HAL
open science

Modélisation et simulation de l'émission énergétique et spectrale d'un jet réactif composé de gaz et de particules à haute température issus de la combustion d'un objet pyrotechnique

Cyril Caliot

▶ **To cite this version:**

Cyril Caliot. Modélisation et simulation de l'émission énergétique et spectrale d'un jet réactif composé de gaz et de particules à haute température issus de la combustion d'un objet pyrotechnique. Sciences de l'ingénieur [physics]. Institut National Polytechnique (Toulouse), 2006. Français. NNT : 2006INPT011G . tel-00271463

HAL Id: tel-00271463

https://theses.hal.science/tel-00271463v1

Submitted on 9 Apr 2008

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.

Institut National Polytechnique de Toulouse

École doctorale TYFEP

Modélisation et simulation de l'émission énergétique et spectrale d'un jet réactif composé de gaz et de particules à haute température issus de la combustion d'un objet pyrotechnique

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 31 mars 2006

pour l'obtention du

Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Toulouse

Discipline : Transferts, Dynamique des Fluides, Énergétique et Procédés
Spécialité : Énergétique et Transferts

par

Cyril CALIOT

Composition du jury

Directeur de thèse :	M. Gilles FLAMANT	CNRS, PROMES, Odeillo-Font-Romeu
Codirecteur de thèse :	M. Yannick LE MAOULT	EMAC, CROMEP, Albi
Tutrice de thèse :	Mme Mouna EL HAFI	EMAC, LGPSD, Albi
Rapporteurs :	M. Gérard JEANDEL	ESSTIN, LEMTA, Nancy
	M. Anouar SOUFIANI	CNRS, EM2C, ECP Chatenay-Malabry
Examinateur :	M. Jean François SACADURA	INSA, CETHIL, Lyon
Invités :	M. Cyril MONTACQ	LACROIX SA, Mazères
	Mme Isabelle LECUYER	CELAR, Rennes

École des Mines d'Albi-Carmaux : Laboratoire de Génie des Procédés des Solides Divisés — UMR 2392

Mis en page avec la classe thloria.

Remerciements

Pour débuter ce manuscrit je souhaite remercier les individus qui au cours de la thèse ont contribué à son déroulement.

Tout d'abord, je tiens à remercier mes encadrants de thèse, monsieur Gilles Flamant pour avoir accepté d'être mon directeur de thèse, monsieur Yannick Le Maoult, codirecteur de thèse, pour être le précurseur de cette thèse CIFRE et madame Mouna El Hafi.Il n'est cependant pas possible pour moi d'énumérer toutes leurs contributions tant sur le plan scientifique et technique que sur le plan personnel, mais je les remercie pour m'avoir bien conseillé et conduit à soutenir une thèse sur un sujet aussi riche. Toujours dans les responsables de la thèse, je tiens à remercier l'ANRT qui a financé pour partie cette thèse CIFRE et bien sûr la société Etienne Lacroix sans qui rien n'aurait été possible. Je remercie spécialement monsieur Philippe Mourry pour avoir cru en ma thèse et m'avoir recruté. Je remercie aussi monsieur Cyril Montacq qui m'a encadré durant mes travaux au sein de la société Etienne Lacroix.

Je remercie particulièrement messieurs Gérard Jeandel et Anouar Soufiani pour m'avoir fait l'honneur d'être les rapporteurs de ma thèse et pour m'avoir fait profiter de leurs connaissances et de leurs points de vue sur différents sujets. Je remercie vivement monsieur Jean-François Sacadura pour avoir présider le jury de ma thèse. Je remercie aussi madame Isabelle Lecuyer pour avoir accepté d'assister à ma soutenance en tant que membre invité.

J'adresse des remerciements spéciaux à messieurs Richard Fournier, Stéphane Blanco et Jean-Michel Brustet pour toutes les discussions que nous avons pu avoir. Je souhaite aussi remercier tous les permanents de l'Ecole des Mines d'Albi avec qui j'ai appris beaucoup sur divers sujets. Je remercie aussi madame Annie Boischot pour m'avoir aidé en me donnant la base de donnée sur l'eau.

Je ne veux pas oublier de remercier les ingénieurs et techniciens qui ont contribués aux bons déroulements d'essais et à la collecte d'informations expérimentales. Tout d'abord monsieur Georges Nepsinsky pour la construction du collecteur de particules, messieurs Bernard Garnier et Grégoire Valbona pour leur sérieux et leur bonne humeur lors des essais à Odeillo, messieurs Jean-Claude Poussin et Bernard Auduc pour leur aide et leurs bons conseils, toute l'équipe des mesures de la société Lacroix ainsi que du CEAT, mesdames Christine Rolland et Sabine Le Roux pour leur expertise lors d'utilisations des microscopes électroniques à balayage. Je veux aussi remercier le service informatique de l'EMAC et particulièrement monsieur Emmanuel Otton pour avoir réussi à configurer une machine informatique, Pigalle, sans laquelle mon travail aurait été plus ardu. Je n'oubli pas non plus l'équipe du garage de l'EMAC qui m'a rendu bien des services.

Et bien sûr, de profonds remerciements sont destinés à ceux qui m'ont accompagné durant la thèse. Tout d'abord je remercie les docteurs, les *rayonneux*, avec qui j'ai appris beaucoup (transfert radiatif, foot, etc.) : Maxime, David, Patrice, Vincent et Amaury. J'ai aussi un grand remerciement à adresser à mon premier stagiaire, Laurent, qui a su faire face à une rude tâche. Parce qu'ils sont géniaux et inoubliables, je remercie dans

le désordre tout ceux que j'ai pu côtoyer durant la thèse : Carlos, Julien Can., Cédric Ver., Thomas, Yilmaz, Mohamed, Sofia, Benu, Mariem, Petra, Souhila, Nicolas, Fabrice, Martio, Cédric Rev., Elian, Stéphane, Sébastien, Akrama, Driss, Julien Rol., Dalila, Carole, Areski, Nadia, Jocelin, Annie, Naly, Anna, Marie-Elise, Jean-Michel, Laetitia, Bruno Lad., Didier, Patricia, Sylvain, Radu, Valérie, Serge et pour ceux que j'ai oublié qu'ils sachent qu'ils y ont droit eux aussi.

Encore une fois, un grand merci à tous.

A MA FAMILLE : Je ne remercierai jamais assez mes parents pour les sacrifices qu'ils ont fait pour moi, pour l'amour qu'il m'ont donné et pour tout ce qu'ils m'ont transmis. Je remercie aussi mon frère, ma grand mère, ma marraine pour m'avoir encouragé et ma famille entière, mes oncles et mes tantes, mes cousins et cousines pour leur soutient.

Je remercie de tout mon cœur ma petite famille, mon épouse Emmanuelle, pour son amour et sa patience, et mes deux fils Nathan et Ruben pour leurs joies de vivre.

A Emmanuelle,

Table des matières

Nomenclature **ix**

Chapitre 1
Introduction générale **1**

1.1 Introduction 1
1.2 Phénomène physique 2
1.3 Démarche 4

Chapitre 2
Expériences et mesures des gaz et des particules

2.1 Mesure de la composition de la phase gazeuse 7
2.1.1 Description de l'expérience 8
2.1.2 Analyse des gaz par spectrométrie de masse 9
2.2 Mesure de la composition de la phase dispersée 10
2.2.1 Campagne d'essais au CEAT 10
2.2.2 Campagne d'essais à PROMES 11
2.2.3 Analyse des particules par microscopie électronique 11

Chapitre 3
Calcul des propriétés radiatives de la phase gazeuse à hautes températures

3.1 Introduction sur la physique du rayonnement des gaz 15
3.1.1 Coefficient d'absorption de la phase gazeuse 17
3.1.2 Elargissement naturel 18
3.1.3 Elargissement Doppler 18
3.1.4 Elargissement par collisions 19
3.1.5 Elargissement Voigt 19
3.1.6 Modification du profil de raie 20

3.1.7 Absorption induite par collisions 21
3.2 Modèle raie par raie 21
3.2.1 Calcul du coefficient d'absorption 21
3.2.2 Grilles spectrales et projection des raies 24
3.2.3 Validation du logiciel raie par raie 25

Chapitre 4
Modèles de bandes étroites et modèles de télédétection infrarouge

4.1 Généralités sur l'équation de transfert radiatif 30
4.1.1 Equation de transfert radiatif 30
4.1.2 solution particulière de l'ETR 32
4.2 Modèle statistique aléatoire de Malkmus 36
4.2.1 Cas d'un gaz seul 36
4.2.2 Cas d'un mélange de gaz 39
4.3 Modèle de bandes étroites en k-distributions corrélés (CK) 40
4.3.1 Cas d'un gaz seul 40
4.3.2 Cas d'un mélange 43
4.4 Hypothèse des gaz fictifs (FG) 46
4.5 Hypothèse d'un gaz unique pour le mélange (SMG) 48
4.6 Modèles de télédétection infrarouge 49
4.6.1 Modèles CKFG-SMG et CK-SMG 49
4.6.2 Tabulation des modèles 51
4.6.3 Validation des modèles et de la tabulation 54
4.7 Etude sur l'approximation de gaz unique pour les mélanges CO_2-H_2O . . . 69
4.7.1 Configuration atmosphérique 70
4.7.2 Résultats de la configuration atmosphérique 71
4.7.3 Configuration école 75
4.7.4 Résultats de la configuration école 76
4.8 Conclusion 88

Chapitre 5
Calcul des propriétés radiatives d'un nuage de particules et étude de l'influence de la diffusion

5.1 Formation des particules 91
5.2 Introduction au rayonnement des particules 93

5.2.1 Paramètres de la diffusion 94
5.2.2 Indice de réfraction complexe 95
5.2.3 Paramètre de taille 96
5.3 Calcul des propriétés d'un nuage de particules à l'aide de la théorie de Mie 96
5.3.1 Sections efficaces 96
5.3.2 Facteurs d'efficacité 97
5.3.3 Fonction de phase 98
5.3.4 Sphères enrobées 99
5.3.5 Coefficients d'absorption, d'extinction et de diffusion 99
5.4 Étude de sensibilité à la diffusion de rayonnement par les particules 101
5.4.1 Influence du diamètre et de la fraction volumique en particules . . . 101
5.4.2 Influence de l'indice complexe de réfraction 107
5.5 Conclusion 111

Chapitre 6
Comparaison modèles-expérimentation pour un cas test

6.1 Démarche adoptée 113
6.2 Modélisation de l'écoulement réactif diphasique 114
6.2.1 Modélisation de la phase gazeuse 114
6.2.2 Dispersion turbulente des particules 115
6.3 Modèle radiatif 115
6.3.1 Présentation du modèle radiatif 116
6.3.2 Validation de Sirjet 122
6.4 Comparaison modèle-expérience 130
6.4.1 Présentation des résultats expérimentaux 130
6.4.2 Présentation des résultats des simulations 132
6.4.3 Confrontation modèle-expérience 136
6.5 Conclusion 138

Chapitre 7
Conclusion générale et perspectives

7.1 Conclusion générale 141
7.2 Perspectives 143

Annexes

Annexe A Emissivités spectrales de H_2O, CO_2 et CO **145**

Annexe B Spectres de coefficient d'absorption et de diffusion de nuages de particules **147**

Annexe C Modélisation de l'écoulement diphasique réactif **153**

C.1 Modélisation de la phase gazeuse 153

C.1.1 Equations de bilan en régime turbulent 153

C.1.2 Modèle κ-ϵ standard 154

C.1.3 Modèle de flamme non-prémélangée 155

C.1.4 Transfert de chaleur par rayonnement 158

C.1.5 Résolution des équations de conservation 159

C.2 Dispersion turbulente des particules 161

Annexe D Champs aérothermochimiques Fluent **165**

Annexe E Champs aérothermochimiques Sirjet **173**

Annexe F Comparaison du jet simulé et mesuré **179**

Annexe G Etalonnage et mesures spectroradiométriques **181**

Bibliographie **183**

Nomenclature

Symboles alphabétiques

a_n	coefficient de Mie
b_n	coefficient de Mie
c_λ	vitesse d'une onde monochromatique dans un milieu
c_0	vitesse de la lumière dans le vide ($2.99792458 \cdot 10^8$ m·s^{-1})
d_i	distance entre la i^{e}surface discrétisée et un détecteur [m]
e	épaisseur d'une colonne homogène isotherme [m]
ec	écartement entre deux particules [m]
$\vec{e}_\Omega$	vecteur unitaire de l'angle solide
$f(k)$	fonction de densité de probabilité de k
f_v	fraction volumique des particules
g	facteur d'asymétrie de diffusion
$g(k)$	fonction de distribution cumulée de k
g_i	i^{e}abscisse d'une quadrature
h	constante de Planck ($6.6260755 \cdot 10^{-34}$ J·s)
k	coefficient d'absorption (variable d'intégration) [m^{-1}]
k	partie imaginaire de l'indice de réfraction (chapitres 5 et 6)
k	nombre d'onde (chapitre 5) [m^{-1}]
$\overline{k}$	paramètre du modèle SNB de Malkmus [m^{-1}·atm^{-1}]
k_B	constante de Boltzmann ($1.380658 \cdot 10^{-23}$ J·K^{-1})

ℓ	épaisseur d'une colonne homogène isotherme [m]
ℓ_γ	longueur du chemin optique de multi-diffusion [m]
m	indice de réfraction complexe
n	partie réelle de l'indice de réfraction (chapitres 5)
$\vec{n}$	normale à une surface
n_j	nombre de moles de l'espèce j
n_g	densité volumique du gaz g [nombre de molécules·m^{-3}]
$n_{gg'}$	exposant de la dépendance en température de la largeur de raie
p	pression totale [Pa]
p_s	pression standard (101325 Pa)
p_{HG}	fonction de phase de Henyey-Greenstein
p_ν	fonction de phase monochromatique
q	nombre d'électron
r	rayon d'une particule
s	abscisse curviligne [m]
Δt_2	incertitude sur le temps d'occupation du niveau d'énergie E_2 [s]
x	fraction molaire
x	paramètre de taille (chapitre 5)
x_j	fraction molaire de l'espèce j
x_g	fraction molaire du gaz g
$x_{g'}$	fraction molaire du gaz g'
A_j	hauteur relative d'un pic secondaire de l'espèce j
B_j	hauteur relative du pic maximum de l'espèce j
C_a	section efficace d'absorption [m^2]
C_d	section efficace de diffusion [m^2]
C_e	section efficace d'extection [m^2]
D	diamètre d'une particule
E_1	niveau d'énergie d'une molécule [m^{-1}]
E_2	niveau d'énergie d'une molécule [m^{-1}]
ΔE_2	incertitude sur la valeur du niveau d'énergie E_2 [J]
E''	énergie de transition de niveau bas [m^{-1}]
$\Delta E''$	intervalle d'énergie E" constituant une classe de gaz fictif [m^{-1}]
F	rapport d'intensité
G	grandeur radiative fonction du coefficient d'absorption (chapitre 4)
G	section géométrique projettée [m^2]
H	fonction Heaviside
H_i	hauteur du pic i [V]
I_ν	intensité monochromatique [W·(m^{-1})$^{-1}$]
I_{0_ν}	intensité monochromatique incidente [W·(m^{-1})$^{-1}$]

I_d	flux diffusé [W]
I_i	flux incident [W]
I_Ω	intensité radiative émise par le jet [W·(μm·sr)$^{-1}$]
L_ν	luminance monochromatique [W·(m^2· m^{-1}·sr)$^{-1}$]
L_λ	luminance monochromatique [W·(m^2 · μm·sr)$^{-1}$]
L_ν^o	luminance monochromatique de Planck [W·(m^2· m^{-1}·sr)$^{-1}$]
L_λ^o	luminance monochromatique de Planck [W·(m^2 · μm·sr)$^{-1}$]
M	masse molaire [g·mol^{-1}]
M_g	masse molaire du gaz g [kg·mol^{-1}]
N	nombre d'espèces (chapitre 2)
N	nombre de raies dans une bande étroite (chapitre 4)
N_c	nombre de colonnes homogènes et isothermes
$N_i(r)$	densité volumique de particules de type i et de rayon r [particules·(m^3·m)$^{-1}$]
N_g	nombre de gaz réels
N_{gf}	nombre de gaz fictifs
N_q	nombre de points de quadrature
N_S	nombre de surfaces discrétisées
$\mathcal{N}_\mathcal{A}$	Nombre d'Avogadro [nombre de molécules·mol^{-1}]
$P(S)$	loi de distribution des raies dans une bande étroite
$P_\Gamma(\gamma)$	densité de probabilité d'occurence du chemin optique γ
Q_a	facteur d'efficacité d'absorption
Q_d	facteur d'efficacité de diffusion
Q_e	facteur d'efficacité d'extinction
R	distance entre Z_0 et le détecteur
S	surface [m^2]
S_{cut}	intensité seuil de prise en compte des raies [m^{-2}]
S_i	aire de la i^{e}surface discrétisée [m^2]
$S_{g,i}$	intensité de la raie i appartenant au gaz g [m^{-1}·(molécule·m^{-2})$^{-1}$]
$S_{0,i}$	intensité de référence de la raie i [m^{-1}·(molécule·m^{-2})$^{-1}$]
S_1	amplitude complexe de diffusion
S_2	amplitude complexe de diffusion
T	température en [K]
T_g	température du mélange gazeux [K]
T_p	température des particules [K]
T_s	température standard (296 K)
T_0	température de référence [K]
V	volume [m^3]
W	largeur de raie noire équivalente
Z_0	coordonnées du centre du cône de visée du détecteur

Symboles grecs

α	constante du spectromètre [V·mol^{-1}]
$\overline{\beta}$	paramètre sans dimension du modèle SNB de Malkmus
γ	demi-largeur à mi-hauteur naturelle d'une raie [m^{-1}]
γ	un rajet optique de multi-diffusion (chapitre 5)
γ	angle entre une ligne de visée et une surface (chapitre 6) [rad]
γ_0	demi-largeur effective (SNB Malkmus) [m^{-1}]
$\gamma_{D,ig}$	demi-largeur à mi-hauteur Doppler d'une raie i du gaz g [m^{-1}]
$\gamma_{L,ig}$	demi-largeur à mi-hauteur Lorentz d'une raie i du gaz g [m^{-1}]
$\gamma^s_{L,igg'}$	demi-largeur à mi-hauteur Lorentz standard d'une raie i du gaz g induit par les collisions du gaz g' [m^{-1}]
δ_r	déplacement du centre de la raie [m^{-1}·Pa^{-1}]
δ	écart moyen entre des raies d'une bande étroite
ϵ_b	émissivité du bloc
θ	angle entre l'axe du jet et la visée du détecteur [rad]
κ_ν	coefficient d'absorption monochromatique du mélange gazeux [m^{-1}]
κ_{e_ν}	coefficient d'extinction monochromatique des particules [m^{-1}]
κ_{p_ν}	coefficient d'absorption monochromatique des particules [m^{-1}]
λ	longueur d'onde [μm]
μ	cosinus de l'angle de diffusion
ν	nombre d'onde [m^{-1}]
ν_0	nombre d'onde de la transition [m^{-1}]
$\nu_{0,i}$	nombre d'onde du centre de la raie i [m^{-1}]
π_n	coefficient de Mie
σ_{p_ν}	coefficient de diffusion monochromatique des particules [m^{-1}]
τ_ν	transmittivité monochromatique
τ_n	coefficient de Mie
$\chi_{gg'}$	fonction empirique modifiant le profil des raies du gaz g ayant comme partenaire de collisions le gaz g'
ω_i	i^{e}poids de la quadrature
$\Gamma(V,S)$	ensemble des chemins optiques possibles avec multi-diffusion émis pa le volume V et atteignant la surface S
$\Delta\nu_{cut}$	intervalle de nombre d'onde seuil du calcul des ailes de raies [m^{-1}]
$\Delta\nu_{hr}$	intervalle de nombre d'onde haute résolution [m^{-1}]
$\Delta\nu$	largeur d'une bande étroite [m^{-1}]

Φ_i	profil de la raie i [m]
Φ_{iD}	profil Doppler de la raie i [m]
Φ_{iL}	profil Lorentz de la raie i [m]
Φ_{iV}	profil Voigt de la raie i [m]
Ω	angle solide [sr]

Acronymes

CK	hypothèse des k corrélés (correlated-k)
CG	hypothèse de Curtis-Godson
ETR	équation de transfert radiatif
FG	hypothèse des gaz fictif (fictitious gas)
MBE	modèle de bandes étroites
MEBE	microscope électronique à balayage environnemental
MSBE	modèle statistique à bandes étroites
SMG	hypothèse d'un gaz unique pour le mélange
SNB	statistical narrow band model (MSBE)

1

Introduction générale

Sommaire

1.1 Introduction 1
1.2 Phénomène physique 2
1.3 Démarche 4

1.1 Introduction

Cette étude a été initiée en partenariat avec la société LACROIX dans l'objectif de mieux comprendre la signature infrarouge (IR) d'un écoulement réactif et diphasique. La préoccupation de la société LACROIX est la maîtrise de la signature IR d'une plate-forme de défense d'un aéronef.

Dans cette problématique industrielle et à-travers ses activités dans le domaine de la pyrotechnie, la société LACROIX a soutenu un plan d'étude amont sur la modélisation des signatures IR. Ce projet de Recherche & Développement a permis le financement de cette thèse CIFRE en partenariat avec les laboratoires de l'Ecole des Mines d'Albi-Carmaux (CROMEP, LGPSD) et le CNRS (PROMES, Four Solaire, Odeillo).

Les travaux réalisés durant la thèse s'inscrivent dans une problématique scientifique liée à l'étude des transferts radiatifs notamment la modélisation des phénomènes radiatifs et la métrologie infrarouge dans les milieux complexes. Plus particulièrement, l'application de cette étude est la télédétection infrarouge d'un écoulement réactif et diphasique à haute température. Cette étude a pour objectif la modélisation du rayonnement infrarouge émis par cet écoulement et reçu par un détecteur.

Les travaux de modélisation ainsi que les mesures ont été effectués sur des produits pyrotechniques servant à la défense d'aéronefs. En conséquence, ce manuscrit de thèse accessible au public ne comprend que la méthode utilisée pour la construction du modèle radiatif. Par contre, il ne comprend pas les résultats des mesures et des simulations réalisées pour des produits qui sont classifiés. La confrontation entre une signature infrarouge

simulée et une signature mesurée pour ces produits ne peut alors pas être donnée dans ce manuscrit.

Dans la suite de l'introduction générale, des bases sur les phénomènes physiques mis en jeu sont données puis la démarche adoptée pour la présentation de l'étude dans le manuscrit de thèse est exposée.

1.2 Phénomène physique

Une plateforme pyrotechnique servant à la protection d'un aéronef est composé d'objets pyrotechniques appelés leurres pyrotechniques. Il en existe plusieurs types et celui qui fait l'objet de l'étude présentée dans ce mémoire est un leurre IR. Cette étude traite précisément de la modélisation et de la simulation numérique de la signature IR d'un jet réactif diphasique formé par la combustion d'un leurre IR. Le phénomène à étudier est représenté sur la figure 1.1 où un avion de chasse qui vient de larguer un leurre IR est photographié par une caméra sensible dans le domaine du rayonnement visible et une caméra sensible au rayonnement infrarouge. Comme la fonction du leurre est de reproduire la signature de l'avion, on comprend aisément que la photographie prise dans l'infrarouge (Fig. 1.1) montre une nette ressemblance entre la signature du réacteur de l'avion avec celle du leurre.

Fig. 1.1 : *Prises de vue d'un aéronef larguant un leurre IR. Photographie prise dans le domaine du spectre du rayonnement visible (à gauche) et infrarouge (à droite).*

Le leurre IR est composé d'un matériau pyrotechnique produisant des gaz et des particules lors de sa combustion. Il est en général éjecté d'un aéronef se déplaçant à grande vitesse à-travers une atmosphère assimilée à un milieu au repos. Dans certains cas, la vitesse de l'aéronef peut approcher la vitesse du son. Lors du largage, la vitesse du leurre IR est la somme de la vitesse d'éjection et de la vitesse de déplacement de l'aéronef. Il se produit alors un écoulement d'air autour de l'objet pyrotechnique formant une traînée qui freine sa progression. De plus, comme cet objet n'a pas une position stable dans l'écoulement d'air, il tourne sur lui-même d'une manière difficilement prédictible. Juste après l'éjection, ce leurre est allumé et la combustion du matériau pyrotechnique produit des gaz et des particules à haute température qui sont susceptibles de réagir avec l'oxygène de

l'air. Les produits de combustion sont alors soumis à un écoulement d'air à grande vitesse qui les confine dans la zone de traînée derrière l'objet pyrotechnique. Comme représenté sur la figure 1.2, le jet ainsi formé est constitué d'une zone diphasique où se concentrent les gaz et les particules depuis leur éjection de l'objet pyrotechnique jusqu'à leur dilution dans l'air.

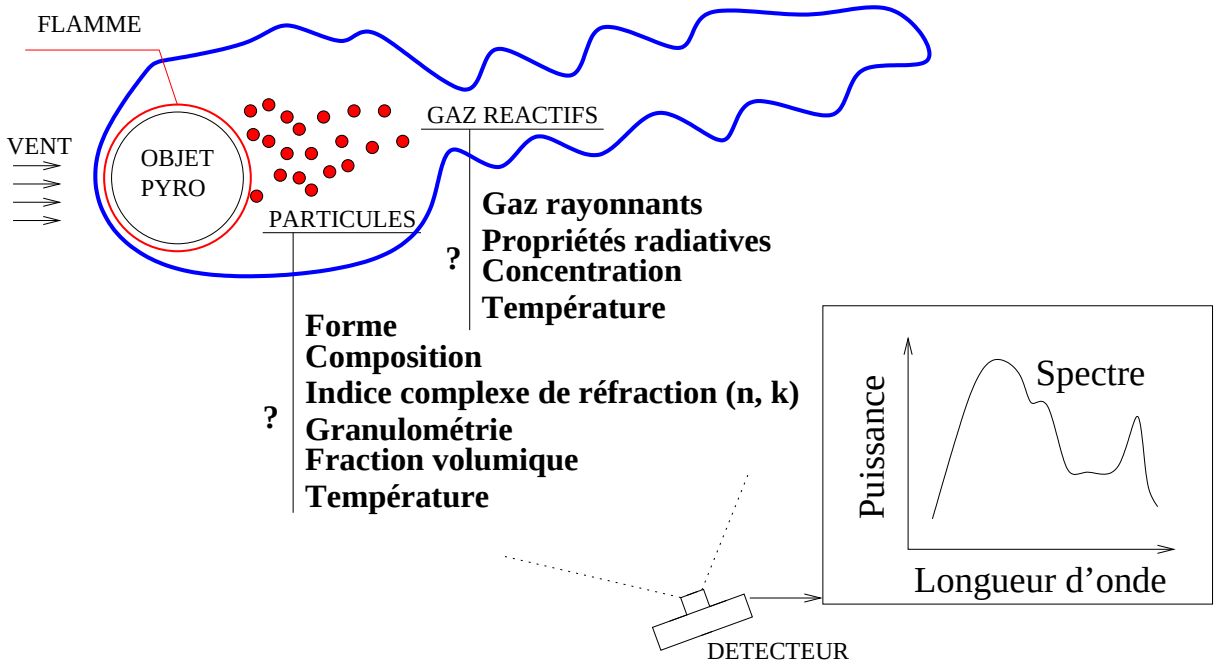


Fig. 1.2 : *Schématisation de la zone diphasique composant le jet et télédétection d'un spectre de leurre infrarouge.*

L'observation spectroradiométrique ou la télédétection du jet réactif de gaz et de particules (Fig. 1.2) permet d'obtenir la distribution spectrale du rayonnement émis par la combustion du leurre. La combustion produit des particules et les gaz à hautes températures qui émettent un rayonnement thermique dans l'infrarouge. Le but de l'étude étant la modélisation et la simulation numérique de la signature infrarouge du jet réactif, tous les paramètres d'entrée du modèle radiatif qui pilotent l'émission du rayonnement doivent être connus (voir figure 1.2). Malheureusement, les grandeurs servant à quantifier l'émission du rayonnement par le jet tels que la température et la concentration sont à priori mal connues dans les conditions réelles de fonctionnement du leurre. De plus, la nature et les propriétés radiatives des gaz et des particules sont aussi des inconnues. Dans la suite du manuscrit un certain nombre de réponses à ces questions vont être fournies, par contre certains points n'ont pas pu être abordés.

Enfin, on peut citer quelques références générales qui donnent des éléments de base de la connaissance scientifique sur les phénomènes physiques propres à notre étude. En ce qui concerne les bases physiques des transferts radiatifs dans un milieu gazeux elles

sont introduites par Soufiani et Taine dans un chapitre d'une école d'été de rayonnement [1]. De plus, on peut citer l'ouvrage de Penner [2] qui offre un éclairage d'un point de vue spectroscopique sur le rayonnement par les gaz. Pour le traitement du rayonnement par les particules une introduction est donnée dans des ouvrages généraux tels que les ouvrages de Siegel et Howel [3] et de Modest [4]. Par contre pour plus de détails on peut se référer à l'article de Mie [5] et aux ouvrages spécialisés de Kerker [6], Van de Hulst [7] et Bohren et Huffman [8]. Nous aurons aussi à traiter des modèles spectraux de coefficient d'absorption qui sont présentés dans l'ouvrage de Goody et Yung [9] et dans l'article de Taine et Soufiani [10].

Avant de détailler les étapes de l'étude, la démarche scientifique adoptée est présentée et donne une vue globale des travaux réalisés.

1.3 Démarche

Dans l'objectif de développer un outil de simulation numérique de la signature infrarouge d'un jet de gaz et de particules à haute température, il faut en premier lieu identifier les espèces majoritaires qui sont responsables de l'émission du rayonnement. Dans ce but, des campagnes expérimentales ont permis la construction de bases de données concernant les gaz et les particules présents dans le jet. Dans le chapitre 2, nous présenterons quelques résultats expérimentaux qualitatifs puisque la totalité des résultats reste classifiée.

