{m}$.

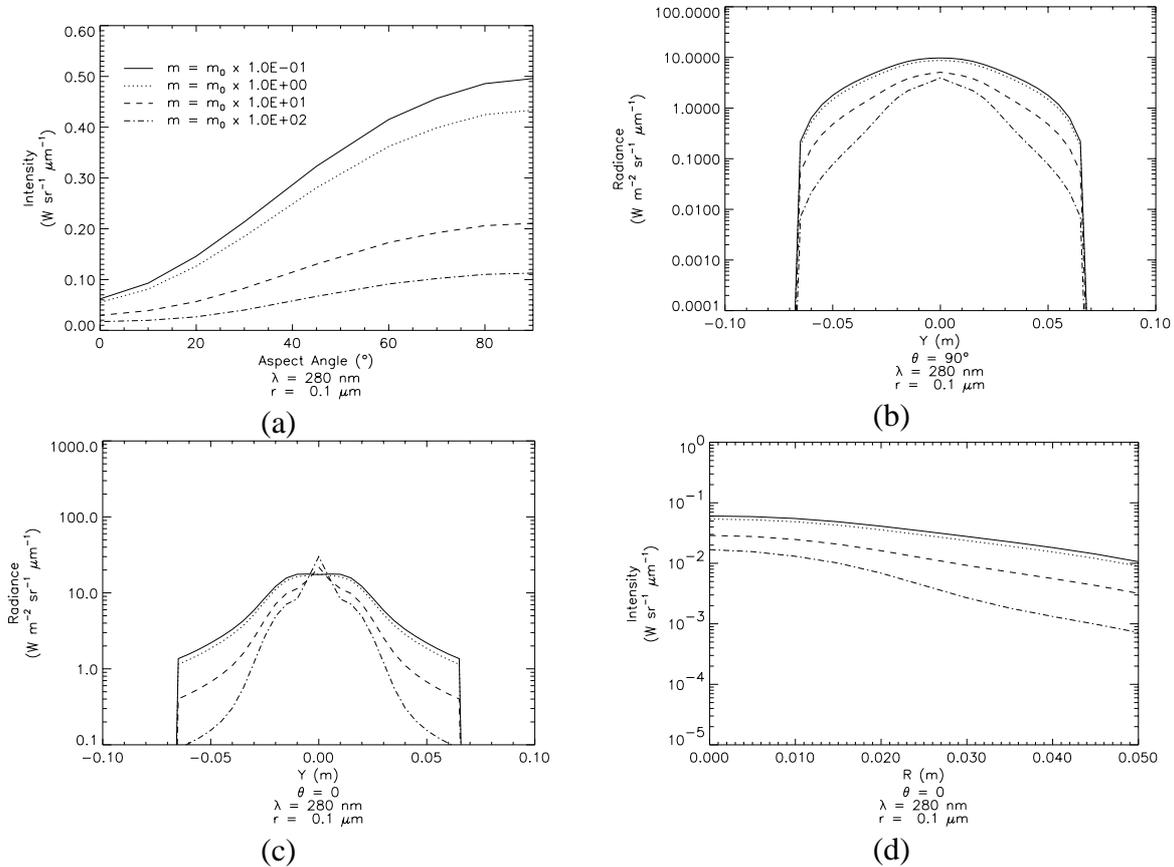


Figure 5.19 - Milieu à symétrie cylindrique fini (distribution granulométrique log-normale de particules :

$\sigma_g = 1.1$, $r_g = 0.1 \mu\text{m}$) défini avec différentes pondérations de l'indice imaginaire de l'alumine :

(a) intensité en fonction de l'angle d'aspect ; (b) profil radial de luminance en vue de côté ; (c) profil radial de luminance en vue avant ; (d) intensité en vue avant en fonction du rayon de masquage

Ces résultats montrent que, plus l'indice imaginaire est important, moins le milieu émet de rayonnement du fait d'une forte augmentation des phénomènes d'absorption. Cette observation est cohérente avec le fait que l'émission du milieu provient en premier lieu de la

réaction de chimiluminescence. Toutefois, sur le profil radial de luminance en vue avant présenté sur la Figure 5.19 (c), on observe un pic central dont la valeur croît avec celle de l'indice imaginaire. Ce phénomène peut être expliqué par l'augmentation locale de l'émission thermique des particules avec leur absorbance et par leur forte concentration sur l'axe du cylindre.

La Figure 5.20 représente les mêmes résultats que la Figure 5.19 lorsque le rayon géométrique moyen des particules vaut $1 \mu\text{m}$.

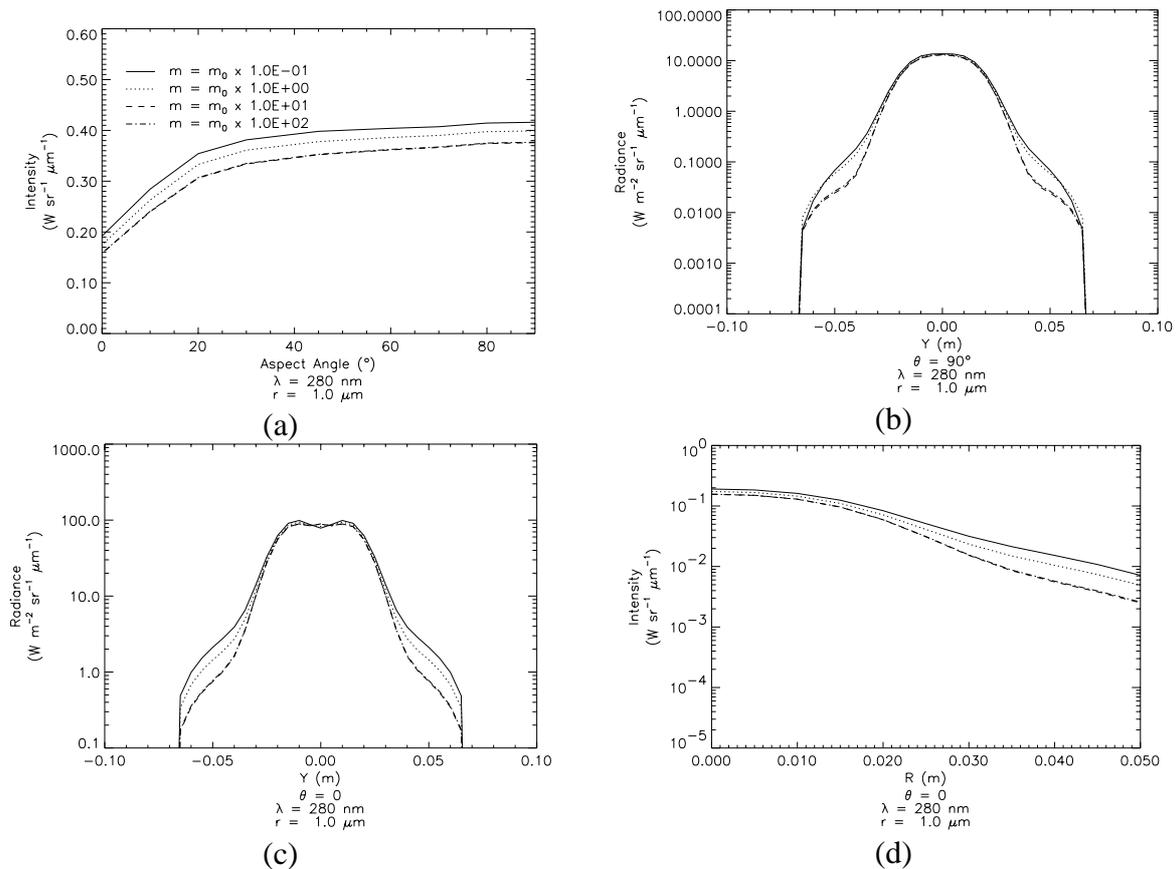


Figure 5.20 - Milieu à symétrie cylindrique fini (distribution granulométrique log-normale de particules : $\sigma_g = 1.1$, $r_g = 1 \mu\text{m}$) défini avec différentes pondérations de l'indice imaginaire de l'alumine : (a) intensité en fonction de l'angle d'aspect ; (b) profil radial de luminance en vue de côté ; (c) profil radial de luminance en vue avant ; (d) intensité en vue avant en fonction du rayon de masquage

La dépendance du champ de rayonnement à la valeur de l'indice imaginaire est alors beaucoup plus faible. Ce phénomène, qui est aussi constaté lorsque le rayon géométrique moyen de la particule vaut $r_g = 10 \mu\text{m}$ (courbes non représentées dans ce chapitre), provient de la diminution, par rapport au cas précédent, de la valeur du coefficient d'extinction. Cette faible sensibilité du champ de rayonnement à l'indice imaginaire prend aussi sa source dans la

variation limitée des facteurs d'efficacité d'absorption et de diffusion lorsque les particules sont microniques ($r_g \geq 1 \mu\text{m}$).

5.3.4. Conclusion

Cette étude paramétrique a permis de mettre en évidence l'évolution du rayonnement émis par un milieu à symétrie cylindrique représentatif de la zone de postcombustion d'un jet de propulseur à propergol composite aluminisé, en prenant en compte les incertitudes sur les propriétés optiques et granulométriques des particules. Les conclusions de cette étude sont liées au fait que l'émission des gaz par chimiluminescence est plus importante que le rayonnement thermique des particules. D'après les résultats présentés ici, il ressort que le champ de rayonnement est très sensible aux hypothèses sur la taille des particules. Lorsque le rayon géométrique moyen des particules augmente, on constate une diminution simultanée de l'extinction au voisinage de l'axe et de la diffusion du rayonnement vers les couches externes du cylindre. Cette grande sensibilité du champ de rayonnement à ces effets de bords est une importante source d'incertitudes dans l'évaluation de la luminance émise en vue avant. Au voisinage de l'axe, le champ de luminance en vue de côté dépend cependant peu de la taille des particules car le milieu peut être considéré comme optiquement mince dans cette direction d'observation. Le champ de rayonnement n'évolue pratiquement pas lorsque l'indice réel varie car les paramètres de diffusion sont peu sensibles à la valeur de ce paramètre optique. Pour des raisons similaires, le même phénomène est observé en fonction des incertitudes sur l'indice imaginaire dans le cas des particules microniques. En revanche, si les particules mesurent environ $0.1 \mu\text{m}$ de rayon, le rayonnement émis par le milieu diminue fortement quand l'indice imaginaire augmente, du fait de l'absorption.

5.4. Conclusion

Des comparaisons ont été effectuées entre la méthode SHDOM et des solutions de référence issues de la littérature dans le cas de milieux « plans parallèles » et d'enceintes carrées. Les résultats ont mis en évidence que la précision de la méthode SHDOM dépendait principalement de la qualité de la résolution angulaire. Si cette dernière est insuffisante, des erreurs de type « effet de rayon » [37] apparaissent. D'après les résultats présentés ici, la quadrature de Gauss-Legendre utilisée par la méthode SHDOM fournit des résultats très satisfaisants lorsque le nombre d'angles zénithaux et azimutaux correspond aux valeurs

suggérées par Evans [10]. Une bonne discrétisation spatiale est en outre nécessaire pour décrire les hétérogénéités de la fonction source créées par les phénomènes de diffusions multiples. Cependant, les erreurs provenant d'un maillage trop large de la grille de propriétés sont assez faibles et peuvent être réduites par l'utilisation du découpage de cellules. Le nombre de points générés par cette fonctionnalité est toutefois difficile à prévoir, ce qui rend difficile l'optimisation de la taille du calculateur et du temps de calcul lorsque le remaillage de la grille de propriétés est activé.

Des comparaisons ont été effectuées entre les modèles 2-flux et SHDOM dont les résultats ont alors été utilisés comme solutions de référence. Dans le cas des milieux « plans parallèles » diffusants, le modèle 2-flux ne fournit pas de résultats satisfaisants lorsque le milieu est optiquement épais et/ou que la direction d'observation est proche de l'horizontale en raison de son incapacité à prendre en compte les phénomènes de diffusion latérale. Dans le cas d'un milieu cylindrique représentatif de la zone de postcombustion d'un jet pour lequel l'adaptation de la méthode SHDOM aux jets a été utilisée, le modèle 2-flux ne peut pas prédire les effets de bords provenant de la diffusion, vers les couches externes du cylindre, du rayonnement émis au voisinage de l'axe. En vue avant, il apparaît que le modèle 2-flux surestime le rayonnement au voisinage de l'axe. Ces résultats soulignent la nécessité d'utiliser un modèle de transfert radiatif 3D de type « méthode des ordonnées discrètes » pour prendre en compte correctement les phénomènes de diffusions multiples au sein de milieux tels que les jets de propulseurs dans le domaine UV.

Pour ce même type de milieu cylindrique, une étude de sensibilité aux incertitudes sur les propriétés optiques et granulométriques des particules a été effectuée au moyen du code SHDOM adapté aux jets. Le rayonnement émis en vue avant augmente fortement avec la taille des particules en raison d'une diminution de la valeur du coefficient d'extinction. Du fait du masquage par le corps du propulseur, un tel phénomène n'est pas observable expérimentalement dans le cas d'un jet réel. D'un autre côté, la taille apparente du milieu diminue en vue avant et de côté lorsque les dimensions des particules croissent car la diffusion du rayonnement de l'axe vers les bords du milieu est moins importante. Le rayonnement est peu sensible à la valeur de l'indice complexe de l'alumine, sauf en ce qui concerne sa partie imaginaire sous l'hypothèse que le rayon des particules soit inférieur à $1\ \mu\text{m}$. Dans ce cas, la valeur des luminances calculées diminue quand celle de l'indice imaginaire augmente, en raison d'une absorption plus élevée. Même si ces résultats ne sont

pas directement généralisables à des exemples de jets réels, ils mettent en évidence certaines des principales sources d'incertitudes sur le rayonnement émis par ces milieux dans le domaine UV, à savoir :

- La distribution granulométrique des particules ;
- La valeur de l'indice imaginaire de l'alumine si les particules ont un rayon inférieur à 1 μm .

Finalement, cette étude du milieu à symétrie cylindrique a permis de définir différentes grandeurs caractéristiques des jets de moteurs-fusées accessibles à l'expérience, qui pourront faire l'objet de comparaisons avec les résultats théoriques.

6. COMPARAISON AVEC DES RÉSULTATS EXPÉRIMENTAUX

Au cours de la dernière décennie, des mesures de signatures UV du jet d'un même propulseur à propergol composite aluminisé, ont été effectuées dans le cadre de plusieurs campagnes expérimentales. Ce propulseur comporte deux régimes : une phase d'accélération et une phase de croisière, qui se distinguent par leur poussée et par le rapport de pression dans le plan de sortie de la tuyère, entre le jet et le milieu externe. En conséquence, les jets correspondant à ces deux régimes diffèrent par leur taille, et donc par leur signature. On dispose, par ailleurs, de résultats de calculs aérothermochimiques effectués à l'aide des codes SPF [1] et AJAX-PNS [116] pour ce propulseur. A partir du champ de composition de jet fourni par ces modèles, les champs de rayonnement émis par les jets au cours des deux régimes, ont été évalués à l'aide du modèle SHDOM modifié, en utilisant comme données d'entrée les propriétés optiques des gaz et des particules décrites au chapitre 4.

Les grandeurs radiatives (comme l'intensité ou la luminance) présentées ici ont été intégrées spectralement entre 240 nm et 280 nm. Pour les calculs effectués à l'aide du modèle SHDOM, la méthode des trapèzes a été utilisée pour effectuer cette intégration en prenant en compte 5 longueurs d'onde. Une telle procédure est justifiée car l'évolution spectrale de l'émission de chimiluminescence des gaz et des propriétés optiques des particules est continue dans le domaine UV.

Pour des raisons de protection des résultats, les résultats numériques ne sont pas présentés dans ce mémoire. Dans une première partie, les incertitudes propres aux calculs de signature sont étudiées. Dans une seconde partie, les conclusions des comparaisons entre signatures théoriques et expérimentales sont présentées.

6.1. Calculs de signature

Les incertitudes propres aux calculs de signature proviennent :

- Du calcul de transfert radiatif ;
- Des données d'entrée issues de la modélisation aérothermochimique.

- Des propriétés optiques des constituants du jet, et notamment celles découlant de la taille et de l'indice imaginaire des particules (*cf.* § 4.3 & § 5.3) ;

D'après les cas tests de validation de la méthode SHDOM (*cf.* § 5.1), ce modèle peut fournir des résultats très proches de solutions de référence issues de la littérature. Les erreurs dues au calcul de transfert radiatif sont donc minimisées. Il reste donc à prendre en compte les incertitudes provenant de la modélisation aérothermochimique et de la caractérisation des constituants des jets, notamment des particules.

Les codes aérothermochimiques SPF et AJAX-PNS fournissent les concentrations et les températures des gaz et des particules du jet étudié ici. A partir de ces données, il est possible de calculer la signature UV au moyen du code de transfert radiatif SHDOM que l'on a adapté aux jets, en prenant en compte l'émission de chimiluminescence de CO + O et les propriétés optiques des particules (*cf.* § 4.2 & § 4.3).

Alors que le code AJAX-PNS est un modèle aérothermochimique français qui a fait l'objet d'améliorations à l'ONERA [116], le code SPF [1] élaboré aux Etats-Unis est distribué exclusivement dans ce pays. De ce fait, on ne dispose pour ce code que d'un nombre limité de résultats de calculs. Les principales caractéristiques des résultats disponibles sont présentées dans le tableau suivant.

Code aérothermochimique	Géométrie du maillage du profil 2D	Traitement des particules d'alumine
SPF	Pas irrégulier pour la discrétisation radiale et la discrétisation axiale formant un « maillage trapézoïdal »	Modèle diphasique Concentration volumique de 5 classes de particules dont le rayon est compris entre 0.5 μm et 10 μm
AJAX-PNS	Cartésien à pas irrégulier pour la discrétisation radiale et axiale	Gaz équivalent Concentration massique d'alumine

Tableau 6.1 – Caractéristiques des profils axisymétriques issus des calculs aérothermochimiques AJAX-PNS et SPF

L'étude des effets, sur la signature du jet, des incertitudes relatives aux paramètres de diffusion des particules (coefficient d'extinction, albédo de diffusion simple et fonction de phase) dépend de la nature du modèle aérothermochimique utilisé. Dans le cas d'un code diphasique tel que SPF, les dimensions des particules sont fixées par le calcul aérothermochimique. Pour cette raison, on ne peut prendre en compte que les incertitudes relatives à l'indice de l'alumine. De fait, comme le rayonnement UV émis par les jets dépend

peu des variations de l'indice réel (*cf.* § 5.3.2), on étudie uniquement l'influence de la méconnaissance de la valeur de l'indice imaginaire. En revanche, si les particules sont assimilées à un « gaz équivalent » comme dans le code AJAX-PNS, il est possible de prendre aussi en compte les hypothèses relatives à la taille des particules. Pour cela, on utilise les distributions granulométriques log-normales définies au chapitre 4 (*cf.* § 4.3.6.2) avec une déviation standard géométrique σ_g valant 1.1 et avec un rayon géométrique moyen r_g paramétrable.

Pour les calculs de transfert radiatif, l'indice réel de l'alumine a été fixé à 1.75 en sachant qu'une variation de 10% de ce paramètre optique, du fait de la température ou des transitions de phases de l'alumine, n'a pratiquement aucune influence sur le rayonnement (*cf.* § 5.3.2). L'indice imaginaire de l'alumine, supposé constant en dessous de son point de fusion (2320 K environ), a été évalué en fonction de la température et de la longueur d'onde par le modèle semi-empirique d'Anfimov *et al.* [81]. La résolution angulaire de la méthode SHDOM est définie à l'aide de $N_\mu = 16$ angles zénithaux et $N_\phi = 32$ azimuts.

D'après les calculs de signature effectués à l'aide des résultats du code aérothermochimique SPF, le champ de rayonnement émis par le jet dépend assez peu de l'indice imaginaire des particules sauf au voisinage de la tuyère en vue de côté et près de l'axe en vue avant. Ce comportement provient des caractéristiques suivantes :

- L'émission provient essentiellement de la chimiluminescence, sauf dans le cœur du jet et dans les zones d'adaptation de la pression où elle est due essentiellement aux particules ;
- Le code SPF conduit à une faible dispersion des particules dans le jet, celles-ci restant concentrées à proximité de l'axe ;
- Les propriétés optiques des particules dans l'ultraviolet sont assez peu sensibles à leur valeur d'indice imaginaire lorsqu'elles sont de taille micronique.

De fait, dans la zone de postcombustion, le profil axial de luminance en vue de côté ne dépend pratiquement pas de la présence de particules. Celles-ci participent donc très peu à l'émission dans cette région du jet. A l'inverse, les pics à proximité du plan de sortie de la tuyère doivent être attribués aux particules. En vue avant, seuls les résultats à la périphérie du jet présentent un intérêt car ils sont observables expérimentalement. On observe alors des résultats indépendants de la présence de particules, ce qui tendrait à montrer que la dispersion

des particules est suffisamment faible pour que le rôle de la diffusion soit négligeable dans ce cas.

Pour les calculs effectués à l'aide des résultats du code AJAX-PNS, la sensibilité du champ de rayonnement à la présence de particules dépend de l'angle d'aspect considéré et de la région du jet étudiée. En vue de côté, le profil axial de luminance ne dépend quasiment pas de la taille ni de l'indice imaginaire des particules, sauf si ces dernières sont supposées mesurer environ $0.1 \mu\text{m}$ de rayon car, dans ce cas, le milieu est optiquement épais. Sous l'hypothèse de particules submicroniques, le champ de rayonnement émis par le jet diminue fortement avec la valeur de l'indice imaginaire. Dans les autres cas, la signature du jet est indépendante de ce paramètre optique. En vue avant, les pieds des profils radiaux de luminance augmentent fortement quand la taille supposée des particules diminue car la diffusion du rayonnement vers les bords du jet est plus importante. Ces observations résultent d'une plus grande dispersion des particules que celle prédite par le code SPF. Ce phénomène provient du traitement des particules comme un « gaz équivalent » dans le code AJAX-PNS car, dans ce cas, leur comportement dans le jet est semblable à celui des espèces gazeuses.

6.2. Comparaison entre les résultats expérimentaux et la modélisation

Au vu des résultats de l'étude paramétrique présentée ci-dessous, on ne prend en compte pour la comparaison entre les résultats théoriques et expérimentaux, que les sources d'incertitudes relatives aux propriétés optiques et granulométriques des particules les plus pertinentes, à savoir :

- Pour les résultats issus du code SPF, la méconnaissance de l'indice imaginaire de l'alumine ;
- Pour les résultats issus du code AJAX-PNS, les hypothèses sur la distribution granulométrique des particules.

Pour effectuer la comparaison entre calculs et expériences, on a utilisé les grandeurs radiatives caractéristiques suivantes :

- L'intensité en vue de côté ;
- La dépendance angulaire de l'intensité ;
- Le profil axial de luminance en vue de côté ;

- Le profil radial de luminance en vue de côté dans la zone de postcombustion ;
- Le profil radial de luminance en vue avant.

L'incertitude sur le champ de luminance expérimental est estimée à 25%. Celle-ci a été minimisée par de nombreuses précautions prises lors des enregistrements et lors de leur calibration.

D'après cette comparaison entre expérience et modélisation, la qualité des prédictions fournies par le calcul numérique dépend du modèle aérothermochimique utilisé et des hypothèses sur les propriétés granulométriques et optiques des particules. Les calculs de rayonnement effectués à partir des résultats du code diphasique SPF évaluent assez bien le champ de luminance en vue de côté, mais ils n'estiment pas correctement sa largeur apparente. Ces observations montrent que le rayonnement du cœur du jet et des zones d'adaptation de la pression résulte vraisemblablement de l'émission thermique des particules. A l'inverse, l'émission de la zone de postcombustion provient essentiellement de la réaction de chimiluminescence. De plus, les calculs utilisant le code AJAX-PNS, sous l'hypothèse des particules submicroniques, suggèrent que celles-ci jouent un rôle important quant à la diffusion du rayonnement vers les couches externes du jet.

6.3. Conclusion

Les comparaisons avec l'expérience ont permis d'identifier les principales sources d'incertitudes concernant la modélisation de la signature UV du jet. D'après les comparaisons effectuées par rapport à des solutions de référence (*cf.* § 5.1), les erreurs dues au modèle de transfert radiatif SHDOM peuvent être considérées comme faibles. L'écart entre calcul et mesure provient donc essentiellement de :

- La modélisation aérothermochimique ;
- L'estimation des propriétés optiques des constituants du jet, notamment de celles des particules.

Les résultats de deux codes aérothermochimiques ont été utilisés pour évaluer la signature UV du jet étudié, à l'aide de l'adaptation du modèle de transfert radiatif aux jets de moteurs-fusées :

- Le code diphasique SPF qui prend en compte 5 classes de particules de rayons compris entre 0.5 μm et 10 μm ;

- Le code AJAX-PNS où les particules d'alumine sont traitées comme un « gaz équivalent ».

L'étude paramétrique présentée ici révèle que les résultats des calculs de signature effectués à l'aide du code SPF dépendent peu de la valeur de l'indice complexe de l'alumine. Si le code AJAX-PNS est utilisé, on constate que le diamètre apparent du jet croît lorsque la taille des particules diminue, du fait d'une diffusion du rayonnement plus importante vers la périphérie. Lorsque les particules sont supposées submicroniques, le rayonnement diminue fortement avec la valeur de l'indice imaginaire, en raison d'une augmentation de l'absorption. Cette dépendance n'apparaît plus dans le cas des particules microniques.

Pour le régime d'accélération, les calculs effectués à l'aide des codes aérothermochimiques disponibles peuvent s'éloigner des résultats expérimentaux selon les grandeurs comparées. Les intensités « théoriques » et expérimentales en vue de côté sont du même ordre de grandeur. Les modélisations ne peuvent toutefois pas prédire correctement le rayonnement UV émis par le cœur du jet. Pour le régime de croisière, le même accord que pour le régime d'accélération, est constaté en ce qui concerne l'intensité en vue de côté. Dans ce cas, la comparaison entre les mesures et les calculs effectués à l'aide du code SPF montre que ces derniers fournissent des résultats assez satisfaisants. Toutefois, ces calculs n'évaluent pas correctement la largeur apparente du jet, tant en vue avant qu'en vue de côté. En revanche, le code AJAX-PNS ne peut pas être utilisé pour estimer l'émission thermique des particules microniques proches de la tuyère. Cependant, d'après les calculs effectués à l'aide de ce code, la largeur apparente du jet en vue avant et de côté proviendrait de la diffusion de particules submicroniques situées sur les couches externes du jet. Ce phénomène qui dépend des échanges par diffusion latérale, ne peut pas être prédit correctement en utilisant une approche 2-flux.

Ces résultats montrent que le désaccord entre les calculs et l'expérience provient principalement de la modélisation aérothermochimique. La comparaison des signatures théoriques et expérimentales a montré la nécessité de disposer d'un modèle permettant d'évaluer la répartition spatiale, les concentrations et les températures de classes de particules aussi bien microniques que submicroniques. En effet, le rayonnement du cœur du jet et des zones d'adaptation de la pression est vraisemblablement produit par l'émission thermique des particules microniques. Quant aux particules submicroniques, elles contribuent à la largeur apparente du jet.

7. CONCLUSION

Dans cette étude, un modèle de transfert radiatif 3D est développé dans le but de calculer la signature UV de jets de propulseurs à propergols solides composites aluminisés en prenant en compte l'influence spécifique des constituants de ces milieux sur le rayonnement. A cette fin, un modèle plus élaboré que les approches 2-flux et 6-flux généralement utilisées a été mis en œuvre : la méthode des ordonnées discrètes et des harmoniques sphériques (SHDOM). Cette méthode itérative permet d'intégrer spatialement l'équation de transfert radiatif (ETR) le long des ordonnées discrètes et l'intégrale de diffusion est évaluée dans une base d'harmoniques sphériques. Le modèle SHDOM, conçu initialement pour les milieux nuageux, a été adapté à la composition aérothermochimique et à la géométrie des jets de moteurs-fusées. Pour cela, l'émission de chimiluminescence des gaz, absente des milieux atmosphériques, a été prise en compte dans la résolution de l'ETR. De plus, une procédure a été mise au point afin d'évaluer les propriétés optiques des constituants des jets à partir de profils axisymétriques issus de calculs aérothermochimiques.

La comparaison des résultats du code SHDOM avec des solutions de référence issues de la littérature a permis d'étudier la précision de ce modèle en fonction de la résolution angulaire et de la discrétisation spatiale. Pour cela, deux géométries ont été prises en compte : des milieux « plans parallèles » et des enceintes carrées. D'après ces calculs, la précision de la méthode SHDOM est apparue optimale lorsque 16 angles zénithaux et 32 azimuts sont utilisés. Des erreurs peuvent être constatées lorsque le milieu n'est pas assez discrétisé, en raison d'une prise en compte insuffisante des hétérogénéités du champ de rayonnement. Le remaillage de la grille de propriétés permet toutefois d'améliorer la précision des calculs. Cependant, les calculateurs disponibles dans le cadre de cette étude, ont une capacité en mémoire de stockage insuffisante pour utiliser cette fonctionnalité de la méthode SHDOM dans le cas des jets.

Le modèle SHDOM a ensuite été comparé, pour des géométries « plans parallèles » et cylindriques, à des approches plus simples comme le modèle 2-flux, généralement utilisées dans les calculs de signature de jets du fait de leur rapidité. D'après ces cas tests, les échanges par diffusion latérale dus aux particules peuvent modifier la dépendance angulaire et spatiale

du champ de rayonnement. Plus spécifiquement, ce phénomène optique permet d'expliquer l'influence des particules sur la largeur « apparente » d'un milieu cylindrique proche des jets. Pour cette raison, le modèle 2-flux qui, par construction, ne prend pas en compte la diffusion latérale, ne peut pas être utilisé pour calculer la signature des jets avec une bonne précision.

Les propriétés optiques des constituants des jets (gaz et particules d'alumine) sont estimées à l'aide de données proposées par la littérature. Dans l'UV, l'émission des gaz est due principalement à la recombinaison radiative de $\text{CO} + \text{O}$. Ce résultat est confirmé par l'étude des spectres expérimentaux du rayonnement UV émis par les jets. Pour évaluer quantitativement cette émission de « chimiluminescence » en fonction de la température et de la longueur d'onde, une loi de type Arrhenius a été ajustée à des données expérimentales issues de la littérature.

Les propriétés optiques des particules dépendent de leur taille, de l'indice complexe de réfraction de l'alumine dont elles sont constituées, et de la longueur d'onde. L'indice de réfraction est fonction de la phase cristalline de l'alumine, de la température et de la longueur d'onde. Si la valeur de l'indice réel est assez bien connue, peu de données sont disponibles dans l'UV pour évaluer celle de l'indice imaginaire qui est, de plus, sensible à la présence d'impuretés. Dans cette étude, les évolutions spectrales et thermiques de ce paramètre optique ont été estimées à l'aide d'un modèle semi-empirique issu de la littérature. Bien que les distributions granulométriques observées expérimentalement soient généralement multimodales, on a supposé que les tailles des particules étaient réparties selon une loi log-normale monomodale. Cette approximation a pour but de faciliter l'étude des effets des incertitudes relatives à la taille moyenne des particules sur le rayonnement émis par un milieu de type jet.

On a étudié le rayonnement émis par un milieu cylindrique représentatif de la zone de postcombustion d'un jet, en prenant en compte différentes hypothèses sur les propriétés optiques et granulométriques des particules d'alumine. Le rayonnement émis par le cylindre ne dépend pratiquement pas de la valeur de l'indice réel. En revanche, lorsque la taille des particules diminue, à concentration massique d'alumine égale, le champ de rayonnement s'élargit du fait de l'augmentation des échanges par diffusion latérale. Avec l'hypothèse des

particules submicroniques, le rayonnement diminue fortement lorsque la valeur de l'indice imaginaire croît. Par contre, dès lors que les particules sont supposées de taille micronique, le rayonnement ne varie que faiblement par rapport à ce même indice imaginaire.

On a comparé des calculs effectués à partir de données aérothermochimiques issues des codes SPF (diphase) et AJAX-PNS, à des mesures de signature UV d'un jet de propulseur à propergol composite aluminisé, en utilisant les grandeurs radiatives suivantes : l'intensité en vue de côté, la dépendance angulaire de l'intensité, et les profils radiaux et axiaux de luminance en vue avant et de côté. Ces résultats ont permis de vérifier que les intensités et les luminances calculées étaient du même ordre de grandeur que les valeurs mesurées. Cependant, les calculs ne permettent pas de prédire fidèlement la forme et les dimensions expérimentales du jet, notamment sa largeur. Cet écart entre les calculs et l'expérience peut être attribué en premier lieu, à la modélisation aérothermochimique et en second lieu, aux incertitudes sur les propriétés optiques et granulométriques des particules.

Le calcul correct de la signature UV d'un jet de propulseur repose donc sur une bonne connaissance de sa composition aérothermochimique. Il est notamment nécessaire de disposer de données précises sur la répartition spatiale et granulométrique des particules. Ces paramètres devront par conséquent, faire l'objet de mesures en divers endroits du jet tels que le cœur (« noyau potentiel »), les zones d'adaptation à la pression ambiante et de postcombustion, ainsi que les bords de ce milieu. La prise en compte de ces nouvelles données permettra en particulier, d'améliorer la modélisation aérothermochimique. Une étude expérimentale de l'indice complexe de l'alumine sera en outre profitable afin de réduire les incertitudes sur la valeur de cette grandeur optique dans le domaine UV.

Le modèle de transfert radiatif 3D utilisé ici pourra être amélioré de façon à utiliser directement le maillage axisymétrique des codes aérothermochimiques pour résoudre l'ETR. Cette modification permettra, en particulier, de réduire les besoins en mémoire de stockage. Dans ce nouveau modèle, la discrétisation spatiale utilisée pour résoudre l'ETR serait reliée directement à la résolution angulaire azimutale. De ce fait, il serait nécessaire d'évaluer l'influence de « l'effet de rayon » spécifique à cette nouvelle méthode.

Une étude comparable à celle qui a été réalisée ici, pourra être effectuée pour la signature infrarouge de jets de propulseurs. Pour cela, on dispose déjà d'un code fiable (SHDOM) pour effectuer les calculs de transfert radiatif en prenant en compte les propriétés optiques des constituants du milieu, évaluées à partir des données aérothermochimiques disponibles. Les interactions entre le rayonnement IR et les espèces gazeuses sont cependant plus difficiles à déterminer que dans le domaine UV, du fait des corrélations spectrales qui existent entre les différents termes de l'ETR. En outre, des études paramétriques semblables à celles effectuées ici pour l'UV devront être effectuées afin d'évaluer les variations du rayonnement émis par le jet, par rapport aux incertitudes sur les propriétés optiques et granulométriques des particules.