Connaissant la nature des gaz et des particules, le calcul de leurs propriétés radiatives doit être réalisé. Cette étape est nécessaire puisque ces propriétés caractérisent l'émission de rayonnement par le jet et elles sont utilisées pour résoudre l'équation de transfert radiatif. Nous présenterons alors, dans le chapitre 3 le code de calcul raie par raie de spectres synthétiques pour les gaz ainsi que sa validation. De plus, pour diminuer le temps de calcul d'une signature infrarouge, il est préférable d'utiliser des modèles spectraux d'absorption de bandes étroites. Le chapitre 4 est consacré au modèle de télédétection infrarouge et comprend une étude du modèle en k-distribution corrélés avec l'approximation d'un gaz unique pour le mélange associée à l'hypothèse des gaz fictifs. En ce qui concerne les propriétés radiatives des particules, le chapitre 5 présente le modèle de Mie pour le calcul de ces propriétés ainsi qu'une étude de sensibilité à la diffusion. En effet, nous quantifierons l'erreur commise sur le flux émis par différentes couches si les processus de diffusion du rayonnement sont négligés.

La modélisation de la signature IR du jet diphasique réactif issu de la combustion du leurre IR, nécessite la connaissance des températures et des concentrations en gaz et particules, en tous les points du jet. De plus, la concentration et la température de ces gaz et de ces particules dépendent, d'une part, des mécanismes de combustion se produisant à la surface de l'objet pyrotechnique qui est soumise à un écoulement à grande vitesse. D'autre part, leurs concentrations et leurs températures dépendent aussi des réactions chimiques pouvant se produire dans le jet. La stratégie adoptée pour remonter à ces

informations sera présentée dans le chapitre 6 qui décrit le modèle d'écoulement diphasique réactif utilisé par le logiciel commercial de simulation Fluent. De plus, dans ce chapitre 6, l'outil de simulation numérique de la signature infrarouge du jet qui a été développé pour la société Lacroix est validé et confronté à une mesure expérimentale.

La démarche globale étant présentée, nous allons commencer par la description des mesures expérimentales accompagnée des résultats qualitatifs concernant les gaz et les particules produits par la combustion.

2

Expériences et mesures des gaz et des particules

Sommaire

2.1 Mesure de la composition de la phase gazeuse 7

2.1.1 Description de l'expérience 8

2.1.2 Analyse des gaz par spectrométrie de masse 9

2.2 Mesure de la composition de la phase dispersée 10

2.2.1 Campagne d'essais au CEAT 10

2.2.2 Campagne d'essais à PROMES 11

2.2.3 Analyse des particules par microscopie électronique 11

2.1 Mesure de la composition de la phase gazeuse

Pour utiliser les modèles de rayonnement présentés par la suite, les conditions thermophysiques du milieu doivent donc être connues puisqu'elles constituent les données d'entrées des modèles. Nous avons donc effectué un certain nombre d'expérimentations dans le cadre de la thèse afin d'acquérir une meilleure compréhension des phénomènes physiques se déroulant dans le jet réactif. Ces expériences ont été faites d'une part pour alimenter les modèles en données d'entrées et d'autre part, pour confronter les résultats de ces mêmes modèles. Les essais menés par la société LACROIX au Centre d'Essais Aéronautique de Toulouse (CEAT) ont permis de caractériser le rayonnement émis par des leurres IR. Durant ces essais, des données sur le rayonnement émis par le jet ont été acquises telles que des images en vidéo IR et visible, des spectres IR basses résolutions et des radiométries IR. Par contre, les conditions extrêmes (écoulement à grande vitesse) de réalisation de ces essais ont rendu certaines mesures impossibles, en particulier les mesures intrusives de prélèvements et d'analyses des gaz et des particules réactives. C'est pourquoi

une deuxième campagne d'expériences s'est déroulée au laboratoire Procédés, Matériaux et Énergie Solaire (PROMES) du CNRS sur le site du four solaire à Odeillo. L'objectif de cette campagne était d'améliorer la connaissance de la nature des gaz présents dans le jet afin de pouvoir les prendre en compte dans le calcul des propriétés radiatives du jet. Dans ce but, la composition des produits gazeux issus de la combustion d'un matériau pyrotechnique ont été mesurée dans une atmosphère neutre (argon) ainsi que dans une atmosphère oxydante (air).

2.1.1 Description de l'expérience

Le montage expérimental (Fig. 2.1) comprend plusieurs parties. Le réservoir cylindrique, de 40cm de diamètre et 50cm de hauteur, est constitué d'une double paroi où circule de l'eau de refroidissement. A mi-hauteur trois emplacements perpendiculaires permettent une visée à-travers des hublots soit en verre (visible) soit en fluorure de calcium (infrarouge). Un bloc (1cm^3 de volume) de la même composition qu'un leurre IR est déposé sur un support refroidi et réglable en hauteur. La taille du bloc pyrotechnique a été choisie pour que l'énergie libérée dans le réservoir étanche ne soit pas trop importante. Deux électrodes assurent le passage du courant à-travers le fil chaud placé en contact avec le bloc afin de l'allumer. Une pompe à vide, une bouteille d'argon et un manomètre sont reliés au réservoir. L'orifice de la canne de prélèvement est placé loin de la paroi. Le mélange produit par la combustion et chargé en fines particules est aspiré puis filtré avant d'entrer dans le spectromètre de masse. Le spectromètre de masse, BALZERS modèle QMG-511, fonctionne avec un quadripole.

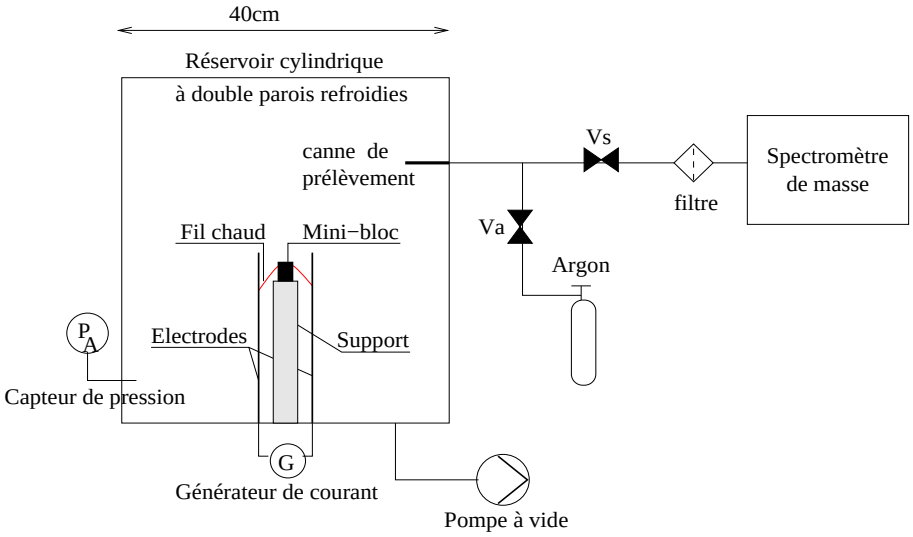


Fig. 2.1 : *Schéma de principe du montage expérimental*

2.1.2 Analyse des gaz par spectrométrie de masse

Les pics enregistrés au cours du temps donnent une hauteur, proportionnelle au signal détecté, en fonction de M/q. M représente la masse molaire d'un composé et q sa charge (le nombre d'électron qu'il a perdu ou gagné). Ainsi, le spectre de masse d'un composé tel que le CO_2 qui a une masse molaire de 44 g·mol^{-1} comporte un pic primaire placé à l'abscisse M/q égal à 44 et plusieurs pics secondaires listés dans une base de données [11]. Afin de comparer entre eux la hauteur de chaque pic issu d'un même composé le coefficient A_j est utilisé et il est défini comme la hauteur relative des pics secondaires :

$$A_j = \frac{\text{Hauteur du pic secondaire de l'espèce j}}{\text{Hauteur du pic maximum de l'espèce j}} \tag{2.1}$$

En général, un composé n'est pas seul, c'est pourquoi il est utile de comparer les pics primaires de chaque espèce avec le coefficient B_j défini comme la hauteur relative des pics entre espèces :

$$B_j = \frac{\text{Hauteur du pic maximum de l'espèce j}}{\text{Hauteur du pic maximum du composé de référence}} \tag{2.2}$$

Les coefficients B_j de toutes les espèces ont le même pic de référence et peuvent donc être comparés. Les valeurs des coefficients A_j et B_j sont consignées dans une base de données du CEA [11]. Ces coefficients entrent dans le calcul des concentrations de chaque espèce puisque les hauteurs sont proportionnelles à un nombre de molécules. La hauteur H_i du pic i est alors donnée par :

$$H_i = \alpha \sum_{j=1}^{N} n_j.A_{ji}.B_j \quad \text{, avec} \quad n_j = x_j \sum_{j'=1}^{N} n_{j'} \tag{2.3}$$

avec, α une constante du spectromètre, n_j le nombre de moles de l'espèce j et x_j sa fraction molaire. Le système à résoudre a N inconnues, il faut donc N équations c'est-à-dire N pics. Deux problèmes subsistent : le premier concerne la vapeur d'eau qui se condense sur les parois refroidies du réservoir et échappe donc à la mesure, le second est la discrimination des concentrations de N_2 et CO qui ont tous deux un pic primaire à 28 et des pics secondaires difficilement exploitables en raison de leur faible rapport signal sur bruit. Néanmoins, il est apparu clairement que les espèces majoritairement produites étaient H_2 et CO lors d'une combustion dans l'argon et H_2O et CO_2 dans l'air.

Ces expériences ont été menées pour un certain type de leurre classifiés et les résultats expérimentaux ne peuvent donc pas être fournis. La campagne expérimentale à PROMES à permis de dégager la nature des gaz présents dans les jets étudiés. Ces gaz sont CO, CO_2 et H_2O qui sont radiativement actifs dans l'infrarouge et qui par conséquent feront l'objet d'une étude particulière, présentée par la suite, concernant le calcul de leurs propriétés radiatives.

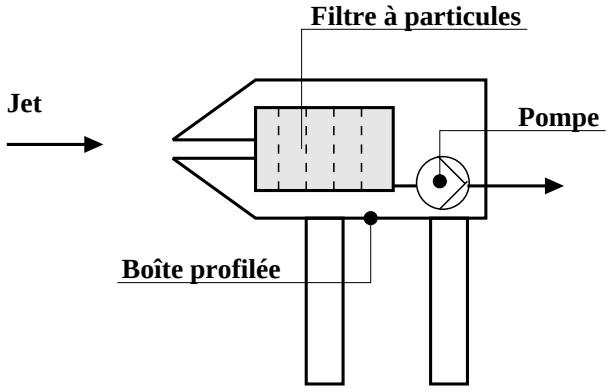


Fig. 2.2 : *Système de récupération des particules dans l'axe du jet.*

2.2 Mesure de la composition de la phase dispersée

La connaissance de la nature, de la taille et de la forme des particules présentes dans le jet est utile pour la compréhension puis la modélisation du rayonnement émis par le leurre infrarouge. Il est alors nécessaire de prélever ces informations dans des conditions d'écoulements réalistes. C'est pourquoi la première campagne de collecte a eu lieu au CEAT. La seconde s'est déroulée au laboratoire PROMES avec le dispositif expérimental décrit au paragraphe précédent. Ensuite, les particules collectées sont analysées par un microscope électronique à balayage dont les principaux résultats sont rapportés.

2.2.1 Campagne d'essais au CEAT

Dans le cadre du projet de développement des leurres infrarouges, la société LACROIX a mené une campagne d'essais au CEAT. Le CEAT est le principal centre européen en matière d'expertises et d'essais au sol d'avions civils et militaires. Il dispose d'un banc d'essais WINDBLAST permettant de produire des rafales de très grandes vitesses (environ 300 $m{\cdot}s^{-1}$). Les rafales du banc WINDBLAST sont utilisées dans le but de simuler l'écoulement d'air autour d'un leurre après son largage depuis un aéronef. L'écoulement réaliste ainsi créé permet d'approcher une reproduction du comportement de la combustion du leurre en situation réelle. Au cours des essais, plusieurs types de mesures ont été conduites. Pour mesurer le rayonnement émis par le jet, des mesures spectroradiométriques et radiométriques ont été réalisées. Des images infrarouges et visibles ont aussi été enregistrées. De plus, dans l'objectif d'améliorer la connaissance des particules rayonnantes dans le jet, la récupération de particules dans l'axe du jet et au sol a été entreprise. Dans l'axe du jet, les particules ont été récupérées dans une boîte profilée renfermant une pompe aspirante et un filtre, comme schématisés sur la figure Fig. 2.2. Le mode de collecte employé a été choisi en considérant les contraintes mécaniques engendrées par la vitesse maximale de l'écoulement (environ $300m/s$). D'autre part, le collecteur ne devait

pas influencer les mesures radiatives. En conséquence, le collecteur devait être très solide et profilé. Il était maintenu au sol par un bâti placé en dehors du champ des appareils de mesures. Une plaque horizontale ainsi qu'une plaque inclinée à 45°, toutes deux fixées au sol, sur lesquelles étaient disposées des pastilles adhésives, composaient le dispositif de récupération des particules au sol.

La collecte des particules par les dispositifs au sol et dans l'axe du jet, a permis de récupérer des particules ayant un diamètre supérieur à 50μm. Comme la vitesse d'aspiration du filtre était trop faible, les très petites particules ont contourné la boîte profilée placée dans le jet. Au sol, très peu de particules sont collectées et ce sont préférentiellement de grosses particules. Comme le dispositif de collecte dans l'axe du jet a récupéré beaucoup plus de particules que celui au sol, les particules prélevées dans l'axe du jet ont été analysées par la suite.

2.2.2 Campagne d'essais à PROMES

La campagne d'essais à PROMES a déjà été décrite dans le paragraphe §.2.1. Cette campagne de mesure des produits de combustion de différentes compositions pyrotechniques, a permis de récolter des échantillons de particules produites par la combustion. Lorsque le bloc brûle au centre du réservoir, il éjecte des particules qui se déposent sur les parois et sur une lame métallique accolée à la paroi. De plus, lors de l'analyse des gaz par spectrométrie de masse, l'échantillon prélevé est tout d'abord filtré. Les particules constituant la fumée présente dans le milieu sont alors récupérées sur le filtre. Ainsi, les particules déposées sur la lame métallique ainsi que le filtrat ont été conservés afin d'être analysées.

2.2.3 Analyse des particules par microscopie électronique

Les particules prélevées sont analysées par le microscope électronique à balayage (MEB) ainsi que le microscope électronique à balayage environnemental (MEBE) appartenant tous deux à l'Ecole des Mines d'Albi-Carmaux. Le MEB associé à un logiciel de traitement d'images, a été utilisé pour déterminer une granulométrie des particules prélevées au CEAT. Ensuite, le MEBE a été utilisé pour mesurer par microanalyse X, la composition élémentaire de la surface des particules échantillonnées. Ces outils de pointe ont aidé à nous renseigner sur la taille (granulométrie), la forme (clichés de particules) et la nature surfacique (microanalyse X) des particules collectées.

Pour les particules prélevées dans l'axe du jet au CEAT, il apparaît que la plupart de ces particules sont creuses, comme représentées sur la figure Fig. 2.3. De plus, il est possible de constater que les particules ont une forme plutôt sphérique. L'origine des trous peut provenir soit d'une solidification préférentielle lors du refroidissement de la particule dans l'écoulement soit d'une bulle de vapeur d'eau qui se forme dans la particule du fait de la baisse de solubilité de l'eau dans la particule lors de son refroidissement [12].

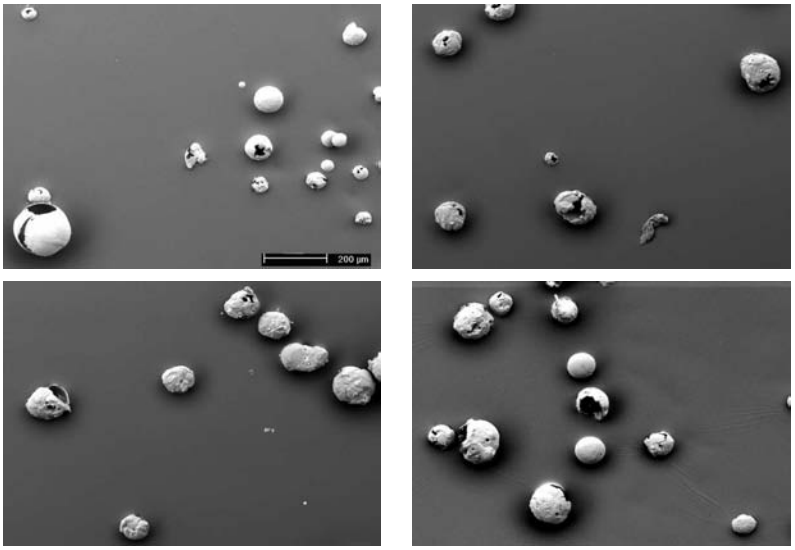


Fig. 2.3 : *Exemple de particules prélevées dans l'axe du jet au CEAT.*

Pour les particules prélevées durant la campagne au PROMES, deux échantillons sont analysés avec le MEBE. Le premier est un dépôt recouvrant une lame métallique qui est représenté sur la figure Fig. 2.4. Le dépôt s'est formé pendant et après la combustion

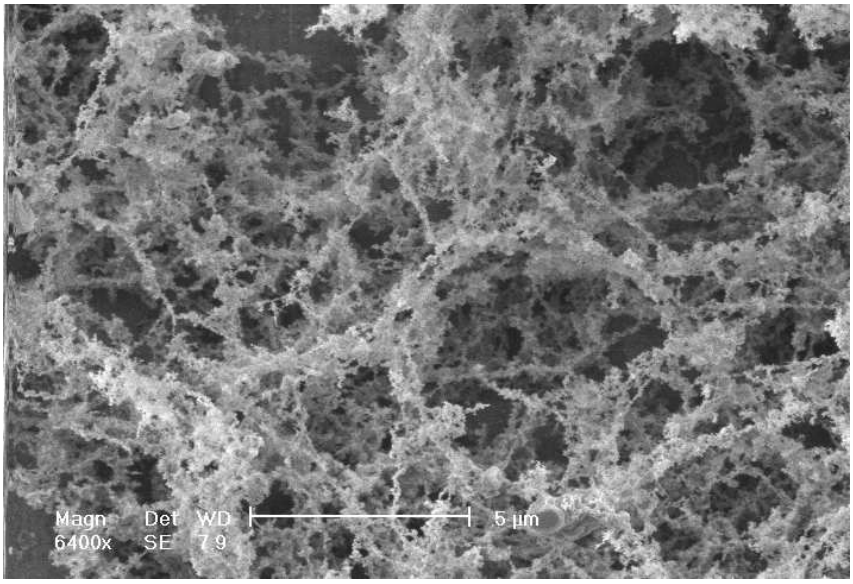


Fig. 2.4 : *Dépôts de particules sur une lame métallique.*

lorsque des particules nanométriques se sont agrégées. La figure Fig. 2.4 met en évidence d'une part la très petite taille des particules primaires sphériques (une dizaine de nanomètres de diamètre) et d'autre part une structure poreuse qui laisse à penser que le dépôt s'est formé par agglomération d'agrégats présents dans la fumée.

Le second échantillon est un filtrat des fumées qui est représenté sur la figure Fig. 2.5.

Le filtrat est constitué de très petites particules sphériques ayant des diamètres compris

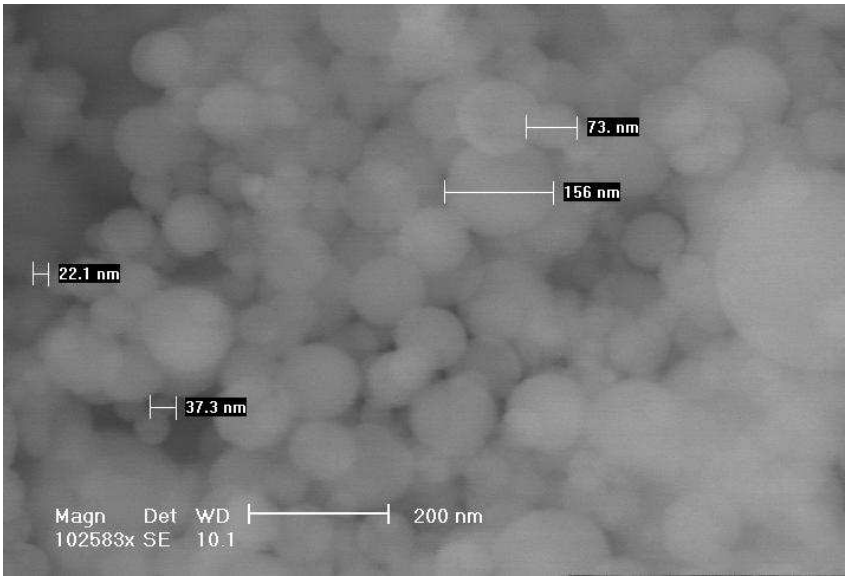


Fig. 2.5 : *Filtrat des fumées après combustion.*

entre 10nm<D<500nm.

Les deux campagnes de collecte des particules donnent des granulométries très différentes avec, dans le cas du prélèvement au CEAT, un diamètre proche de la centaine de micromètres, et dans le cas de la campagne à PROMES, un diamètre proche de la centaine de nanomètres. D'ailleurs, une expérience similaire à celle au PROMES a été menée par Karasev et al. [13] qui met en évidence des particules nanométriques. Tout d'abord, les deux expériences comportent de grandes différences. En premier lieu, la combustion des blocs pyrotechniques est réalisées pour des masses de blocs différentes puisque la masse d'un bloc est 30 fois plus grande au CEAT. Ensuite, la combustion au CEAT a lieu dans un écoulement à grande vitesse alors qu'elle se déroule dans une enceinte à PROMES. De plus, les moyens de collecte sont complètement différents. D'une part, le collecteur dans l'axe du jet au CEAT est placé à une dizaine de mètre du bloc pyrotechnique et n'est pas conçu pour récolter de très fines particules. D'autre part, les plaques de prélèvement placées sur les parois latérales de l'enceinte du réservoir à PROMES sont situées à vingt centimètres du bloc pyrotechnique.

Pour un même matériau pyrotechnique, au CEAT de grosses particules ont été collectées alors qu'au PROMES ces grosses particules n'ont pas été observées. Le paramètre qui change d'une expérience à l'autre et qui doit avoir une grande influence, est la vitesse de l'écoulement d'air autour du matériau pyrotechnique. Cet écoulement doit influencer la vitesse de combustion du combustible métallisé et la formation des particules éjectées à la surface du matériau. De plus, l'écoulement influence l'évolution des particules et leur histoire est alors différente.

Ces expériences ont initié une démarche de compréhension des processus liés à la for-

mation des particules par la combustion de plusieurs matériaux pyrotechniques différents. De plus, les expériences menées ont permis de caractériser la nature des particules prélevées et de mesurer des granulométries. Cependant, pour accéder aux paramètres pilotant le rayonnement émis par les particules du jet, il faut envisager d'autres expériences, notamment sur la caractérisation de la nature et de la granulométrie des particules après leur éjection. Ne possédant pas encore toutes ces données par manque de temps, une étude de sensibilité donnant l'influence de la taille, de la fraction volumique et de la nature des particules (indice complexe de réfraction) sur le flux émis par un nuage de particules a été menée. Celle-ci est décrite en détail dans le chapitre 5.

Ayant validé la nature des espèces gazeuses principales présentes dans le jet, nous allons aborder à présent les modèles de calcul des spectres synthétiques.

3

Calcul des propriétés radiatives de la phase gazeuse à hautes températures

Sommaire

3.1 Introduction sur la physique du rayonnement des gaz 15

3.1.1 Coefficient d'absorption de la phase gazeuse 17

3.1.2 Elargissement naturel 18

3.1.3 Elargissement Doppler 18

3.1.4 Elargissement par collisions 19

3.1.5 Elargissement Voigt 19

3.1.6 Modification du profil de raie 20

3.1.7 Absorption induite par collisions 21

3.2 Modèle raie par raie 21

3.2.1 Calcul du coefficient d'absorption 21

3.2.2 Grilles spectrales et projection des raies 24

3.2.3 Validation du logiciel raie par raie 25

3.1 Introduction sur la physique du rayonnement des gaz

Tout phénomène d'émission (spontanée ou induite) et d'absorption de rayonnement par des molécules d'un gaz correspond à une transition entre deux états moléculaires, caractérisée par deux niveaux d'énergie E_1 et E_2 distincts ($E_2>E_1$) représentés sur la figure 3.1.

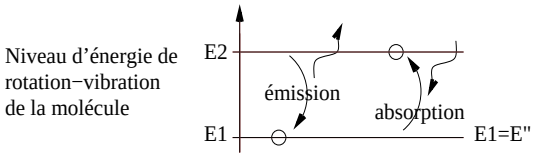


Fig. 3.1 : *Schématisation d'une émission et d'une absorption d'un photon modifiant l'énergie E de la molécule.*

Les phénomènes d'absorption ou d'émission de rayonnement infrarouge par une molécule sont caractérisés par une raie d'absorption ou d'émission correspondant à une transition de rotation-vibration de la molécule ([1], [2]). Le nombre d'onde ν_0 pour lequel se produit la transition vérifie la relation :

$$E_2 - E_1 = h \cdot c_0 \cdot \nu_0 \tag{3.1}$$

h et c_0 sont la constante de Planck et la vitesse de la lumière dans le vide.

Le spectre de raies d'un milieu gazeux est constitué d'un grand nombre de raies (plusieurs millions). De plus, le spectre associé aux phénomènes d'absorption et d'émission peut être exprimé soit en coefficient d'absorption comme sur la figure 3.2, soit en émissivité (Fig. 4.3), en transmittivité ou en luminance.

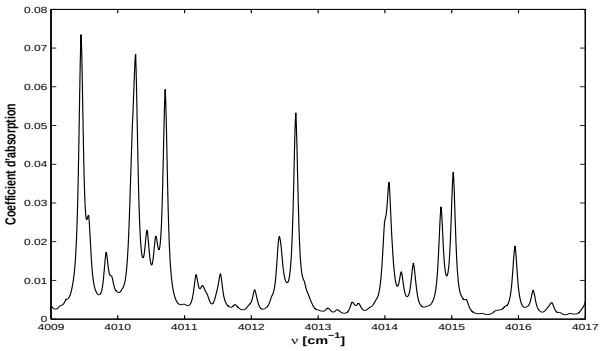


Fig. 3.2 : *Spectre de raies du coefficient d'absorption [cm^{-1}] entre 4009 et 4017cm^{-1} pour un milieu gazeux composé de 40% molaire de H_2O et de 60% d'air à la température de 2550K et à pression atmosphérique.*

Le profil d'une raie dépend de façon complexe des conditions thermophysiques du milieu. Par exemple, la pression ou le nombre de molécules de l'espèce par unité de volume, la fraction molaire de l'espèce active et des autres espèces, qui interviennent comme perturbateurs lors de collisions intermoléculaires pendant la transition, la température ou loi de distribution des vitesses des molécules, éventuellement en non équilibre thermodynamique local, sont autant de facteurs influant sur le spectre. Un spectre réel de gaz est le recouvrement, avec d'éventuels effets de couplages, de l'ensemble des raies liées aux différents phénomènes (émission spontanée, induite, absorption) pour l'ensemble des

transitions existantes. L'objectif de ce chapitre est de présenter le modèle physique permettant le calcul de la variation spectrale du coefficient d'absorption d'un mélange à haute température composé des gaz présents dans le jet issus de la combustion de l'objet pyrotechnique.

3.1.1 Coefficient d'absorption de la phase gazeuse

La transmittivité monochromatique τ_ν d'une colonne de gaz non diffusant, isotherme et isobare, est donnée par la loi de Beer-Lambert :

$$\tau_\nu = \frac{I_\nu}{I_{0_\nu}} = \exp[-\kappa_\nu \cdot e] \tag{3.2}$$

où I_ν est l'intensité monochromatique du rayonnement sortant de la colonne d'épaisseur e et I_{0_ν} est l'intensité monochromatique du rayonnement incident. κ_ν est le coefficient d'absorption du mélange gazeux au nombre d'onde ν. Une raie i d'un gaz g, considérée en première approximation comme isolée, est caractérisée par :

- la position de son centre : $\nu_{0,i} = \frac{E_2 - E_1}{hc_0}$, avec E_2 et E_1 ($E_2 > E_1$) deux niveaux d'énergie d'une espèce donnée et $\nu_{0,i}$ le nombre d'onde du centre de la raie i,
- le profil de raie normalisé (Lorentz, Doppler ou Voigt), $\Phi_i(\nu - \nu_{0,i})$ qui est la fonction caractérisant le profil normalisé de la raie et qui dépend de la température, de la pression, des fractions molaires x_g et $x_{g'}$ en l'espèce absorbante g et dans les partenaires de collisions g'.
- l'intensité de la raie, $S_{g,i}$.