8. BIBLIOGRAPHIE

- [1] Simmons F. S.
Rocket Exhaust Plume Phenomenology
The Aerospace Press, El Segundo, CA, USA & AIAA, Inc., Reston, VA, USA (2000)
- [2] Kolb C. E., Ryali S. B., Wormhoudt J.
The Chemical Physics of Ultraviolet Rocket Plume Signatures
SPIE, Vol. 932, Ultraviolet Technology II (1988)
- [3] Lyons R. B., Wormhoudt J., Kolb C. E.
Calculation of Visible Radiation from Missile Plume
AIAA paper No. 81-1111 (1981)
- [4] Reed R. A., Calia V. S.
Review of Aluminum Oxide Rocket Exhaust Particles
AIAA paper n° AIAA-93-2819 (1993)
- [5] Chandrasekhar S.
Radiative Transfer
Dover Publications Inc., New York, NY, USA (1960)
- [6] Freeman G. N., Ludwig C. B., Malkmus W., Reed R.
Development and Validation of Standardized InfraRed Radiation Model (SIRRM)
Gas/Particle Radiation Transfer Model
Air Force Rocket Propulsion Laboratory, Edwards AFB, CA, USA,
Rapport No. AFPRL-TR-79-55 (1979)
- [7] Viskanta R., Mengüç M. P.
Radiation Heat Transfer in Combustion System
Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 13, pp. 97-160 (1987)
- [8] Lyons R. B., Wormhoudt J., Gruninger J.
Scattering of Radiation by Particles in Low Altitudes Plume
AIAA paper No. 81-1053 (1981)

- [9] Lyons R. B., Wormhoudt J., Gruninger J.
Scattering of Radiation by Particles in Low-Altitude Plume
J. Spacecraft, Vol. 20, No. 2, pp. 189-192 (1983)
- [10] Evans K. F.
The Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method for Three-Dimensional Atmospheric Radiative Transfer
J. Atm. Sci., Vol. 55, No. 3, pp. 429-446 (1998)
- [11] Dash S. M., Pearce B. E., Pergament H. S., Flishburne E. S
Prediction of Rocket Plume Flowfields for Infrared Studies
J. Spacecraft, Vol. 17, No. 3, pp. 190-199 (1980)
- [12] Lenoble J.
Radiative Transfer in Scattering and Absorbing Atmospheres: Standard Computational Procedures
A Depaak Publishing, Hampton, VA, USA, (1985)
- [13] Kassianov, E. I.
Intercomparison of 3D Radiation Code: Phase I: Monte-Carlo Method
International Workshops on Intercomparison of 3-Dimensional Radiation Codes (I3RC-99), (1999), http://climate.gsfc.nasa.gov/I3RC/abstracts-new/I3RC_extended_Kassianov.ps [09/05/2001]
- [14] Macke A., Schreier R.,
The University of Kiel (UNIK) Monte-Carlo Radiative Transfer Model
International Workshops on Intercomparison of 3-Dimensional Radiation Codes (I3RC-99), (1999), <http://climate.gsfc.nasa.gov/I3RC/abstracts-new/UNIK.pdf> [09/05/2001]
- [15] Hirok W. O., Gautier C.
Santa Barbara Three-Dimensional (SB3D) Radiative Transfer Model
International Workshops on Intercomparison of 3-Dimensional Radiation Codes (I3RC-99), (1999), http://climate.gsfc.nasa.gov/I3RC/abstracts-new/ucsb_labs.pdf [09/05/2001]

- [16] Rublev A., Trembach V.
Two Monte-Carlo Code for 3D Comparison
International Workshops on Intercomparison of 3-Dimensional Radiation Codes (I3RC-99), (1999), <http://climate.gsfc.nasa.gov/I3RC/abstracts-new/KIAE.pdf>
[09/05/2001]
- [17] Edwards D. K., Babikan D. S.
Radiation from a Nongray Scattering Emitting and Absorbing SRM Plume
AIAA paper No. 89-1721 (1989)
- [18] Bryun K. H., Smith T. F.
Development of the Zone Method for Linearly-Anisotropic Scattering Media
J. Q. S. R. T., Vol. 40, No. 5, 591-604 (1988)
- [19] Liu J., Shang H. M., Chen Y. S., Wang T. S.
Analysis of Discrete Ordinate Method with Even Parity Formulation
J. Thermophys. Heat Transfer, Vol. 11, No. 2, pp. 253-260 (1997)
- [20] Meador W. E., Weaver W. R.
Two-Stream Approximations to Radiative Transfer in Planetary Atmospheres: A Unified Description of Existing Methods and a New Improvement
J. Atm. Sci., Vol. 37, pp. 630-643 (1980)
- [21] Toon O. B., McKay C. P., Ackerman T. P., Santhanam K.
Rapid Calculation of Radiative Heating Rates and Photodissociation Rates in Inhomogeneous Multiple Scattering Atmosphere
J. Geophys. Res., Vol. 94, No. D13, pp. 16287-16301 (1989)
- [22] Fu Q., Liou K. N., Cribb M. C., Charlock T. P., Grossman A.
Multiple Scattering Parameterization in Thermal Infrared Radiative Transfer
J. Atm. Sci., Vol. 54, No. 24, pp. 2799-2812 (1997)
- [23] Deeter M. N., Evans K. F.
A Hybrid Eddington-Single Scattering Radiative Transfer Model for Computing Radiances from Thermally Emitting Atmosphere
J. Q. S. R. T., Vol. 60, No. 4, pp. 635-648 (1998)

- [24] Van de Hulst H. C.
Multiple Light Scattering, Tables, Formulas and Applications, Vol. 2
Academic Press, New York, NY, USA (1980)
- [25] Li J.
Gaussian Quadrature and Its Application to Infrared Radiation
J. Atm. Sci., Vol.57, No. 5, pp. 753-765 (2000)
- [26] Li J., Fu Q.
Absorption Approximation with scattering Effect for Infrared Radiation
J. Atm. Sci., Vol.57, No. 17, pp. 2605-2914 (2000)
- [27] Mudgett P. S., Richards L. W.
Multiple Scattering Calculations for Technology
App. Opt., Vol. 10, No. 7, pp. 1485-1502 (1971)
- [28] Ishimaru A.
Wave propagation and Scattering in Random Media, Vol. 1, Single Scattering and Transport Theory
Academic Press, New York, NY, USA (1978)
- [29] Joseph J. H., Wiscombe W.J.
The Delta-Eddington Approximation for Radiative Transfer
J. Atm. Sci., Vol. 33, pp. 2452-2459 (1976)
- [30] Meador W. E., Weaver W. R.
Six-Beam Models in Radiative Transfer Theory
App. Opt., Vol. 15, No. 2, pp. 3155-3160 (1976)
- [31] Emslie A. G., Aronson J. R.
Spectral Reflectance and Emittance of Particulate Materials. 1: Theory
App. Opt., Vol 12, No. 11, pp. 2563-2572 (1973)

- [32] Truelove J. S.
Three-dimensional Radiation in Absorbing Emitting-Scattering Media using Discrete Ordinate Approximation
J. Q. S. R. T., Vol. 79, No. 1, pp. 27-31 (1988)
- [33] Koch R., Krebs W., Wittig S., Viskanta R.
Discrete Ordinates Quadrature Schemes for Multidimensional Radiative Transfer
J. Q. S. R. T., Vol. 53, No. 4, pp. 353-372 (1995)
- [34] Fiveland W. A.
Discrete Ordinate Methods for Radiative Heat Transfer in Isotropically and Anisotropically Scattering Media
J. Heat Transfer, Vol. 109, pp. 809-812 (1987)
- [35] Goldsave C.
Accelerating the Discrete Ordinate Method for the Solution of the Radiative Transfer Equation for Planetary Atmospheres
J. Q. S. R. T., Vol. 56, No. 4, pp. 609-616 (1996)
- [36] Vaillon R., Lallemand M., Lemonnier D.
Radiative Heat Transfer in Orthogonal Curvilinear Coordinates Using the Discrete Ordinate Method
J. Q. S. R. T., Vol. 55, No. 1, pp. 7-17 (1996)
- [37] Chai J. C., Lee H. S., Pantakar S. V.
Ray Effect and False Scattering in the Discrete Ordinate Method
Numerical Heat Transfer, Part B, Vol. 34, pp. 373-389 (1993)
- [38] Joumani Y.
Transferts radiatifs 2D par la méthode des ordonnées discrètes
Rapport ONERA No. RT 26/2486 DEFA/N (1999)

- [39] Coelho P. J.
The Role of Ray Effects and False Scattering on the Accuracy of the Standard and Modified Discrete Ordinates Method
Third International Symposium on Radiative Transfer, The International Centre for Heat and Mass Transfer (ICHMT), Ankara, Turquie (2001)
- [40] Jessee J. P., Fiveland W. A.
Bounded High-Resolution Differencing Schemes Applied to the Discrete Ordinate Method
J. Thermophysics and Heat Transfer, Vol. 11, No. 4, pp. 540-548 (1997)
- [41] Stamnes K., Tsay S.-C., Wiscombe W., Jayaweera
Numerically Stable Algorithm for Discrete-Ordinate-Method Radiative Transfer in Multiple Scattering and Emitting Layered Media
App. Opt., Vol. 27, No. 12, pp. 2502-2509 (1988)
- [42] Wiscombe, W. J.
The Delta-M Method : Rapid Yet Accurate Radiative Flux Calculations for Strongly Asymmetric Phase Function
J. Atm. Sci., Vol. 34, pp. 1408-1422 (1977)
- [43] Kuo K.-S., Weger R. C., Welch R. M.
The Picard Iterative Approximation to the Solution of the Integral Equation of Radiative Transfer. Part I: The Plane Parallel Case
J. Q. S. R. T., Vol. 53, No. 4 195–213 (1995)
- [44] Kuo K.-S., Weger R. C., Welch R. M., Cox S. K.
The Picard Iterative Approximation to the Solution of the Integral Equation of Radiative Transfer. Part II: Three-Dimensional Geometry
J. Q. S. R. T., Vol. 55, No. 2 195–213 (1996)
- [45] Sánchez A. A., Krajewski W. F., Smith T. F.
A General Radiative Transfer Model for Atmospheric Remote Sensing Studies in Multidimensional Media
Iowa Institute of Hydraulic Research, Iowa City, IA, USA, Rapport No. 355 (1992)

- [46] Tofsted D. H., O'Brien S. G.
Physics-Based Visualization of Dense Natural Clouds. I. Three-Dimensional Discrete Ordinates Radiative Transfer
App. Opt.-LP, Vol. 37, No. 33, pp. 7718-7728 (1998)
- [47] Vaillon R.
Etude de l'interaction rayonnement - chimie dans un plasma réactif d'hydrogène - hélium à l'aide de la méthode des ordonnées discrètes en coordonnées curvilignes
Th., Aérodynamique et mécanique des fluides, combustion, thermique (option : Thermique), Poitiers (1996)
- [48] Ou S.-C. S., Liou K. L.
Generalization of the Spherical Harmonics Method to Radiative Transfer in Multi-Dimensional Space
J. Q. S. R. T., Vol. 28, No. 4, pp. 271-288 (1982)
- [49] Evans, K. F.
Two-Dimensional Radiative Transfer in Cloudy Atmospheres: The Spherical Harmonic Spatial Grid Method
J. Atm. Sci., Vol. 50, No. 18, pp. 3111-3124 (1993)
- [50] Cohen-Tanoudji C., Diu B., Laloë F.
Mécanique Quantique I
Hermann, Editeurs des Sciences et des Arts, Paris, France (1995)
- [51] Levin D. A., Laux C. O., Kruger C. H.
A General Model for the Spectral Calculation of OH Radiation in the Ultraviolet
J. Q. S. R. T., Vol. 61, No. 3, pp. 377-392 (1999)
- [52] Gaydon A. G.
Spectroscopy and Combustion Theory
Chapman & Hall ltd., Londres, Royaume-Uni (1948)

- [53] Burrows M. C.
Radiation Related to Oxygen-Hydrogen Combustion at High Pressure
 Tenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute,
 Pittsburgh, PA, USA, pp. 207-215 (1965)
- [54] Wolfhard H. G., Hinck E.
Elementary Processes in Low-Pressure Flames and their Relation to Rocket-Exhaust Radiation
 Eleventh Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute,
 Pittsburgh, PA, USA, pp. 589-595 (1967)
- [55] Porter R. P., Clark A. H., Kaskan W. E., Browne W. E.
A Study of Hydrocarbon Flame
 Eleventh Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute,
 Pittsburgh, PA, USA, pp. 907-917 (1967)
- [56] Becker K. H., Kley D., Norstrom R. J.
OH Chemiluminescence in Hydrocarbon Flame*
 Twelfth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute,
 Pittsburgh, PA, USA, pp. 405-413 (1969)
- [57] Dandy D. S., Vosen S. R.
Numerical and Experimental Studies of Hydroxyl Radical Chemiluminescence in Methane-Air Flames
 Combust. Sci. And Techn., Vol. 82, pp. 131-150 (1992)
- [58] Zeegers P. J. Th., Alkemade C. Th. J.
Chemiluminescence of OH Radical and K atom by radical Recombination in Flames
 Tenth Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute,
 Pittsburgh, PA, USA, pp. 33-40 (1965)
- [59] Tabayashi K., Shobatake K.
Dissociative Excitation of Water by Metastable Rare Gas Atoms:

$$\text{Rg}({}^3\text{P}_{0,2}) + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{Rg} + \text{OH}({}^2\Sigma^+) + \text{H} \quad (\text{Rg} = \text{Ar}, \text{Kr})$$
 J. Chem. Phys., Vol. 88, No. 2, pp. 835-844 (1988)

- [60] Ho G. H., Golde M. F.
Experimental Study of the Reactions of $N_2(A^3\Sigma_u^+)$ with H atom and OH Radicals
J. Chem. Phys., Vol. 95, No. 12, pp. 8866-8870 (1991)
- [61] Garland N. L., Crosley D. R.
On the Collisional Quenching of Electronically Excited OH, NH and CH in Flames
Twenty-first Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute,
Pittsburgh, PA, USA, pp. 1693-1702 (1986)
- [62] Daily J. W.
OH Quenching Rates
Department of Mechanical Engineering, University of Colorado, Boulder, CO, USA
(1997)
http://spot.colorado.edu/~daily/LIF/Rates/Quenching/OH_Quenching/ohaquenchindex.html [28/06/2001]
- [63] Herzberg G.
Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules, Second Edition
D. Van Nostrand, Inc., Princeton, NJ, USA (1950)
- [64] Coxon J. A.
Optimum Molecular Constants and Term Values for the $X^2\Pi$ ($v \leq 5$) and $A^2\Sigma^+$ ($v \leq 3$) states of OH
Can. J. Phys., Vol. 58, pp. 933-949 (1980)
- [65] Chidsey I. L., Crosley D. R.
Calculated Rotational Transition Probabilities for the A-X system of OH
J. Q. S. R. T., Vol. 23, pp. 187-199 (1980)
- [66] Dimpfl W. L., Kinsey J. L.
Radiative Lifetimes of $OH(A^2\Sigma)$ and Einstein Coefficients for the A-X system of OH and OD
J. Q. S. R. T., Vol. 21, pp. 233-241 (1979)

- [67] Crosley D. R., Lengel R. K.
Relative Transition Probabilities and the Electronic Transition Moment in the A-X System of OH
 J. Q. S. R. T., Vol. 15, pp. 579-591 (1975)
- [68] Vitikin E. I., Karelin V. G., Kirillov A. A., Suprun A. S., Khadyka Ju. V.
A Physico-Mathematical Model of Rocket Exhaust Plumes
 Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 40, No. 5, pp. 1227-1241 (1997)
- [69] Clyne M. A. A., Trush B. A.
The Kinetics of the Carbon Monoxide Flame Band
 Ninth Symposium (International) on Combustion, Academic Press, New York, NY, USA, pp. 1693-1702 (1963)
- [70] Grillo, A., Slack, M.
CO + O Chemiluminescence: Rate Coefficient and Spectral Distribution
 Proceedings of the 13th International Symposium on Shock Tubes and Waves, State University of New York Press, Albany, NY, USA, pp. 576-584 (1982)
- [71] Guidpati M. S.
Photochemically Induced Electronic-To-Electronic Energy Transfer in Germinate CO \cdots O van der Waals Pair Generated through Vacuum Ultraviolet Photolysis of CO₂ in Ar Matrices
 J. Phys. Chem. A, Vol. 101, pp. 2003-2009 (1997)
- [72] Pravilov A. M., Smirnova L. G.
Spectral Distribution of the Chemiluminescence Rate Constant in the O(³P)+CO(+M) and O(³P)+NO(+He) Reactions
 Kinetika i Kataliz, Vol. 19, No. 5, pp. 1115-1122 (1978)
- [73] Eremin A. V., Ziborov V. S.
Nonequilibrium Radiation from the CO₂ band (¹B₂-X¹Σ_g⁺) in Shock-Heated Flows
 Shock Waves, Vo. 3, pp. 11-17 (1993)

- [74] Pravilov A. M., Smirnova L. G., Sumbaev I. G.
Chemiluminescence Spectrum and Rate Constant in the Action of Atomic Oxygen on Carbon Monoxide in Helium at 20°C
Russian J. Phys. Chem., Vol. 52, No. 8, pp.1082-1084 (1978)
- [75] Slack M., Grillo A.
High Temperature Rate Coefficient Measurements of CO + O Chemiluminescence Combustion and Flame, Vol. 59, pp. 189-196 (1985)
- [76] Dixon, R. N.
The Carbon Monoxide Band
Proc. Roy. Soc. A, Vol. 275, pp. 431-446 (1963)
- [77] Galaktinov I.I.
Hot Bands in the CO₂ Molecule in the UV absorption spectrum
Opt. Spectroscop. (USSR), Vol. 59, No. 6, pp. 706-708 (1986)
- [78] Eremin A. V., Ziborov V. S., Naboko I. M.
Using CO₂ Bands for the Diagnostics of a Collisionnally Heated Gas
Opt. Spectroscop. (USSR), Vol. 67, No. 3, pp. 329-331 (1990)
- [79] Kuentzmann P.
Formation de la phase condensée dans un propulseur à propergol solide métallisé
Note technique ONERA n° NT 210 (1973)
- [80] Zhang P. H., Chang R. Z., Wei Z., Cao H., Zhou X. N.
The Melting Point, Latent Heat of Solidification and Enthalpy for Both Solid and Liquid α -Al₂O₃ in the range 550-2400 K
Int. J. Thermophys., Vol. 7, No. 4, pp. 811-819 (1986)
- [81] Anfimov N. A., Karabadjak G.F., Khmelinin B. A., Plastinin Y.A., Rodionov A.V.
Analysis of Mechanisms and Nature of Radiation from Aluminum Oxide in Different Phase States in Solid Rocket Exhaust Plumes
AIAA paper n°AIAA-93-2818 (1993)

- [82] Bukaemskii A. A., Beloshapko A. G., Puzyr A. P.
Physicochemical Properties of Al_2O_3 Powder Produced by Explosives Synthesis
Combustion Explosion and Shock Waves, Vol. 36, No. 5, pp. 660-666 (2000)
- [83] Kim H.O., Laredo D., Netzer D.W.
Measurement of Submicrometer Al_2O_3 Particles in Plumes
App. Opt., Vol. 32, No. 23, 6834-40 (1993).
- [84] Laredo D., Netzer D. W.
The Dominant Effect of Alumina on Nearfield Plume Radiation
J. Q. S. R. T., Vol. 50, No. 5, pp. 511-530 (1993)
- [85] Laredo D., McCorie J. D., Vaughn J. K., Netzer D. W.
Motor and Plume Particle Size Measurements in Solid Propellant Micromotors
J. Propulsion and Power, Vol. 10, No. 3, p. 410-417 (1994)
- [86] Hansen J. E., Travis L. D.
Light Scattering in Planetary Atmosphere
Space Sci. Rev., Vol. 16, pp. 527-610 (1974)
- [87] Van de Hulst H. C.
Light Scattering by Small Particles
Dover Publications, New York, NY, USA (1981)
- [88] Wiscombe W. J.
Improved Mie Scattering Algorithms
App. Opt., Vol. 19, No. 9, pp. 1505-1509 (1980)
- [89] Krishnan S., Weber J. K. R., Schiffman R. A., Nordine P., Reed R. R.
Refractive Index of Liquid Aluminum Oxide at 0.6328 μm
J. Am. Ceram. Soc., Vol. 74, No. 4, p. 881-883 (1991)
- [90] Malitson I. H.
Refraction and Dispersion of Synthetic Sapphire
J. Opt. Soc. Am., Vol. 52, No. 12, pp. 1377-1379 (1962)