Dans l'approche la plus simple, la raie est supposée isolée, et le coefficient d'absorption monochromatique d'un mélange de gaz est donné par l'addition des contributions de toutes les raies de tous les constituants absorbants, au nombre d'onde ν considéré, soit :

$$\kappa_\nu = \sum_{constituants\ g} \sum_{raies\ i} \Phi_i(\nu - \nu_{0,i})\ n_g S_{g,i} \tag{3.3}$$

où n_g est le nombre de molécules du constituant par unité de volume et dans le cas d'un gaz parfait, n_g est exprimé par :

$$n_g = \frac{x_g p}{k_B T} \tag{3.4}$$

Avec x_g la fraction molaire du gaz absorbant dans le mélange, p la pression totale, k_B la constante de Boltzmann et T la température du mélange. Le profil de raie s'écrit comme une fonction densité de probabilité vérifiant :

$$\int_0^\infty \Phi_i(\nu - \nu_{0,i}) d\nu = 1 \tag{3.5}$$

De plus, l'intensité de la raie est donnée par :

$$S_{g,i} = \frac{1}{n_g} \int \kappa_{\nu,i} d\nu \tag{3.6}$$

3.1.2 Elargissement naturel

L'élargissement naturel de la raie est lié au principe d'incertitude de Heisenberg, selon lequel,

$$\Delta E_2 \Delta t_2 \sim \frac{h}{2\pi} \tag{3.7}$$

où ΔE_2 et Δt_2 sont, respectivement, l'incertitude sur la valeur du niveau d'énergie haut de la transition et l'incertitude sur le temps pendant lequel ce niveau haut est occupé. Une relation analogue à l'équation Eq. 3.7 s'applique au niveau d'énergie bas de la transition. Ces incertitudes conduisent à une incertitude sur la valeur du nombre d'onde du centre de la raie. La fonction de distribution de l'intensité de la raie i est alors donnée par le profil de raie de Lorentz ([2]) :

$$\Phi_{iL} = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma}{(\nu - \nu_{0,i})^2 + \gamma^2} \tag{3.8}$$

avec, γ la demi-largeur à mi-hauteur de la raie représentant le taux de dépeuplement (émission spontanée) des niveaux d'énergie haut et bas. γ peut aussi être interprété comme la somme des inverses des temps de vie naturels (temps d'occupation) des niveaux. Dans notre étude, comme la pression considérée est la pression atmosphérique, les effets dus aux collisions intermoléculaires sur l'élargissement du profil sont prépondérants et les effets de l'élargissement naturel sont négligeables.

3.1.3 Elargissement Doppler

Pour une molécule au repos, l'émission ou l'absorption de rayonnement pour une transition donnée se produit au nombre d'onde $\nu_{0,i}$ (à la largeur naturelle près). Lorsque le lieu d'observation de la molécule change et passe du référentiel de la molécule à celui du laboratoire, la molécule acquiert une certaine vitesse. Ainsi, selon le principe de Doppler, le nombre d'onde de la transition est déplacé. De plus, si le milieu est considéré à l'équilibre thermique, les molécules ont une vitesse modélisée par une distribution de Maxwell-Boltzmann. Alors, le profil de la raie dû à l'élargissement Doppler présente une distribution gaussienne donnée par la relation :

$$\Phi_{iD}(\nu - \nu_{0,i}) = \frac{1}{\gamma_{D,ig}} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}\ e^{-\ln 2 \left(\frac{\nu - \nu_{0,i}}{\gamma_{D,ig}} \right)^2} \tag{3.9}$$

où $\nu_{0,i}$ est le centre de raie et γ_D la demi-largeur à mi-hauteur du profil Doppler. La demi-largeur Doppler, connue avec une très grande précision, traduit l'élargissement d'une raie dû à la vitesse de la molécule observée dans le référentiel du laboratoire. Notons que l'élargissement Doppler ne dépend que de la température thermodynamique T, de la masse molaire M_g de la molécule active et du nombre d'onde mais est indépendant du nombre de molécules de l'espèce considérée ou de la pression du gaz :

$$\gamma_{D,ig} = \frac{\nu_{0,i}}{c_0} \sqrt{2 k_B T \ln 2 \frac{\mathcal{N}_\mathcal{A}}{M_g}} = 1.13\ 10^{-8} \sqrt{\frac{T}{M_g}}\ \nu_{0,i} \tag{3.10}$$

Dans cette expression c_0 est la célérité de la lumière dans le vide, T est la température absolue, $\frac{M_g}{\mathcal{N}_\mathcal{A}}$ est la masse de la molécule absorbante avec M_g sa masse molaire (en [kg·mol^{-1}]) et $\mathcal{N}_\mathcal{A}$ le nombre d'Avogadro. Ce profil est observé dans la réalité lorsque l'effet des collisions intermoléculaires est négligeable, par exemple quand la pression du CO_2 est suffisamment faible à 300K (de l'ordre du mbar).

3.1.4 Elargissement par collisions

La théorie de l'impact postule que la durée d'une collision est très petite devant le temps entre deux collisions. Aussi, seules les collisions binaires sont considérées. Avec cette approximation, la raie a un profil de Lorentz [14] :

$$\Phi_{iL}(\nu - \nu_{0,i}) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{L,ig}}{(\nu - \nu_{0,i} - p\delta_r)^2 + \gamma_{L,ig}^2} \tag{3.11}$$

où γ_L est la demi-largeur à mi-hauteur du profil Lorentz, p la pression totale et δ_r le déplacement du centre de raie induit par collision. Dans le cas de l'élargissement par collision, le profil de Lorentz fait intervenir γ_L qui représente le taux de dépeuplement, induit par collision, des niveaux d'énergie haut et bas d'une transition. Dans cette étude, si la demi-largeur Lorentz n'est pas présente dans les bases de données spectroscopiques, elle est calculable à partir de données tabulées, même à haute température, par la relation valable dans la limite du modèle du gaz parfait :

$$\gamma_{L,ig} = \sum_{g'} x_{g'} \gamma_{L,igg'}^s \frac{p}{p_s} \left(\frac{T_s}{T}\right)^{n_{gg'}} \tag{3.12}$$

où p_s et T_s désignent la pression et la température standards, les $\gamma_{L,igg'}^s$ sont les coefficients d'élargissement d'une raie du composant g par les molécules partenaires de collision g' (g peut être de type g') mesurés et tabulés dans les conditions standards ($T_s = 296K$, $p_s = 1\ atm$). Dans un tel modèle, les effets liés à la durée finie des collisions et les effets d'interférences entre raies sont négligés, de sorte que le coefficient d'absorption s'écrit comme une simple addition des coefficients d'absorption des raies isolées.

3.1.5 Elargissement Voigt

Dans les conditions de température et de pression telles que les effets Doppler et Lorentz sont du même ordre de grandeur, le profil normalisé alors appelé profil Voigt est le produit de convolution des deux profils Lorentz et Doppler :

$$\Phi_{iV}(\nu - \nu_{0,i}) = \frac{1}{\gamma_{D,ig}} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}\ \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x-t)^2} dt \tag{3.13}$$

Les paramètres x et y sont, respectivement, la distance depuis le centre de la raie en unité de largeur Doppler, $x = \sqrt{\ln 2} \frac{\nu - \nu_{0,i} - p\delta_r}{\gamma_{D,ig}}$, et le rapport entre la largeur Doppler et

Lorentz, $y = \sqrt{\ln 2}\frac{\gamma_{L,ig}}{\gamma_{D,ig}}$. Le profil de Voigt est calculé avec l'algorithme de Wells [15] qui est très rapide et reste suffisamment précis (à 10^{-4} près) pour toute valeur du couple (x,y) nécessaire dans un calcul raie par raie. Cependant il existe d'autres algorithmes ([16]-[17]).

3.1.6 Modification du profil de raie

Générallement, le profil d'une raie est représenté par une fonction Lorentz, Doppler ou Voigt selon que l'élargissement de la raie est due aux collisions, à l'effet Doppler ou à une combinaison de ces deux effets. Cependant, ces profils théoriques sont des approximations qui ne sont pas valables dans certaines applications. Par exemple, le rétrécissement collisionnel d'une raie a été prédit et observé la première fois par Dicke [18], et interprété complètement par Galatry [19]. De plus, dans les ailes de raies des effets de recouvrement modifient le profil.

Absorption dans les ailes de raies

Winters et al. [20] ainsi que Burch et al. [21] ont observé que l'absorption dans la tête de bande ν_3 (2400-2600cm^{-1}) du CO_2 était plus faible que celle calculée avec des raies de Lorentz. Depuis lors, le profil de raie est fixé lorentzien et est multiplié par une fonction empirique χ qui décroît rapidement dans les ailes de raies. De cette manière, si la raie est couplée à d'autres raies, il est possible de se limiter au cas de la raie isolée, grâce à l'usage des fonctions phénoménologiques χ. Le modèle précédemment caractérisé par l'équation Eq. 3.3 reste applicable dès lors qu'on utilise un profil, éventuellement Voigt, modifié sous la forme :

$$\Phi_i(\nu - \nu_{0,i}) = \Phi_{iV}(\nu - \nu_{0,i})\chi_{gg'}(\nu - \nu_{0,i}) \tag{3.14}$$

La fonction χ dépend de l'espèce absorbante, des partenaires de collisions, de la raie considérée et s'applique à partir d'une certaine distance spectrale du centre de raie. La forme analytique de χ est indépendante de la raie i considérée. L'intérêt du recours à l'approche pragmatique des fonctions χ est d'adopter un modèle de coefficient d'absorption reposant sur ce profil. Cet artifice permet l'additivité des contributions des différentes raies dans un calcul raie par raie. Les facteurs χ sont en général ajustés sur les résultats expérimentaux. On trouve les expressions des fonctions χ, relatives à des applications atmosphériques, dans [22] pour H_2O et dans les références [23, 24, 25, 26, 27] pour le CO_2. Pour une large gamme de pression (0-60bar) et pour la gamme de températures 190-800 K, les expressions des fonctions χ sont données pour le CO_2 dans [28, 29]. Pour une large gamme de pression (0-70bar) et pour la gamme de températures 296-875 K, les expressions des fonctions χ de H_2O sont données dans [30]. Au delà de 900K aucune valeur des fonctions χ n'a été trouvée dans la bibliographie.

3.1.7 Absorption induite par collisions

L'absorption induite par collisions est un phénomène qui, bien que généralement faible, peut être observé lorsque les épaisseurs optiques (ainsi que la pression) sont importantes. La prise en compte de l'absorption induite par collision peut devenir importante, dans notre étude, si l'épaisseur de la couche atmosphérique est grande. En effet, les seules espèces où les absorptions induites par collision doivent être prise en compte sont O_2 et N_2. Ainsi, lorsque le trajet atmosphérique est de quelques kilomètres la transmittivité de l'air peut être calculée en utilisant les données des références [31, 32].

Après cette courte introduction à la modélisation du spectre de rayonnement des gaz, nous allons aborder à présent le modèle raie par raie qui permet le calcul des spectres synthétiques des molécules gazeuses présentes dans le jet, CO, CO_2 et H_2O.

3.2 Modèle raie par raie

Ce modèle très précis permet de tenir compte des fortes variations du coefficient d'absorption du milieu gazeux en fonction du nombre d'onde ν. Le pas de discrétisation du spectre du coefficient d'absorption est $\Delta\nu_{hr} = 5.10^{-4}$ cm^{-1}. Ainsi, le calcul du transfert par rayonnement est effectué à une échelle plus petite que la largeur de raie qui est typiquement de l'ordre de $\gamma \approx 10^{-2}$ cm^{-1}. Le calcul raie par raie à haute résolution permet d'utiliser les équations de transfert radiatif en monochromatique. De plus, les spectres de coefficients d'absorption moléculaire très fins obtenus par le raie par raie ont deux objectifs :

1. la résolution précise de l'équation de transfert radiatif qui fournit une *solution de référence* pouvant être comparée à des solutions obtenues avec des modèles approchés.

2. La tabulation de paramètres utiles aux modèles approchés.

3.2.1 Calcul du coefficient d'absorption

Pour construire un spectre à haute résolution du coefficient d'absorption d'un mélange de gaz, le modèle de raie le plus utilisé, et dont la précision est suffisante pour les applications envisagées, est celui de la raie isolée. Ce modèle raie par raie permet le calcul du coefficient d'absorption volumique monochromatique κ_ν, d'un mélange de gaz, par la relation :

$$\kappa_\nu = \sum_g \frac{x_g p}{k_B T} \sum_i S_{ig}(T)\Phi_i(\nu - \nu_{0,i}) \tag{3.15}$$

L'intensité S_{ig}, à la température T, est obtenue à partir des caractéristiques de la transition contenues dans une base de données spectroscopiques (BDS) et de la relation :

$$S_{ig}(T) = S_{0,i}(T_0, \nu_{0,i}) \frac{Q(T_0)}{Q(T)} \frac{e^{-\frac{E_i''}{k_B T}}}{e^{-\frac{E_i''}{k_B T_0}}} \frac{\left(1 - e^{-\frac{hc\nu_{0,i}}{k_B T}}\right)}{\left(1 - e^{-\frac{hc\nu_{0,i}}{k_B T_0}}\right)} \tag{3.16}$$

Avec $S_{0,i}$ l'intensité de la raie à la température de référence T_0, $Q(T)$ la fonction de partition de l'espèce gazeuse, E_i'' l'énergie du niveau bas de la transition, h la constante de Planck et c la célérité de la lumière.

HITRAN [33] est la plus connue des BDS, elle contient de nombreuses informations pour plusieurs molécules mais son utilisation est limitée aux calculs de spectres atmosphériques terriens, donc aux basses températures. Lorsque des molécules sont portées à hautes températures, leur rayonnement est composé de raies issues de transitions différentes de celles intervenant à basses températures (températures atmosphériques). Pour des molécules à hautes températures il existe des BDS publiques (et disponibles via Internet) incluant la liste des raies présentes à hautes températures :

1. Pour H_2O, il existe HITEMP [33] (qui est la version haute température de HITRAN) mais sa validité a été reconnue pour des températures inférieures à 1000K. Une liste des raies de H_2O à haute température a été également calculée par Partridge et Schwenke [34].
2. Pour CO_2, il y a HITEMP (valable pour des températures inférieures à 1000K) et CDSD1000 [35] qui contient un plus grand nombre de raies que HITEMP à haute température.
3. Pour CO qui est une molécule diatomique, la BDS HITEMP est valable pour de très hautes températures.

Il est à noter qu'il n'existe pas encore de BDS publiques valables à haute température pour d'autres molécules. Pourtant, si le besoin existe, les BDS de HITRAN peuvent être utilisées mais avec précaution puisque les BDS HITRAN sont valables pour des températures atmosphériques. Dans notre étude, la BDS utilisée pour H_2O est une concaténation des raies issues des BDS de Partridge et Schwenke et de HITEMP. Cette concaténation a été fournie par l'ONERA sous forme d'une liste de raies. Comme la BDS de Partridge et Schwenke [34] contient seulement le nombre d'onde, l'énergie de niveau bas de la transition et l'intensité de la raie, il manque donc la demi-largeur à mi-hauteur qui sera calculée par les relations empiriques de Delaye et al. [36]. Pour CO_2, CDSD1000 est choisie puisqu'elle donne des résultats meilleurs que HITEMP à haute température. Enfin, pour CO, HITEMP est utilisée. Les BDS HITRAN, HITEMP et CDSD1000 donnent des demi-largeurs Lorentz pour deux types de partenaires de collision, la molécule elle-même et l'air. Lorsque d'autres partenaires de collisions sont présents tels que H_2O et CO_2 des relations empiriques [36, 37, 38] sont utilisées pour compléter le calcul de la demi-largeur Lorentz de la raie.

Le profil de raie calculé est celui de Voigt qui est la convolution du profil de Doppler (élargissement par effet Doppler) et du profil de Lorentz (élargissement par collisions). L'algorithme utilisé pour le calcul du profil Voigt est celui de Wells [15] dont la précision est 10^{-4}.

$$\Phi_{iV}(\nu - \nu_{0,i}, p, T) = \frac{1}{\gamma_{D,ig}}\sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}}\frac{y}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-t^2}}{(x-t)^2+y^2}dt \tag{3.17}$$

$$x = \sqrt{\ln 2}\frac{\nu - \nu_{0,i}}{\gamma_{D,ig}} \tag{3.18}$$

$$y = \sqrt{\ln 2}\frac{\gamma_{L,ig}}{\gamma_{D,ig}} \tag{3.19}$$

L'intégrale dans l'expression de Φ_{iV} est calculée numériquement et fait intervenir les paramètres x et y qui définissent respectivement la distance depuis le centre de la raie en unités de demi-largeur Doppler et le rapport entre les demi-largeurs Lorentz et Doppler.

Même pour des raies isolées, le profil de Voigt n'est qu'une approximation. Pour une étude fine des spectres (de l'ordre du pourcent), trois mécanismes doivent être pris en compte :

1. Le premier résulte des changements (en module et direction) de la vitesse de la molécule active engendrés par les collisions. L'influence sur le profil est un rétrécissement qui apparaît dans le régime de pression où les largeurs Doppler et Lorentz sont du même ordre (effet de type Dicke-Galatry [18, 19]).
2. Le second vient du fait que le profil résulte d'une moyenne de Boltzmann sur la distribution des vitesses absolues des molécules actives. Un traitement correct doit donc inclure la dépendance des paramètres collisionnels par rapport à cette vitesse dans un profil dont on effectue ensuite la moyenne. Un des effets marquants de ce mécanisme est le fait que les raies deviennent asymétriques.
3. Le troisième est causé par le recouvrement de raies (en anglais, line mixing). Il apparaît lorsque des collisions entre une molécule active et un partenaire de collision conduisent à un transfert de population entre les niveaux de rotation-vibration de la molécule et à une redistribution de l'intensité spectrale dans une bande. L'effet est proportionnel à la concentration du partenaire de collision et augmente avec la pression.

Pour les systèmes moléculaires étudiés, les conséquences des deux premiers mécanismes sont très faibles, ils ne sont importants que pour des mélanges de molécules actives légères et perturbateurs lourds, tel que H_2-Xe. Pour le troisième mécanisme, lorsque les transitions d'une même bande sont suffisamment élargies par les collisions pour que leurs profils se recouvrent notablement, les raies ne peuvent plus être considérées isolées. C'est donc une situation que l'on rencontre toujours dans les ailes ou si la pression est suffisamment élevée. Avec les densités modérées considérées dans cette étude le recouvrement apparaît dans les régions où les raies sont très proches (telles que les branches Q, par exemple).

Négliger les interférences entre des raies voisines peut conduire à des erreurs importantes dans des zones très localisées du spectre. Néanmoins, cette approximation retenue par la suite, n'a qu'un poids négligeable sur le flux total [39]. En revanche, la modification du profil dans les ailes de raies est pris en compte. La fonction χ utilisée dans le raie par raie est celle de Cousin et al. [23] pour le CO_2 perturbé par N_2 et O_2 à 296K puis celle de Le Doucen et al. [24], Menoux et al. [26] pour le CO_2 perturbé par lui-même. Pour H_2O, la tabulation de Clough et al. [22] est retenue pour le code raie par raie. Il est à noter que la fonction empirique χ permet de corriger le coefficient d'absorption dans les ailes de raies afin de retrouver les spectres expérimentaux. Dans cet objectif, les tabulations publiées ont été réalisées en ajustant des données expérimentales aux sens des moindres carrés par un spectre de raies lorentziennes corrigées. La correction dépend alors de plusieurs paramètres tels que la zone spectrale étudiée, la température et la pression. En conséquence, lorsque l'on applique la fonction χ la correction reste approximative. La fonction empirique χ intervient à quelques nombres d'onde du centre de la raie (de 3 à 25 cm^{-1} en fonction de la tabulation) et le profil de la raie est alors calculé par la formule dimensionnelle :

$$\Phi_i(\nu - \nu_{0,i}) = \frac{1}{\pi}\frac{p}{p_s}\frac{\sum_{g'} \chi_{gg'} \cdot x_{g'}\gamma^s_{L,igg'}\left(\frac{T_s}{T}\right)^{n_{gg'}}}{(\nu - \nu_{0,i})^2 + \gamma^2_{L,ig}} \tag{3.20}$$

3.2.2 Grilles spectrales et projection des raies

La discrétisation de l'espace des nombres d'onde est réalisée en utilisant une méthode de grilles multiples qui permet d'économiser le temps de calcul. L'idée directrice est qu'au centre de la raie les variations du profil sont plus rapides que dans les ailes. Le coefficient d'absorption au centre de la raie est calculé sur une grille fine puis à mesure que l'on s'éloigne on bascule sur une grille plus lâche avec à chaque fois un pas $\Delta\nu$ deux fois plus large (Fig. 3.3a). Ainsi, la discrétisation de la raie est fine au centre de la raie et moins résolue dans les ailes. Le nombre de calculs du profil de la raie est ainsi optimisé et le temps de calcul diminué. Lorsque toutes les raies du spectre sont traitées, les coefficients d'absorption calculés sur la grille la plus lâche sont projetés et interpolés sur la grille immédiatement plus fine (Fig. 3.3b). Les critères de basculement entre grilles servent à optimiser le pas de discrétisation de la raie en conservant une erreur d'interpolation inférieure à 0.3%. Ces critères ainsi que la méthode d'interpolation linéaire ont été étudiés par Ibgui [39] et sont utilisés dans le code raie par raie.

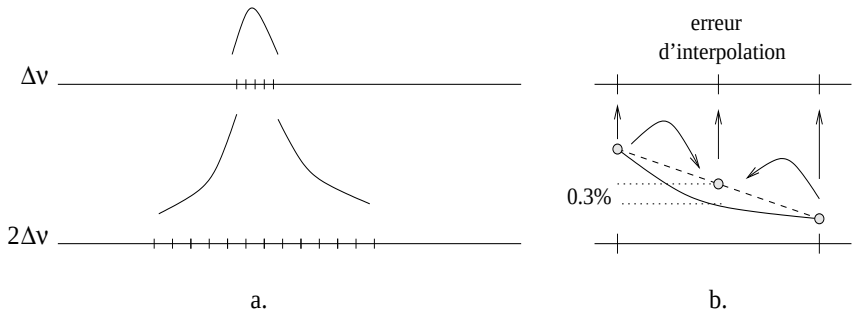


Fig. 3.3 : *Principe de la méthode de grilles multiples, (a.) : augmentation du pas de discrétisation, (b.) : erreur d'interpolation inférieure à* 0.3%

Dans l'objectif de gagner du temps de calcul, un choix des raies est réalisé avant le calcul du profil de raie. Ce choix porte sur la prise en compte de la raie en fonction de la valeur de son intensité. Ibgui [39] donne une revue des méthodes employées pour trier les raies à prendre en compte pour le calcul d'un spectre raie par raie. Dans notre étude, après avoir réalisé plusieurs tests numériques, la coupure sur l'intensité est choisie égale à S_{cut}=10^{-25}cm^{-2}. De cette manière, les raies dont l'intensité (Eq. 3.16) est inférieure à S_{cut} ne sont pas comptabilisées dans le calcul du coefficient d'absorption. Ces raies sont alors considérées comme négligeables et le calcul de la raie n'est donc pas entrepris. De même, le profil est calculé dans une aile de raie, jusqu'à une certaine limite fixée à $\Delta\nu_{cut} = 500$ cm^{-1}. Dans l'étude, le pas de la grille à haute résolution est choisi égal à $\Delta\nu_{hr}$=5.10^{-4} cm^{-1}.

La programmation du raie par raie est effectuée en Fortran 90. Ce langage a permis d'utiliser des pointeurs qui favorisent un gain optimal de place mémoire dans la gestion des grilles multiples. La taille du vecteur du coefficient d'absorption dépend des bornes de la plage spectrale utile au calcul. Pour une plage spectrale de 1000 cm^{-1}, par exemple, avec une haute résolution spectrale ($\Delta\nu_{hr}$) la taille du vecteur du coefficient d'absorption est alors de 8 Megaoctets pour un vecteur simple précision. La méthode de grilles multiples conduit à utiliser le double de place mémoire nécessaire à la grille la plus fine. Pour traiter l'exemple précédent, la place mémoire requise pour les grilles multiples est 16 Megaoctets. Ce doublement de taille mémoire est la contrepartie à fournir pour accélérer le temps de calcul en utilisant la méthode des grilles multiples.

3.2.3 Validation du logiciel raie par raie

Rosenmann et al. [40] ont publié une portion du spectre de CO_2 autour de 2271.75 cm$^-$1. Le spectre de la transmittivité a été mesuré dans les conditions suivantes : T=789 K, p=18 mbar, x_{CO_2}=1, e=11.48 cm. De plus, ce spectre a été utilisé par Taskhun et al. [35] pour valider à haute résolution la base de donnée CDSD1000. Comme le spectre à obtenir est bien connu, le calcul de ce spectre en utilisant CDSD1000 permet de valider le code raie par raie (en anglais, Line By Line, LBL) utilisé par la suite. La comparaison du

spectre expérimental et du spectre calculé sur la Fig. 3.4 montre une bonne concordance et ce même résultat est obtenu par Taskhun et al. (Voir Fig.4 dans [35]).

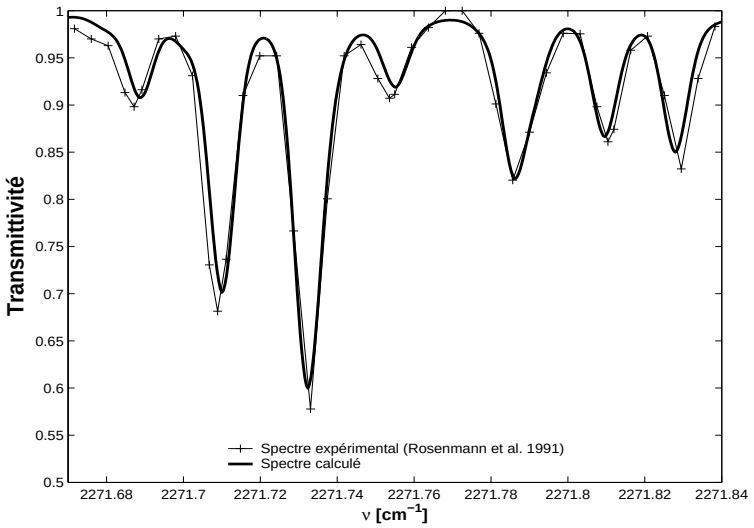


Fig. 3.4 : *Transmittivité spectrale haute résolution du CO_2 proche de 2271.75cm^{-}1 : (-+-) spectre expérimental [40]; (—) spectre calculé. T=789 K, p=18 mbar, x_{CO_2}=1, e=11.48 cm.*

La figure Fig.3.5 compare un spectre expérimental de H_2O à haute température mesuré par Ludwig [41] avec un spectre calculé par le logiciel LBL en utilisant la BDS de l'ONERA [42]. Le spectre d'émissivité de H_2O est mesuré dans les conditions suivantes : x_{H_2O}=0.1735, T=1450 K, p=1 atm, e=150 cm. Le spectre calculé est convolué en utilisant une fonction d'appareil triangulaire de 40 cm^{-1} de largeur à mi-hauteur [43]. Une bonne concordance entre le spectre expérimental de Ludwig [41] et le spectre calculé est trouvée dans la région spectrale au-delà de 4000 cm^{-1}. Par contre, dans l'intervalle spectral compris entre 3880 et 4000 cm^{-1} le spectre calculé sous-estime l'émissivité de 10% environ. Cette erreur vient soit de la BDS, soit d'une incertitude sur la mesure.

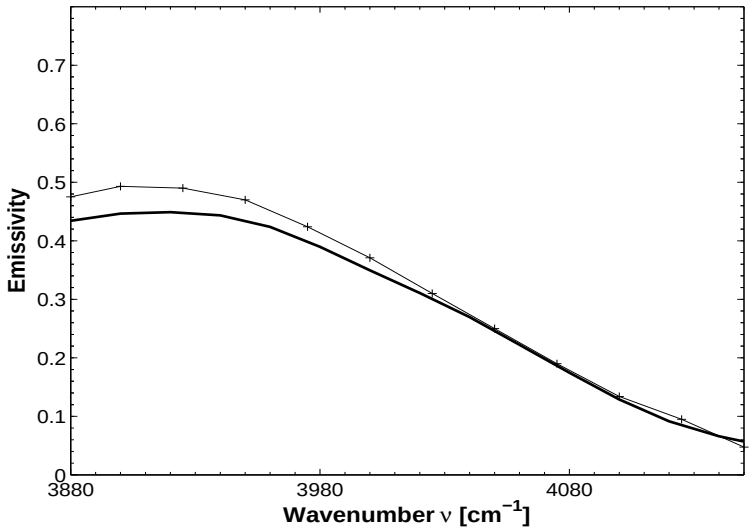


Fig. 3.5 : *Emissivité spectrale de H_2O entre 3880 et 4180 cm^{-}1 : (-+-) spectre expérimental [41] ; (—) spectre calculé. T=1450 K, p=1 atm, x_{H_2O}=0.1735, e=150 cm.*

Compte tenu de la difficulté d'évaluer la qualité des bases de données spectroscopiques existantes surtout pour les hautes températures nous avons admis que le code raie par raie développé était validé.

Comme nous disposons d'un code LBL, nous avons pu tracer, sur les figures A.1 et A.2 de l'annexe A, l'émissivité pour les molécules H_2O, CO_2 et CO à quatre températures différentes.

De plus, le LBL permettra, par la suite, de disposer d'un calcul de référence ainsi que d'un outil de création de bases de données nécessaires aux modèles spectraux de bandes étroites.

Quelques uns de ces modèles spectraux de bandes étroites sont présentés dans le prochain chapitre.

4

Modèles de bandes étroites et modèles de télédétection infrarouge

Sommaire

4.1 Généralités sur l'équation de transfert radiatif 30

4.1.1 Equation de transfert radiatif 30

4.1.2 solution particulière de l'ETR 32

4.2 Modèle statistique aléatoire de Malkmus 36

4.2.1 Cas d'un gaz seul 36

4.2.2 Cas d'un mélange de gaz 39

4.3 Modèle de bandes étroites en k-distributions corrélés (CK) . 40

4.3.1 Cas d'un gaz seul 40

4.3.2 Cas d'un mélange 43

4.4 Hypothèse des gaz fictifs (FG) 46

4.5 Hypothèse d'un gaz unique pour le mélange (SMG) 48

4.6 Modèles de télédétection infrarouge 49

4.6.1 Modèles CKFG-SMG et CK-SMG 49

4.6.2 Tabulation des modèles 51

4.6.3 Validation des modèles et de la tabulation 54

4.7 Etude sur l'approximation de gaz unique pour les mélanges CO_2-H_2O 69

4.7.1 Configuration atmosphérique 70

4.7.2 Résultats de la configuration atmosphérique 71

4.7.3 Configuration école 75

4.7.4 Résultats de la configuration école 76

4.8 Conclusion 88

Dans les modèles de bandes étroites (MBE), le spectre utile du mélange de gaz est subdivisé en bandes suffisamment étroites pour que la fonction de Planck et les propriétés radiatives des parois ou des particules puissent être considérées comme constantes sur chaque bande spectrale. La largeur d'une bande étroite est généralement prise égale à 25 cm^{-1}.

Il existe deux grandes catégories de modèle de bandes étroites. Goody et Yung [44] et Taine et Soufiani [10] donnent une revue complète des MBE.

La famille des modèles statistiques à bandes étroites (MSBE, en anglais Statistical Narrow Band, SNB) constitue une des catégories de MBE où un certains nombre d'hypothèses concernant les positions des raies d'absorption ainsi que leurs profils et leurs intensités conduisent à des expressions de la transmittivité moyenne d'une colonne gazeuse homogène et isotherme.

L'autre catégorie de MBE est fondée sur l'utilisation de la fonction de distribution du coefficient d'absorption (k-distribution) qui utilise le caractère répétitif du spectre du coefficient d'absorption. Les différences entre ces deux catégories de modèles résident dans les paramètres disponibles pour calculer le transfert de rayonnement dans un milieu semi-transparent. En effet, pour généraliser, les modèles SNB fournissent une transmittivité moyenne sur la bande étroite tandis que les modèles en k-distributions donnent un coefficient d'absorption.

Par la suite, le SNB de Malkmus est présenté dans le cas d'un gaz seul puis dans le cas d'un mélange gazeux. Son utilisation pour le calcul du transfert de rayonnement monodimensionnel dans un milieu comportant un mélange gazeux hétérogène et anisotherme est décrit. De la même manière, le principe et l'utilisation du MBE avec les k-distributions est exposé. Ensuite, l'hypothèse des gaz fictifs est rappelée ainsi que l'hypothèse d'un gaz unique pour représenter le mélange. Enfin, le modèle de télédétection infrarouge à bandes étroites retenu pour l'étude est présenté et sa tabulation est décrite et validée.

Avant de détailler les modèles de bandes étroites, nous allons effectuer quelques rappels sur l'équation de transfert radiatif.

4.1 Généralités sur l'équation de transfert radiatif

4.1.1 Equation de transfert radiatif

L'équation de transfert radiatif (ETR) (Eq. 4.1) régit la propagation du rayonnement électromagnétique monochromatique dans un milieu ([1], [4]). Trois hypothèses importantes sont utilisées dans l'écriture de l'ETR et sont supposées vérifiées dans l'ensemble de l'étude sur les transferts radiatifs conduite par la suite.

1. Le milieu considéré est supposé être à l'équilibre thermodynamique local (ETL). Localement, la distribution d'énergie des états moléculaires est considérée identique à celle qui s'établirait dans un système à l'état d'équilibre thermodynamique et

soumis aux mêmes conditions.

2. La variation temporelle de la luminance est négligée, ce qui est généralement vrai dans les problèmes de transfert de chaleur.
3. L'indice complexe de réfraction (n) est supposé égal à l'unité pour les gaz ([45]), ce qui constitue une bonne approximation pour un grand nombre de gaz à pression atmosphérique.

Le milieu étudié dans le cadre de cette étude, est constitué d'un mélange de gaz semi-transparents, à la température $T_g(s)$, ainsi que de particules de natures et de tailles différentes, à la température $T_p(s)$. Ce milieu est supposé absorbant (gaz et particules), émissif (gaz et particules) et diffusant (diffusion élastique et anisotrope du rayonnement par les particules).

Les différentes contributions radiatives sont exposées sur la figure 4.1. La variation de luminance monochromatique L_ν selon le chemin $\vec{s}$, dans l'angle solide $d\Omega$ autour de la direction de $\vec{s}$ (Fig. 4.1), est donnée par l'équation de transfert radiatif :

$$\begin{aligned}\underbrace{\vec{e}_\Omega \cdot \nabla L_\nu(s,\vec{e}_\Omega)}_{\text{VARIATION}} = & - \underbrace{\Big[\kappa_\nu(s) + \kappa_{p_\nu}(s) + \sigma_{p_\nu}(s)\Big] L_\nu(s,\vec{e}_\Omega)}_{(1)+(2)} \\ & + \underbrace{\kappa_\nu(s) L^o_\nu(T_g) + \kappa_{p_\nu}(s) L^o_\nu(T_p)}_{(4)} \\ & + \underbrace{\int_{4\pi} \sigma_{p_\nu} L_\nu(s,\vec{e}_{\Omega'})\; p_\nu(s,\vec{e}_{\Omega'} \to \vec{e}_\Omega) d\Omega'}_{(3)}\end{aligned} \tag{4.1}$$

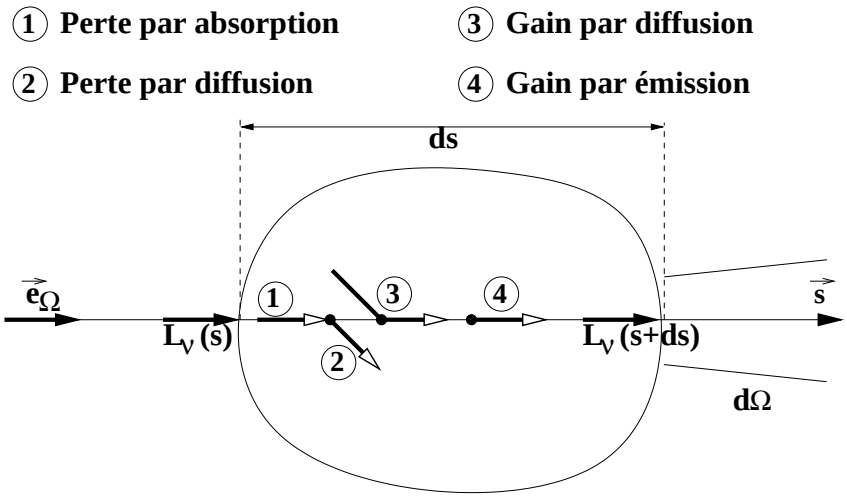


Fig. 4.1 : *Transfert radiatif 1D dans un milieu émissif, absorbant et diffusant.*

L'ETR (Eq. 4.1) est écrite pour un rayonnement monochromatique de nombre d'onde ν. La signification des termes composant l'ETR est la suivante :

- VARIATION : Variation spatiale de la luminance monochromatique, $L_\nu(s, \vec{e}_\Omega)$.
- (1)+(2) : Pertes par absorption et diffusion dues aux particules ainsi qu'aux espèces gazeuses.
- (4) : Gain par émission dû aux particules ainsi qu'au mélange de gaz.
- (3) : Gain par diffusion, dans la direction $\vec{e}_\Omega$, du rayonnement provenant de toutes les directions $\vec{e}_{\Omega'}$.

La luminance monochromatique, L_ν, représente l'énergie émise à la surface d'un corps par unité de temps, dans un intervalle de nombre d'onde $d\nu$ centré en ν, par unité de surface élémentaire, dans un angle solide élémentaire centré dans la direction $\vec{e}_\Omega$. Son unité est alors : [W·m^{-2}·(m^{-1})$^{-1}$·sr^{-1}]. $\vec{s}$ représente le vecteur unitaire sur le chemin le long duquel la luminance est transportée. A chaque position sur le chemin correspond une abscisse curviligne s. Le pas ds définit l'écart entre deux positions sur le chemin. L'angle solide $d\Omega$ de vecteur directeur $\vec{e}_\Omega$ est définie en fonction des angles θ et ϕ intervenant dans les repères en coordonnées sphériques, $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$. Les coefficients monochromatiques volumiques d'absorption par le mélange gazeux et par le nuage de particules sont notés respectivement κ_ν et κ_{p_ν}. Comme seule la diffusion par les particules est prise en compte, le coefficient monochromatique volumique de diffusion est noté σ_{p_ν}. L'unité de ces coefficients est : [m^{-1}]. L^o_ν est la luminance monochromatique du corps noir qui est calculée grâce à la fonction de Planck. Pour un milieu dont l'indice de réfraction est égal à l'unité, la loi de distribution de Planck est :

$$L^o_\nu(T) = \frac{2hc_0^2\nu^3}{(e^{\frac{hc_0\nu}{k_BT}} - 1)} \qquad [W \cdot m^{-2} \cdot (m^{-1})^{-1} \cdot sr^{-1}] \tag{4.2}$$

La luminance du corps noir est souvent exprimée par unité de longueur d'onde (par μm) et la fonction de Planck s'écrit alors :

$$L^o_\lambda(T) = \frac{2hc_0^2 10^{-6}}{\lambda^5(e^{\frac{hc_0}{k_B\lambda T}} - 1)} \qquad [W \cdot m^{-2} \cdot \mu m^{-1} \cdot sr^{-1}] \tag{4.3}$$

La longueur d'onde λ (unité en [m]) et le nombre d'onde ν (unité en [m^{-1}]) sont ceux mesurés dans le vide. h, c_0, k_B désignent respectivement la constante de Planck ($h = 6.6260755.10^{-34}$ [J·s]), la vitesse de la lumière dans le vide ($c_0 = 2.99792458.10^8$ [m·s^{-1}]) et la constante de Boltzmann ($k_B = 1.380658.10^{-23}$ [J·K^{-1}]). p_ν est la fonction de phase monochromatique représentant la distribution angulaire de l'énergie diffusée par une particule. De la même manière, $p_\nu(s, \vec{e}_{\Omega'} \rightarrow \vec{e}_\Omega)$ définit la densité de probabilité pour que l'énergie diffusée arrive de la direction $\vec{e}_{\Omega'}$ et reparte dans la direction $\vec{e}_\Omega$.

4.1.2 solution particulière de l'ETR

Dans le cas particulier où les effets de la diffusion par les gaz et les particules sont négligeables et si on suppose identiques les températures des gaz et des particules à l'abscisse curviligne s, la solution de l'ETR (Eq. 4.1) s'écrit en grandeurs monochromatiques

dans un angle solide $d\Omega$ selon la direction $\vec{e}_\Omega$ (ligne de visée entre les abscisses 0 et ℓ) :

$$L_\nu(\ell) = L_\nu(0) \cdot \tau_\nu(0,\ell) + \int_0^\ell L_\nu^o(T,s)\frac{\partial \tau_\nu(s,\ell)}{\partial s}ds \tag{4.4}$$

avec,

$$\tau_\nu(s,\ell) = exp\Big[-\int_s^\ell (\kappa_\nu + \kappa_{p_\nu})ds'\Big] \tag{4.5}$$

la transmittivité monochromatique le long d'une ligne de visée traversant un milieu hétérogène et anisotherme.

De plus, lorsque cette solution particulière de l'ETR est moyennée sur une bande étroite (de largeur $\Delta\nu$), elle devient :

$$\overline{L}(\ell) = \overline{L(0) \cdot \tau(0,\ell)} + \int_0^\ell \overline{L^o}(s)\frac{\partial \overline{\tau}(s,\ell)}{\partial s}ds \tag{4.6}$$

en considérant la luminance de Planck constante sur l'intervalle spectral de la bande étroite et avec l'expression suivante de la transmittivité moyenne :

$$\overline{\tau}(s,\ell) = \frac{1}{\Delta\nu}\int_{\Delta\nu} exp\Big[-\int_s^\ell (\kappa_\nu + \kappa_{p_\nu})ds'\Big]d\nu \tag{4.7}$$

L'intérêt de cette expression de la solution de l'ETR sur une bande étroite réside dans la diminution du temps de calcul. En effet, lors de l'intégration de la luminance sur tout le spectre l'équation monochromatique Eq.4.4 doit être calculée à chaque nombre d'onde ce qui engendre des temps de calculs très importants dans des cas simples. Pour cette raison, il est intéressant de diminuer le nombre de calcul lorsqu'il faut intégrer la luminance sur tout le spectre et le moyen employé est la diminution de l'information spectrale à travers la connaissance de la transmittivité moyenne dans une bande étroite.

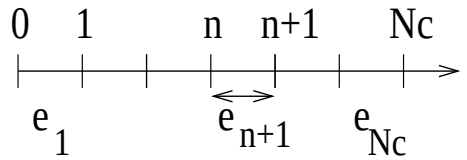


Fig. 4.2 : *Représentation d'une ligne de visée traversant une colonne hétérogène et anisotherme discrétisée en N_c éléments homogènes et isothermes.*

Comme il est possible de calculer une transmittivité moyenne dans une bande étroite d'un milieu homogène et isotherme, la ligne de visée est discrétisée en N_c colonnes homogènes et isothermes (Fig. 4.2). En considérant que :

1. $\overline{L}(0)$ est décorrélée de $\overline{\tau}$ (e.g. la luminance $\overline{L}(0)$ provient d'une paroi noire ou faiblement réfléchissante),
2. le mélange est composé de N_g gaz ainsi que d'un nuage de particules, avec pour coefficients d'absorption monochromatiques respectifs κ_ν^i et κ_{p_ν},

3. comme les variations de κ_{p_ν} sont faibles dans une bande étroite, κ_{p_ν} est supposé constant dans la bande étroite.

la solution discrétisée de l'ETR s'écrit :

$$\overline{L}(\ell) = \overline{L}(0) \cdot \overline{\tau}(0, N_c) + \sum_{n=1}^{N_c} \overline{L^o}(T_n) \Big[\overline{\tau}(n, N_c) - \overline{\tau}(n-1, N_c) \Big] \tag{4.8}$$

avec,

$$\overline{\tau}(n, N_c) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} exp\Big[- \sum_{n'=n+1}^{N_c} (\sum_{i=1}^{N_g} \kappa^i_{\nu,n'} + \kappa_{p_\nu,n'}) e_{n'} \Big] d\nu \tag{4.9}$$

Si le milieu contient uniquement le mélange gazeux, sans particule, la transmittivité devient alors :

$$\overline{\tau}(n, N_c) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp\Big[- \sum_{n'=n+1}^{N_c} \Big(\sum_{i=1}^{N_g} \kappa^i_{\nu,n'} \Big) e_{n'} \Big] \tag{4.10}$$

La résolution de l'équation Eq. 4.8 demande le calcul précis de la transmittivité moyenne $\overline{\tau}(n, N_c)$ de la couche hétérogène et anisotherme composée des couches homogènes et isothermes d'indice n jusqu'à N_c. La difficulté de ce calcul réside dans la prise en compte des fortes variations de la transmittivité monochromatique qui ont deux origines :

1. à l'intérieur d'une bande étroite la transmittivité varie avec le nombre d'onde (spectre de raies),
2. le long de la ligne de visée, les couches à températures et concentrations différentes ont leurs propres spectres de raies.

En effet, le rayonnement émis et absorbé le long d'une ligne de visée traversant un milieu anisotherme et hétérogène est fortement dépendant des positions et des intensités des raies qui composent les spectres de chaque couche. Dans la littérature, cette dépendance est appelée *corrélation spectrale*. Par ailleurs, l'émission et l'absorption par des couches de faibles épaisseurs optiques se concentrent autour des centres de raies tandis que pour des couches de fortes épaisseurs optiques l'émission et l'absorption est présente autour du centre de raie mais aussi dans les ailes de raie. Cette information spectrale est restituée entièrement par les calculs utilisant une résolution fine du spectre de raie. Le modèle raie par raie fournit la précision requise. Par contre, lorsqu'un modèle de bande étroite est utilisé, les propriétés spectrales sont intégrées sur une bande de largeur $\Delta\nu$ et l'information spectrale haute résolution est alors perdue.

Pour illustrer ce propos, considérons par exemple, trois couches composées d'air (N_2, O_2) et de H_2O, chacune homogène en température et concentration comme représentée dans le tableau 4.1. Tout d'abord on regroupe les raies de H_2O de manière à ce que le groupe des raies froides soit constitué de raies dont l'énergie du niveau bas de la transition soit inférieure à 1500cm^{-1}. Dans le second groupe, celui des raies chaudes, toutes les raies restantes y sont consignées. Ensuite, les spectres de raies de chaque couche sont calculés et l'émissivité spectrale ($\epsilon_\nu = 1 - \tau_\nu$) correspondante est donnée sur la figure 4.3 où les raies chaudes et les raies froides sont tracées respectivement en rouge et bleu.

Tab. 4.1 : *Récapitulation des caractéristiques des trois couches de gaz.*

T=2000K	T=1000K	T=300K
e=10cm	e=10cm	e=10m
x_{H_2O}=0.1	x_{H_2O}=0.1	x_{H_2O}=0.01

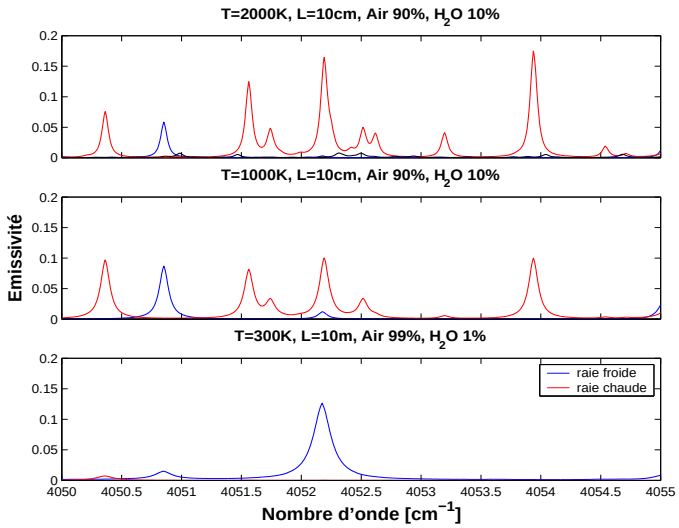


Fig. 4.3 : *Spectres de l'émissivité de trois couches d'un mélange H_2O-Air entre 4050 et 4055cm^{-1}.*

La figure 4.3 montre alors que dans la bande spectrale de 5cm^{-1} de large, il existe un spectre de raie qui évolue avec la température. En particulier, à faible température, le spectre est composé de raies appartenant au premier groupe (raies froides) tandis qu'à haute température il est essentiellement composé de raies issues du second groupes (raies chaudes). Si on doit calculer le rayonnement émis par la couche à 2000K et absorbé par les deux autres couches (Fig. 4.3), on obtient le meilleur résultat en utilisant un modèle raie par raie qui calcule l'équation 4.4 avec des grandeurs monochromatiques en discrétisant l'intervalle des nombres d'onde assez finement ($\Delta\nu$=5.10^{-4}cm^{-1}). Cependant, le temps de calcul étant très élevé, on préfère utiliser un modèle de bande étroite qui calcule l'équation 4.6 en considérant des propriétés radiatives moyennes sur la bande étroite (par exemple, $\Delta\nu$=5cm^{-1}). Avec cette méthode l'information spectrale sur la position et l'intensité des raies est perdue, les spectres des trois couches sont alors supposés décorrélés. En conséquence, lorsque les propriétés radiatives (émissivité, transmittivité etc.) sont moyennées dans une bande étroite, on commet une erreur quand on calcule un transfert de rayonnement à travers des couches composées du même gaz et ayant de grands écarts de températures. En effet, il n'existe plus d'information sur le positionnement des raies dans la bande étroite.

Pour approfondir les modèles spectraux de bandes étroites, nous allons commencer par une présentation du modèle de Malkmus.

4.2 Modèle statistique aléatoire de Malkmus

4.2.1 Cas d'un gaz seul

Les différents modèles statistiques à bandes étroites se distinguent entre eux par les hypothèses faites sur la distribution des positions et des intensités des raies à l'intérieur d'une bande étroites ainsi que sur les profils de raies. Dans tous les cas, le but des MSBE consiste à obtenir une expression simple de la transmittivité d'une colonne gazeuse, d'épaisseur e, moyennée sur $\Delta\nu$:

$$\overline{\tau} = \frac{1}{\Delta\nu}\int_{\Delta\nu} \exp[-\kappa_\nu e]d\nu \tag{4.11}$$

Cette transmittivité doit être une fonction de quelques paramètres résumant de façon statistique les propriétés spectroscopiques de l'ensemble des N raies à l'intérieur de $\Delta\nu$. Au vu de la structure des spectres à haute résolution, on suppose que les raies de la plupart des molécules d'intérêt pratique ont des positions aléatoires dans une bande étroite. Les hypothèses requises pour obtenir l'expression générale de $\overline{\tau}$ dans l'approche des modèles aléatoires sont :

- L'intervalle $\Delta\nu$ contient un grand nombre N de raies.
- Les positions des centres des N raies sont aléatoires dans $\Delta\nu$ et sont statistiquement indépendantes. Les intensités des raies sont également supposées statistiquement indépendantes.
- Les intensités des raies peuvent être représentées par une loi de distribution probabiliste $P(S)$.
- L'absorption dans $\Delta\nu$ est exclusivement due aux N raies centrées à l'intérieur de $\Delta\nu$ mais toute l'étendue spectrale de chacune de ces N raies est supposée incluse dans $\Delta\nu$.

Ainsi, la probabilité totale pour qu'un photon de nombre d'onde ν appartenant à $\Delta\nu$ soit absorbé par la colonne gazeuse d'épaisseur e est donné par [1] :

$$\overline{\alpha}_\nu = 1 - \prod_{i=1}^{N}(1 - \frac{1}{\Delta\nu}\int_{S_i} P(S_i)W_i(S_i)dS_i) \tag{4.12}$$

avec $W_i(S_i)$ la largeur de la raie noire équivalente à la raie i. $W_i(S_i)$ dépend du profil et notamment de la largeur de la raie particulière i. On fait une hypothèse supplémentaire :

- Les N raies ont le même profil spectral caractérisé par une même demi-largeur à mi-hauteur effective γ_0.

$W_i(S_i)$ devient alors une fonction unique de S_i : $W(S_i)$. Par ailleurs, l'intégrale sur les valeurs possibles de S_i ne dépend plus de la raie et S_i devient une variable muette d'intégration. Finalement, on obtient à la limite du nombre de raies N tendant vers l'infini :

$$\overline{\tau} = \exp\,[-\frac{\overline{W}(S)}{\delta}] \tag{4.13}$$

avec,

$$\overline{W}(S) = \int_0^\infty P(S)W(S)dS = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} W_i \tag{4.14}$$

Afin de se donner une forme plus exploitable, il faut se fixer une expression analytique de la distribution $P(S)$ des intensités. Plusieurs lois ont été proposées :

- la loi uniforme (toutes les raies ont la même intensité),
- la loi exponentielle ([46]),
- la loi inverse tronquée de Godson (cité dans [9]),
- la loi inverse exponentielle tronquée de Malkmus [47] qui accentue la proportion de raies à faibles intensités par rapport aux raies à fortes intensités .

La démarche du calcul de $\overline{W}(S)$ consiste à se fixer un type de profil de raies et à effectuer le calcul de l'intégrale du second membre de l'équation (Eq. 4.14) avec la définition de $W(S)$ en utilisant une seule demi-largeur effective γ_0 représentative de l'ensemble des N raies. Les paramètres de la loi de distribution utilisée, ainsi que γ_0 sont ensuite obtenus en identifiant le comportement de l'expression obtenue de $\frac{\overline{W}(S)}{\delta}$ lorsque toutes les raies sont dans le régime d'absorption faible et d'absorption forte, avec le comportement de $\sum \frac{W_i}{(N\delta)}$ tenant compte des caractéristiques de chaque raie.

Le résultat obtenu pour un profil de raie lorentzien et une loi de distribution des intensités en inverse-exponentielle tronquée conduit au MSBE de Malkmus, avec :

$$\frac{\overline{W}(S)}{\delta} = \frac{\overline{\beta}}{\pi}\left(\sqrt{1 + \frac{2\pi x p e \overline{k}}{\overline{\beta}}} - 1\right) \tag{4.15}$$

La formulation Lorentz de Malkmus, donnée par Taine et Soufiani [10], est utilisée et pour la transmittivité moyenne dans le cas d'un gaz réel :

$$\overline{\tau} = \exp\Big[-\frac{\overline{\beta}}{\pi}\Big(\sqrt{1 + \frac{2\pi x p e \overline{k}}{\overline{\beta}}} - 1\Big)\Big] \tag{4.16}$$

avec, x la fraction molaire en gaz et p la pression totale. L'expression de la transmittivité $\overline{\tau} = \exp\big[-\frac{\overline{W}(S)}{\delta}\big]$ dépend alors de deux paramètres résumant les propriétés spectroscopiques des raies dans $\Delta\nu$:

$$\overline{k} = \frac{1}{\delta}\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} S_i = \frac{\overline{S}}{\delta} \tag{4.17}$$

$$\overline{\beta} = \frac{2\pi\overline{\gamma}}{\overline{\delta}} \tag{4.18}$$

avec,

$$\overline{\gamma} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \gamma_i \tag{4.19}$$

$$\overline{\delta} = \delta\frac{\overline{S}\overline{\gamma}}{\left(\frac{1}{N}\sum_i \sqrt{\gamma_i S_i}\right)^2} \tag{4.20}$$

$\overline{k}$ a la dimension d'un coefficient d'absorption par unité de pression partielle de gaz absorbant ($m^{-1} \cdot atm^{-1}$) alors que $\overline{\beta}$ caractérise le degré de chevauchement des raies. Pour $\overline{\beta}$ faible devant 1, les raies sont pratiquement isolées alors que pour $\overline{\beta} \gg 1$, les raies se chevauchent fortement et les fortes variations du coefficient d'absorption à haute résolution spectrale tendent à disparaître. En somme, la distribution des intensités des raies de Lorentz ainsi que les valeurs des paramètres de Malkmus, constituent l'information spectrale contenue dans la bande étroite.

La résolution de l'équation Eq. 4.8 impose le calcul de la transmittivité moyenne d'une couche gazeuse anisotherme et hétérogène (Eq. 4.10). L'approche utilisant l'hypothèse de spectres décorrélés conduit à multiplier les transmittivités moyennes de chaque couche homogène et isotherme dans le but d'obtenir la transmittivité moyenne de la couche hétérogène anisotherme. Cette hypothèse considère soit que les spectres de chaque couche sont identiques soit que les spectres sont plats, bien qu'ils puissent avoir des valeurs moyennées différentes. Malheureusement, elle produit des erreurs importantes (plus de 100%), elle sous-estime la valeur de la transmittivité moyenne de la couche hétérogène et anisotherme et donc surestime fortement la luminance émise par une couche. Afin de diminuer l'erreur commise, les approches de Curtis-Godson ([48], [49]) et Lindquist-Simmons ([50]) sont généralement utilisées. Ces approches sont décrites parmi d'autres dans les références [9, 10, 51] qui donnent une revue complète des approximations utilisables pour étendre les modèles statistiques à bandes étroites au cas de colonne hétérogène et anisotherme. Taine et Soufiani [10] ont constaté que les deux approches donnent de bons résultats tant que les gradients de températures restent modérés. Par contre, l'approximation de Curtis-Godson est très imprécise lorsque le milieu présente de fort gradient de pression.Dans l'application concernée par la suite, la pression est quasiment constante dans le milieu, de plus l'approximation de Lindquist-Simmons étant complexe à mettre en oeuvre, c'est l'approximation de Curtis-Godson qui a été choisie.

Dans l'approximation de Curtis-Godson, la transmittivité de la colonne, comprise entre les abscisses s_1 et s_2, est exprimée formellement comme une fonction de deux paramètres p_1 et p_2, représentant les propriétés moyennes du milieu entre s_1 et s_2 :

$$\overline{\tau} = f(p_1, p_2) \tag{4.21}$$

La fonction $f(p_1, p_2)$ doit :

- d'une part tendre vers l'expression du modèle statistique à bande étroite dans le cas limite d'une colonne homogène et isotherme,
- elle doit, d'autre part, conduire aux bons comportements asymptotiques en absorption faible et en absorption forte.

Le premier point est respecter en utilisant une expression de $\overline{\tau}$ identique à celle obtenue pour une colonne à propriétés uniformes. La vérification du second point conduit à l'expression de paramètres moyens obtenus d'après le comportement asymptotique de $\overline{W}(s_1, s_2)$ en absorption faible et forte. Ceci conduit par exemple dans le cas de la loi

inverse-exponentielle tronquée à :

$$\overline{\tau} = \exp\Big[-\frac{\overline{\beta}_{CG}}{\pi}\Big(\sqrt{1+\frac{2\pi v\overline{k}_{CG}}{\overline{\beta}_{CG}}}-1\Big)\Big] \tag{4.22}$$

avec,

$$v = \int_{s_1}^{s_2} x(s)p(s)ds \tag{4.23}$$

$$\overline{k}_{CG} = \frac{1}{v}\int_{s_1}^{s_2} x(s)p(s)\overline{k}(s)ds \tag{4.24}$$

$$\overline{\beta}_{CG} = \frac{1}{v\overline{k}_{CG}}\int_{s_1}^{s_2} x(s)p(s)\overline{k}(s)\overline{\beta}(s)ds \tag{4.25}$$

Il est à noter que ce résultat suppose que toutes les raies ont le même type de dépendance avec la température et la pression. Cette hypothèse n'est pas strictement vérifiée en général.