- [91] Bauer E., Carlson D.J.
Mie Scattering Calculations for Micron Size Alumina and Magnesia Sphere
J. Q. S. R. T., Vol. 4, pp. 363-374 (1964)
- [92] Gryvnack D. A., Burch D. F.
Optical and Infrared Properties of Al_2O_3 at Elevated Temperature
J. Opt. Soc. Am., Vol. 55, No. 6, pp. 625-629 (1965)
- [93] Plass G. N.
Temperature Dependence of the Mie Scattering and Absorption Cross Section for Aluminum Oxide
App. Opt., Vol. 4, No. 12, p. 1616-1619 (1965)
- [94] Parry D. L., Brewster M. Q.
Optical Constants and Size of Propellant Combustion Aluminum Oxide (Al_2O_3) Smoke
AIAA paper n° AIAA-88-3350 (1988)
- [95] Saladino A. J., Farmer R. C.
Radiation/Convection Coupling in Rocket Plume Analysis
Rapport n° SECA-FR-93-10, SECA, Inc., Huntsville, AL, USA (1993)
- [96] Mularz E. J., Yuen M. C.
An Experimental Investigation of Radiative Properties of Aluminum Oxide Particle
J. Q. S. R. T., Vol. 12, pp. 1553-1568 (1972)
- [97] Mott N. F., Davis E. A.
Electronic Processes in Non-Crystalline Materials
Clarendon Press, Oxford, Royaume-Uni (1971)
- [98] Skettrup T.
Urbach's Rule from Thermal Fluctuations in the Band-Gap Energy
Phys. Rev., Vol. 18, No. 6, pp. 2622-2631 (1978)
- [99] Konopka W. L., Reed R. A., Calla V.S.
Measurement of Infrared Optical Properties of Al_2O_3 Rocket Particles
AIAA paper n° AIAA-83-1568 (1983)

- [100] Weber J. K. R., Krishnan S., Anderson C. D., Nordine P. C.
Spectral Absorption Coefficient of Molten Aluminum Oxide from 0.385 to 0.780 μm
J. Am. Ceram. Soc., Vol. 78, No. 3, pp. 583-587 (1995)
- [101] Plastinin Y., Sipatchev H., Karabadzhak G., Khmelinin B., Khlebnikov A., Shishkin Y
Influence of Alumina Particles' Phase Transition on Its Radiation in the Middle Infrared and Ultraviolet Regions of Spectrum
AIAA paper n° 2000-0735 (2000)
- [102] Koo. J. H.
A review of Particle Sizing Methods in Rocket Propulsion
24th JANNAF Combustion Meeting, CPIA pub. 476, The Johns Hopkins University/CPIA, Columbia, MD, USA (1987)
- [103] Netzer D. W., Diloreto V. D., Dubrov E.
Particle Behavior in Solid Propellant Rocket
17th JANNAF Combustion Meeting, Vol. 1, CPIA pub. 329, The Johns Hopkins University/App. Phys. Lab./CPIA, Laurel, MD, USA (1980)
- [104] Uthe E. E.
Particle Sizer Evaluations Using Multiwavelength Extinction Measurement
App. Opt., Vol. 21, p. 454 (1982)
- [105] Traineau J.C., Kuentzmann P., Prevost M., Tarrin P., Delfour A.
Particle Size Measurement in a Subscale Motor for the Ariane 5 Solid Rocket Booster
AIAA paper n° AIAA-92-3049 (1992)
- [106] Sun F., Lewis J. W.
Simplex Deconvolution of Particle-Size Distribution Functions from Optical Measurements
App. Opt., Vol. 34, No. 36, pp. 8437-8446 (1995)

- [107] Wang J., Hallet F. R.
Spherical Particle Size Determination by Analytical Inversion of the UV-Visible-NIR Extinction Spectrum
App. Opt., 35, p. 193 (1996)
- [108] Hespel L., Delfour A.
Mie Light-Scattering Granulometer with Adaptive Numerical Filtering
App. Opt., Vol. 39, No. 36, pp. 6897-6917 (2000)
- [109] Dobbins R. A., Stand L. D.
A Comparison of Two Methods of Measuring Particle Size of Al₂O₃ Produced by a Small Rocket Motor
AIAA J., Vol. 8, No. 9, pp. 1544-1550 (1970)
- [110] Farmer W.M., Schwartz F.A., Harwell K. E.
Particle Size Measurement in Solid Propellant Launch Cloud Size
JANNAF 13th Plume Technology Meeting, Vol. 1, The Johns Hopkins University/CPIA, Columbia, MD, USA (1982)
- [111] Cofer W. R., Purgold G. C., Winstead E. L., Edahl R. A.
Space Shuttle Exhausted Aluminum Oxide : A Measured Particle Size Distribution
J. Geophys. Res. Vol. 96, No. D9 p. 17371-17376 (1991)
- [112] Caldas M., Semião V.
Modelling of Scattering and Absorption Coefficients for a Polydispersion
Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol. 42, pp. 4535-4548 (1999)
- [113] Hermsen R. W.
Aluminum Oxide Particle Size for Solid Propellant Prediction
J. Spacecraft, 18, p. 483 (1981)
- [114] Golovitchev V. I.
Course on Spray Combustion
Department of Thermo and Fluid Dynamics, School of Mechanical Engineering, Chalmers University of Technology, Göteborg, Suède (2000)
http://www.tfd.chalmers.se/~valeri/Spray_comb/stLect_21-40.pdf [27/06/01]

- [115] Beiting E. J.
Predicted Optical Characteristics of Solid Rocket Motor Exhaust in the Stratosphere
J. Spacecraft and Rockets, Vol. 34, p. 311 (1997)
- [116] Borie V., Roblin A.
Modélisation du rayonnement des jets de missiles tactiques I. Etude préliminaire de l'émission UV.
DIFFUSION RESTREINTE
Rapport Technique de Synthèse n° RTS 48/4545 PY, ONERA (1996)
- [117] Van de Hulst H. C.
Multiple Light Scattering, Tables, Formulas and Applications, Vol. 1
Academic Press, New York, NY, USA (1980)
- [118] Baudoux P.-E., Roblin A., Chervet P.
New Approach for Radiative-Transfer Computations in Axisymmetric Scattering Hot Media
J. Thermophys. Heat Transfer, Vol. 15, No. 3, pp. 317-325 (2001)
- [119] Glorieux Benoît
Mesure de la densité, de la tension superficielle et de la viscosité de l'alumine liquide en fonction de la température et de l'environnement
Th., Sciences Physiques, Orléans (2000)

9. ANNEXES

9.1. GRANDEURS RADIOMETRIQUES : DEFINITIONS

Luminance : Puissance lumineuse surfacique angulaire, notée $R(\mathbf{s}, \Omega)$. La luminance représente la puissance d'un pinceau de lumière confiné dans l'angle solide $d\Omega$ et émis dans la direction Ω par un élément de surface $d\sigma$ situé en \mathbf{s} , comme indiqué sur la Figure 9.1.

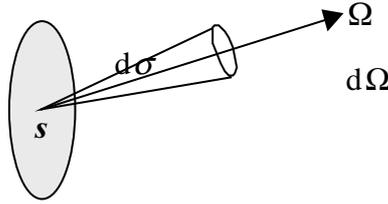


Figure 9.1 – Géométrie de la luminance $R(\mathbf{s}, \Omega)$

Intensité : Puissance lumineuse angulaire, notée $I(\Omega)$. L'intensité représente la puissance lumineuse émise par un objet dans la direction Ω . Lorsque cette source n'est pas ponctuelle, l'intensité est obtenue en intégrant le champ de luminance sur la surface de l'objet Σ selon la relation :

$$I(\Omega) = \iint_{\Sigma} R(\mathbf{s}, \Omega) d\sigma \quad (9.1)$$

Flux (hémisphérique) : Puissance lumineuse surfacique, notée $F(\mathbf{s})$. Le flux représente la puissance lumineuse émise perpendiculairement à l'élément de surface $d\sigma$. Le flux résulte donc de l'intégration angulaire du champ de luminance sur l'hémisphère dont le plan de coupe est défini par $d\sigma$, selon la relation :

$$F(\mathbf{s}) = \iint_{2\pi} R(\mathbf{s}, \Omega) (\vec{n}_{d\sigma} \cdot \vec{\Omega}) d\Omega \quad (9.2)$$

où $\vec{n}_{d\sigma}$ est la normale à l'élément de surface $d\sigma$, dont la géométrie est représentée la Figure 9.2.

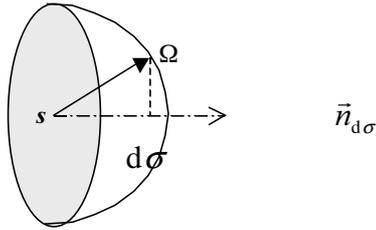


Figure 9.2 – Géométrie du flux $F(\mathbf{s})$

Irradiance : Puissance lumineuse surfacique, notée $G(\mathbf{s})$. L'irradiance représente la puissance lumineuse totale émise par l'élément de surface $d\sigma$. L'irradiance résulte donc de l'intégration angulaire du champ de luminance sur 4π sr selon la relation :

$$G(\mathbf{s}) = \iint_{4\pi} R(\mathbf{s}, \Omega) d\Omega \quad (9.3)$$

9.2. SOLUTION DU MODELE 2-FLUX

Le système d'équations homogènes associées du modèle 2-flux (*cf.* relation (2.19)) peut s'écrire d'une manière générale :

$$\frac{d\vec{\mathbf{R}}(z)}{dz} = \vec{\mathbf{G}} \cdot \vec{\mathbf{R}}(z) \quad (9.4)$$

où les vecteurs et les matrices sont définis comme suit :

$$\vec{\mathbf{R}}(z) = \begin{pmatrix} R^+(z) \\ R^-(z) \end{pmatrix} \quad (9.5)$$

$$\vec{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} -\gamma_+ & \gamma_- \\ -\gamma_- & \gamma_+ \end{pmatrix} \quad (9.6)$$

La solution peut s'écrire sous la forme :

$$\vec{\mathbf{R}}(z) = \sum_{i=1}^2 \vec{\mathbf{u}}_i e^{\alpha_i z} \quad (9.7)$$

où $\vec{\mathbf{u}}_i$ est le vecteur propre de $\vec{\mathbf{G}}$ associé à la valeur propre α_i .

Une telle solution n'est possible que si $\vec{\mathbf{G}}$ est diagonalisable, c'est-à-dire lorsque son déterminant est non nul. Ce dernier peut-être écrit sous la forme :

$$|\vec{\mathbf{G}}| = -\gamma_+^2 + \gamma_-^2 \quad (9.8)$$

Celui-ci est nul lorsque :

$$\gamma_+ = \gamma_- = \gamma \quad (9.9)$$

Dans la plupart des formulations du modèle 2-flux, ce cas correspond au problème du milieu purement diffusant ($\omega_0 = 1$). Lorsque la fonction source est définie par la relation :

$$S(z) = S_0 + S_1 z \quad (9.10)$$

la solution du système différentiel (2.19) défini avec la relation (9.9) peut être écrite de la manière suivante :

$$\begin{aligned} R_+(z) = \frac{\gamma z}{1 + \gamma Z} & \left[R_-(Z) + (\gamma R_+(0) + S_0)Z + \left(\gamma S_0 + \frac{S_1}{2} \right) Z^2 + \frac{1}{3} \gamma S_1 Z^3 \right] \\ & + R_+(0) - (\gamma R_+(0) - S_0)z - \left(\gamma S_0 - \frac{S_1}{2} \right) z^2 - \frac{1}{3} \gamma S_1 z^3 \end{aligned} \quad (9.11)$$

$$\begin{aligned}
 R_-(z) = \frac{1+\gamma z}{1+\gamma Z} & \left[R_-(Z) + (\gamma R_+(0) + S_0)Z + \left(\gamma S_0 + \frac{S_1}{2} \right) Z^2 + \frac{1}{3} \gamma S_1 Z^3 \right] \\
 & - (\gamma R_+(0) - S_0)z - \left(\gamma S_0 + \frac{S_1}{2} \right) z^2 - \frac{1}{3} \gamma S_1 z^3
 \end{aligned} \tag{9.12}$$

Ce calcul a été réalisé à l'aide de Maple[®] V Release 5.1.

9.3. PROPRIETES MATHÉMATIQUES DES HARMONIQUES SPHÉRIQUES

Dans le code SHDOM, le passage de l'expression des champs de rayonnement en fonction d'ordonnées discrètes à leur développement sur une base d'harmoniques sphériques réelles $Y_l^m(\mu, \phi)$ fait appel à la relation d'orthonormalité (3.15). A un facteur de phase près, les éléments de cette base peuvent être exprimés de manière univoque, pour des valeurs de l et de $|m|$ constantes, en fonction des harmoniques sphériques complexes $\tilde{Y}_l^m(\mu, \phi)$ définies par [50] :

$$\tilde{Y}_l^m(\mu, \phi) = \tilde{\gamma}_l^m p_l^{|m|}(\mu) e^{im\phi} \quad (9.13)$$

Avec :

$$\tilde{\gamma}_l^m = \begin{cases} (-1)^m \frac{\gamma_l^m}{\sqrt{2}} & \text{si } m > 0 \\ \gamma_l^0 & \text{si } m = 0 \\ \frac{\gamma_l^m}{\sqrt{2}} & \text{si } m < 0 \end{cases} \quad (9.14)$$

De ce fait, la relation (3.14) est équivalente à :

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\mu \tilde{Y}_l^{m'*}(\mu, \phi) \tilde{Y}_l^m(\mu, \phi) \\ &= \frac{\tilde{\gamma}_l^{m'} \tilde{\gamma}_l^m}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} d\phi \int_{-1}^1 p_l^{|m'|}(\mu) p_l^{|m|}(\mu) d\mu \\ &= \delta_{l'l'} \delta_{mm'} \end{aligned} \quad (9.15)$$

La relation (3.15) est donc vérifiée si et seulement si :

$$\tilde{\gamma}_l^{m'} \tilde{\gamma}_l^m \sum_{j=1}^{N_\mu} \omega_j p_l^{m'}(\mu_j) p_l^m(\mu_j) \sum_{k=1}^{\hat{N}_{\phi,j}} \bar{\omega}_{j,k} e^{i(m-m')\phi_k} = \delta_{l'l'} \delta_{mm'} \quad (9.16)$$

La taille de la base d'harmoniques sphériques est donnée par les entiers L et M , représentant respectivement la valeur maximale de l et $|m|$. Dans la suite de ce paragraphe, on présente le lien entre les résolutions azimutales et zénithales d'une quadrature angulaire de type Legendre-Gauss et la troncature de la base d'harmoniques sphériques.

9.3.1. Conditions azimutales

Dans le code SHDOM, le nombre d'azimuts diminue à mesure que les ordonnées discrètes se rapprochent du zénith afin d'économiser du temps de calcul puisque la

dépendance azimutale est de moins en moins importante. Les résultats obtenus par cette approximation sont considérés comme étant très proche de ceux obtenus en conservant constant le nombre d'azimuts. Dans cette dernière hypothèse la relation d'orthonormalité azimutale s'écrit :

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\phi} d\phi = \frac{1}{N_\phi} \sum_{k=1}^{N_\phi} e^{2i(m-m')\frac{k-1}{N_\phi}\pi} = \delta_{mm'} \quad (9.17)$$

Lorsque $m' = m$, cette relation est toujours vérifiée puisqu'elle correspond à la relation de normalisation des poids de quadratures azimutaux. Si $m' \neq m$, la relation (8.14) peut se réécrire en utilisant les propriétés des séries géométriques par la relation :

$$\frac{1 - e^{2i(m-m')\pi}}{1 - e^{2i\frac{m-m'}{N_\phi}\pi}} = 0 \quad (9.18)$$

Cette relation est toujours vraie sauf si le dénominateur $1 - e^{2i\frac{m-m'}{N_\phi}\pi}$ est nul. Ceci a lieu lorsque $\frac{m-m'}{N_\phi}$ est entier. Cette condition est vérifiée pour la première fois lorsque $|m-m'| = N_\phi$. Par conséquent, les moments azimutaux des harmoniques sphériques doivent obéir à l'inégalité suivante :

$$|m-m'| \leq N_\phi - 1 \quad (9.19)$$

Comme $|m-m'|$ est compris entre 1 et $2M$, les harmoniques sphériques sont soumises à la relation :

$$2M \leq N_\phi - 1 \quad (9.20)$$

Vue la parité de N_ϕ , le développement de la base d'harmoniques sphériques est donc borné par :

$$M = \frac{N_\phi}{2} - 1 \quad (9.21)$$

9.3.2. Conditions relatives aux angles zénithaux

Après avoir mis en évidence la dépendance azimutale de la taille de la base des harmoniques sphériques, il faut établir le lien entre L et N_μ en déterminant dans quelles conditions la relation suivante est vérifiée :

$$\tilde{\gamma}_{l'}^m \tilde{\gamma}_l^m \int_{-1}^1 p_{l'}^{(m)}(\mu) p_l^{(m)}(\mu) d\mu = \tilde{\gamma}_{l'}^m \tilde{\gamma}_l^m \sum_{j=1}^{N_\mu} \omega_j p_{l'}^{(m)}(\mu_j) p_l^{(m)}(\mu_j) = \delta_{ll'} \quad (9.22)$$

où les μ_j sont les racines du polynôme de Legendre de degré N_μ . Le produit des deux fonctions de Legendre associées de la relation (8.19) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} p_{l'}^{(m)}(\mu) p_l^{(m)}(\mu) &= (1-\mu^2)^{|m|} \frac{d^{|m|} p_{l'}(\mu)}{d\mu^{|m|}} \frac{d^{|m|} p_l(\mu)}{d\mu^{|m|}} \\ &= \left[(1-\mu)^{|m|} \frac{d^{|m|} p_{l'}(\mu)}{d\mu^{|m|}} \right] \left[(1+\mu)^{|m|} \frac{d^{|m|} p_l(\mu)}{d\mu^{|m|}} \right] \end{aligned} \quad (9.23)$$