4.2.2 Cas d'un mélange de gaz

Le traitement d'un mélange gazeux, avec le SNB de Malkmus, est exposé. Ce mélange est composé des gaz H_2O, CO_2 et CO dont certaines parties de leurs spectres de raies se chevauchent. Dans ces zones, la transmittivité moyenne du mélange gazeux, d'une colonne homogène et isotherme d'épaisseur e, moyennée sur une bande étroite est donnée par la relation :

$$\overline{\tau}_{mix} = \frac{1}{\Delta\nu}\int_{\Delta\nu} \exp\Big[-\Big(\kappa_\nu^{h_2o}+\kappa_\nu^{co_2}+\kappa_\nu^{co}\Big)e\Big]d\nu \tag{4.26}$$

Le calcul de cette expression est réalisé avec la meilleure précision par le modèle raie par raie. Cependant il n'est pas envisageable d'utiliser le LBL dans notre application. Goody [44] met en évidence une propriété de multiplication des transmittivités moyennes de chaque gaz composant le mélange et qui donne la transmittivité du mélange :

$$\overline{\tau}_{mix} = \overline{\tau}_{h_2o}\overline{\tau}_{co}\overline{\tau}_{co_2} \tag{4.27}$$

Cette propriété de multiplication a été constatée par de nombreuses études expérimentales et notamment dans un cas atmosphérique publié par Burch et al. [52]. Taine et Soufiani [10] montre aussi que la multiplication des transmittivités moyennes de chaque gaz permet d'obtenir la transmittivité moyenne du mélange, en respectant une bonne précision lors de la comparaison au calcul LBL. Cette propriété de multiplication s'explique par l'absence de corrélation entre les spectres de chaque gaz. En effet, le spectre d'un gaz ne dépend pas du spectre d'un autre gaz sauf par l'intermédiaire de la largeur de Lorentz qui intervient dans son profil mais pas dans la détermination de la position des raies. D'un point de vue statistique, si chaque raie d'un gaz est considérée comme un évènement indépendant et si la position des raies est aléatoire, alors les équations 4.26 et 4.27 sont équivalentes pour

le calcul de $\overline{\tau}_{mix}$ puisque le coefficient de corrélation est nul (le produit de la moyenne est égal à la moyenne des produits), en accord avec la propriété de multiplication des probabilités d'occurrences simultanées d'évènements indépendants. Avec le MSBE de Malkmus, la transmittivité moyenne dans une bande étroite pour un mélange H_2O-CO_2-CO homogène isotherme d'épaisseur e est alors calculée par l'équation 4.27 faisant intervenir la transmittivité moyenne relative à chaque gaz donnée par l'équation 4.16.

Pour obtenir la luminance sortante d'une direction de visée traversant un milieu anisotherme et hétérogène constitué d'un mélange H_2O, CO_2, CO il suffit de remplacer la transmittivité moyennée sur la bande étroite dans l'équation 4.8 par la transmittivité de Malkmus (Eq. 4.22) calculée avec les paramètres de Curtis-Godson. Pour le calcul de la transmittivité moyenne d'une couche hétérogène et anisotherme la méthode de multiplication des transmittivités est employée (Eq. 4.27). En résumé, dans un premier temps la transmittivité d'une couche hétérogène et anisotherme d'un gaz est calculée séparément pour chaque gaz en utilisant l'approximation de Curtis-Godson. Cette étape est répétée pour chaque gaz et pour chaque couche hétérogène et anisotherme. Puis, dans un second temps, la propriété de multiplication des transmittivités est utilisée pour calculer la transmittivité des couches hétérogènes anisothermes relative au mélange. Il est important de remarquer que la transmittivité moyenne sur la bande étroite calculée avec le modèle de Malkmus, de la manière indiquée ci-dessus, se substitue à celle donnée par l'équation 4.10 et permet la résolution de l'équation 4.8.

Il est à noter que le modèle statistique de Malkmus a fait l'objet d'une tabulation qui n'est pas détaillée dans ce manuscrit.

Après avoir rappelé le modèle SNB de malkmus, Un autre modèle spectral de bande étroite est présenté qui fera l'objet, par la suite, d'études plus approfondies.

4.3 Modèle de bandes étroites en k-distributions corrélés (CK)

4.3.1 Cas d'un gaz seul

Comme le remarque Stephens [53], l'utilisation de la méthode des k(coefficient d'absorption)-distributions (Arking et Grossmann [54], Domoto [55], Chou et Arking [56]) est une approche utile pour les calculs de transfert radiatif dans l'infrarouge. A l'origine, cette méthode fut proposée par Ambartzumian [57] dans son travail sur les atmosphères stellaires. Un avantage important de la méthode des k-distributions est qu'elle peut être utilisée dans les modèles qui résolvent l'ETR sous sa forme intégrale et sous sa forme différentielle.

Dans un intervalle de bande $\Delta\nu$, suffisamment étroit pour considérer la fonction de Planck constante, la connaissance précise de la position de chaque raie n'est pas requise pour le calcul de la transmittivité moyenne d'une colonne à propriétés uniformes. Pour calculer cette transmittivité, la méthode des k-distributions suppose que sa valeur est

indépendante de l'ordonnancement des κ_ν en fonction du nombre d'onde, mais dépend uniquement de la fraction de bande étroite associée à une valeur particulière de κ_ν.

Soit $G(\kappa_\nu)$ une grandeur dépendant du nombre d'onde du rayonnement à l'intérieur d'une bande $\Delta\nu$ dans une colonne à propriétés uniformes. Si le milieu est homogène et isotherme la valeur moyenne de G dans la bande étroite est :

$$\overline{G} = \frac{1}{\Delta\nu}\int_{\Delta\nu} G(\kappa_\nu)d\nu = \int_0^1 G(\kappa_\nu)d\Big(\frac{\nu}{\Delta\nu}\Big) \tag{4.28}$$

Soit une bande étroite subdivisée en N domaines notés i tels que κ_ν soit une fonction monotone à l'intérieur de chacun d'eux. Soit $f(k)dk$ la fraction de $\Delta\nu$ pour laquelle le coefficient d'absorption κ_ν prend des valeurs comprises entre k et $k+dk$:

$$f(k)dk = \frac{1}{\Delta\nu}\sum_i \delta\nu_i \tag{4.29}$$

avec, $\delta\nu_i$ les intervalles du spectre où κ_ν prend une valeur entre k et $k+\delta k$. Alors il est possible d'exprimer $\overline{G}^{\Delta\nu}$ comme :

$$\overline{G} = \int_0^\infty f(k)G(k)dk \tag{4.30}$$

avec $f(k)$, la fonction de distribution des k :

$$f(k) = \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{\Delta\nu}\Big|\frac{d\nu}{d\kappa_\nu}\Big|_i\Big[H(k-k_{min,i}) - H(k-k_{max,i})\Big] \tag{4.31}$$

où $k_{min,i}$ et $k_{max,i}$ désignent les valeurs minimale et maximale de κ_ν dans le domaine i et H la fonction de Heaviside.

$$H(x-a) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < a \\ \\ 1 & \text{si } x \geq a \end{cases}$$

Ainsi, le concept du modèle de bande étroite en k-distribution est de remplacer l'intégrale, d'une quantité radiative G, sur l'espace des nombres d'onde (Eq. 4.28) par une intégrale sur le coefficient d'absorption (Eq. 4.30). Il est important de noter que la k-distribution engendre une perte entière de l'information sur la localisation spectrale de chaque raie. L'équation 4.31 peut être utilisée numériquement pour déterminer $f(k)$ à partir d'un spectre à haute résolution.

La méthode des k-distributions ne peut pas être appliquée à des milieux anisothermes et hétérogènes sans une hypothèse supplémentaire concernant les corrélations entre les différentes distributions. Par exemple, le calcul d'une grandeur radiative telle que la luminance moyenne émise par une couche non diffusante d'épaisseur ℓ est donné par :

$$\overline{L} = \frac{1}{\Delta\nu}\int_{\Delta\nu}\Big\{\int_0^\ell L_\nu^o(s)\kappa_\nu(s)\exp\Big[-\int_s^\ell \kappa_\nu(s')ds'\Big]ds\Big\}d\nu \tag{4.32}$$

Une solution à ce problème est l'utilisation de la méthode en k-distribution, sous l'hypothèse des k-corrélés (méthode CK). Cette méthode est basée sur la fonction de distribution cumulée $g(k)$ qui admet une fonction inverse $k(g)$. Soit $g(k)$ la fonction de distribution cumulée (cdf) qui représente la probabilité que κ_ν prenne une valeur inférieure ou égale à k :

$$g(k) \equiv \text{prob}(\kappa_\nu \leq k) \equiv \int_{-\infty}^{k} f(k')dk' \tag{4.33}$$

Dans notre cas, la cdf utilisée $g(k)$ est une fonction monotone croissante de $[\kappa_{\nu,min}, \kappa_{\nu,max}]$ vers $[0, 1]$ où $\kappa_{\nu,min}$ et $\kappa_{\nu,max}$ désignent les valeurs minimale et maximale de κ_ν dans $\Delta\nu$, elle vérifie alors les hypothèses suivantes :

- la cdf est positive et croissante,
- $g(k_{min}) = 0$ et $g(k \to \infty) = 1$.

Donc, la cdf possède une propriété :

$$dg(k) = f(k)dk \tag{4.34}$$

L'équation Eq. 4.30 devient alors :

$$\overline{G} = \int_0^1 G[k(g)]dg \tag{4.35}$$

$$\text{avec} \quad g(k) = \int_{k_{min}}^{k} f(k')dk' \tag{4.36}$$

Il est à noter que la relation décrite par l'équation (Eq. 4.35) est strictement valable dans le cas d'une colonne de gaz à propriétés uniformes.

Comme les fonctions $g(k)$ et $k(g)$ sont des fonctions monotones, alors l'intégrale peut être évaluée avec une quadrature de gauss à N_q points :

$$\overline{G} = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i G[k(g_i)] \tag{4.37}$$

En résumé, l'intégration sur le nombre d'onde avec le LBL (Eq. 4.28) est remplacée, dans le modèle CK, par une intégration sur la fonction g (Eq. 4.37). Cette dernière est obtenue en sommant en N_q points de quadratures la valeur de la fonction G à l'abscisse g_i pondérée par le poids ω_i. En comparant les équations 4.28 et 4.35 on peut constater le changement de variable, $dg = \frac{d\nu}{\Delta\nu}$ ainsi que le changement approprié des bornes. La fonction réciproque $k(g)$ représente le coefficient d'absorption réordonné par valeurs croissantes, en fonction du pseudo-nombre d'onde adimensionné : $dg = \frac{d\nu}{\Delta\nu}$. Cette fonction peut donc être obtenue à partir des spectres à haute résolution par simple réordonnancement des valeurs du coefficient d'absorption. La valeur de k à l'abscisse g_i, notée $k(g_i)$, représente une valeur prise par le spectre de κ_ν dans la bande étroite. Cette valeur de $\kappa_\nu = k(g_i)$ se répète plusieurs fois dans la bande étroite (spectre de raies). De plus, l'abscisse g_i représente un pourcentage de $\Delta\nu$ où $\kappa_\nu \leq k(g_i)$. Comme κ_ν prend la valeur $k(g_i)$ en plusieurs points du spectre alors l'abscisse g_i est associée à plusieurs nombres d'onde. En conséquence,

l'abscisse g_i est considérée comme un pseudo-nombre d'onde sans dimension mais à cette abscisse sont associés plusieurs intervalles de nombre d'onde dans la bande étroite. Les grandeurs $G[k(g_i)]$ sont donc considérées comme pseudo-monochromatiques et elles sont utilisées dans les équations valables en monochromatique. Ainsi, il est possible de faire l'approximation des k-corrélés qui permet le calcul de transfert pseudo-monochromatique (à $g(k)$ fixé) sur toute l'extension de la ligne de visée avant la sommation (Eq. 4.37). Par contre, cette approximation suppose que l'allure relative du spectre dans une bande étroite ne varie pas le long d'une ligne de visée où la température et la pression peuvent changer. En effet, comme le calcul de transfert est réalisé à une valeur de g fixé, les intervalles de spectres constituant la k-distribution à l'abscisse g de chaque couche homogène isotherme traversée doivent être identiques. Malheureusement, le long d'une ligne de visée qui comporte de forts gradients de température, l'intensité de chaque raie varie et les allures des spectres changent.

En particulier, dans notre étude, la grandeur $\overline{G}$ calculée par la méthode CK est la luminance moyenne $\overline{L}$. La méthode CK permet alors d'écrire :

$$\overline{L} = \frac{1}{\Delta\nu}\int_{\Delta\nu} L(\kappa_\nu)d\nu \approx \int_0^1 L[k(g)]dg \tag{4.38}$$

$L(\kappa_\nu)$ est la luminance monochromatique sortante d'une ligne de visée traversant un milieu hétérogène et anisotherme.

4.3.2 Cas d'un mélange

Dans notre étude, la fonction G à intégrer dépend des coefficients d'absorption d'un mélange gazeux (H_2O-CO_2-CO) anisotherme et hétérogène :

$$\overline{G} = \frac{1}{\Delta\nu}\int_{\Delta\nu} G(\kappa_\nu^{co_2}, \kappa_\nu^{h_2o}, \kappa_\nu^{co})d\nu \tag{4.39}$$

Le modèle en k-distribution propose de réarranger la solution en fonction des k qui est la variable représentant les valeurs que prend κ_ν (avec, $\kappa_\nu = \kappa_\nu^{co_2} + \kappa_\nu^{h_2o} + \kappa_\nu^{co}$) dans la bande étroite :

$$\overline{G} = \int_0^\infty f(k)G(k)dk \tag{4.40}$$

La probabilité que le coefficient d'absorption du mélange, κ_ν, prenne la valeur k à dk près est notée $f(k)dk$, avec k la variable relative au mélange. La fonction de distribution du coefficient d'absorption du mélange $f(k)$ n'est pas aisée à calculer. Soit cette fonction est calculée et tabulée pour chaque mélange de gaz à partir d'un spectre synthétique du mélange, soit elle est obtenue grâce aux fonctions de distribution relatives à chacun des gaz composant le mélange. Si les trois spectres des gaz (H_2O-CO_2-CO) sont décorrélés, leurs distributions $f_1(k_{h_2o})$, $f_2(k_{co_2})$ et $f_3(k_{co})$ peuvent être supposées indépendantes. Dans le cas du mélange, l'équation 4.39 devient alors :

$$\overline{G}(\ell) \quad = \quad \int\int\int f_1(k_{h_2o})f_2(k_{co_2})f_3(k_{co})G[k_{h_2o}, k_{co_2}, k_{co}]dk_{h_2o}dk_{co_2}dk_{co}$$

$$= \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 G[k_{h_2o}(g_{h_2o}), k_{co_2}(g_{co_2}), k_{co}(g_{co})] dg_{h_2o} dg_{co_2} dg_{co} \tag{4.41}$$

$$= \sum_{i=1}^{N_q} \sum_{j=1}^{N_q} \sum_{k=1}^{N_q} \omega_i \omega_j \omega_k G[k_{co_2}(g_i), k_{h_2o}(g_j), k_{co}(g_k)] \tag{4.42}$$

La méthode CK demande donc la sommation de $N_q^{N_g}$ valeurs de G pseudo-monochromatiques dans une bande étroite (N_g est le nombre de gaz présents dans le mélange). Les abscisses pseudo-monochromatiques g_i, g_j, g_k sont associées, respectivement, à des coefficients d'absorption $k^{co_2}(g_i)$, $k^{h_2o}(g_j)$, $k^{co}(g_k)$ pseudo-monochromatiques. De cette manière, le calcul de G dans une bande étroite demande la connaissance des k-distributions de chaque gaz aux températures et concentrations présentes dans chaque couche homogène isotherme.

Le principal inconvénient lié à la méthode CK est qu'elle nécessite un grand nombre de résolutions pseudo-monochromatiques de l'ETR, surtout si le mélange gazeux est composé de plusieurs gaz réels ayant leurs spectres qui se chevauchent.

Cependant, dans le cas particulier où l'on utilise une méthode basée sur une description des propriétés optiques des gaz par des transmittivités moyennes alors le temps de calcul devient convenable dans le cas d'un mélange. En effet, les transmittivités moyennes de chaque gaz peuvent être multipliées entre-elles pour donner directement la transmittivité moyenne du mélange (Eq.4.45). Cette méthode est utilisable avec des méthodes de transfert résolvant l'ETR, sans diffusion, sous sa forme intégrale, comme le Lancer de Rayon [3] (Ray-Tracing, en anglais) ou la méthode des directions discrètes [58, 59]. Si la diffusion est prise en compte, le seul modèle de transfert utilisable, sans grosse approximation et avec une description des propriétés optiques des gaz en terme de transmittivités, est le modèle statistique de Monte Carlo [4].

Rivière et al. [60] ont utilisé une méthode de Lancer de Rayon basée sur une formulation en transmittivités de colonnes avec les modèles CK et CKFG (Correlated-K Fictitious Gas, voir paragraphe 4.4). Pour un mélange de gaz non diffusant et dans le cas du modèle CK, le principe de la méthode consiste à calculer la luminance sortante d'une ligne de visée discrétisée en N_c colonnes homogènes et isothermes, suivant l'équation :

$$\overline{L}(\ell) = \sum_{n=1}^{N_c} \overline{L^o}(T_n) \Big[\overline{\tau}(n, N_c) - \overline{\tau}(n-1, N_c) \Big] \tag{4.43}$$

Le nombre d'équation de transfert est alors limité à une seule équation par bande étroite quelle que soit le nombre de gaz. En effet, cette équation (Eq. 4.43) utilise des transmittivités de colonnes qui peuvent être calculées comme le produit des transmittivités de chacune des espèces (en accord avec la propriété de multiplication des transmittivités moyennes décorrélées) :

$$\overline{\tau}(n, N_c) = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} exp\Big[- \sum_{n'=n}^{N_c} (\kappa_{\nu,n'}^{co_2} + \kappa_{\nu,n'}^{h_2o} + \kappa_{\nu,n'}^{co}) e_{n'} \Big] d\nu \tag{4.44}$$

$$\approx \prod_j \overline{\tau_j}(n, N_c) \tag{4.45}$$

Avec, j désignant les espèces gazeuses H_2O, CO_2 et CO. Enfin, les transmittivités de colonnes de chaque espèce sont elles-mêmes calculées par la méthode CK ou CKFG :

$$\overline{\tau_j}(n, N_c) = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i \exp\Big[- \sum_{n'=n}^{N_c} k_j(g_i) e_{n'} \Big] \tag{4.46}$$

De cette manière, la méthode des k-distributions est utilisée pour le calcul de la transmittivité de chaque gaz correspondant à une colonne hétérogène et anisotherme (de n à N_c par exemple). Cette formulation en transmittivité est très efficace numériquement puisqu'elle ne requiert que $(N_g \cdot N_q)$ sommations (Eq. 4.46). Cependant elle doit être utilisée par des méthodes de transferts formulant l'ETR sous sa forme intégrale.

Un autre traitement du chevauchement de raie repose sur la connaissance d'une seule fonction cumulée, celle du mélange de gaz réels. La cumulée $g(k)$ peut être calculée pour un mélange de gaz et le résultat est traité par le modèle CK comme un milieu possédant un seul gaz complexe. Par exemple, Goody et al. [44], Modest et Riazzi [61], Gerstell [62] Solovjov et Webb [63] utilisent les cumulées de chaque gaz réel pour obtenir la cumulée du mélange. Fu et Liou [64] calculent, dans un cas atmosphérique, la fonction cumulée d'un mélange de gaz à partir du spectre raie par raie formé par ce mélange. Cette technique demande le calcul de la cumulée pour toute la gamme des rapports de mélange de chaque gaz. Ce calcul préalable est très coûteux en temps CPU puisqu'il faut le répéter pour différentes températures et pressions. Par contre, cet effort numérique permet d'atteindre une meilleure précision sur la cumulée du mélange. En revanche, lors du calcul de transfert l'hypothèse de corrélation des spectres et la variation du rapport de mélange de chaque gaz réels peuvent entraîner des erreurs. Mais, Fu et Liou [64] qui ont comparé la technique classique de la méthode CK qui consiste à tenir compte de chaque gaz réels avec celle-ci, notent que la précision des deux méthodes est identique.

L'utilisation d'une seule cumulée pour le mélange permet une diminution du nombre de résolutions pseudo-spectrales. Avec cette méthode, le modèle CK demande la résolution de seulement N_q fois l'ETR :

$$\overline{G} = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i G[k(g_i)] \tag{4.47}$$

Cependant, le modèle CK pour un gaz de mélange suppose que les spectres de chaque couche isotherme et homogène ont les mêmes allures (spectres corrélés). Mais, comme le rapport de mélange $(\frac{x_g}{x_{g'}})$ est variable dans chaque couche il est prévisible que l'hypothèse de spectres corrélés, utilisée par la méthode des k-distribution, entraîne des erreurs. En effet, cette corrélation suppose la même allure du spectre dans chaque couche avec des variations en intensité. Etant donné que le rapport de mélange de chaque gaz n'est pas constant dans chaque couche et que les raies d'un gaz réel sont proportionnelles à la concentration de ce gaz, l'allure du spectre du mélange change dans toutes les couches ayant des rapports de mélange différents.

4.4 Hypothèse des gaz fictifs (FG)

L'hypothèse des gaz fictifs est introduite pour pallier le défaut majeur des MBE en présence de forts gradients de température, à savoir la *sur-corrélation* entre les raies intenses des zones chaudes et celles des zones froides. En effet, le modèle CK suppose d'une part, l'équivalence entre l'intégration sur ν et l'intégration sur g et d'autre part, que les spectres des différentes couches sont homothétiques (hypothèse des k-corrélés). Cette dernière hypothèse consiste, lors d'un calcul de transfert, à associer la valeur la plus élevée de κ_ν d'une colonne chaude, à la valeur la plus élevée de κ_ν d'une colonne froide. De la même manière, pour le modèle statistique de Malkmus, lorsque l'approximation de Curtis-Godson est utilisée, l'allure du spectre est supposée identique le long de la ligne de visée.

Un des moyens d'éviter les erreurs de sur-corrélation des spectres avec la température consiste à regrouper des ensembles de raies appartenant à un gaz donné. Ces groupes doivent être constitués de raies qui ont un comportement identique en fonction de la température. Ludwig, Malkmus, Reardon et Thomson [65] ont proposé de regrouper les raies d'un gaz ayant des énergies de niveau bas de transition voisines (Spectral Line Grouping), dans le but d'améliorer le traitement des modèles statistiques. L'intérêt de cette approche est que toutes les raies d'un groupe ont approximativement la même dépendance vis à vis de la température. Une fois le regroupement effectué, Ludwig et al. procèdent de la même manière que pour un mélange de gaz mais avec des groupes de raies. Le paramètre important qui pilote l'évolution de l'intensité d'une raie en fonction de la température est l'énergie E_i'' (Fig 3.1) du niveau inférieur de la transition associée à la raie i. De plus, à l'équilibre thermodynamique local, l'intensité $S_i(T)$ est directement proportionnelle à la population du niveau inférieur et donc à $\exp(-\frac{E_i''}{k_B T})$. Cette dépendance explique la différence d'évolution des intensités de raies ayant des énergies E_i'' différentes, en fonction de la température. En conséquence, une façon simple d'obtenir des variations similaires des intensités des raies avec la température consiste à regrouper les raies du gaz absorbant dont les énergies E_i'' sont similaires. La méthode des gaz fictifs (en anglais, Fictitious Gaz, FG), développé par Levi Di Leon et Taine [66] pour le CO_2, consiste à considérer le gaz réel comme un mélange de gaz fictifs : chacun de ces gaz étant caractérisé par l'ensemble des raies du gaz réel dont l'énergie du niveau bas E_i'' appartient à une certaine classe $\Delta E''$.

Pour H_2O, la méthode des gaz fictifs est utilisé avec le modèle CK par Rivière et al. [60] ainsi qu'avec le modèle SNB de Malkmus par Soufiani et al. [67]. Les méthodes CK et SNB sont alors appliquées à chacun des gaz fictifs et donnent de meilleurs résultats, spécialement lorsque les gradients de températures sont importants et que l'épaisseur du milieu atmosphérique froid est grande. L'approche des modèles CK et SNB ne change pas avec l'hypothèse des gaz fictifs et ils s'appliquent de la même manière. Le seul changement est la provenance des raies composant un gaz. Lorsque cette hypothèse est appliquée avec la méthode CK, le modèle est noté CKFG (Correlated k-distribution and Fictitious Gas) et avec la méthode SNB, le modèle est appelé SNBFG (Statistical Narrow Band and

Fictitious Gas). Comme pour les gaz réels, les raies appartenant à un gaz fictif sont alors considérées comme décorrélées avec celles des autres gaz fictifs. Chaque gaz fictif a donc des raies dont l'énergie E_i'' est comprise dans un intervalle $\Delta E''$ le plus petit possible afin de respecter l'hypothèse sur leur comportement semblable avec la température. Effectivement, si E" représente l'énergie de la molécule par rapport à son état fondamental, à température élevée, l'énergie de la molécule est aussi élevée et les transitions (raies) correspondantes à des E_i'' grands sont donc possibles. Chaque gaz fictif étant composé de raies ayant des E" proches alors le gaz fictif fg devient radiativement actif dans une gamme de température qui dépend de la valeur de $\Delta E''_{fg}$. Par la suite, les raies appelées *froides* sont considérées être les raies composant le rayonnement des gaz à température atmosphérique. Les raies dénommées *chaudes* apparaissent à température élevée. Leur intensité augmente avec la température et en conséquence elles contribuent principalement au rayonnement des régions chaudes mais n'absorbent pas dans les régions à températures atmosphériques puisque les transitions qu'elles représentent ne sont pas suffisamment peuplées à ces températures.

En ce qui concerne les $\Delta E''_{gf}$ relatifs à un gaz fictif, plusieurs intervalles ont déjà été testés dans la bibliographie. Ludwig et al. [65] présentent des résultats en utilisant un modèle statistique et deux intervalles $\Delta E''_1$=0-1595 cm^{-1} et $\Delta E''_2$=1595 cm^{-1}-∞. Levi Di Leon et Taine [66] présentent des résultats en utilisant un modèle CK et forment 5 classes de gaz fictifs pour CO_2 avec $\Delta E'' = 1000$ cm^{-1} constant de $E'' = 0$ à 4000 cm^{-1} puis une cinquième classe de $E'' = 4000$ cm^{-1} à ∞. Rivière et al. [60] comparent les résultats du modèle CK avec 3 ou 5 classes de gaz fictifs ayant en commun des intervalles $\Delta E'' = 1500$ cm^{-1} constants. Dans un cas, deux classes sont considérées jusqu'à $E'' = 3000$ cm^{-1} et la troisième de $E'' = 3000$ cm^{-1} à ∞ et de la même façon dans l'autre cas quatre classes jusqu'à $E'' = 6500$ cm^{-1} puis la cinquième au-delà. Soufiani et al. [67] appliquent les cinq classes citées en dernier avec le modèle statistique de Malkmus. Enfin, Pierrot et al. [68] utilisent le modèle CKFG pour un mélange H_2O-CO_2 avec quatre classes de gaz fictifs : 0-1400, 1400-2500, 2500-4000 et 4000 cm^{-1}-∞ pour H_2O et pour CO_2 : 0-1800, 1800-3100, 3100-4700, 4700 cm^{-1}-∞. Les classes de gaz fictifs données dans la bibliographie n'ont pas été comparées entre elles parce qu'elle n'ont pas été utilisées dans les mêmes conditions. Seule une comparaison de la décomposition en 3 ou 5 classes a été menée par Rivière et al. [60]. Cette comparaison montre que la précision atteinte sur les résultats est identique pour les deux décompositions en 3 et 5 gaz fictifs.

Dans la bibliographie citée précédemment, l'hypothèse des gaz fictifs utilisée dans les modèles spectraux améliore la précision des résultats surtout lorsqu'il existe un grand écart de température et que l'épaisseur de la couche froide est importante. Cependant, l'hypothèse de décomposition d'un gaz réel en gaz fictifs augmente le nombre de gaz à traiter et par conséquent le temps de calcul.

4.5 Hypothèse d'un gaz unique pour le mélange (SMG)

Dans les rappels bibliographiques sur le modèle CK et son traitement des mélanges de gaz, une hypothèse consistant à supposer le mélange comme un seul gaz complexe a été exposée. En effet, soit les paramètres de la k-distribution du mélange sont calculés directement à partir du spectre LBL relatif au coefficient d'absorption du mélange, soit la k-distribution du mélange est reconstruite à partir des k-distributions des gaz composant le mélange. Avec le modèle CK, le traitement du mélange comme un gaz unique (en anglais, Single Mixture Gaz, SMG) permet une réduction du temps de calcul.

Dans tous les cas, en formulation différentielle ou en formulation intégrale de l'ETR, il est possible d'utiliser la méthode des k-distributions corrélés avec l'hypothèse SMG. L'inconvénient de cette hypothèse est qu'elle peut conduire à des erreurs si les rapports des fractions molaires des espèces sont très différents. Lorsque les rapports de mélange entre gaz changent le long d'une ligne de visée l'allure du spectre dans une bande étroite change aussi puisque les intensités des raies sont proportionnelles à la fraction molaire du gaz. Ainsi, pour le modèle CK, lorsque l'allure relative du spectre dans une bande étroite n'est pas conservée le long de la ligne de visée, l'hypothèse des k-corrélés utilisée dans le cadre d'un gaz unique pour le mélange conduit à des erreurs.

Les modèles de bande étroite perdent l'information spectrale haute résolution lorsqu'ils moyennent le coefficient d'absorption ou la transmittivité sur une bande. Dans le cas général, comme l'information spectrale est perdue ces modèles ne peuvent pas atteindre la précision du raie par raie lors d'un calcul de transfert de rayonnement. Pourtant, ils sont largement utilisés dans certaines applications où ils atteignent une précision jugée suffisante par l'utilisateur. Par exemple, pour des applications de télédétection quand l'épaisseur de la couche froide est faible et si elle contient les mêmes espèces rayonnantes que dans le foyer (H_2O, CO_2, CO), l'hypothèse de gaz fictif n'a pas besoin d'être considérée. En revanche lorsque l'épaisseur de la couche froide est importante, l'hypothèse de gaz fictif doit être considérée pour atteindre une précision suffisante de l'ordre de quelques pourcents [60]. On remarque alors que l'influence des corrélations spectrales devient non négligeable à partir d'une certaine valeur de l'épaisseur optique du milieu froid. Cependant, il est possible d'utiliser un modèle comportant un risque d'erreur limité jusqu'à une certaine valeur de l'épaisseur optique du milieu froid. De la même manière, l'hypothèse SMG présente un risque d'erreur mais nous montrerons, comment, dans l'application de télédétection qui fait l'objet de cette étude, elle permet de réduire le temps de calcul sans trop altérer la précision atteinte par l'hypothèse des gaz fictifs. Dans ce but, la section suivante décrit les modèles de télédétection infrarouge dont la précision sera évaluée par des comparaisons avec le raie par raie. De plus, un essai d'étude des limites des modèles utilisant l'hypothèse SMG sera présentée.