$p_{l'}^{(m)}(\mu) p_l^{(m)}(\mu)$ est donc le produit d'un polynôme de degré l' et de degré l . Il peut être exprimé sous la forme d'une somme de produits de polynômes de Legendre de degré respectif inférieur à l et à l' . Or, par construction, la quadrature de Legendre-Gauss vérifie la relation suivante :

$$\forall l \leq N_\mu - 1, \forall l' \leq N_\mu - 1, \int_{-1}^1 p_{l'}(\mu) p_l(\mu) d\mu = \sum_{j=0}^{N_\mu} w_j p_{l'}(\mu_j) p_l(\mu_j) = \frac{\delta_{ll'}}{\gamma_l^2} \quad (9.24)$$

Par conséquent, la base d'harmoniques sphériques est bornée par :

$$L = N_\mu - 1 \quad (9.25)$$

9.4. LA METHODE DELTA-M

Dans de nombreux problèmes de diffusion, la fonction de phase est fortement piquée vers l'avant. Par exemple, les particules d'alumine présentes dans un jet de propulseurs ont un paramètre d'asymétrie compris typiquement entre 0,7 et 0,9 dans le proche UV. Dans ce cas, *SHDOM* et de nombreux autres modèles convergent difficilement. La méthode Delta-M [42] simplifie le calcul en décomposant la fonction de phase en une combinaison linéaire d'un pic de diffusion avant, et d'une nouvelle fonction de phase $\tilde{P}(\Omega', \Omega)$ lissée suivant la relation :

$$P(\Omega', \Omega) = 4\pi f \delta(\Omega' - \Omega) + (1 - f) \tilde{P}(\Omega', \Omega) \quad (9.26)$$

En toute rigueur la fonction de phase s'exprime en série de polynôme de Legendre par la relation :

$$P(\cos \Theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \chi_l p_l(\cos \Theta) \quad (9.27)$$

La fonction de phase lissée est définie par :

$$\tilde{P}(\cos \Theta) = \sum_{l=0}^L \tilde{\chi}_l p_l(\cos \Theta) \quad (9.28)$$

Le pic de diffusion avant peut s'écrire :

$$4\pi f \delta(\cos \Theta - 1) = f \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) p_l(\cos \Theta) \quad (9.29)$$

Pour que la troncature du développement de la fonction de phase lissée en série de Legendre soit valable, il est nécessaire de s'assurer de la nullité du coefficient $\tilde{\chi}_{L+1}$ afin de limiter l'apparition d'artefacts numériques tels que des valeurs négatives pour la fonction de phase. Or, si on applique la relation (9.26) à l'ordre $L + 1$, on peut écrire :

$$\chi_{L+1} = (1 - f) \tilde{\chi}_{L+1} + [2(L + 1) + 1] f \quad (9.30)$$

Aussi le facteur f dépend-il du développement de la fonction de phase en polynômes de Legendre selon la relation :

$$f = \frac{\chi_{N_L+1}}{2(L+1)+1} \quad (9.31)$$

Lorsque la relation (9.26) est appliquée aux $l \leq L$, on peut écrire :

$$\chi_l = (1 - f) \tilde{\chi}_l + (2l + 1) f \quad (9.32)$$

Le développement de la fonction de phase lissée en série de polynômes de Legendre, est donc donnée par :

$$\tilde{\chi}_l = \frac{\chi_l - f(2l+1)}{1-f} \quad (9.33)$$

En utilisant la décomposition de la fonction de phase, l'ETR peut donc être réécrite sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} R_\lambda(\mathbf{s}, \Omega) &= K_{\text{Ext}} \left[-R(\mathbf{s}, \Omega) + \frac{\omega_0}{4\pi} \int_{-1}^1 \left[4\pi f \delta(\mu' - \mu) + (1-f) \tilde{P}(\Omega, \Omega') \right] R(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \right] + \tilde{J}(z, \Omega) \\ &= K_{\text{Ext}} \left[-(1-f\omega_0)R(\mathbf{s}, \Omega) + \frac{\omega_0}{4\pi} (1-f) \int_{4\pi} \tilde{P}(\Omega, \Omega') R(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \right] + \tilde{J}(z, \Omega) \quad (9.34) \\ &= \frac{K_{\text{Ext}}}{1-f\omega_0} \left[-R(\mathbf{s}, \Omega) + \frac{1-f}{1-f\omega_0} \frac{\omega_0}{4\pi} \int_{4\pi} \tilde{P}(\Omega, \Omega') R(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \right] + \tilde{J}(z, \Omega) \end{aligned}$$

Les paramètres de l'équation de transfert radiatif sont modifiés suivant les relations :

$$\text{Coefficient d'extinction :} \quad \tilde{K}_{\text{Ext}} = (1-f\omega_0) K_{\text{Ext}} \quad (9.35)$$

$$\text{Epaisseur optique :} \quad d\tilde{\tau} = (1-f\omega_0) d\tau \quad (9.36)$$

$$\text{Albédo de diffusion simple :} \quad \tilde{\omega}_0 = \frac{1-f}{1-f\omega_0} \omega_0 \quad (9.37)$$

L'équation de transfert radiatif devient alors :

$$\frac{d}{d\tilde{\tau}} R(\mathbf{s}, \Omega) = -R(\mathbf{s}, \Omega) + \tilde{J}(\mathbf{s}, \Omega) + \frac{\tilde{\omega}_0}{4\pi} \int_{4\pi} \tilde{P}(\Omega', \Omega) R(\mathbf{s}, \Omega') d\Omega' \quad (1)$$

La résolution est semblable à l'ETR originale. Comme l'albédo de diffusion simple est plus petit, la part de l'intégrale de diffusion dans la fonction source $\tilde{J}(\mathbf{s}, \Omega)$ est moins importante, ce qui accélère la convergence des résultats. On rappelle que la méthode Delta-Eddington présentée au chapitre 2 est un cas particulier de la méthode Delta- M .

9.5. PROCEDURE D'ENTREE DES DONNEES DANS LE CODE SHDOM

La Figure 9.3 représente l'algorithme d'entrée des données nécessaire à l'initialisation du code SHDOM.

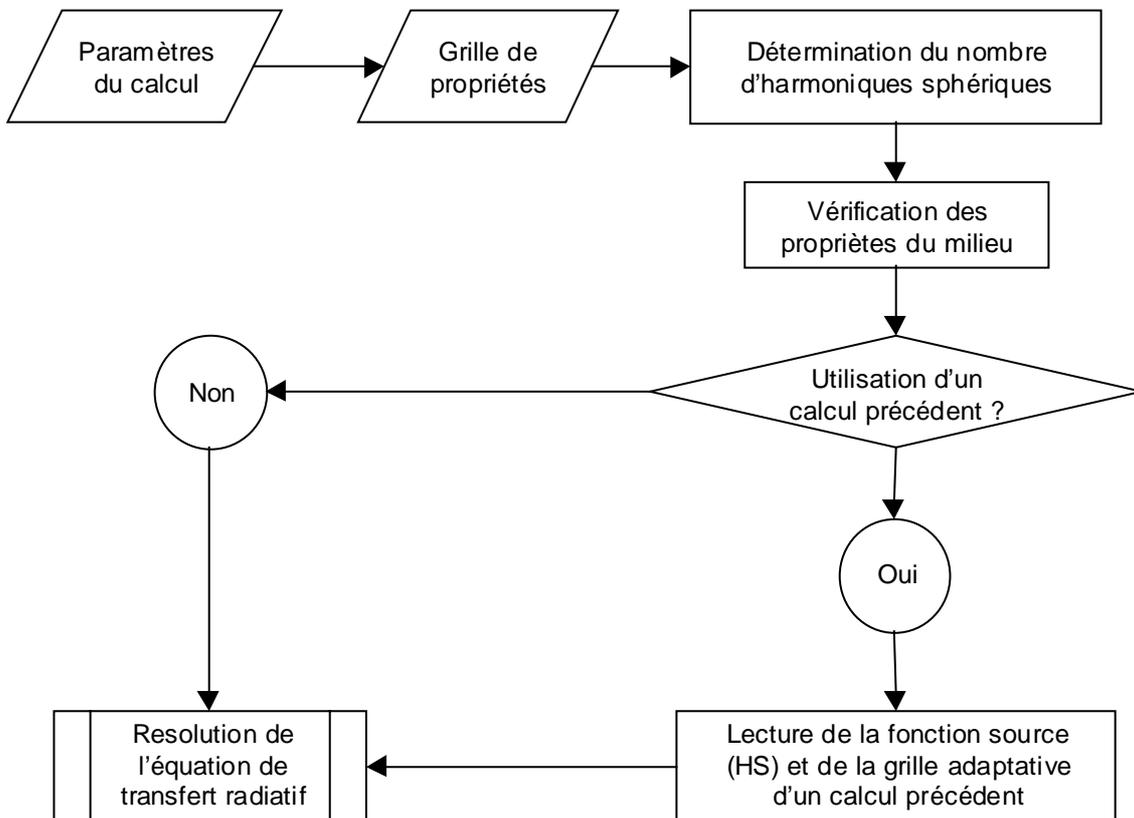


Figure 9.3 - Algorithme d'entrée des données.

Les paramètres du calcul sont :

- La résolution angulaire (N_μ, N_ϕ) ;
- Les conditions aux limites (ouvertes ou périodiques selon X ou Y) ;
- Le mode de calcul (3D, 2D selon les plans (X, Z) ou (Y, Z) ou pixels indépendants selon Z) ;
- L'utilisation ou non de la méthode Delta-M ;
- Le critère de convergence Δ_{Sol} ;
- Le nombre d'itérations maximal autorisé ;
- Le critère de découpage C ;

La forme de la grille de propriétés utilisée dans les calculs de jets de moteur-fusée comprend :

- Une cartographie de discrétisation spatiale ;
- La liste des fonctions de phase utilisées (développées sur une base de polynômes de Legendre) ;
- La carte des propriétés en fonction des numéros des abscisses de la cartographie spatiale comprenant :
 - Les puissances volumiques et angulaires de chimiluminescence (ou concentrations et températures des gaz lorsque le modèle numérique permettant d'évaluer l'émission de chimiluminescence est implanté dans SHDOM),
 - Les températures des particules,
 - Les coefficients d'extinction,
 - Les albédos de diffusion simple,
 - Les numéros de la fonction de phase associée.

A partir de la résolution angulaire, SHDOM détermine la longueur de la base d'harmoniques sphériques. SHDOM vérifie ensuite la conformité de la grille de propriétés avec ce qu'autorise la théorie du transfert radiatif. En particulier, SHDOM veille à ce que l'albédo de diffusion simple et la valeur absolue du paramètre d'asymétrie soient inférieurs à 1. Selon le désir de l'utilisateur, la fonction source, le champ de luminance (développés en harmoniques sphériques) et la grille adaptative de la dernière itération d'un précédent calcul peuvent être introduits pour initialiser le calcul courant.

9.6. INTERPOLATION BILINEAIRE DES PROFILS AXISYMETRIQUES

Les différentes méthodes pour effectuer l'interpolation bilinéaire d'un profil axisymétrique dans la grille de propriétés optique dépendent de sa géométrie. Dans cette étude, deux types de maillage de profil ont été retenus :

- Les maillages « cartésiens » où le pas radial (c'est-à-dire en r) est indépendant de la distance axiale z ;
- Les maillages « trapézoïdaux » où le pas radial (c'est-à-dire en r) dépend de la distance axiale z . Les mailles du profil ont donc une forme de trapèze dont les côtés parallèles sont perpendiculaires à l'axe du jet [11].

Dans le premier cas, un premier remaillage est effectué par interpolation linéaire de façon à faire coïncider l'échelle axiale du profil avec celle de la grille de propriétés. Ainsi, une seconde interpolation linéaire radiale suffit pour obtenir le résultat souhaité. Le second exemple présente un certain nombre de difficultés supplémentaires comme celle du repérage de la maille concernée et l'interpolation dans des mailles en forme de trapèze. La suite de ce paragraphe présente deux approches permettant d'effectuer une telle opération.

Soient un point M du profil aérothermochimique et $A_1A_2A_4A_3$ la maille trapézoïdale associée dont les sommets sont les nœuds du profil axisymétrique original formant le plus petit trapèze entourant le point M . La géométrie du problème est représentée sur la Figure 9.4. L'axe ($z'z$) représente la direction axiale et l'axe ($r'r$), la direction radiale du profil.

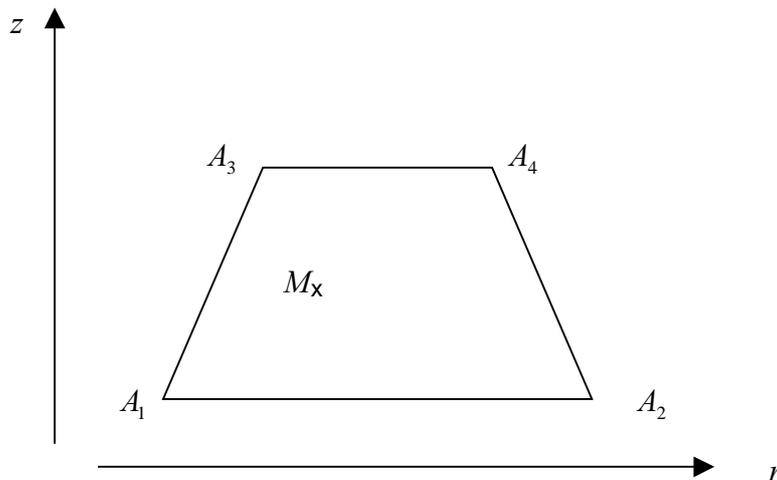


Figure 9.4 - Géométrie de la maille trapézoïdale $A_1A_2A_4A_3$

z et r sont les abscisses du point M dont l'ordonnée f représente la propriété aérothermochimique que l'on cherche à évaluer. Les $\{z_i\}_{i=1...4}$ et les $\{r_i\}_{i=1...4}$ sont les abscisses respectives des nœuds du profil $\{A_i\}_{i=1...4}$ et les $\{f_i\}_{i=1...4}$ sont leurs ordonnées respectives. La dépendance spatiale de l'ordonnée f obéit à une loi bilinéaire selon la relation :

$$f = a z r + b z + c r + d \quad (9.38)$$

Les coefficients a , b , c et d sont des constantes internes à la maille. Elles peuvent être déterminées par inversion du système suivant :

$${}_{i=1...4}\{f_i = a z_i r_i + b z_i + c r_i + d \quad (9.39)$$

La solution de ce système est donnée par les relations :

$$\left\{ \begin{array}{l} a = \frac{-\frac{f_2 - f_1}{r_2 - r_1} + \frac{f_4 - f_3}{r_4 - r_3}}{z_3 - z_1} \\ b = \frac{\frac{f_2 r_1 - f_1 r_2}{r_2 - r_1} - \frac{f_4 r_3 - f_3 r_4}{r_4 - r_3}}{z_3 - z_1} \\ c = \frac{z_3 \frac{f_2 - f_1}{r_2 - r_1} - z_1 \frac{f_4 - f_3}{r_4 - r_3}}{z_3 - z_1} \\ d = \frac{-z_3 \frac{f_2 r_1 - f_1 r_2}{r_2 - r_1} + z_1 \frac{f_4 r_3 - f_3 r_4}{r_4 - r_3}}{z_3 - z_1} \end{array} \right. \quad (9.40)$$

Lorsque le point M est situé sur l'axe $]A_1 A_2[$, une interpolation linéaire suffit. Cette dernière est donnée par la relation :

$$f = \frac{f_2(r - r_1) - f_1(r - r_2)}{r_2 - r_1} \quad (9.41)$$

Une autre technique consiste à circonscrire la maille par un rectangle $A'_1 A'_2 A'_4 A'_3$ dont les propriétés des sommets sont extrapolées linéairement à partir de la maille originelle. A l'intérieur de cette nouvelle maille qui est représentée sur la Figure 9.5, l'ordonnée f est supposée évoluer avec la position de M de la même façon que dans la maille originelle conformément à la relation (9.38).

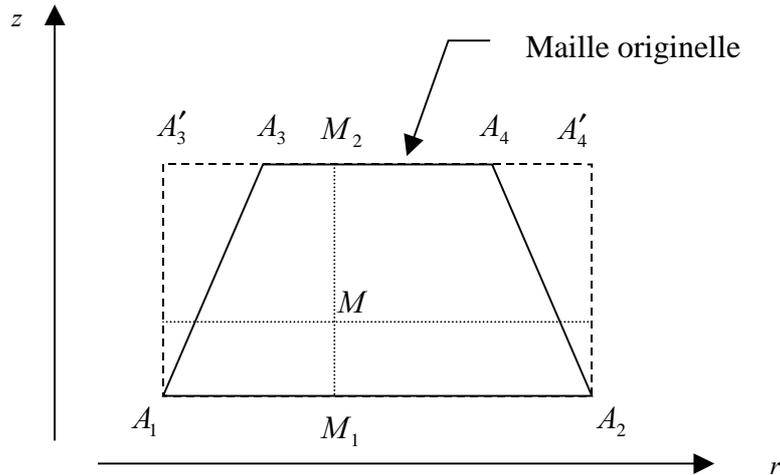


Figure 9.5 - Géométrie de la maille rectangulaire circonscrite

On définit les points M_1 et M_2 respectivement sur les segments $[A'_1A'_2]$ et $[A'_3A'_4]$ de façon à ce qu'ils possèdent la même abscisse radiale r que le point M et leurs ordonnées sont évaluées par interpolation linéaire le long des arêtes de la maille virtuelle. La valeur de l'ordonnée f en M peut donc être calculée par une interpolation linéaire effectuée le long du segment $[M_1M_2]$. Les calculs effectués avec la méthode analytique directe donnent exactement les mêmes résultats que cette dernière approche puisqu'elles reposent sur la même hypothèse d'évolution bilinéaire des propriétés du milieu. Cependant, la méthode analytique directe nécessite d'utiliser explicitement des solutions particulières du système linéaire (équation (9.38)) lorsque certains points de la maille sont confondus. La seconde approche est donc celle qui a été utilisée pour interpoler les maillages pour la simplicité de sa mise en œuvre et sa robustesse numérique.