4.6 Modèles de télédétection infrarouge

Le modèle de bande étroite choisi pour la télédétection infrarouge est le modèle CK qui calcule des coefficients d'absorption pouvant être utilisés dans différents modèles de résolution de l'ETR avec ou sans diffusion.

Dans notre étude, la télédétection infrarouge de l'émission du jet doit prendre en compte le mélange gazeux H_2O-CO_2-CO comportant de forts écarts de température ainsi qu'une épaisseur importante de la couche froide. En conséquence, d'une part l'hypothèse des gaz fictifs (FG) s'impose dans cette situation de télédétection et d'autre part l'hypothèse d'un gaz unique pour le mélange (SMG) est utilisée. L'hypothèse SMG est introduite dans l'objectif de diminuer le nombre de gaz fictifs pour rendre le calcul numérique plus rapide. De plus, l'utilisation de l'hypothèse SMG dans le modèle de télédétection est validée en réalisant l'évaluation de sa précision dans des configurations académiques, afin de tester les limites du modèles, et des configurations se rapprochant de situations de télédétection plus réalistes.

Dans un premier temps, la démarche de construction du modèle CKFG-SMG pour notre étude est introduite ainsi que la tabulation de ces paramètres. En parallèle du modèle CKFG-SMG, le modèle CK-SMG qui n'inclue pas l'hypothèse des gaz fictifs est présenté.

4.6.1 Modèles CKFG-SMG et CK-SMG

La décomposition d'un gaz réel en plusieurs gaz fictifs améliore la précision des modèles de bandes étroites mais augmente le nombre de gaz. Lorsque le modèle CK est utilisé pour résoudre l'ETR sous sa forme différentielle, il nécessite $N_q^{N_g}$ (N_q nombre de points de quadrature, N_g nombre de gaz) calculs de la luminance pseudo-monochromatique sortante d'une ligne de visée (Eq. 4.45). Lorsque le modèle raie par raie est utilisé, avec un pas haute résolution $\Delta\nu_{hr}$ pour une bande étroite de largeur $\Delta\nu$ alors il faut résoudre $\frac{\Delta\nu}{\Delta\nu_{hr}}$ fois l'ETR (Eq. 4.43). Comme $\Delta\nu_{hr}$ est de l'ordre de 5.10^{-4} cm^{-1}, et $\Delta\nu \approx 25$ cm^{-1}, le nombre de résolution de l'ETR approche 5.10^4 avec le LBL. Dans le cas d'un mélange de N_g gaz réels chacun décomposé en N_{gf} gaz fictifs, le nombre de résolution de l'ETR devient prohibitif, $N_q^{N_g \cdot N_{gf}}$. Si l'hypothèse des gaz fictifs est utilisée pour un mélange de gaz réels, la méthode CKFG classique est inutilisable : par exemple avec N_q=10, N_g=3 et N_{gf}=3 il faut un milliard de résolutions de l'ETR. C'est pourquoi, afin de limiter le temps de calcul et de rendre l'approche CKFG réalisable, il est possible de diminuer le nombre de gaz ($N_g \cdot N_{gf}$) et l'ordre de la quadrature N_q tout en respectant une certaine précision.

Dans le modèle CK-SMG, le mélange gazeux H_2O-CO_2-CO est considéré comme un seul gaz (hypothèse SMG). De cette manière, le modèle CK-SMG considère le mélange comme un seul gaz et demande alors N_q résolutions de l'ETR.

De plus, en considérant l'hypothèse des gaz fictifs, les raies composant le gaz de mélange

sont regroupées pour constituer N_{gf} gaz fictifs. Chaque gaz fictif est alors composé de raies appartenant aux différents gaz réels et ayant des énergies de transition E_i'' voisines. Rivière et al. [60] comparent des résultats de calculs de télédétection effectués avec 3 et 5 gaz fictifs. Ils trouvent que l'utilisation de 3 gaz fictifs ne provoque pas une perte de précision notable. Dans le cadre de cette étude, la rapidité du calcul prime. En conséquence, le nombre de gaz fictif du mélange doit être minimal, il est fixé à $N_{gf} = 3$. Le modèle CKFG-SMG du mélange H_2O-CO_2-CO comprend alors trois gaz fictifs (Fig. 4.4) et nécessite dans le cas général $N_q^{N_{gf}}$ calculs de transfert pseudo-monochromatique pour résoudre l'ETR.

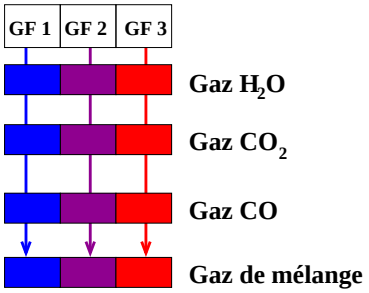


Fig. 4.4 : *Schématisation de la construction des gaz fictifs du mélange H_2O, CO_2 et CO à partir d'une sommation des gaz fictifs issus de chaque gaz réels.*

Par contre, si une méthode intégrale de résolution de l'ETR est utilisée ou bien si la diffusion est négligeable, la formulation en transmittivités de colonnes doit être adoptée compte tenu de son faible coût en temps de calcul. L'application de cette formulation conduit donc dans le cas du modèle CKFG-SMG à $N_{gf} \cdot N_q$ sommations (voir Eq. 4.43 et 4.46). Il est important de remarquer que si l'hypothèse SMG n'est pas retenue, l'application de la formulation en transmittivité dans la cas du modèle CKFG [60] conduit à $N_g \cdot N_{gf} \cdot N_q$ sommations. Le nombre de résolution est alors augmenté d'un facteur N_g mais les risques d'erreurs liées à l'hypothèse SMG sont écartés. Cependant, quelque soit la formulation adoptée le gain en temps de calcul passe aussi par le choix de la quadrature.

La précision souhaitée de la méthode CK est influencée en grande partie par le nombre de points et le type de la quadrature choisie. Rivière et al. [60] utilisent une quadrature à 7 points qui donne des résultats comparables à ceux obtenus en utilisant une quadrature à 10 points. Liu et al. [69] montrent que la quadrature de Gauss-Legendre à 4 points donne des résultats satisfaisants. Cependant, l'augmentation du nombre de point de la quadrature devient nécessaire dans la région proche de g=1, lorsque la cumulée présente un pic étroit. Cette situation se produit dans le régime Doppler (à faible pression) et s'accentue si peu de raies contribuent au rayonnement dans la bande étroite. Une quadrature plus raffinée, lorsque g tend vers 1, doit donc être employée dans cette situation.

Une fois que la quadrature est choisie, les valeurs des abscisses de Gauss g_i sont fixées et les valeurs des k_{g_i} sont obtenues itérativement par dichotomie d'après les spectres LBL de chaque gaz fictif composant le mélange. Les coefficients d'absorption correspondant à toutes les abscisses de la quadrature de Gauss sont mémorisés pour chaque couche

homogène isotherme. Ces coefficients d'absorption permettent la résolution de l'ETR et le calcul de la luminance sortante d'une ligne de visée ou de la transmittivité d'une couche. Pour le modèle CKFG-SMG, le coefficient d'absorption κ_j est calculé par le LBL pour chaque gaz fictif, de façon à obtenir une k-distribution pour chaque gaz fictif. Au contraire, les paramètres d'une seule k-distribution sont calculés pour le modèle CK-SMG, à partir du spectre LBL du coefficient d'absorption représentatif du mélange.

4.6.2 Tabulation des modèles

La base de données à tabuler doit comprendre les paramètres des k-distributions pour de nombreuses valeurs du rapport de mélange à plusieurs températures et pressions totales. Tout d'abord, cette base de données est tabulée pour une quadrature fixée et des classes de gaz fictifs déterminées. La quadrature choisie de Gauss-Legendre à 10 points et les classes de gaz fictifs retenues sont données respectivement dans les tableaux Tab. 4.2 et Tab. 4.3. La quadrature de Gauss-Legendre à 10 points a été obtenue en retenant les points et poids dans l'intervalle [0 ;1] d'une quadrature de Gauss-Legendre à 20 points calculée dans l'intervalle [-1 ;1].

Tab. 4.2 : *Abscisses g_i et poids ω_i de la quadrature de Gauss-Legendre à 10 points.*

i	g_i	ω_i	i	g_i	ω_i	i	g_i	ω_i
1	0.0765	0.1528	5	0.6361	0.1182	9	0.9640	0.0406
2	0.2278	0.1492	6	0.7463	0.1019	10	0.9931	0.0176
3	0.3737	0.1421	7	0.8391	0.0833			
4	0.5109	0.1317	8	0.9122	0.0627			

Tab. 4.3 : *Classes des énergies de niveau bas des raies en cm^{-1} des gaz réels H_2O, CO_2 et CO composant les 3 gaz fictifs.*

Classes des gaz fictifs	H_2O	CO_2	CO
$\Delta E''_{gf1}$	[0,2000]	[0,2000]	[0,900]
$\Delta E''_{gf2}$	[2000,3000]	[2000,3000]	[900,3000]
$\Delta E''_{gf3}$	[3000,∞]	[3000,∞]	[3000,∞]

Les rapports de mélange, les températures et les pressions totales doivent être connues avant la tabulation. En effet, un calcul LBL ainsi qu'une procédure de tabulation des paramètres ont lieu pour chaque couple des valeurs de x_{H_2O}, x_{CO_2}, x_{CO}, T et p. Dans la

pratique, les paramètres tabulés à chaque couple de ces valeurs doivent être interpolés afin d'être utilisés dans un modèle de transfert.

La tabulation est entreprise pour 176 bandes étroites de 25 cm^{-1} dans la zone spectrale 1625-6000 cm^{-1}. Cependant, pour des besoins d'optimisation numérique, il faut considérer différents mélanges. Le chevauchement des raies de H_2O, CO_2 et CO apparaît dans quelques régions du spectre listées dans le tableau Tab. 4.4. Les frontières des régions spectrales de recouvrement des raies du tableau Tab. 4.4 prennent en compte l'étalement, survenant à hautes températures, des bandes de rotation-vibration des espèces gazeuses.

Tab. 4.4 : *Régions spectrales de recouvrement des raies du mélange avec le nombre de bandes de 25 cm^{-1}.*

Mélange	Région spectrale en cm^{-1}	Nombre de bandes
H_2O-CO_2-CO	[1950,2325]	16
H_2O-CO_2	[2350,2425], [3225,3775], [4475,5200]	57
H_2O-CO	[1625,1925], [3800,4350]	36

20 valeurs de la température ont été choisies arbitrairement pour la tabulation avec un pas qui augmente avec la température. De 300 K à 900 K, 13 valeurs distantes de 50 K sont prises et ensuite les 7 valeurs restantes sont : 1050, 1200, 1400, 1700, 2100, 2500 et 2900 K. La tabulation présentée dans cette étude est réalisée à la pression atmosphérique. Compte tenu de la forte dépendance du profil de la raie avec la fraction molaire de H_2O (au travers de la largeur Lorentz), et comme H_2O est toujours présente dans les mélanges, la discrétisation des mélanges est effectuée en fonction de H_2O. De cette manière, 12 points de discrétisation de x_{H_2O} ont été choisis : 0.01, 0.02, 0.04, 0.06, 0.08, 0.1, 0.14, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 0.8.

Pour chaque valeur discrète de x_{H_2O} et dans les bandes étroites où les raies du mélange H_2O-CO_2-CO sont présentes, les paramètres des k-distributions sont tabulés pour 15 mélanges dont les fractions molaires en CO_2 et CO sont données dans la figure 4.5. Les valeurs des fractions molaires (fonction de x_{H_2O}, Fig. 4.5) de CO_2 et CO utilisées pour la tabulation des mélanges sont fixées arbitrairement. Sur la diagonale tracée en pointillés (Fig. 4.5), le mélange est composé uniquement d'au moins deux des trois gaz du mélange H_2O-CO_2-CO. Par contre, sous la diagonale, les mélanges calculés par le LBL tiennent compte de l'air au travers des partenaires de collisions pour le calcul des largeurs Lorentz.

Dans les bandes étroites où les raies correspondent aux mélanges H_2O-CO_2 et H_2O-CO, les paramètres des k-distributions sont tabulés pour 5 couples de valeurs de fractions molaires qui correspondent à celles schématisées sur les axes appartenant respectivement à CO_2 et CO sur la figure Fig. 4.5. Le calcul de la tabulation présentée ci-dessus dure environ 3 jours sur une station de travail NEC (bi-processeurs 3.4 GHz et 8 GO de RAM).

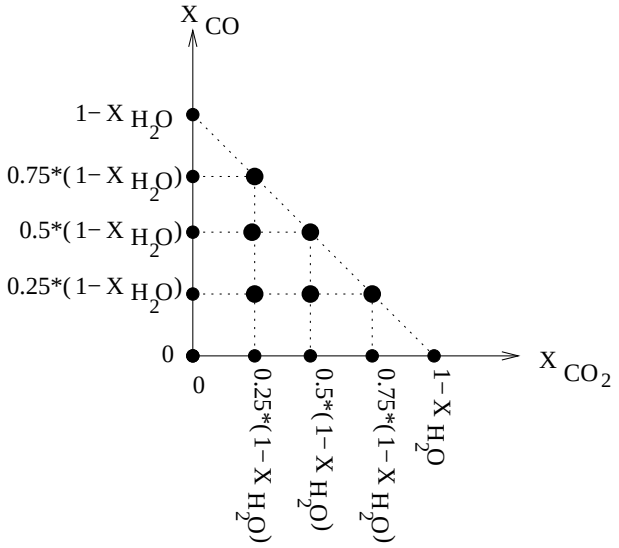


Fig. 4.5 : *Représentation des fractions molaires de CO_2 et CO intervenant dans les 15 mélanges (points) à tabuler correspondant à une valeur de x_{H_2O}.*

Les paramètres des k-distributions étant calculés pour des mélanges bien précis, la base de données est constituée de valeurs discrètes. Comme un grand nombre de paramètres sont tabulés, la réduction de la base de données est nécessaire. De plus, l'utilisation de cette tabulation doit permettre un calcul rapide des paramètres afin de ne pas pénaliser le calcul de transfert radiatif. En conséquence, la démarche retenue de réduction de la tabulation consiste dans un premier temps à ajuster les coefficients b_i d'un polynôme de degré 2 à deux variables X_1 et X_2 de la forme :

$$Y = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_1^2 + b_4X_1X_2 + b_5X_2^2 \tag{4.48}$$

avec Y le paramètre recherché. Y est alors le paramètre utile dans le modèle de télédétection, $k(g_i)$. A ce paramètre correspond un mélange dont les fractions molaires sont représentées par X_1 et X_2 dans l'équation 4.48. Lors du calcul de transfert radiatif, le polynôme permet le calcul des $k(g_i)$ en fonction des fractions molaires. Ensuite, une procédure d'interpolation est entreprise sur les autres variables, telles qu'une troisième fraction molaire ou la température.

Cette démarche, appliquée aux paramètres des k-distributions dans le cas du mélange H_2O-CO_2-CO, revient à ajuster les coefficients du polynôme en fonction des fractions molaires x_{CO_2} et x_{CO} pour un couple de valeurs de x_{H_2O}, T. Ensuite, une interpolation bilinéaire est effectuée en fonction de x_{H_2O} et T. Pour le mélange H_2O-CO_2 le polynôme est fonction de x_{H_2O} et x_{CO_2}. Une seule interpolation linéaire en fonction de T est alors nécessaire pour calculer le paramètre. De la même manière, les paramètres du mélange H_2O-CO sont calculés en remplaçant x_{CO_2} par x_{CO}. Lorsque seul H_2O est présente, le polynôme est ajusté pour une seule variable, x_{H_2O}, et ensuite une interpolation linéaire est réalisée sur la température.

4.6.3 Validation des modèles et de la tabulation

Les modèles CK-SMG et CKFG-SMG présentés précédemment vont être confrontés aux calculs LBL de référence dans plusieurs situations de télédétection dans le but de tester leur validité. Les approches CK-SMG et CKFG-SMG sont évaluées dans trois configurations servant à exposer les conséquences d'une part de l'hypothèse SMG, d'autre part de l'utilisation des gaz fictifs et enfin des deux réunies (FG-SMG) dans une situation réaliste qui tend à représenter des situations rencontrées dans notre étude.

Les paramètres des k-distributions des modèles CK-SMG et CKFG-SMG sont, dans cette évaluation, calculés directement à partir des spectres LBL. De cette façon, les erreurs dues aux interpolations ne sont pas prises en compte dans la discussion et la validation des modèles. Une fois les modèles validés, les résultats d'un calcul de transfert utilisant les paramètres tabulés sont comparés à ceux obtenus dans la situation réaliste de télédétection avec les paramètres issus directement du LBL.

Le spectre de la luminance moyennée sur une bande étroite $\overline{L}$ est représenté par la suite sur chaque figure, avec l'erreur absolue commise par chaque modèle approché en comparaison avec le LBL. Cette luminance est émise dans une direction de visée par une couche hétérogène et anisotherme à pression atmosphérique. Par la suite, trois de ces couches sont étudiées.

Les expressions de la luminance sortante d'une direction de visée qui traverse des couches homogènes isothermes sont données pour le LBL par l'équation suivante :

$$\overline{L}(\ell) = \frac{1}{\Delta\nu}\int_{\Delta\nu}\sum_{n=1}^{N_c}\Big(1-\exp[-\kappa_{\nu n}e_n]\Big)L_\nu^o(T_n)\prod_{n'=n+1}^{N_c}\exp[-\kappa_{\nu n'}e_{n'}]d\nu \qquad (4.49)$$

avec , $\kappa_{\nu n}$ le coefficient d'absorption monochromatique du mélange gazeux de la couche n.

Dans cette validation des modèles spectraux de bandes étroites, l'ETR est formulée en transmittivité et les calculs de transfert sont effectués, avec les modèles CKFG-SMG et CK-SMG. L'équation 4.43 est alors résolue en calculant tout d'abord la transmittivité (Eq. 4.46) moyenne d'une couche hétérogène et anisotherme pour un gaz. Ensuite, la transmittivité du mélange gazeux de cette même couche hétérogène et anisotherme est calculée (Eq. 4.45).

Les spectres des luminances sont calculés dans deux fenêtres spectrales, [1200-2500cm^{-1}] et [2800-4200cm^{-1}]. H_2O émet dans les deux fenêtres, tandis que H_2O, CO_2 et CO se recouvrent notablement dans la fenêtre [1950-2325cm^{-1}]. De plus, H_2O et CO_2 se recouvrent dans les régions [2350-2425cm^{-1}] et [3225-3775cm^{-1}]. De la même manière, H_2O et CO se recouvrent dans les zones [1625-1925cm^{-1}] et [3800-4350cm^{-1}].

La première couche, décrite sur la figure 4.6, est isotherme et particulièrement hétérogène. Ensuite, les figures 4.7(a) et 4.7(b) présentent les comparaisons entre les résultats des modèles CK-SMG et CKFG-SMG avec ceux du raie par raie. Le caractère fortement hétérogène de la couche est choisi pour évaluer la validité de l'approximation d'un gaz

unique équivalent à un mélange (SMG). La figure 4.7(a) représente les erreurs absolues induites par le chevauchement des raies du mélange H_2O-CO_2-CO entre 1950 et 2250cm^{-1}. De la même façon, la figure 4.7(b) représente les erreurs induites par le chevauchement des raies du mélange H_2O-CO_2 entre 3450 et 3775cm^{-1}. Bien que le rapport de mélange de chaque gaz réel change abruptement le long de la direction de visée, l'hypothèse de corrélation des k-distribution produit une erreur relative inférieure à 10% sur une bande étroite. Il est à noter que le modèle CKFG-SMG donne de meilleurs résultats que le modèle CK-SMG sur la figure 4.7(a) alors que les deux modèles ont la même précision pour la partie du spectre représentée sur la figure 4.7(b). Dans la zone du spectre comprise entre 1950 et 2250cm^{-1} de la figure 4.7(a) les raies influençant majoritairement le rayonnement sont des raies chaudes appartenant à H_2O et CO_2, tandis que les raies froides et les raies chaudes, sont présentes pour la molécule CO. Par conséquent, le modèle CKFG-SMG est plus précis puisqu'il isole les raies froides dans le gaz fictif 1. En effet, lors du calcul de transfert dans cette zone spectrale le gaz fictif 1 est constitué majoritairement de raies de CO. Ainsi, les effets de l'hypothèse SMG pour ce gaz fictif sont atténués. Dans la région spectrale entre 3450 et 3775cm^{-1} de la figure 4.7(b), les raies de H_2O et CO_2 qui se chevauchent ont des énergies de niveaux bas de transition de valeurs différentes. Dès lors, la sur-corrélation spectrale engendrée par l'hypothèse SMG affecte autant les deux modèles.

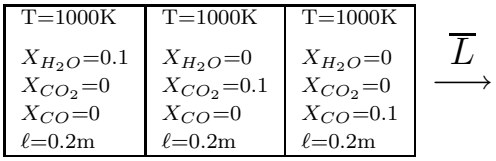
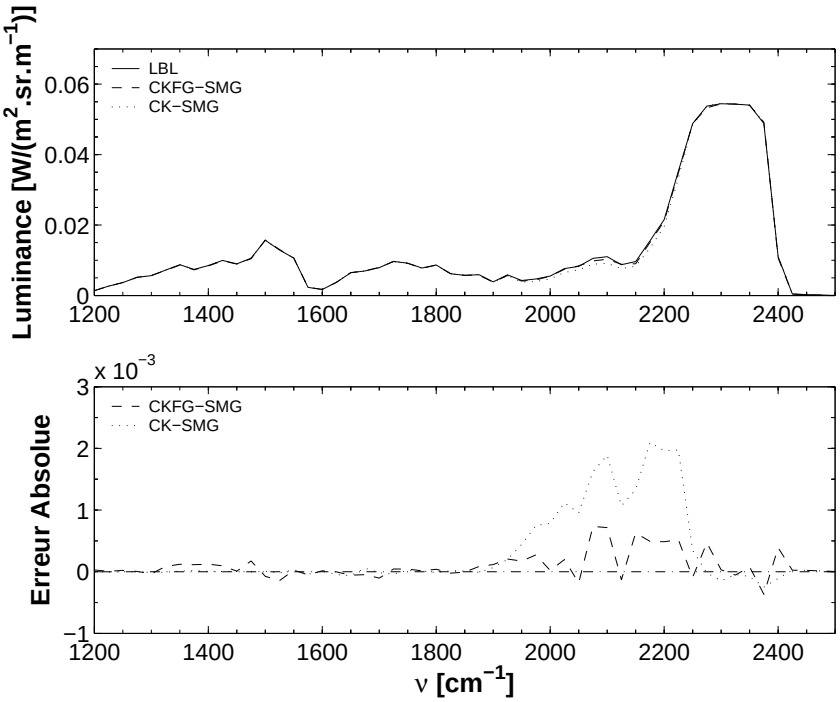
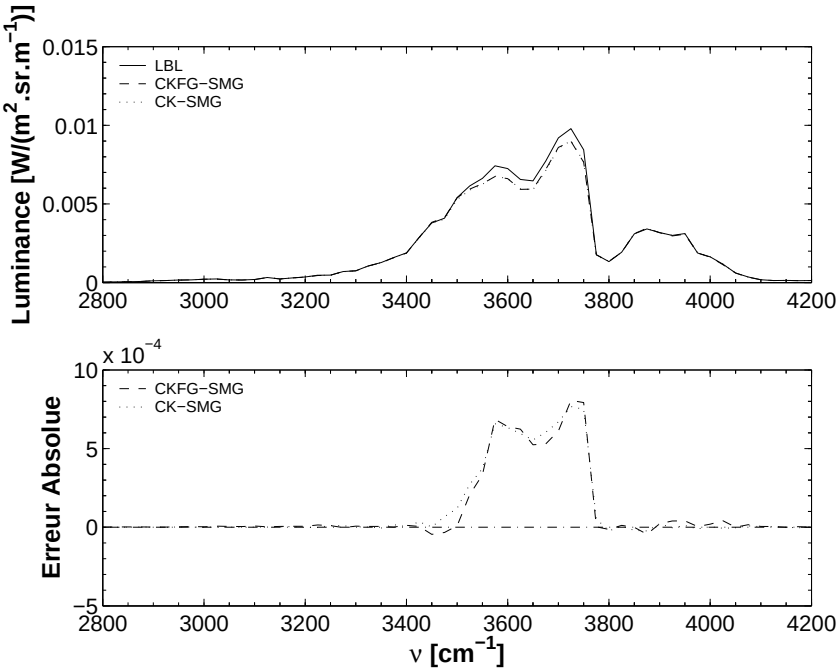


Fig. 4.6 : *Représentation des conditions de calcul des luminances sortantes.*



(a) 1200-2500 cm^{-1}.



(b) 2800-4200 cm^{-1}.

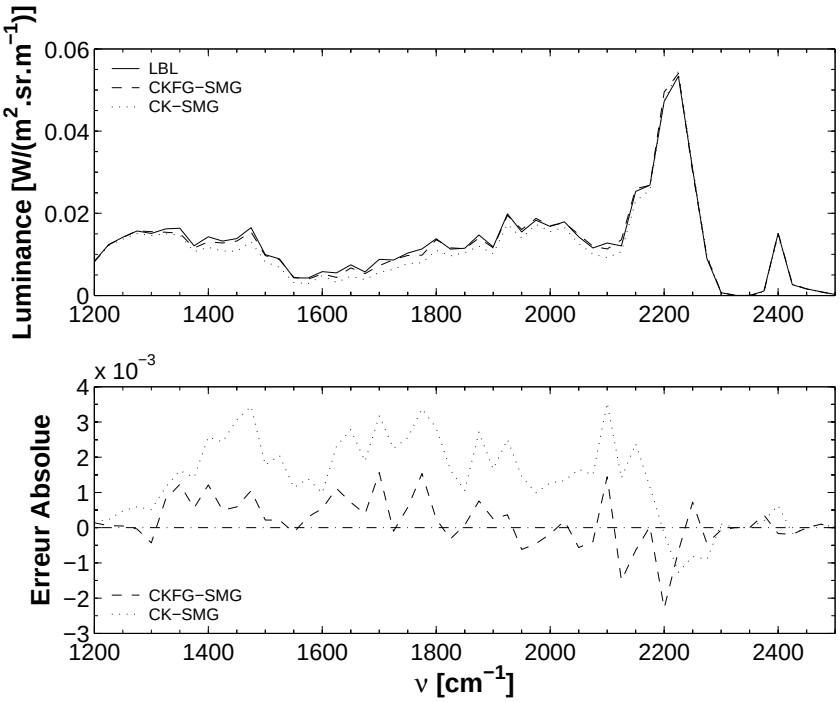
Fig. 4.7 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne hétérogène et isotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CKFG-SMG et CK-SMG dans deux fenêtres du spectre IR.*

La deuxième colonne décrite sur la figure 4.8 est homogène et anisotherme. Dans ce cas, c'est l'efficacité de l'hypothèse des gaz fictifs appliquée au mélange gazeux qui est évaluée. Deux trajets atmosphériques sont étudiés dans le but de faire varier l'épaisseur optique de milieu froid. Ces trajets correspondent à une faible et une forte épaisseur optique permettant de représenter l'influence du trajet atmosphérique sur la précision des modèles. Les figures 4.9(a) et 4.10(a) donnent des spectres de luminance pour un faible trajet atmosphérique. Dans les deux zones du spectre, le modèle CKFG-SMG donne globalement de meilleurs résultats que le CK-SMG. Pour un long trajet atmosphérique, comme dans les figures 4.9(b) et 4.10(b), le modèle CKFG-SMG est nettement plus précis que le CK-SMG, puisque l'erreur relative reste inférieure à 10% dans une bande étroite pour CKFG-SMG alors qu'elle peut dépasser les 40% pour le CK-SMG. Rivière et al. [60] ont obtenu des résultats spectraux similaires pour H_2O. Dans cette étude, l'hypothèse des gaz fictifs améliore considérablement les résultats lorsque le mélange H_2O-CO_2-CO est considéré comme un gaz unique et surtout quand l'épaisseur optique du milieu atmosphérique est importante.

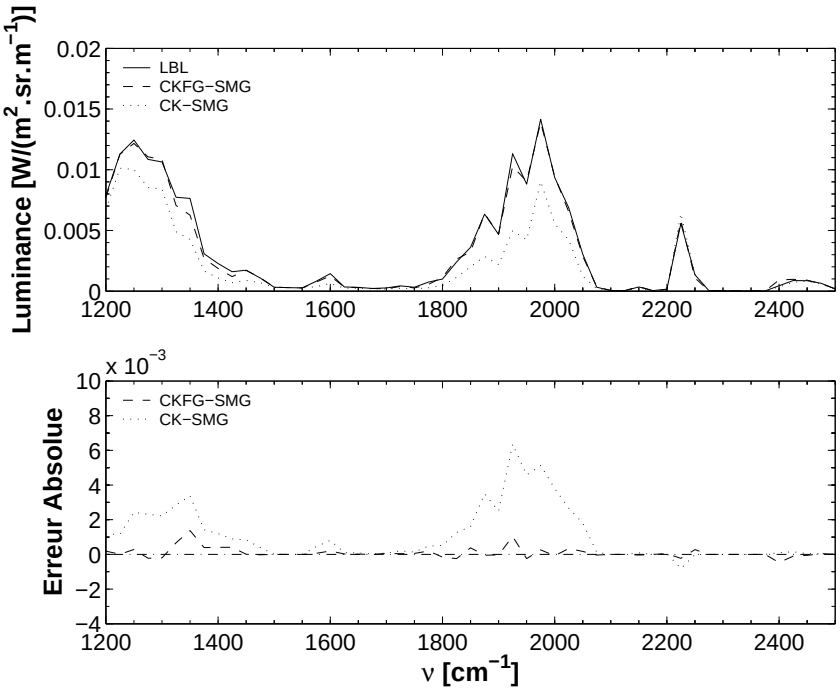
T=1500K	T=1200K	T=900K	T=500K	T=300K
X_{H_2O}=0.1 X_{CO_2}=0.1 X_{CO}=0.1 ℓ=0.2m	X_{H_2O}=0.1 X_{CO_2}=0.1 X_{CO}=0.1 ℓ=0.2m	X_{H_2O}=0.1 X_{CO_2}=0.1 X_{CO}=0.1 ℓ=0.2m	X_{H_2O}=0.1 X_{CO_2}=0.1 X_{CO}=0.1 ℓ=0.2m	X_{H_2O}=0.1 X_{CO_2}=0.1 X_{CO}=0.1 ℓ=0.2m, 10m

$\overline{L} \longrightarrow$

Fig. 4.8 : *Représentation des conditions de calcul des luminances sortantes.*

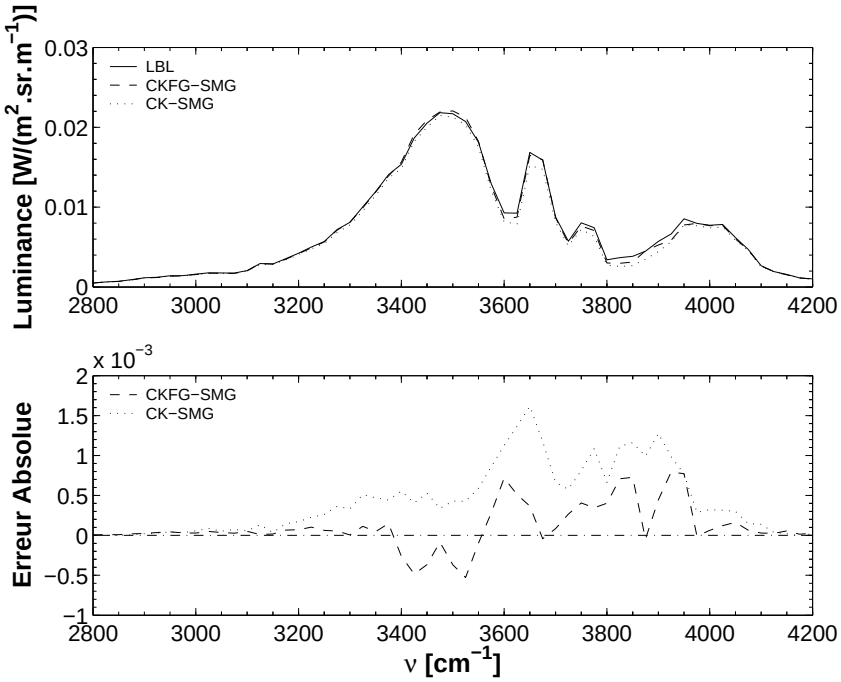


(a) 1200-2500cm^{-1} et ℓ(300K)=0.2m.

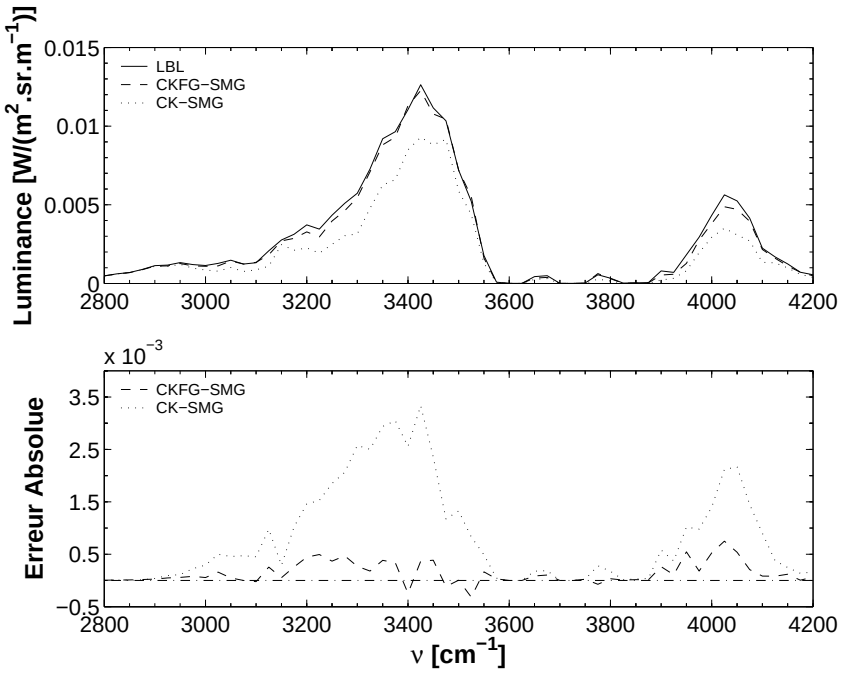


(b) 1200-2500cm^{-1} et ℓ(300K)=10m.

Fig. 4.9 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne homogène et anisotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CKFG-SMG et CK-SMG dans deux fenêtres du spectre IR.*



(a) 2800-4200cm^{-1} et ℓ(300K)=0.2m.



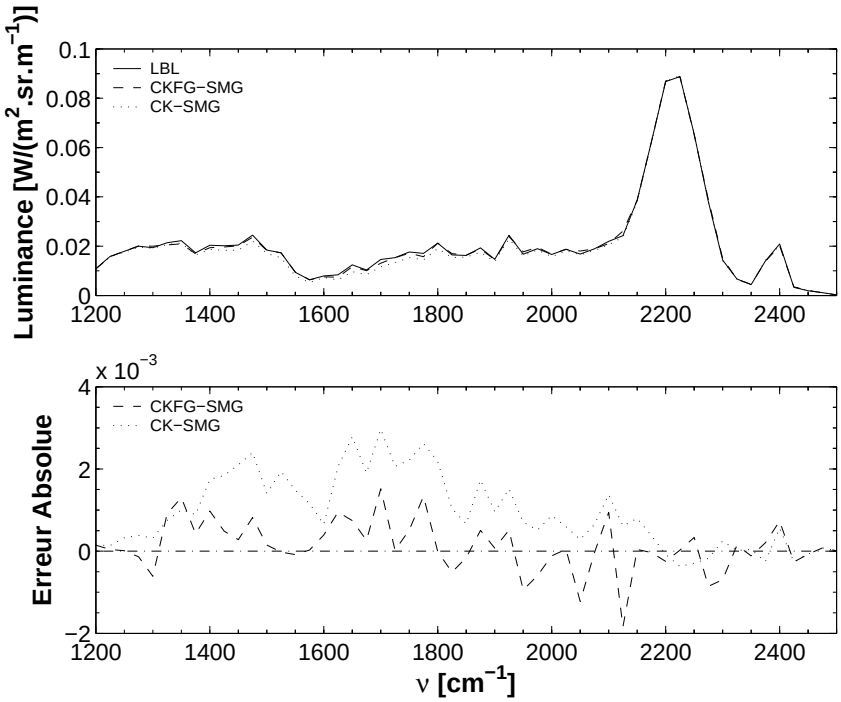
(b) 2800-4200cm^{-1} et ℓ(300K)=10m.

Fig. 4.10 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne homogène et anisotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CKFG-SMG et CK-SMG dans deux fenêtres du spectre IR.*

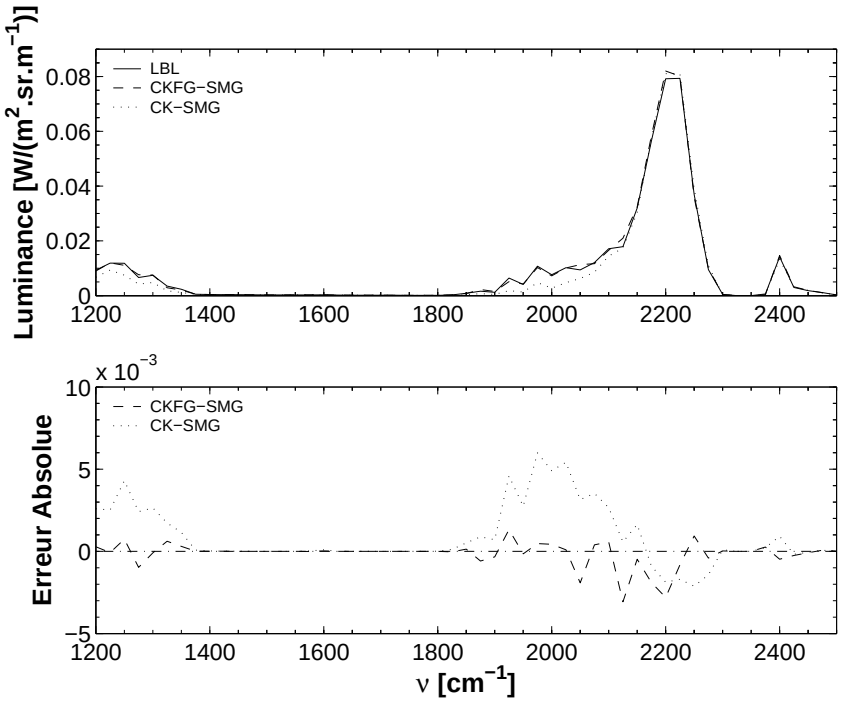
La troisième colonne décrite sur la figure 4.11 est à la fois hétérogène et anisotherme. La composition de cette colonne permet l'évaluation de l'efficacité des deux hypothèses de gaz fictifs et de gaz unique de mélange postulées simultanément dans une configuration de télédétection réaliste. La figure 4.11 représente alors les luminances dans deux fenêtres spectrales et pour deux valeurs du trajet atmosphérique. Dans les couches à hautes températures, le rapport de mélange des gaz réels est approximativement constant. Par contre, dans la couche froide (T=300K) le rapport de mélange est différent de celui dans la région à haute température. Sur les figures 4.13(a) et 4.12(a) (trajet optique court) l'influence de l'épaisseur optique de la couche atmosphérique est trop faible pour produire une différence remarquable entre les résultats des modèles CKFG-SMG et CK-SMG. En ce qui concerne les résultats incluant un long trajet atmosphérique représentés sur les figures 4.12(b) et 4.13(b), le modèle CKFG-SMG atteint une bonne précision avec une erreur maximale dans une bande étroite inférieure à 15% tandis que le modèle CK-SMG conduit à une erreur de plus de 50% dans une bande étroite. Sur les deux figures 4.12(b) et 4.13(b), les erreurs commises par le CK-SMG sont dues principalement à l'hypothèse des spectres corrélés considérant une sur-corrélation des k-distributions entre les spectres des régions chaudes et le spectre atmosphérique. C'est pourquoi l'approche CKFG-SMG, qui est construite pour ce type de situation, atteint une bonne précision. De plus, l'effet de sur-corrélation des spectres engendré par l'hypothèse de gaz unique pour le mélange (SMG) est négligeable dans cette configuration. Sur la figure 4.12(b), comme l'épaisseur optique de CO dans l'atmosphère est très faible, les erreurs produites par l'hypothèse SMG sont dues à H_2O et CO_2 qui se recouvrent dans la région spectrale 2100-2250cm^{-1}. Dans cette zone du spectre, l'erreur commise est inférieure à 15% et peut donc être négligée surtout lorsque la luminance doit être intégrée sur une large plage spectrale. Sur la figure 4.13(b), aucun effet de l'hypothèse SMG n'est trouvée puisque la luminance dans la région spectrale de recouvrement de H_2O et CO_2 est totalement absorbée par l'atmosphère. Les erreurs commises par les modèles CKFG-SMG et CK-SMG sont donc principalement dues aux corrélations spectrales induites par le changement de température le long de la direction de visée et par un trajet atmosphérique important lorsque les rapports de mélange des gaz ne varient pas abruptement dans les couches à hautes températures.

T=1500K	T=1200K	T=900K	T=500K	T=300K	
X_{H_2O}=0.15 X_{CO_2}=0.08 X_{CO}=0.04 ℓ=0.2m	X_{H_2O}=0.12 X_{CO_2}=0.06 X_{CO}=0.03 ℓ=0.2m	X_{H_2O}=0.09 X_{CO_2}=0.04 X_{CO}=0.02 ℓ=0.2m	X_{H_2O}=0.06 X_{CO_2}=0.02 X_{CO}=0.01 ℓ=0.2m	X_{H_2O}=0.03 X_{CO_2}=370E-6 X_{CO}=2E-7 ℓ=0.2m, 200m	$\overline{L}$ $\longrightarrow$

Fig. 4.11 : *Représentation des conditions de calcul des luminances sortantes.*

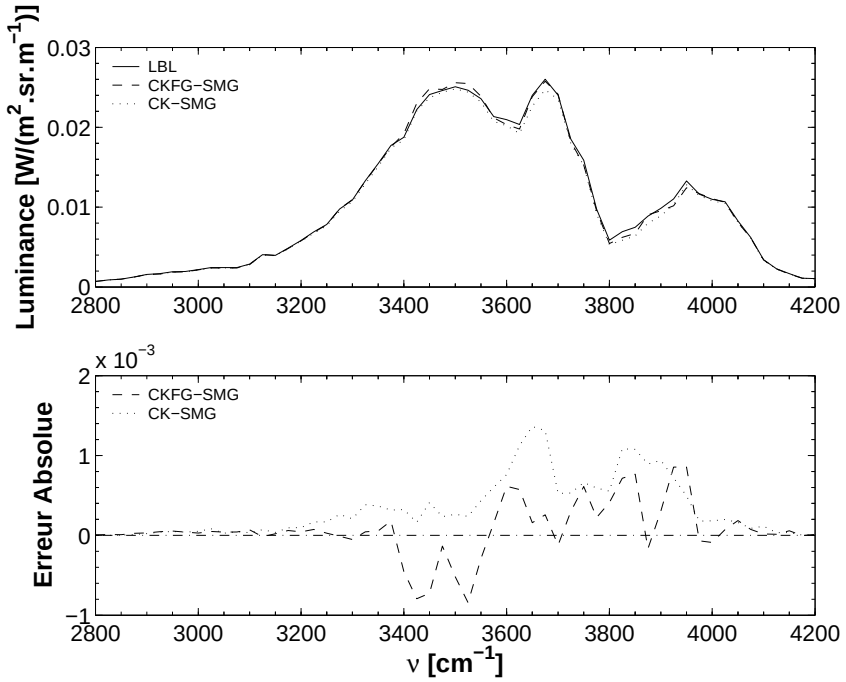


(a) 1200-2500cm^{-1} et ℓ(300K)=0.2m.

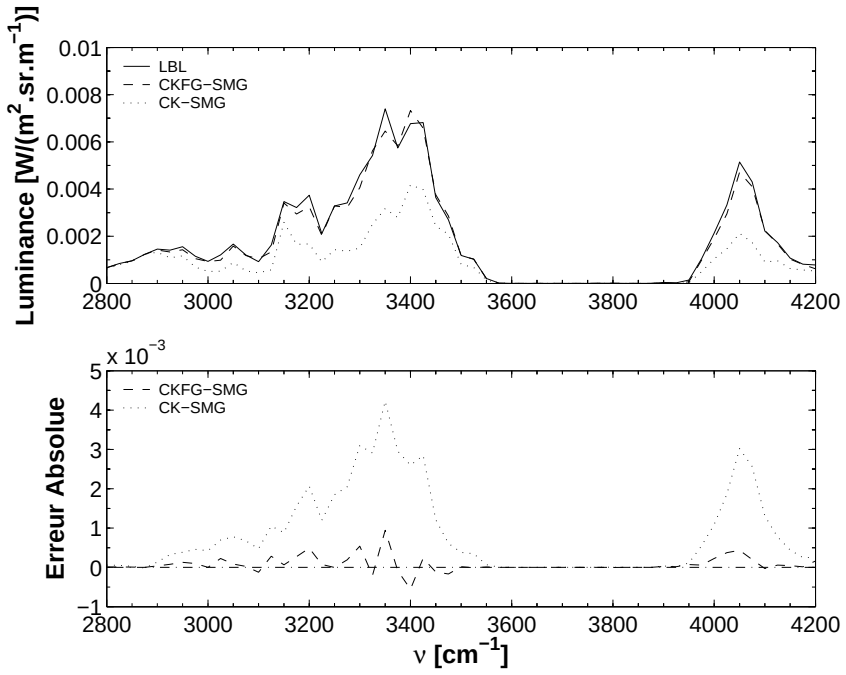


(b) 1200-2500cm^{-1} et ℓ(300K)=200m.

Fig. 4.12 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne hétérogène et anisotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CKFG-SMG et CK-SMG dans deux fenêtres du spectre IR.*



(a) 2800-4200cm^{-1} et ℓ(300K)=0.2m.

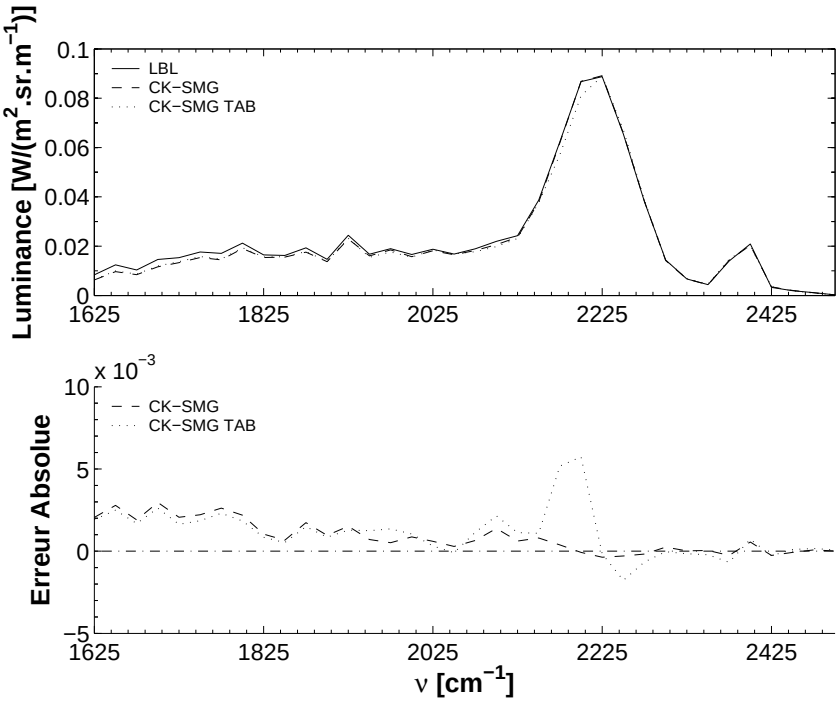


(b) 2800-4200cm^{-1} et ℓ(300K)=200m.

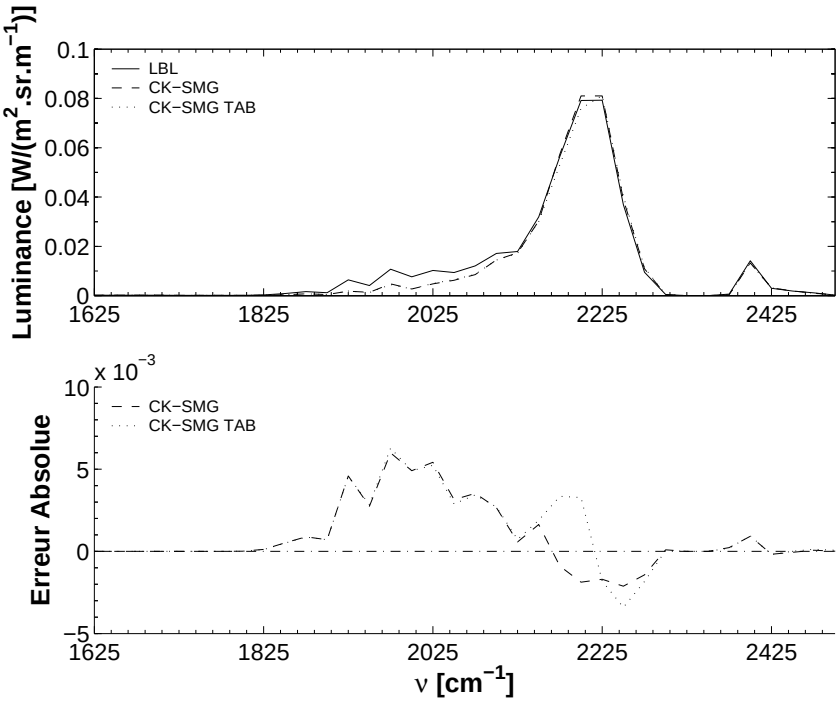
Fig. 4.13 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne hétérogène et anisotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CKFG-SMG et CK-SMG dans deux fenêtres du spectre IR.*

Compte tenu des configurations de télédétection envisagées dans l'étude menée, l'approche utilisant un modèle CKFG-SMG est retenue pour le calcul de la signature IR du jet. L'utilisation du modèle CK-SMG reste possible mais pour des trajets atmosphériques courts. Les approches CK-SMG et CKFG-SMG étant validées, leurs bases de données tabulées comprenant les paramètres des k-distributions peuvent alors être testées. La configuration de la figure 4.11 est reprise pour le calcul des spectres représentés sur les figure 4.14 et 4.15. Les figures 4.14 et 4.15 donnent la luminance sortante d'une couche hétérogène anisotherme calculée avec les modèles LBL et CK-SMG. Pour ce dernier, les paramètres sont soit calculés directement à partir d'un LBL (CK-SMG) soit interpolés à partir de la tabulation (CK-SMG TAB). En comparaison au LBL, l'erreur absolue commise lors du calcul de transfert avec CK-SMG et CK-SMG TAB est aussi tracée.

Les écarts constatés sur les figures 4.14(a) et 4.14(b) entre l'erreur commise par CK-SMG et CK-SMG TAB sont assez faibles hormis sur la figure 4.14(a) vers 2200cm^{-1}, où l'erreur due à l'utilisation de la tabulation (CK-SMG TAB) atteint 5%. Sur les figures 4.15(a) et 4.15(b), l'erreur supplémentaire ajoutée par l'interpolation des paramètres tabulés est négligeable.

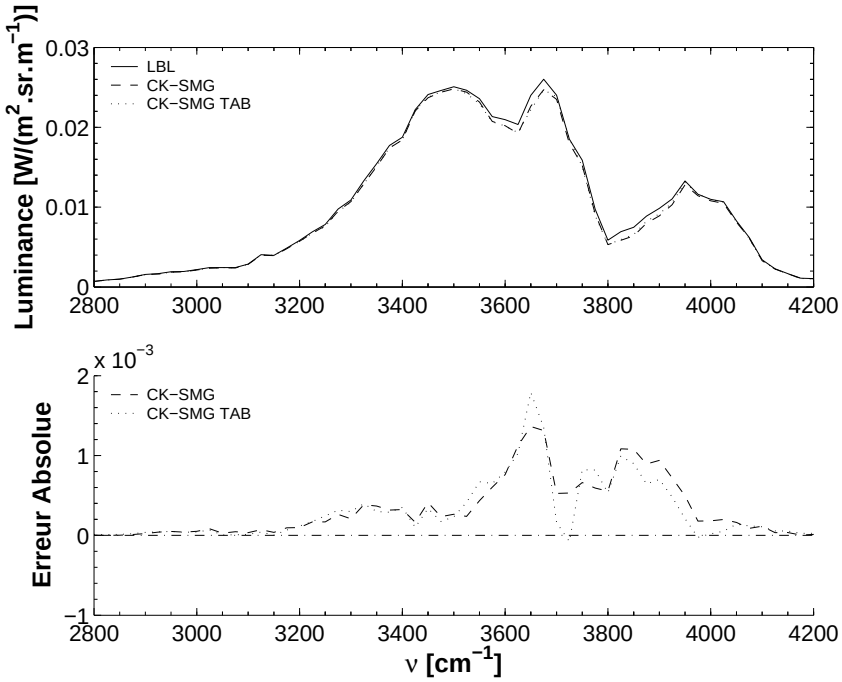


(a) 1200-2500cm^{-1} et ℓ(300K)=0.2m.

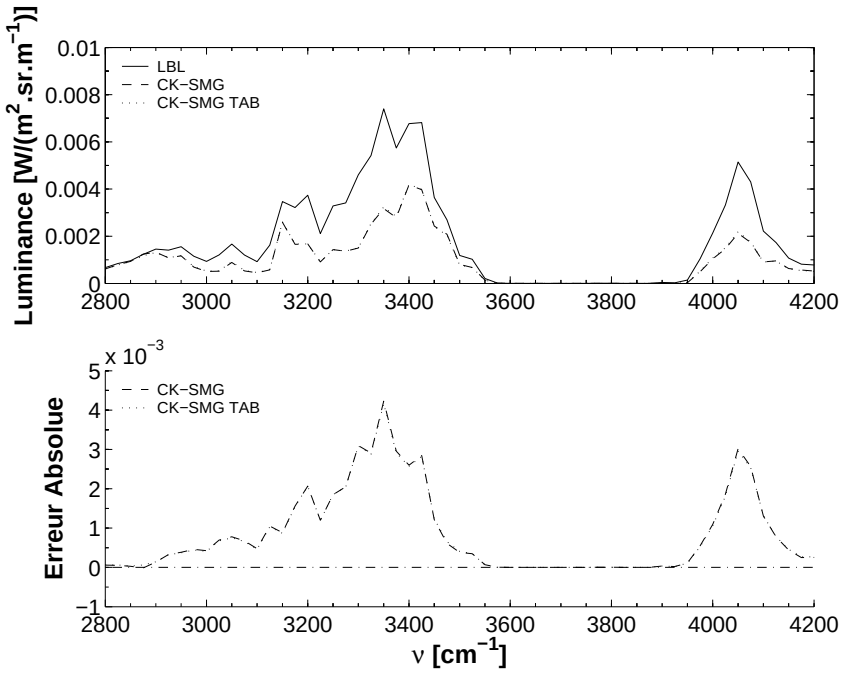


(b) 1200-2500cm^{-1} et ℓ(300K)=200m.

Fig. 4.14 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne hétérogène et anisotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CK-SMG et CK-SMG TAB dans deux fenêtres du spectre IR.*



(a) 2800-4200cm^{-1} et ℓ(300K)=0.2m.

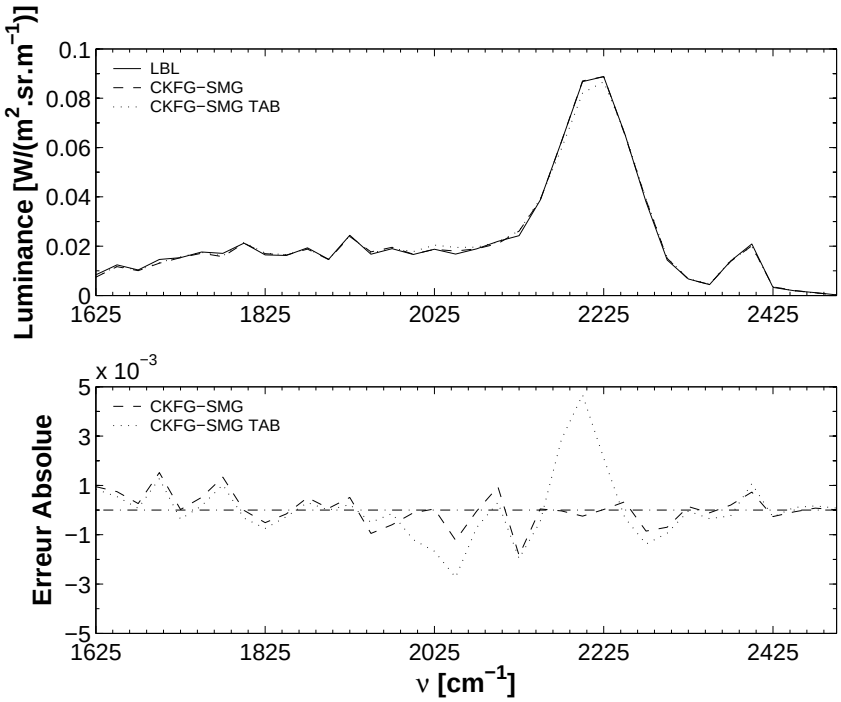


(b) 2800-4200cm^{-1} et ℓ(300K)=200m.