9.7. ARTICLE

New Approach for Radiative-Transfer Computations in Axisymmetric Scattering Hot Media

Pierre-Emmanuel Baudoux,* Antoine Roblin,† and Patrick Chervet‡
 ONERA, 91761 Palaiseau, France

An atmospheric three-dimensional discrete ordinate method, called the Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method (SHDOM), is extended to nonequilibrium and axisymmetric media such as rocket plumes, which contain hot reactive gases and metallic oxide particles like alumina. A spherical harmonics base is used to improve the source function evaluation while solving the radiative-transfer equation. The source function includes the chemiluminescence radiation produced by gas reactions, the particles thermal radiation, and the in-scattering term. During the iteration process, the in-scattering term is evaluated with a spherical harmonics base using the radiance field calculated along discrete ordinates until the source function converges. Test cases in simple geometries, like plane parallel media or square enclosures, show the accuracy of SHDOM results according to others calculated by reference models. An extended Arrhenius law is used to model the middle-ultraviolet chemiluminescent radiation produced by the CO + O recombination. Finally, SHDOM is applied to the radiance field emitted by realistic rocket plume sections represented by infinite cylinders or finite cylindrical media shadowed by a mask representing the rocket body.

Nomenclature

A_λ	= radial profile function for temperature and chemiluminescence
A_λ^{\max}	= maximum of radial profile function A_λ
a	= chemiluminescence volumetric power parameter
$B_\lambda(T)$	= Planck function, $\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$
b	= thermal chemiluminescence volumetric power parameter, K
F^+	= upper hemispherical flux
F^-	= bottom “ground” hemispherical flux
\tilde{F}^+	= net ground hemispherical flux
g	= asymmetry parameter of the phase function
h	= Planck constant, $6.626\,068\,76(52) \times 10^{-34}$ J s
I_λ	= radiance, $\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$
I_λ^C	= chemiluminescent angular volumetric power, $\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-3} \mu\text{m}^{-1}$
$I_{0,\lambda}^C$	= chemiluminescent molar angular volumetric power, $\text{W sr}^{-1} \text{cm}^3 \text{mol}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$
J_λ	= emission source function, $\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$
\tilde{J}_λ	= total source function, $\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$
J_λ^S	= in-scattering source function, $\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$
L, M	= spherical harmonic base truncation numbers
l, m	= spherical harmonic order numbers
M	= molecule or atom in the gas phase
N	= number of discrete ordinates
N_μ	= number of zenith angles
N_ϕ	= maximum number of azimuthal angles
p_l	= l th-order Legendre polynomial
R_0^C	= chemiluminescent photon production rate, $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$
R_σ	= maximum radius of the cylinder containing particles, mm
s	= physical coordinate vector, m

T	= temperature, K
X', X	= x axis
Y', Y	= y axis
Y_l^m	= (l, m) spherical harmonics order
Z', Z	= z axis
Θ	= scattering angle
θ	= zenithal angle
λ	= wavelength, nm
ν	= radiation frequency, Hz
σ	= extinction coefficient, m^{-1}
τ	= optical depth
Φ	= scattering phase function, sr^{-1}
ϕ	= azimuthal angle
χ_l	= phase function Legendre coefficient
Ω	= direction vector
ω_0	= single scattering albedo

Introduction

RADIATIVE-TRANSFER modeling is needed in order to understand many physical problems such as heat transfer in furnaces or detectability of aircrafts and missiles. In most cases the optical signature of these flying objects, from infrared (IR) to UV comes from their motors' plume radiation.^{1–3} The middle UV domain is of practical interest because the sky background seen from the low Earth atmosphere can be considered completely dark caused by solar radiation absorption by stratospheric and tropospheric ozone layers. This darkness allows one to detect a rocket plume with a good contrast, especially in the so-called solar blind band located approximately between 240 to 290 nm. The study of detection performance in this band requires data on UV plume signatures for various flight conditions and rocket motor types. As experimental results are limited to a few conditions, signature modeling is highly required to encompass all situations of practical interest. This modeling is performed in two steps. First the aerothermochemical plume properties are calculated using a suitable flowfield model,^{4–6} and then the radiative-transfer equation (RTE) is solved, based on calculated pressure, temperature, and species concentrations. The plumes are generally considered as axisymmetric media where emission, absorption, and scattering from metallic oxide (e.g., alumina) take place. Whereas molecular vibrational bands and thermal emission from particles are the principal sources in the IR, chemiluminescence reactions may become the dominant radiation mechanism in the UV.^{1,3} In a rocket plume, reactions which result from a non-local

Received 23 March 2000; revision received 30 October 2000; accepted for publication 9 January 2001. Copyright © 2001 by the authors. Published by the American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., with permission.

*Ph.D. Candidate, Département d'Optique Théorique et Appliquée, Chemin de la Hunière; baudoux@onera.fr.

†Research Engineer, Département d'Optique Théorique et Appliquée, Chemin de la Hunière; roblin@onera.fr.

‡Research Engineer, Département d'Optique Théorique et Appliquée, Chemin de la Hunière; chervet@onera.fr.

thermodynamic equilibrium coming from the combustion inside the plume, produce minor unstable species like atomic oxygen or the hydroxyl radical. Consequently, it is necessary to include the contribution of the chemiluminescent emission produced by these species in the source function. The purpose of this paper is to present a new radiative-transfer model adapted to UV plumes signature calculation, where particle scattering and a chemiluminescent gas are present.

The main difficulty in solving the RTE is the evaluation of the in-scattering contribution, which represents the radiation scattered by particles from all directions into the line of sight. Many methods, whose differences depend mainly upon the way in which scattering is considered, have been proposed over the last three decades for solving the RTE in scattering and participating media.⁷ The zonal method⁸ and the Monte Carlo⁹ approach give accurate solutions, but computational time is so large that these techniques are restricted to simple geometric test cases and monochromatic or gray conditions. In the two-stream model,^{10,11} where the radiance field is evaluated in two opposite propagation directions, the RTE is solved analytically in homogeneous media. However, this model provides only radiance estimations because of its poor angular resolution, and it is restricted to one-dimensional geometry. In the six-stream model,¹² which is the simplest three-dimensional model, the RTE is evaluated in three orthogonal directions. Yet the determination of radiance angular dependence requires as many computations as the number of the lines of sight required. The angular resolution provided by this model is still limited. In the discrete ordinate method (DOM) angular dependence is sampled in many directions defined by a quadrature scheme such as S_N (Ref. 13) or Gauss-Legendre.¹⁴ Many authors have proposed ways to solve the DOM such as matrix inversion in plane parallel media¹⁵ or iterative methods for three-dimensional problems.¹⁶

Evans¹⁷ has developed an original extended iterative DOM for three-dimensional atmospheric problems called the Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method (SHDOM). This model evaluates the in-scattering contribution using a spherical harmonics base, whereas the RTE is integrated along discrete ordinates defined in a Gauss-Legendre quadrature scheme. This artifice allows an interpolation of the radiance angular dependence, accelerates the computational process, and requires less computational time and memory storage. This code has been first applied to thermal problems in atmospheric media such as cloudy scenes and to scattering of IR-visible solar radiation. Because of its flexibility, the SHDOM approach has been found to be easily extended to nonequilibrium axisymmetric media such as rocket plumes. This paper will present such an extension in the UV domain. In the next section the main SHDOM features will be presented with the new developments needed in order to determine UV signature of rocket plumes. The reader is referred to Evans' original work¹⁷ for details concerning SHDOM. Then, SHDOM results of simple validation test cases (plane parallel media and square enclosure) will be compared with results from other models published previously. After that the chemiluminescent reaction in the UV domain will be described. Finally, the modified SHDOM code will be applied to cylindrical media whose properties are similar to a realistic rocket plume.

Radiative Transfer Model

The monochromatic RTE describes the variation of the radiance field in a specified direction Ω through a small differential volume and can be written as

$$\frac{1}{\sigma(s, \lambda)} (\Omega \cdot \nabla) I_\lambda(s, \Omega) = -I_\lambda(s, \Omega) + J_\lambda(s, \Omega) + \frac{\omega_0(s, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(s; \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) I_\lambda(s, \Omega') d\Omega' \quad (1)$$

where $I_\lambda(s, \Omega)$ is the radiance at point s propagating in direction Ω ; $J_\lambda(s, \Omega)$ is the emission source function, which includes the particle thermal emission $[1 - \omega_0(s, \lambda)]B_\lambda(T_{\text{Particles}})$ and chemiluminescence from gases $I_\lambda^C(s, \Omega)$ added in the modified model; $\sigma(s, \lambda)$ is the local extinction coefficient; $\omega_0(s, \lambda)$ is the single scattering

albedo; and $\Phi(s; \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega)$ is the normalized scattering phase function. The chemiluminescence $I_\lambda^C(s, \Omega)$ is introduced in the RTE as a volumetric angular power. So the emission source function should be written as

$$J_\lambda(s, \Omega) = [1 - \omega_0(s, \lambda)]B_\lambda(T_{\text{Particles}}) + \frac{I_\lambda^C(s, \Omega)}{\sigma(s, \lambda)} \quad (2)$$

The in-scattering source function, which represents the radiation scattered by the particles from all directions into the direction of the line of sight, can be written as

$$J_\lambda^S(s, \Omega) = \frac{\omega_0(s, \lambda)}{4\pi} \int_{4\pi} \Phi(s; \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) I_\lambda(s, \Omega') d\Omega' \quad (3)$$

The total source function $\hat{J}_\lambda(s, \Omega)$, which includes the emission term $J_\lambda(s, \Omega)$ and the in-scattering source function $J_\lambda^S(s, \Omega)$, is defined according to the following relation:

$$\hat{J}_\lambda(s, \Omega) = J_\lambda(s, \Omega) + J_\lambda^S(s, \Omega) \quad (4)$$

In the SHDOM approach, extended to the UV domain, the RTE is solved following these steps:

1) Initialization is where the RTE is integrated spatially column after column using a two-stream model (δ -Eddington).¹⁸ The hemispherical fluxes are then converted to the first two moments of spherical harmonics of the radiance field.

2) The in-scattering source function $J_\lambda^S(s, \Omega)$ is evaluated with the spherical harmonics base using the radiance field calculated during the preceding step.

3) The total source function $\hat{J}_\lambda(s, \Omega)$, stored in the spherical harmonics base, is written in a discrete ordinates representation.

4) The RTE is integrated along each discrete ordinate with the total source function $\hat{J}_\lambda(s, \Omega)$ obtained during step 3, using a backward-ray scattering technique according to

$$I_\lambda(s, \Omega) = I_\lambda(0, \Omega) \exp \left[- \int_0^s \sigma(s', \lambda) ds' \right] + \int_0^s \exp \left[- \int_{s'}^s \sigma(s'', \lambda) ds'' \right] \sigma(s', \lambda) \hat{J}_\lambda(s', \Omega) ds' \quad (5)$$

5) The radiance field in discrete ordinates is converted to a spherical harmonic representation.

6) Steps 2–5 are continued until results converge according to a user-defined “solution criterion” based on an evaluation of the differences between current source function $\hat{J}_\lambda^{(n)}(s, \Omega)$ and the one calculated during the preceding iteration $\hat{J}_\lambda^{(n-1)}(s, \Omega)$.

7) The radiance field at a user-defined plane is extracted from the final source function field $\hat{J}_\lambda(s, \Omega)$ using the RTE integral form [Eq. (5)] as in step 4. The use of the spherical harmonics base allows the user to get the radiance field along other lines of sight than the SHDOM discrete ordinates.

The use of a real spherical harmonics base in SHDOM diagonalizes the phase function so that the in-scattering source function $J_\lambda^S(s, \Omega)$ can be written as

$$J_\lambda^S(s, \Omega) = \omega_0(s, \lambda) \sum_{l=0}^L \frac{\chi_l(s, \lambda)}{2l+1} \sum_{m=-M}^M I_{\lambda l}^m(s) Y_l^m(\Omega) \quad (6)$$

where (L, M) define the spherical harmonic base truncation, $I_{\lambda l}^m(s)$ is the (l, m) -order spherical harmonic coefficient of the radiance field, and $\chi_l(s, \lambda)$ the l th-order Legendre coefficient of the phase function defined by

$$\Phi(s; \lambda; \Omega' \rightarrow \Omega) \approx \sum_{l=0}^L \chi_l(s, \lambda) p_l(\cos \Theta) \quad (7)$$

The Gauss-Legendre quadrature scheme for discrete ordinates is defined by N_μ zenith angles with a maximum of N_ϕ azimuthal

angles (their number decreases as the zenith angle comes closer to the vertical direction). This user-defined setting determines the spherical harmonics truncation in accordance with

$$L = N_\mu - 1 \quad (8)$$

$$M = N_\phi/2 - 1 \quad (9)$$

This truncation preserves the spherical harmonics orthogonality in the angular quadrature scheme but may cause a misrepresentation of the particle scattering phase function leading to negative values. This situation is removed by applying the Delta-M method,¹⁹ which renormalizes the phase function.

Because of the use of a spherical harmonic base, the iterations take less operations than a classical DOM. If N is the number of discrete ordinates, SHDOM takes, at each iteration, approximately N operations to evaluate the scattering integral and $9N^{3/2}$ others for conversions between the discrete ordinates and the spherical harmonic base. A classical DOM needs $2N^2$ operations for the same computation. SHDOM also needs less memory storage than a classical DOM. For example, with an angular resolution defined using N_μ zenith angles and $N_\phi = 2N_\mu$ azimuthal angles, a classical DOM stores the source function along $2N_\mu^2$ discrete ordinates. For the same angular resolution SHDOM reduces this number to N_μ^2 moments of spherical harmonics.

In the general case the medium's radiative properties are input in a property grid whose spatial structure is regular (even in X and Y , even or not in Z). During RTE integration [Eq. (5)], the extinction coefficient $\sigma(s', \lambda)$ and its product with the total source function $\sigma(s', \lambda)\hat{J}_\lambda(s', \Omega)$ are assumed to be linear across every grid cell. If the total source function $\hat{J}_\lambda(s', \Omega)$ is too heterogeneous and if the grid cell's optical thickness is higher than a user-defined splitting criterion, an adaptive grid algorithm is used to split the grid. The upper surface can be represented as a totally absorbing layer, which usually corresponds to the "sky" in atmospheric problems. In the same way the lower surface can be represented as a Lambertian "ground." The horizontal boundary conditions can be either "periodic" or "open." If boundary conditions are periodic, a ray exiting a vertical wall is continued on the opposite side as a new incident ray. Consequently the scene can be represented as an infinite mosaic whose period is given by the property grid size. In open boundary conditions radiative transfer is computed in two-dimensional mode on the vertical walls representing the infinite atmosphere surrounding the medium.

Computations on finite length axisymmetric media (e.g., rocket plumes) are performed with the vertical symmetric axis, and the vertical cell walls are transparent so that they do not affect the computational results with open boundary conditions. On the contrary, the symmetric axes of square enclosures or of infinite cylindrical media are horizontal in order to use the periodic boundary conditions. Because SHDOM has been initially developed in an atmospheric medium, it gives the radiance field only for a horizontal plane. Consequently, the code has been modified to allow radiance calculations in the vertical plane including the case where the line of sight is horizontal. In this way the radiance field cartography of a rocket plume can be rebuilt for any aspect angle. The plume intensity represents the whole radiative angular power received by a detector. It is calculated by surface integration of the radiance field, taking account of the perspective effect depending on the viewing angle.

Validation Test Cases

The aim of the validation test cases presented here is to compare the accuracy of SHDOM with other radiative-transfer models in well-known simple media. Two types of geometry are retained. Plane parallel media are used for comparison with the two-stream model, the six-stream model, and a reference DOM. These models have been used previously for rocket plume signatures.^{12,20} Then, square enclosures are used to assess the SHDOM accuracy according to results from Liu et al.²¹ More test cases have been performed by Evans¹⁷ in order to establish the accuracy of SHDOM in vari-

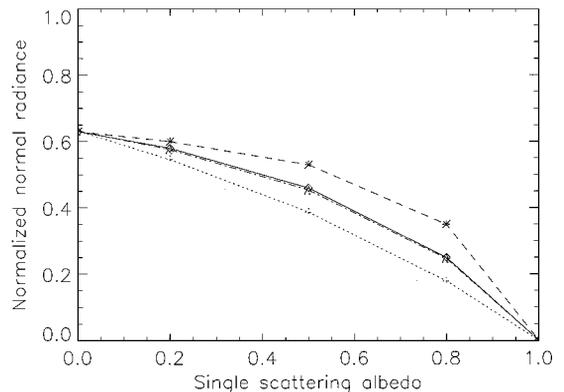


Fig. 1 Normal radiance $I_\lambda(z=Z; \theta=0)/B_\lambda(T_0)$ vs single scattering albedo for a uniform plane parallel medium ($\tau=1$, isotropic phase function) [$+ \cdots +$, two stream¹²; $*- - *$, six stream¹²; \diamond — \diamond , N stream¹²; and $\triangle - - \triangle$, SHDOM ($N_\mu = 20$, $N_\phi = 24$)].

ous atmospheric problems (one-, two-, and three-dimensional). The author has concluded that SHDOM can be as accurate as a Monte-Carlo computation when the number of discrete ordinates is sufficiently large.

Plane Parallel Medium

SHDOM calculations of the normal radiance exiting from thermally emitting plane parallel media have been compared with results obtained by Freeman et al.,¹² using the two- and six-stream models and a reference DOM, also called the N -stream model (with $N \gg 6$). The medium optical depth is equal to one. The SHDOM angular resolution is defined by $N_\mu = 20$ zenith angles and a maximum of $N_\phi = 24$ azimuthal angles. The property grid, defined by $5 \times 5 \times 6$ points, is a 1-m-per-side homogeneous cube. Because a plane parallel medium is infinite and homogeneous along the horizontal directions [($X'X$) and ($Y'Y$)], the boundary conditions are periodic in radiance through the vertical walls of the grid. Neither the ground nor the sky emit or reflect any radiation by themselves. The scattering phase function is assumed to be isotropic. The results are normalized by the radiance emitted by a Lambertian ground at the same temperature T_0 as the studied medium. Figure 1 shows the normal radiance $I_\lambda(z=Z; \theta=0)/B_\lambda(T_0)$ calculated with the different methods vs the single scattering albedo. Although SHDOM gives the same results as the N -stream model, the two-stream and six-stream models respectively underpredict and overpredict radiance values. Freeman et al.¹² have shown that two-stream results are almost exact for a thin medium where lateral in-scattering can be neglected. Conversely, when the optical depth grows, the six-stream results are close to those of the N stream. In this situation the six-stream model evaluates correctly the lateral in-scattering effects. The test cases presented in Fig. 1 correspond to an intermediate situation where the two-stream and the six-stream approximations on the lateral in-scattering are both not adapted to evaluate the radiance field correctly.

Square Enclosure

The calculations presented next have been performed to establish the accuracy of SHDOM according to exact methods. As a discrete ordinate method, it can be used to compute hemispherical fluxes by radiance integration over $2\pi sr$. Comparing fluxes calculations with known exact results gives information on the correctness of the SHDOM radiance field angular representation used to evaluate the in-scattering source function $J_\lambda^S(s, \Omega)$. Two test cases have been investigated: a thermally emitting and nonscattering two-dimensional medium in a square enclosure with 1-m-long sides, and a purely isotropically scattering medium illuminated by a nonreflecting thermally emitting Lambertian ground at temperature T_0 . In both examples the cold and absorbing vertical boundaries, which are parallel to plane (YOZ), have been defined by optically thick and cold cells

Table 1 Number of discrete ordinates N and spherical harmonics N_{SH} used in SHDOM computations for the infinite square medium

Discrete ordinates			Spherical harmonics		
N_μ	N_ϕ	N (total number)	L	M	N_{SH} per point
2^a	1	2	1	0	2
2^a	4	8	1	1	4
8	16	90	7	7	64
16	32	354	15	15	256

$$^a \mu = \pm\sqrt{\frac{1}{3}}$$

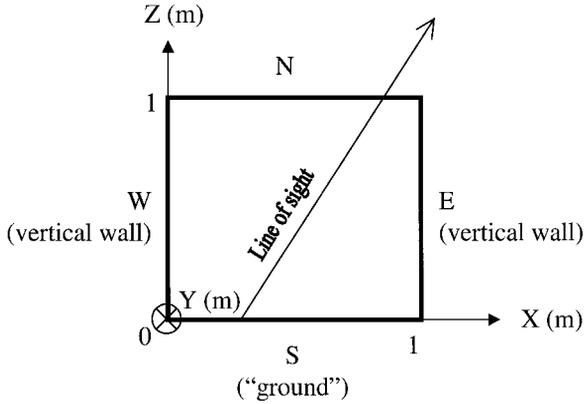


Fig. 2 Square enclosures geometry.

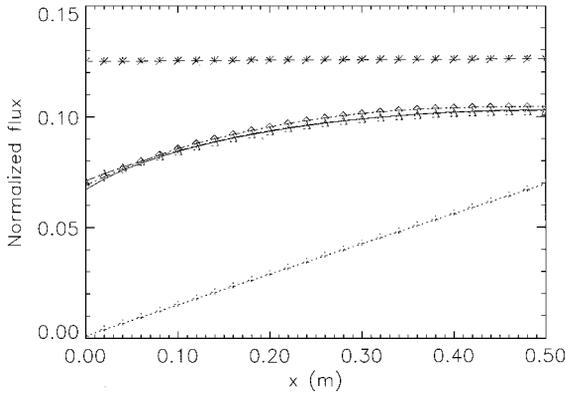


Fig. 3 Upper-wall hemispherical flux $F^+(x, z=Z)$ from a nonscattering and emissive infinite square enclosure with 1-m-long sides and an extinction coefficient σ equal to 0.1 m^{-1} : comparison between exact calculation and SHDOM computations with angular resolutions presented in Table 1 [—, exact calculation; \dots , SHDOM ($N_\mu=2, N_\phi=1$); \dots , ($N_\mu=2, N_\phi=4$); \dots ($N_\mu=8, N_\phi=16$); and \dots ($N_\mu=16, N_\phi=32$)].

(cf., Fig. 2). Radiance boundary conditions are periodic along direction ($Y'Y$) so that the medium can be considered to be infinite in this direction. The elementary property grid length of the medium base is 0.02 m. Table 1 presents the angular resolution of SHDOM computations. The results are normalized by the hemispherical flux emitted by a Lambertian ground at the same temperature T_0 as the emitting component of the studied media. The temperature T_{cold} of the other items is set so that $B_\lambda(T_{\text{cold}}) \ll B_\lambda(T_0)$.

In the first test case the exact calculation has been performed by integrating exact radiance field over 100 zenith and 200 azimuthal angles. Figure 3 shows the normalized upper-hemispherical fluxes obtained from different angular resolutions in an optically thin

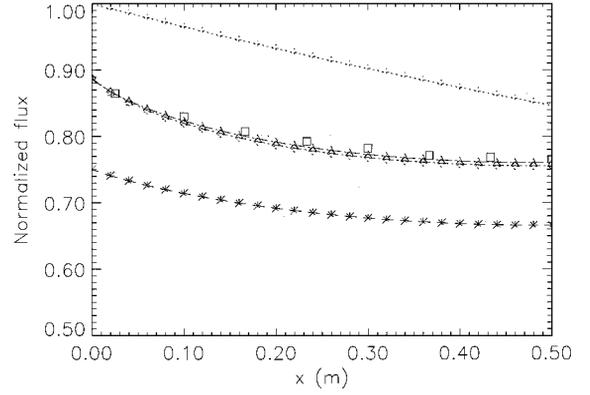


Fig. 4 Net ground hemispherical flux $\tilde{F}^+(x, z=0)$ from a purely scattering infinite square enclosure with 1-m-long sides and an extinction coefficient σ equal to 1 m^{-1} : comparison between zone method and SHDOM computations with angular resolutions presented in Table 1 [\square , zone method²¹; \dots , SHDOM ($N_\mu=2, N_\phi=1$); \dots , ($N_\mu=2, N_\phi=4$); \dots ($N_\mu=8, N_\phi=16$); and \dots ($N_\mu=16, N_\phi=32$)].

medium ($\sigma = 0.1 \text{ m}^{-1}$). The normalized upper-hemispherical fluxes are defined by

$$F^+(x, z=Z) = \frac{\int_0^{\pi/2} \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} I_\lambda(x, z=Z; \theta, \phi) d\phi}{\pi B_\lambda(T_0)} \quad (10)$$

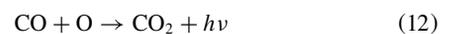
Although results with $N_\mu=2$ are obviously inaccurate, the computations converge to the exact solution with finer angular resolution. The resolution with ($N_\mu=8, N_\phi=16$) is suggested by Evans¹⁷ to be optimal for flux calculations and with ($N_\mu=16, N_\phi=32$) for radiance computations. The pseudo two-stream and eight-stream schemes respectively under- and overpredict the horizontal direction contributions to the hemispherical fluxes. Because estimating the in-scattering source function [Eq. (3)] is similar to flux evaluation, these errors emphasize the difficulty to design an accurate two-stream model. In the second test case the exact results presented in Fig. 4 originating from Liu et al.²¹ have been calculated using the zone method for $\sigma = 1 \text{ m}^{-1}$. The net ground hemispherical fluxes are defined by

$$\tilde{F}^+(x, z=0) = 1 - F^-(x, z=0) = 1 - \frac{\int_{\pi/2}^{\pi} \cos \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} I_\lambda(x, z=0; \theta, \phi) d\phi}{\pi B_\lambda(T_0)} \quad (11)$$

Although the two-stream and the eight-stream schemes respectively over- and underevaluate the in-scattering term, results with finer angular resolution are essentially coincident with the exact solution and the maximum differences are within 2%. Depending on the angular resolution and on the single scattering albedo, 1 to 10 iterations have been necessary to reach convergence.

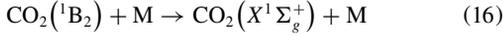
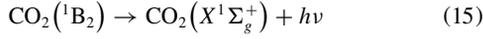
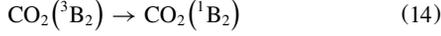
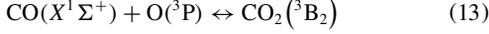
CO + O Chemiluminescence

Combustion and afterburning processes in rocket plume produce molecular species such as CO_2 , H_2O , CO, and reactive radicals like O and OH. The chemical reactions occurring between these molecules are able to produce a nonnegligible UV-visible photochemical emission, so-called chemiluminescence. In the solar blind spectral band the chemiluminescence comes mainly from the CO + O recombination,³ which gives rise to a UV-visible continuum called CO blue flame emission:



This reaction has been studied experimentally at low and high temperatures in many situations like flames,²² shock waves,^{23,24} or discharge tubes.²⁵ The principal properties of the CO + O radiative recombination mechanism are presented next. A semi-empirical law deduced from experimental reaction rates is then proposed.

The steps of the reactional mechanism depend on the electronic molecular states correlation²⁶ between these molecules as presented in Fig. 5. Privilov and Smirnova²⁷ have proposed the following chemiluminescent mechanism:



Spin conservation rules impose the restriction that the recombined $\text{CO}_2(^3\text{B}_2)$ is in a triplet state after reaction (13), which is the reverse of the $\text{CO}_2(^3\text{B}_2)$ predissociation. After a triplet-singlet transition [Eq. (14)] the de-excitation can be either radiative [Eq. (15)] or caused by collisions [Eq. (16)] with other molecules.

The experiment of Clyne and Trush²⁵ in discharge tubes at ambient temperature (293 K) and the study of Grillo and Slack²³ in hot shock waves (3000 K) show that chemiluminescent angular volumetric power I_λ^C is proportional to CO and O concentrations according to the following relation:

$$I_\lambda^C = I_{0,\lambda}^C [\text{CO}][\text{O}] \quad (17)$$

Slack and Grillo²⁸ have fit experimental results on chemiluminescent thermal dependence using an Arrhenius law, which can be expressed as photon production rate between 1300 K and 3000 K according to

Table 2 Experimental Arrhenius law parameters of CO + O chemiluminescence according to Eq. (17) whose results are given in units of $\text{W nm}^{-1} \text{sr}^{-1} \text{mol}^{-2} \text{cm}^3$

Wavelength, nm	$a(\lambda)$	$b(\lambda)$, K
255	17.67	4619
260	17.85	4582
280	18.67	4485
310	18.56	3039

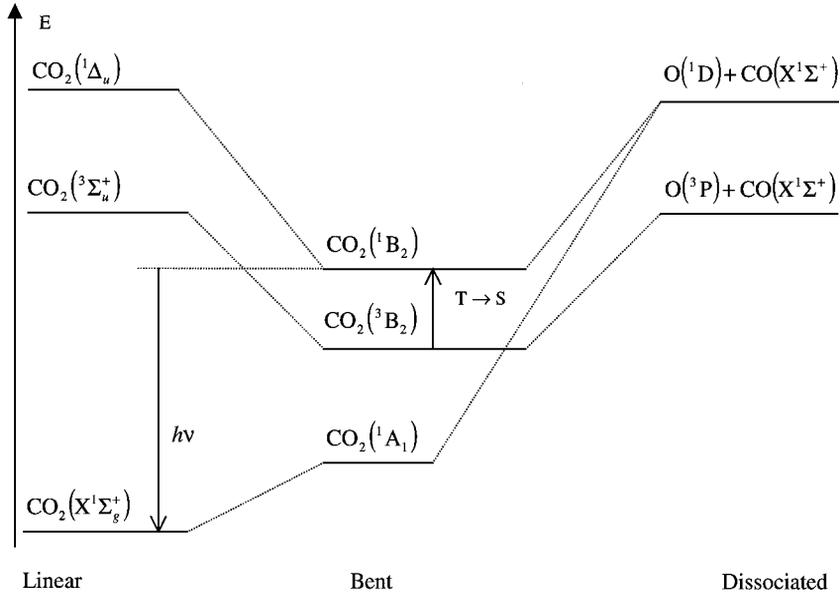


Fig. 5 Energy levels diagram of CO, O, and CO_2 (Ref. 26) (not to scale).

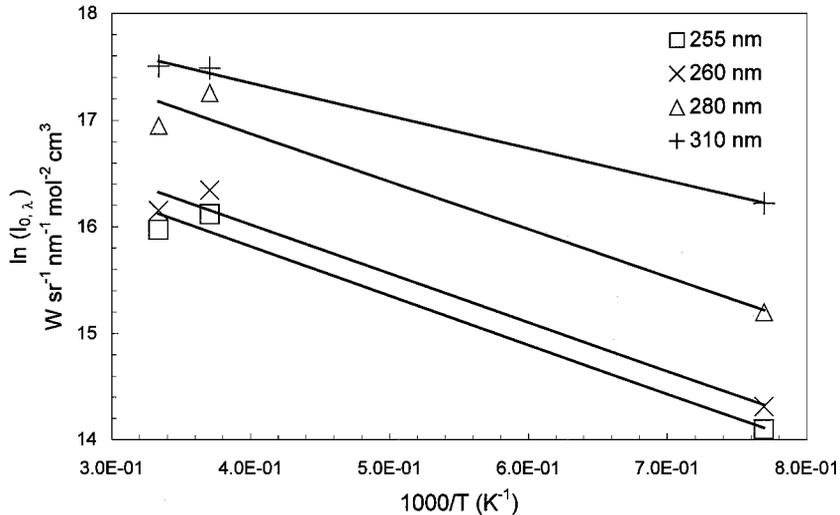


Fig. 6 Thermal dependence of the CO + O molar chemiluminescent volumetric angular power at several wavelengths in a logarithmic scale: experimental data from Grillo and Slack²³ (3000 K) and Slack and Grillo²⁸ (2700 and 1300 K).

$$R_0^C = 6.8(\pm 0.6) \times 10^5 \exp(-1960/T) \quad (18)$$

in units of $\text{cm}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$. The exponential coefficient 1960 K corresponds to the $\text{CO}_2(^3\text{B}_2)$ recombination [Eq. (11)] activation energy (about 0.17 eV). To describe the temperature dependence of the CO blue flame chemiluminescent spectrum, an extended Arrhenius law is used with wavelength-dependent coefficients:

$$I_{0,\lambda}^C = \exp[a(\lambda) - b(\lambda)/T] \quad (19)$$

where $I_{0,\lambda}^C$ is the chemiluminescent monochromatic volumetric angular power in units of $\text{W nm}^{-1} \text{sr}^{-1} \text{mol}^{-2} \text{cm}^3$. The parameters $a(\lambda)$ and $b(\lambda)$ (cf., Table 2) are deduced from the experimental Arrhenius diagram presented in Fig. 6.

UV Signature of Cylindrical Media

Radiance fields have been calculated with UV-extended SHDOM in simple cylindrical media. Four aerothermochemical profiles are deduced from flowfield calculations and are assumed to be independent of the axial coordinate. To simplify the presentation of the optical properties, their radial profiles, deduced from Mie theory and Eqs. (17) and (19), have been fitted with suitable functions. After a description of the radial profiles used, two test cases are presented corresponding to an infinite cylinder and a finite cylinder partially shaded by a mask.

Property Grid Settings

The extinction coefficient radial profile is assumed to be a straight line decreasing from the axis where $\sigma(0) = \sigma_{\max}$ to the particle

Table 3 Settings of the cylinder test cases for the four media

Optical properties	Medium 1	Medium 2	Medium 3	Medium 4
Extinction coefficient, m^{-1}	Straight line $\sigma_{\max} = 15.0$ $R_\sigma = 40 \text{ mm}$	Straight line $\sigma_{\max} = 12.5$ $R_\sigma = 60 \text{ mm}$	Straight line $\sigma_{\max} = 7.5$ $R_\sigma = 70 \text{ mm}$	Straight line $\sigma_{\max} = 4.5$ $R_\sigma = 100 \text{ mm}$
Temperature, K	Double-Gaussian $T_{\max} = 2300 \text{ K}$ $T_0 = 2000 \text{ K}$ $R_{\max} = 15 \text{ mm}$	Double-Gaussian $T_{\max} = 2350 \text{ K}$ $T_0 = 2200 \text{ K}$ $R_{\max} = 10 \text{ mm}$	Gaussian $T_{\max} = 2400 \text{ K}$ FWHM ^a = 35 mm	Gaussian $T_{\max} = 2100 \text{ K}$ FWHM ^a = 40 mm
Chemiluminescence, $\text{W m}^{-3} \text{sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$	Double-Gaussian $C_{\max} = 435.0$ $C_0 = 1.5$ $R_{\max} = 17 \text{ mm}$	Double-Gaussian $C_{\max} = 395.0$ $C_0 = 20.0$ $R_{\max} = 15 \text{ mm}$	Double-Gaussian $C_{\max} = 340.0$ $C_0 = 280.0$ $R_{\max} = 10 \text{ mm}$	Gaussian $C_{\max} = 65.0$ FWHM ^a = 16 mm

^aFull width at half maximum.

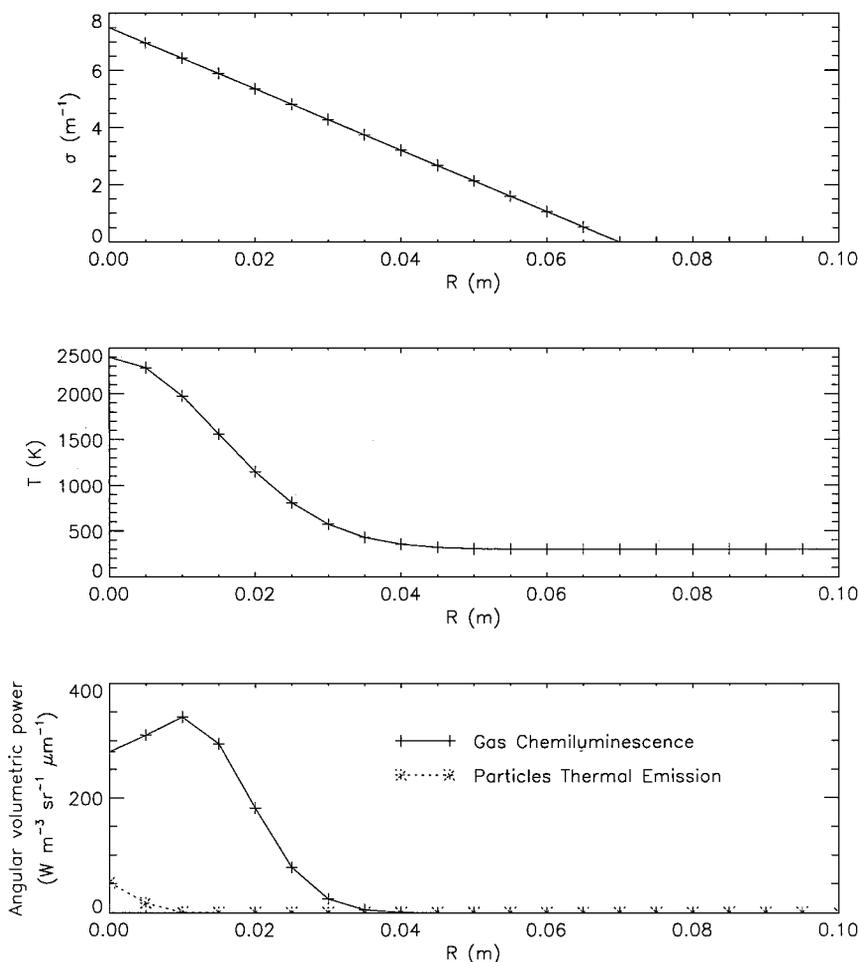


Fig. 7 Property radial profiles of cylindrical medium 3: particle extinction coefficient, temperature, and angular volumetric power from CO + O chemiluminescence and particle thermal emission.

radial extension R_σ . The minimum value of the extinction coefficient is equal to $\sigma_{\min} = 10^{-5} \text{ m}^{-1}$ to avoid numerical artifacts during the source function $J_\lambda(s, \Omega)$ evaluation corresponding to chemiluminescence. The temperature axisymmetric profile and the chemiluminescence profile are defined either by a Gaussian curve or the sum of two Gaussian curves symmetric with the medium axis. They are parameterized by the axial value of the studied aerothermochemical property $A_\lambda(0)$, the maximum value A_λ^{\max} , and its radial position R_{\max} . The temperature curves have a lower limit $T_{\min} = 300 \text{ K}$ representing the atmospheric temperature. The RTE is solved in a rectangular parallelepipedic property grid. The radial extension (i.e., perpendicular to the medium axis) equals $2R_\sigma = 200 \text{ mm}$ with a $\Delta r = 5\text{-mm}$ elementary cell length. The angular resolution is defined with $N_\mu = 16$ zenith angles and a maximum of $N_\phi = 32$ azimuthal angles.

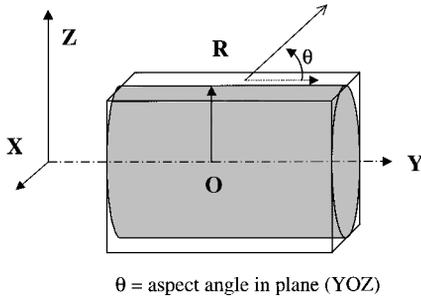
Table 3 summarizes the various parameters needed to describe the property profiles at 280 nm. Media 1 and 2 correspond to areas close to the nozzle, medium 3 corresponds to the afterburning zone (Fig. 7), and medium 4 represents the rocket plume tail. For a simple representation of the scattering properties, typical values have been used.²⁹ The single scattering albedo is uniformly equal to 0.8. To test our model, the phase function has been approximated as a Henyey–Greenstein phase function³⁰ with an asymmetry parameter g equal to 0.8.

Infinite Cylinder

Figure 8 represents the infinite cylinder geometry, and Fig. 9 shows the radiance profile of medium 3 for two aspect angles at 280 nm. Three iterations have been necessary to reach convergence. When the aspect angle decreases, the radiance values increase in the same manner as in the case of a thin emissive medium.¹² When integrated over a line of sight, the two peaks of medium 3's chemiluminescence radial profile disappear.

Rocket Body Masking

Figure 10 shows the geometry of the finite cylinder test case used to model the mask shadow's effect. The cylinder axis is vertical in



$\theta =$ aspect angle in plane (YOZ)

Fig. 8 Property grid geometry of infinite cylindrical media.

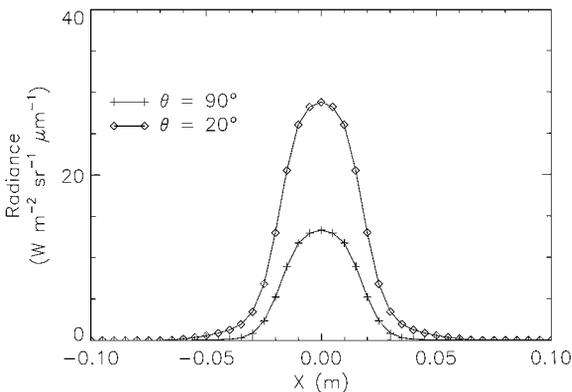


Fig. 9 Radiance profiles of medium 3 at 280 nm for two different aspect angles.

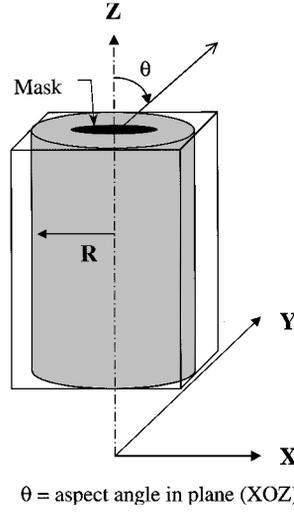


Fig. 10 Property grid geometry of the finite cylinder partially shaded by a circular mask.

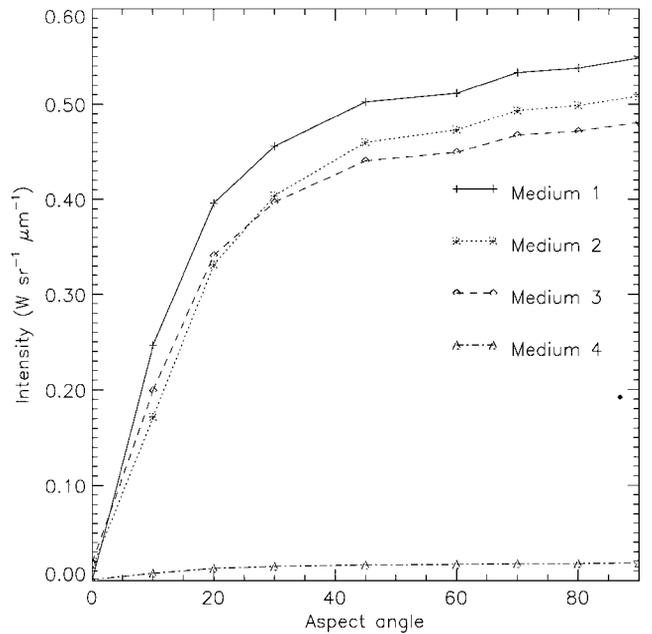
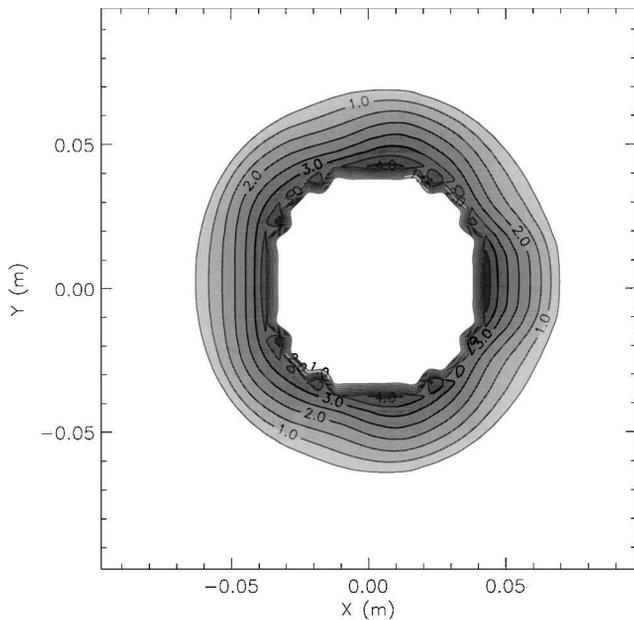


Fig. 11 Spectral intensity plot at 280 nm vs aspect angle for the different cylindrical media partially shaded by a circular mask, whose radius is equal to 40 mm.

order to use open boundary conditions. The cylinder is 1.04 m high with a spatial discretization equal to $\Delta z = 4 \text{ mm}$. Figure 11 presents the intensity plot vs the aspect angle calculated with a mask radius equal to 40 mm. The intensity is deduced from the radiance field by a surface integration over one of the vertical walls and the upper horizontal plane. Media 1, 2, and 3 have intensity plots close to each other. Because medium 4 corresponds to the rocket plume tail, its intensity is small. The intensity's angular dependence can be explained by the extinction caused by the large particle concentration near the axis and, close to the nose-on aspect angle, by the mask shadow. The nose-on intensity is very small because the mask shades most of the chemiluminescent emission. Calculations with two mask radii presented in Table 4 also show that the nose-on intensity is very sensitive to the body masking size. Figure 12 shows the nose-on isoradiance curves for medium 3. The circular hole in the radiance field center corresponds to the mask, which hides a great part of the nose-on radiation. In this case the nose-on radiation depends largely on the mask size because it is on the same order as the plume radial extension. Other computations show that the nose-on intensity is lower in nonscattering cylindrical media than in the scattering cases. These results prove that scattering extends the apparent radial extension of rocket plumes at nose-on aspect.

Table 4 Nose-on intensity of the cylindrical media for several mask radii

R_{Mask} , mm	Nose-on intensity, $\text{mW sr}^{-1} \mu\text{m}^{-1}$			
	Medium 1	Medium 2	Medium 3	Medium 4
40	0.0	13.3	18.9	1.1
30	9.1	23.8	33.0	1.5

**Fig. 12** Spectral nose-on radiance field at 280 nm (in $\text{W sr}^{-1} \text{m}^{-2} \mu\text{m}^{-1}$) of medium 3 partially shaded by a circular mask, whose radius is equal to 40 mm.

Conclusions

This paper has presented modifications of the atmospheric radiative transfer SHDOM applied to nonequilibrium media-like rocket plumes. The use of a spherical harmonics base in this DOM raises the in-scattering evaluation efficiency. This radiative field representation also allows radiance calculations along each user-defined line of sight. Test cases performed in simple geometries like plane parallel media or square enclosures show the accuracy of the SHDOM radiance and flux calculations and emphasize the lack of precision of radiative fields estimated by two- or six-stream models. UV CO + O chemiluminescence has been modeled with an extended Arrhenius law using experimental spectra. Finally, the improved SHDOM has been applied to cylindrical media defined using realistic plume section profiles. The infinite cylinder test case shows that the radiance field emitted by such media has an angular dependence similar to that of an optically thin medium for aspect angles close to a side-on view. The rocket body masking effects and the particle scattering role have been shown to be important for finite cylinder nose-on radiance fields. The results presented in this work attempt to demonstrate that the extended SHDOM is accurate, flexible, and easily applicable to a wide set of scattering media, in or out of thermal equilibrium, such as rocket plumes. As a three-dimensional radiative-transfer model, SHDOM is applicable to more realistic rocket plume modeling, in which the aerothermochemical properties depend on the distance from the nozzle. The use of SHDOM would carry out parametric studies on the influence of the optical properties of rocket plume's constituents upon its radiance field.

References

- Lyons, R. B., Wormhoudt, J., and Kolb, C. E., "Calculation of Visible Radiation from Missile Plumes," AIAA Paper 81-1111, June 1981.
- Lyons, R. B., Wormhoudt, J., and Gruninger, J., "Scattering Radiation in Low-Altitude Plumes," *Journal of Spacecraft and Rockets*, Vol. 20, No. 2, 1983, pp. 189–192.
- Kolb, C. E., Ryali, S. B., and Wormhoudt, J. C., "The Chemical Physics of Ultraviolet Rocket Plume Signature," *Ultraviolet Technology II*, SPIE Proceedings, Vol. 932, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, Bellingham, WA, 1988, pp. 2–23.
- Dash, S. M., Pearce, B. E., Pergament, H. S., and Fishburne, E. S., "Prediction of Rocket Plume Flowfields for Infrared Signature Studies," *Journal of Spacecraft and Rockets*, Vol. 17, No. 3, 1980, pp. 190–199.
- Vitkin, E. I., Karelin, V. G., Kirillov, A. A., Suppurun, A. S., and Khadyka, J. V., "A Physico-Mathematical Model of Rocket Exhaust Plumes," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 40, No. 5, 1997, pp. 1227–1241.
- Rodionov, A. V., Plastinin, Y. A., Drakes, J. A., Simmons, M. A., and Hiers, R. S., "Modeling of Multiphase Alumina-Loaded Jet Flow Fields," AIAA Paper 98-3462, July 1998.
- Viskanta, R., and Mengüç, M. P., "Radiation Heat Transfer in Combustion Systems," *Progress in Energy Combustion Sciences*, Vol. 13, 1987, pp. 97–160.
- Bruyn, H. B., and Smith, T. F., "Development of the Zone Method for Linearly-Anisotropic Scattering Media," *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, Vol. 40, No. 5, 1988, pp. 591–604.
- Lenoble, J., "Monte-Carlo Method," *Radiative Transfer in Scattering and Absorbing Atmospheres: Standard Computational Procedures*, A. Deepak Publishing, Hampton, VA, 1985, pp. 31–34.
- Meador, W. E., and Weaver, W. R., "Two-Stream Approximations to Radiative Transfer in Planetary Atmospheres: A Unified Description of Existing Methods and a New Improvement," *Journal of Atmospheric Sciences*, Vol. 37, No. 3, 1980, pp. 630–643.
- Toon, O. B., McKay, C. P., and Ackermann, T. P., "Rapid Calculation of Radiative Heating Rates and Photodissociation Rates in Inhomogeneous Multiple Scattering Atmospheres," *Journal of Geophysical Research*, Vol. 94, No. D13, 1989, pp. 16,287–16,301.
- Freeman, G. N., Ludwig, C. B., Malkmus, W., and Reed, R., "Development and Validation of Standardized Infrared Radiation Model (SIRRM) Gas/Particle Radiation Transfer Model," USAF/Air Force Rocket Propulsion Lab., AFRPL-TR-79-55, Edwards AFB, CA, Oct. 1979.
- Fiveland, W. A., "Discrete Ordinate Methods for Radiative Heat Transfer in Isotropically and Anisotropically Scattering Media," *Journal of Heat Transfer*, Vol. 109, 1987, pp. 809–812.
- Chandrasekar, S., "Quadrature Formulae," *Radiative Transfer*, Dover, New York, 1960, pp. 54–69.
- Stamnes, K., Tsay, S.-C., Wiscombe, W., and Jayaweera, K., "Numerically Stable Algorithm for Discrete-Ordinate-Method Radiative Transfer in Multiple Scattering and Emitting Layered Media," *Applied Optics*, Vol. 27, No. 12, 1988, pp. 2502–2509.
- Sanchez, A. A., Krajewsky, W. F., and Smith, T. F., "A General Radiative Transfer Model for Atmospheric Remote Sensing Studies in Multi-Dimensional Media," Iowa Inst. of Hydraulic Research, IIHR 355, Iowa City, IA, Jan. 1992.
- Evans, K. F., "The Spherical Harmonics Discrete Ordinate Method for Three-Dimensional Atmospheric Radiative Transfer," *Journal of Atmospheric Sciences*, Vol. 55, No. 3, 1998, pp. 429–446.
- Joseph, J. H., and Wiscombe, W. J., "The Delta-Eddington Approximation for Radiative Transfer," *Journal of Atmospheric Sciences*, Vol. 33, No. 12, 1976, pp. 2452–2459.
- Wiscombe, W. J., "The Delta-M Method: Rapid Yet Accurate Radiative Flux Calculations for Strongly Asymmetric Phase Function," *Journal of Atmospheric Sciences*, Vol. 34, No. 9, 1977, pp. 1408–1422.
- Ludwig, C. B., Malkmus, W., Freeman, G. N., Reed, R., and Slack, M., "Infrared Radiation from Rocket Plume," *Modern Utilization of Infrared Technology VI*, SPIE Proceedings, Vol. 253, Society of Photo-Optical Instrumentation Engineers, Bellingham, WA, 1980, pp. 122–128.
- Liu, J., Shang, H. M., Chen, Y. S., and Wang, T. S., "Analysis of Discrete Ordinates Method with Even Parity Formulation," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, Vol. 11, No. 2, 1997, pp. 253–260.
- Samaniago, J.-M., Egolfopoulos, F. N., and Bowman, C. T., "CO₂ Chemiluminescence in Premixed Flame," *Combustion Science and Technology*, Vol. 109, 1995, pp. 183–203.
- Grillo, A., and Slack, M., "CO + O Chemiluminescence: Rate Coefficient and Spectral Distribution," *Proceedings of the 13th International Symposium on Shock Tubes and Waves*, State Univ. of New York Press, Albany, NY, 1982, pp. 596–604.
- Eremin, A. V., and Ziborov, V. S., "Nonequilibrium Radiation from the CO₂ Band (¹B₂ – X¹Σ_g⁺) in Shock-Heated Flows," *Shock Waves*, Vol. 3, 1993, pp. 11–17.

²⁵Clyne, M. A. A., and Trush, B. A., "Mechanism of Chemiluminescent Combination Reactions Involving Oxygen Atoms," *Proceedings of the Royal Society of London*, Vol. 269A, 1962, pp. 404–418.

²⁶Guidpati, M. S., "Photochemically Induced Electronic-to-Electronic Energy Transfer in Germinate CO··O van der Waals Pair Generated Through Vacuum Ultraviolet Photolysis of CO₂ in Ar Matrices," *Journal of Physical Chemistry A*, Vol. 101, No. 11, 1997, pp. 2003–2009.

²⁷Pravilov, A. M., and Smirnova, L. G., "Temperature Dependence of the Spectral Distribution of the Rate Constant of Chemiluminescence in the Reaction O(³P) + CO → CO₂ + hv," *Kinetika i Kataliz*, Vol. 22, No. 4,

1981, pp. 832–838.

²⁸Slack, M., and Grillo, A., "High Temperature Rate Coefficient Measurements of CO + O Chemiluminescence," *Combustion and Flame*, Vol. 59, 1985, pp. 189–196.

²⁹Lyons, R. B., Wormhoudt, J., and Gruninger, J., "Scattering of Radiation by Particles in Low Atmospheric Plumes," AIAA Paper 81-1053, June 1981.

³⁰Van de Hulst, H. C., "Results for the Henyey-Greenstein Phase Function, Unbounded and Semi-Infinite Medium," *Multiple Light Scattering Tables, Formula and Applications*, Vol. 2, Academic Press, New York, 1980, pp. 331–354.