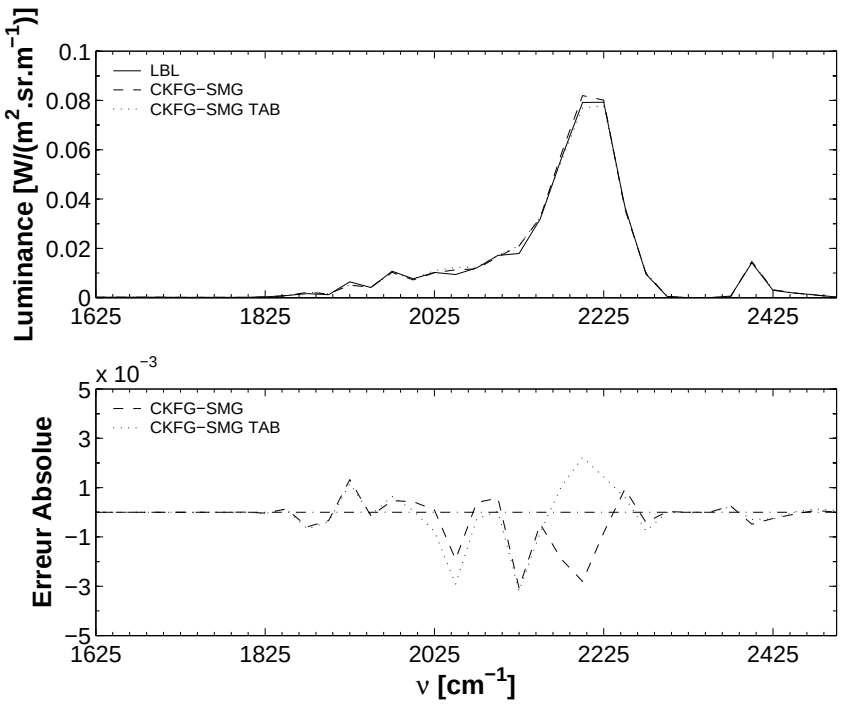
Fig. 4.15 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne hétérogène et anisotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CK-SMG et CK-SMG TAB dans deux fenêtres du spectre IR.*

La configuration de la figure 4.11 est reprise pour le calcul des spectres représentés sur les figure 4.16 et 4.17. De la même manière que précédemment, mais avec l'hypothèse des gaz fictifs, les figures 4.16 et 4.17 donnent la luminance sortante d'une couche hétérogène anisotherme calculée avec les modèles LBL et CKFG-SMG. Pour le CKFG-SMG, ses paramètres sont soit calculés directement à partir d'un LBL (CKFG-SMG) soit interpolés à partir de la tabulation (CKFG-SMG TAB). Comparée au résultat du LBL, l'erreur absolue commise lors du calcul de transfert avec CKFG-SMG et CKFG-SMG TAB est aussi tracée.

Les écarts constatés sur les figures 4.16(a) et 4.16(b) entre l'erreur commise par CKFG-SMG et CKFG-SMG TAB sont assez faibles. De plus, comme précédemment, sur la figure 4.16(a) vers 2200cm^{-1}, l'erreur due à l'utilisation de la tabulation (CKFG-SMG TAB) atteint 5%. Enfin, sur les figures 4.17(a) et 4.17(b), l'erreur supplémentaire ajoutée par l'interpolation des paramètres tabulés est négligeable.

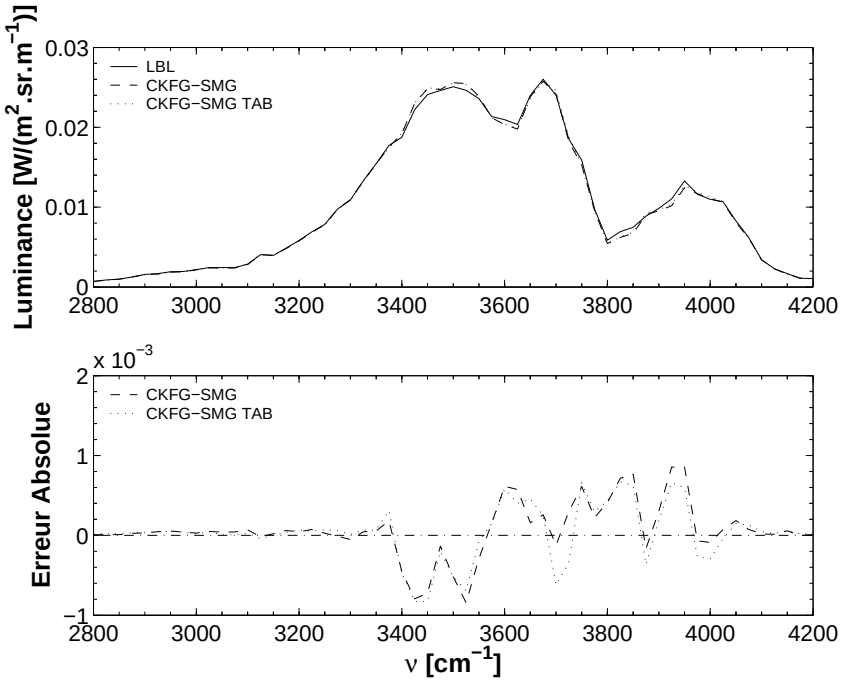


(a) 1200-2500cm^{-1} et ℓ(300K)=0.2m.

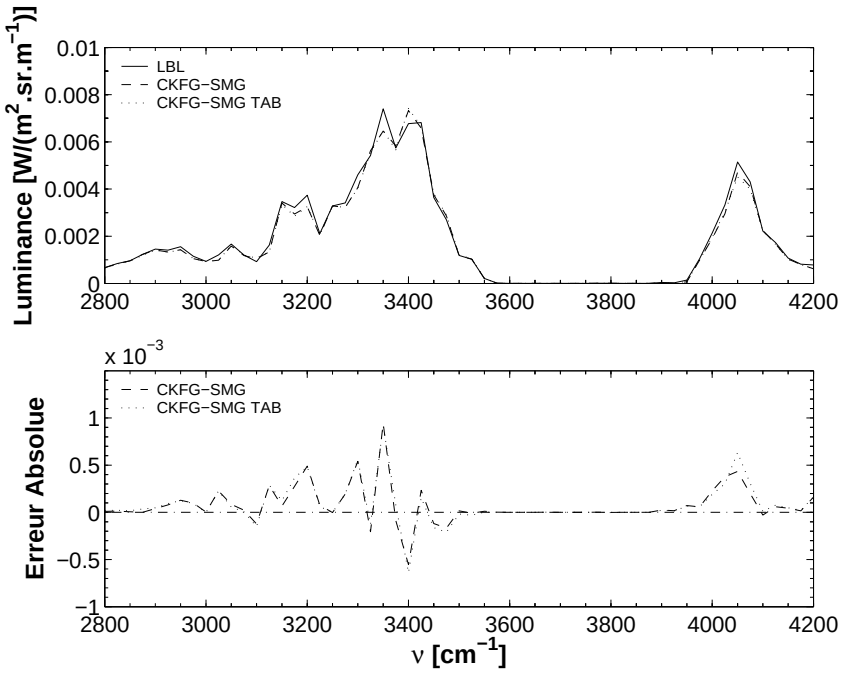


(b) 1200-2500cm^{-1} et ℓ(300K)=200m.

Fig. 4.16 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne hétérogène et anisotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CKFG-SMG et CKFG-SMG TAB dans deux fenêtres du spectre IR.*



(a) 2800-4200cm^{-1} et ℓ(300K)=0.2m.



(b) 2800-4200cm^{-1} et ℓ(300K)=200m.

Fig. 4.17 : *Comparaisons des luminances sortantes $\overline{L}$ de la colonne hétérogène et anisotherme moyennées sur une bande étroite et calculées avec le LBL, CKFG-SMG et CKFG-SMG TAB dans deux fenêtres du spectre IR.*

En résumé, les figures 4.14-4.15 et 4.16-4.17 montrent que les paramètres des modèles CK-SMG TAB et CKFG-SMG TAB sont interpolés correctement pour les couches étudiées dans la configuration de la figure 4.11.

4.7 Etude sur l'approximation de gaz unique pour les mélanges CO_2-H_2O

Cette section a pour objectif l'évaluation des erreurs commises par l'utilisation de l'hypothèse d'un gaz unique pour le mélange (Single Mixture Gas, SMG) dans un modèle de bandes étroites de télédétection infrarouge avec l'hypothèse des gaz fictifs.

Nous allons présenter une étude plus détaillée de l'approximation SMG que celle présentée dans les paragraphes précédents. De plus, nous allons comparer les modèles CK-SMG et CKFG-SMG aux modèles classiques CK et CKFG ainsi qu'au modèle de référence, le LBL. Cette évaluation des modèles sera conduite en terme de précision et en terme de temps de calcul.

Pour effectuer ces comparaisons, une étape de construction et de validation des bases de données (tabulation) a été réalisée pour les modèles CK et CKFG (classique). Cette étape est très proche de la tabulation énoncée auparavant. Dans le cas du mélange H_2O-CO_2-CO, la tabulation des paramètres du modèle CK classique a consisté à tabuler séparément les paramètres de chaque gaz. De plus, la tabulation des paramètres du modèle CKFG classique a été réalisée pour chaque gaz fictif de chaque gaz réel. La discrétisation en température a déjà été donnée et la pression est fixée à 1atm. Pour H_2O, les paramètres sont calculés pour différentes valeurs de x_{H_2O} et la base de données est ensuite réduite à l'aide d'un polynôme de degré 2. Pour CO_2 et CO, leurs paramètres sont calculés pour différentes valeurs de leurs fractions molaires ainsi que pour des valeurs de x_{H_2O} afin de tenir compte de la variation des largeurs de raies en fonction de la concentration en H_2O. Ensuite, leurs bases de données sont réduites avec un polynôme de degré 2 à deux variables. Enfin, dans un calcul de transfert, tous les paramètres sont interpolés linéairement avec la température.

Avec les paramètres tabulés des modèles classiques CK et CKFG, les comparaisons en terme de temps de calcul et de précision pourront être conduites. Nous considèrerons dans cette évaluation la fenêtre spectrale 2.6-3μm où le recouvrement de H_2O et CO_2 est important.

Le modèle CKFG avec 3 gaz fictifs par gaz réels est appliqué à H_2O et CO_2, ce qui conduit à considérer 6 gaz fictifs dans les zones de recouvrements de ces deux gaz. Par contre si on utilise l'hypothèse SMG, on ne considère que 3 gaz fictifs. Cependant la sur-corrélation des spectres entraînée par l'hypothèse SMG peut, à priori, produire des erreurs que nous allons tenter de quantifier en fonction des épaisseurs optiques des gaz H_2O et CO_2. Par la suite les résultats sont donnés pour deux configurations distinctes. La première est appelée *configuration atmosphérique* tandis que la seconde moins réaliste est

appelée *configuration école*. Ces deux configurations permettent d'évaluer les limites du modèle CKFG-SMG dans un cas où une couche est composée d'H_2O et l'autre de CO_2. Avant de poursuivre, il est important de remarquer que pour de telles configurations, le meilleur modèle à employer est le modèle CK (classique) puisque les deux couches sont constituées de gaz différents et donc que l'hypothèse de gaz fictif n'a pas besoin d'être réalisée.

4.7.1 Configuration atmosphérique

Dans un premier temps, on calcule la luminance sortante de deux couches adjacentes représentant un cas typique de télédétection où l'hypothèse SMG est mise en défaut. La couche principalement émettrice est composée uniquement de H_2O tandis que celle absorbante n'est composée que de CO_2. Cette configuration atmosphérique est donnée sur la figure 4.18.

Une représentation du spectre de l'émissivité d'une couche atmosphérique dans la fenêtre spectrale du recouvrement (H_2O-CO_2) est donnée pour trois valeurs de l'épaisseur de la couche : 10m, 100m et 1km (Fig. 4.19). Cette émissivité est calculée précisément avec le modèle raie-par-raie.

T=2000K	T=300K
X_{H_2O}=0.2	X_{H_2O}=0
X_{CO_2}=0	X_{CO_2}=370.10^{-6}
ℓ=2m	ℓ=10m, 100m, 1km

$\overline{L}$ $\longrightarrow$

Fig. 4.18 : *Représentation des conditions de calculs des luminances sortantes pour la configuration atmosphérique (p=1atm).*

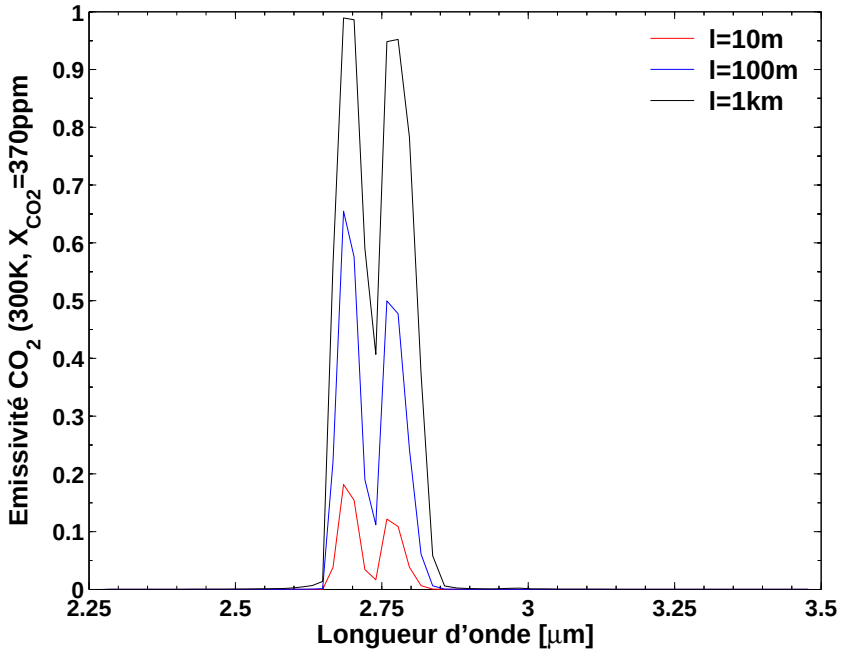


Fig. 4.19 : *Emissivité (modèle LBL) du CO_2 pour une couche atmosphérique à 300K (p=1atm et X_{CO_2}=370ppm) avec ℓ=10m, 100m, 1km.*

4.7.2 Résultats de la configuration atmosphérique

Les spectres, entre 2.25 et 3.5μm, des luminances sortantes (Fig. 4.18) sont représentés sur les figures 4.20-4.22. Ces luminances sont calculées avec différents modèles pour trois longueurs de la couche. Le premier modèle est le modèle de référence, LBL, et les autres sont les modèles de bandes étroites CK, CKFG et CK-SMG, CKFG-SMG.

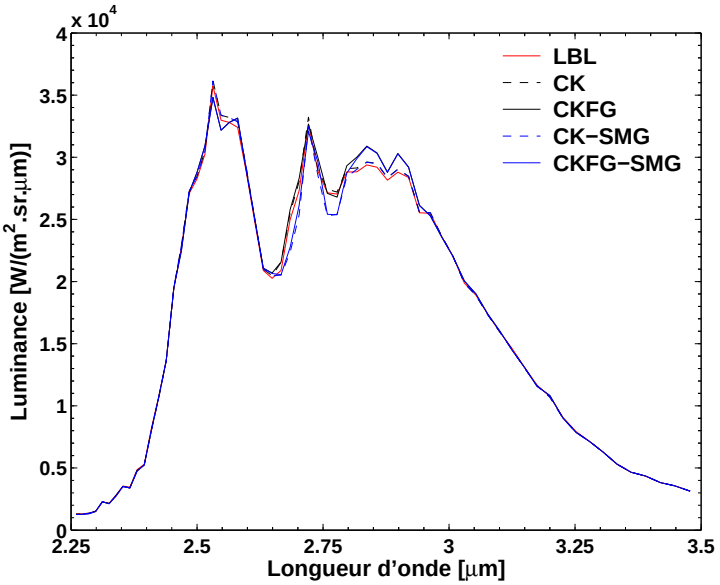


Fig. 4.20 : *Luminance sortante pour la couche avec $\ell_{300K} = 10m$.*

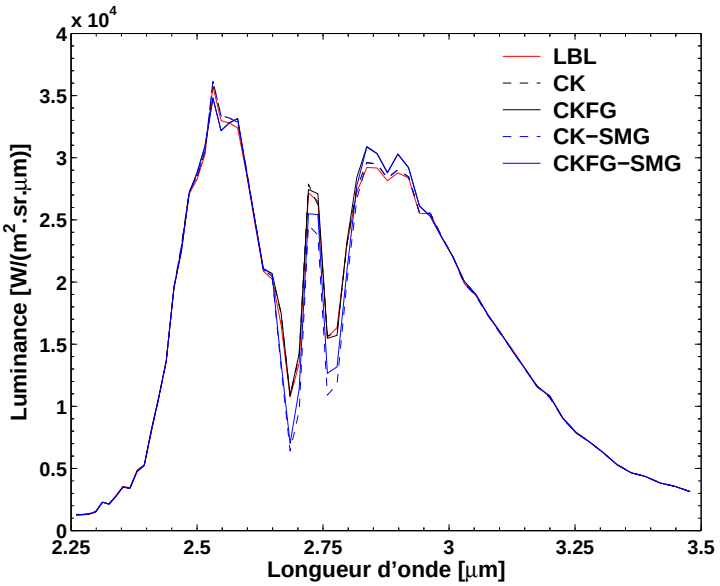


Fig. 4.21 : *Luminance sortante pour la couche avec $\ell_{300K} = 100m$.*

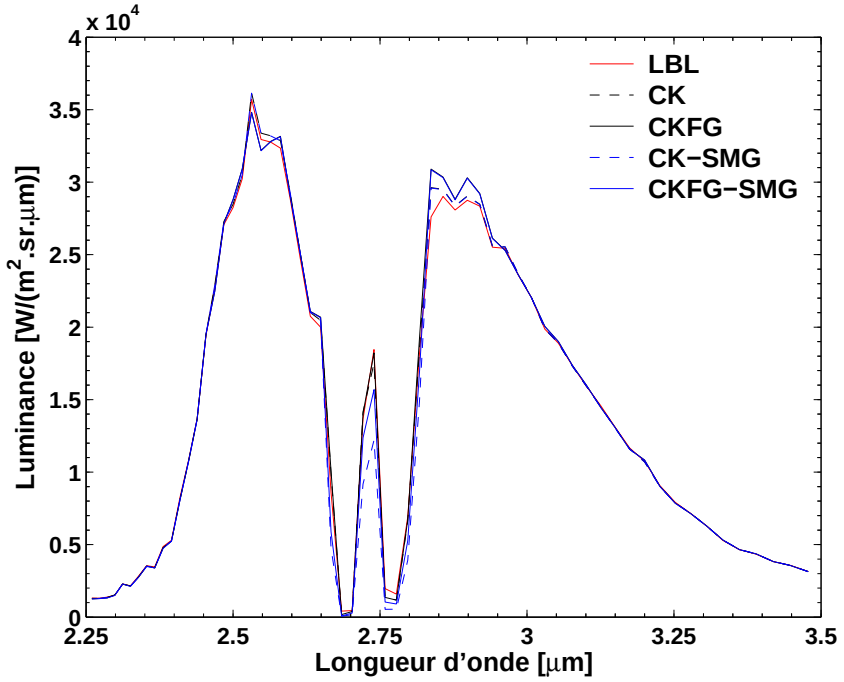


Fig. 4.22 : *Luminance sortante pour la couche avec ℓ_{300K} = 1000m.*

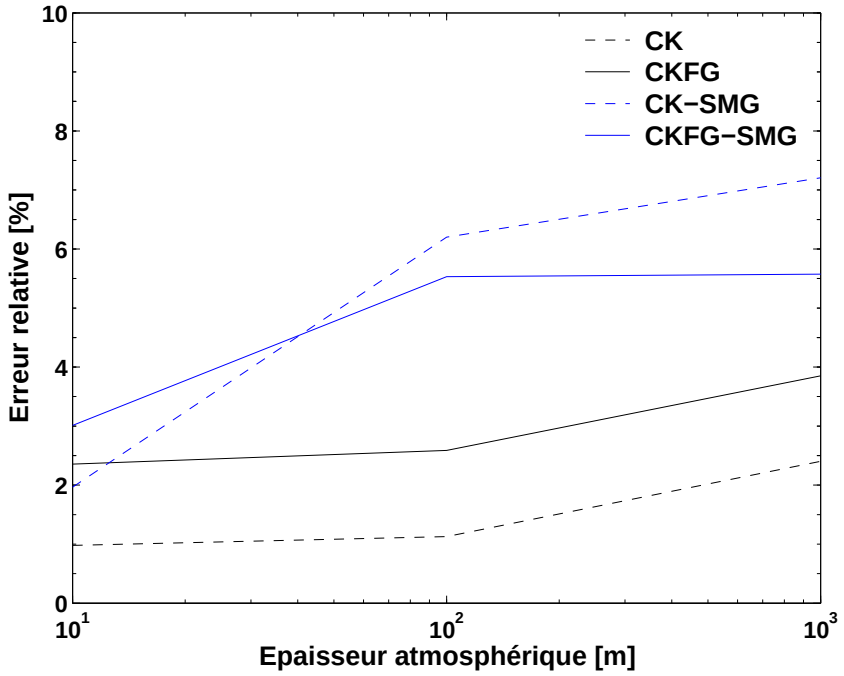


Fig. 4.23 : *Evolution de l'erreur relative intégrée entre 2.6 et 3 µm pour chaque modèle en fonction de l'épaisseur de la couche atmosphérique.*

L'erreur commise par chaque modèle (CK, CKFG, CK-SMG, CKFG-SMG) entre les bornes spectrales 2.6-3μm est donnée pour chaque couche sur la figure 4.23. Le calcul de l'erreur est effectué avec l'expression suivante :

$$\text{Erreur relative}[\%] = \frac{\int_{\lambda=2.6\mu m}^{\lambda=3\mu m} |L_{ref} - L_{mod}| d\lambda}{\int_{\lambda=2.6\mu m}^{\lambda=3\mu m} L_{ref} d\lambda} \tag{4.50}$$

L_{ref} et L_{mod} sont respectivement les luminances sortantes calculées avec le modèle raie-par-raie et un modèle approché. Cette erreur représente la valeur absolue de l'écart entre la solution de référence (LBL) et le modèle approché. La valeur absolue utilisée dans l'expression de l'erreur permet d'éviter que les écarts avec la solution de référence ne se compensent.

Discussion des résultats

Pour la configuration atmosphérique les résultats montrent que l'erreur maximale (Eq. 4.50) entre 2.6 et 3μm commise par les modèles CK et CKFG sont du même ordre : 2% pour CK et 4% pour CKFG (Fig. 4.23). En effet, l'hypothèse des gaz fictifs n'apporte pas une précision supplémentaire puisque aucun des deux gaz n'est présents dans les deux couches à la fois. Cette configuration peut alors être traitée avec le modèle CK. La différence de précision observée entre ces modèles vient de la précision atteinte lors de l'interpolation des paramètres des deux modèles. L'augmentation de l'erreur due à CK et CKFG pour l'épaisseur de la couche de CO_2 de 1000m (Fig. 4.23) est provoquée par un manque de précision de ces deux modèles entre 2.8 et 3μm. Ce défaut de précision est lié à la tabulation.

De plus, les résultats montrent que l'erreur maximale (Eq. 4.50) entre 2.6 et 3μm due à l'hypothèse SMG ne dépasse pas 8% pour CK-SMG et 6% pour CKFG-SMG. Les valeurs des erreurs relatives de ces deux modèles sont proches et lorsque l'épaisseur de la couche de CO_2 augmente de 100m à 1000m, l'augmentation de leur erreur relative évolue plus lentement à cause de la saturation de l'absorption par la couche de CO_2.

4.7.3 Configuration école

Dans un second temps, on calcule la *luminance émise par une couche de H_2O et absorbée par une couche de CO_2*. Ce cas est la configuration école où l'hypothèse SMG doit conduire à une mauvaise estimation de l'absorption. Cette configuration école est donnée sur la figure 4.24.

T=1000K X_{H_2O}=0.2 X_{CO_2}=0 ℓ=0.5m, 1m, 2m	T=1000K X_{H_2O}=0 X_{CO_2}=0.2 ℓ=0.5m, 1m, 2m

Fig. 4.24 : *Représentation des conditions de calculs pour la configuration école (p=1atm).*

Pour quantifier l'influence de chacune des deux couches, les spectres des émissivités des couches de CO_2 et de H_2O (calculée avec le modèle raie-par-raie) sont donnés sur les figures 4.25 et 4.26, pour trois valeurs de l'épaisseur de chacune des couches, 0.5m, 1m et 2m.

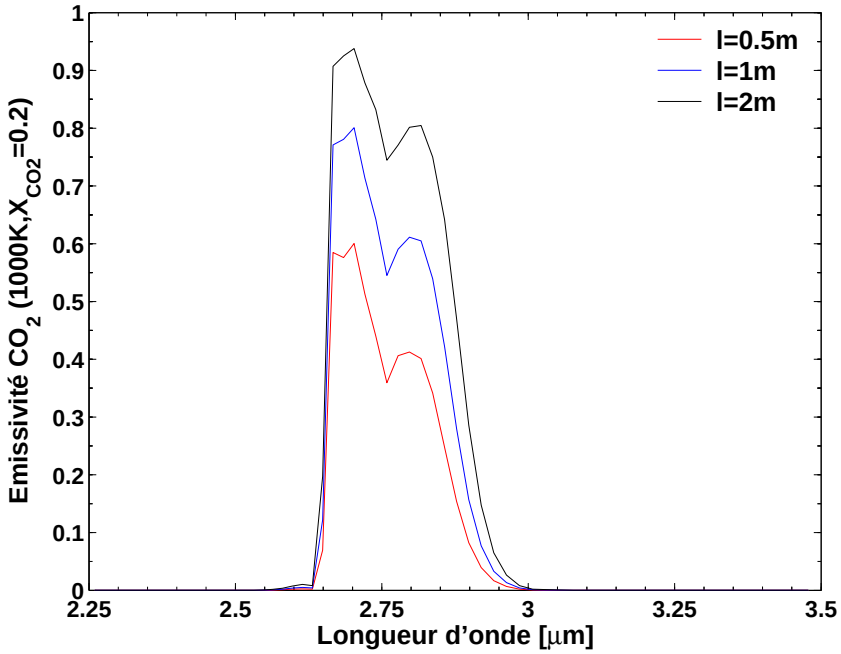


Fig. 4.25 : *Emissivité (modèle LBL) du CO_2 d'une couche à 1000K (p=1atm et X_{CO_2}=0.2) avec ℓ=0.5m, 1m, 2m.*

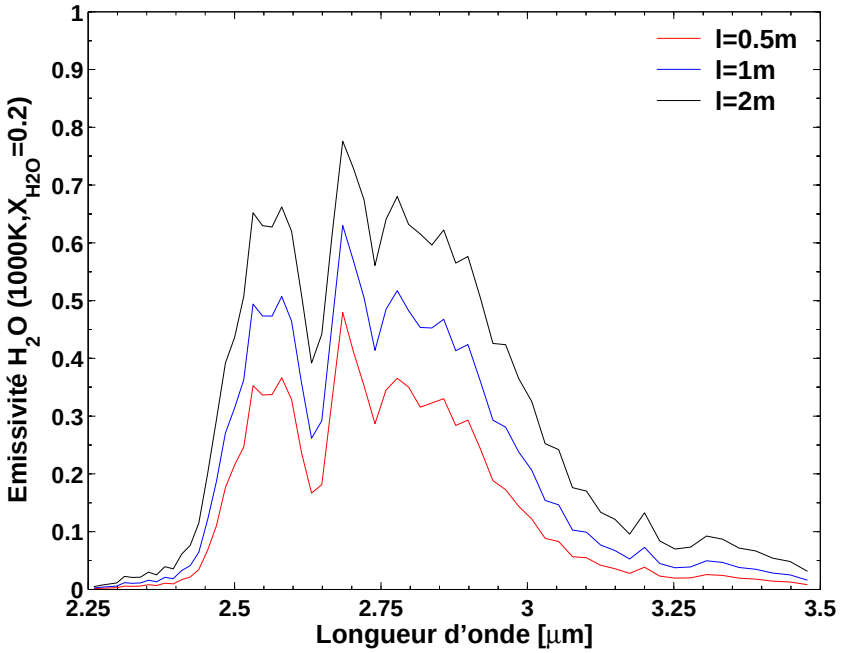


Fig. 4.26 : *Emissivité de H_2O (modèle LBL) d'une couche à 1000K (p=1atm et X_{H_2O}=0.2) avec ℓ=0.5m, 1m, 2m.*

4.7.4 Résultats de la configuration école

Les luminances émises par la couche d'H_2O et transmises à-travers celle de CO_2 (Fig. 4.24) sont représentées sur les figures 4.27, 4.28, 4.29, 4.32, 4.33, 4.34, 4.37, 4.38, 4.39.

Les résultats sont organisés en fonction de l'épaisseur de la couche d'H_2O. Trois spectres de luminances transmises sont donnés pour une épaisseur constante de la couche d'H_2O et une épaisseur de la couche de CO_2 différente pour chaque figure. Ensuite, une figure est donnée qui représente l'erreur de chaque modèle approché (Eq. 4.50), intégrée entre les bornes 2.6-3μm, en fonction de l'épaisseur de la couche de CO_2.

Comme les erreurs commises par l'hypothèse SMG conduisent à une mauvaise estimation de l'absorption par la couche de CO_2, nous allons étudier les erreurs commises sur le calcul de la fraction d'intensité absorbée par le CO_2. Pour cela, la partie du rayonnement absorbée par CO_2 entre 2.6 et 3μm est calculée par le raie-par-raie (référence) avec l'expression :

$$\begin{aligned}\overline{I^a_{ref}} &= \int_{2.6\mu m}^{3\mu m} |(1-\exp[-\kappa_{\lambda H_2O}\ell_{H_2O}])L_b \\ &\quad -(1-\exp[-\kappa_{\lambda H_2O}\ell_{H_2O}])L_b \cdot \exp[-\kappa_{\lambda CO_2}\ell_{CO_2}]|d\lambda \qquad (4.51)\end{aligned}$$

De plus, on définit, de la même manière, une intensité absorbée par le CO_2, $\overline{I^a_{mod}}$, calculée avec un modèle approché dans l'objectif de la comparer à l'intensité absorbée de référence. Les résultats de la comparaison ($\frac{\overline{I^a_{mod}}}{\overline{I^a_{ref}}}$) sont donnés sur les figures 4.31, 4.36 et 4.41.

Résultats pour la configuration école avec ℓ_{H_2O}= 0.5m

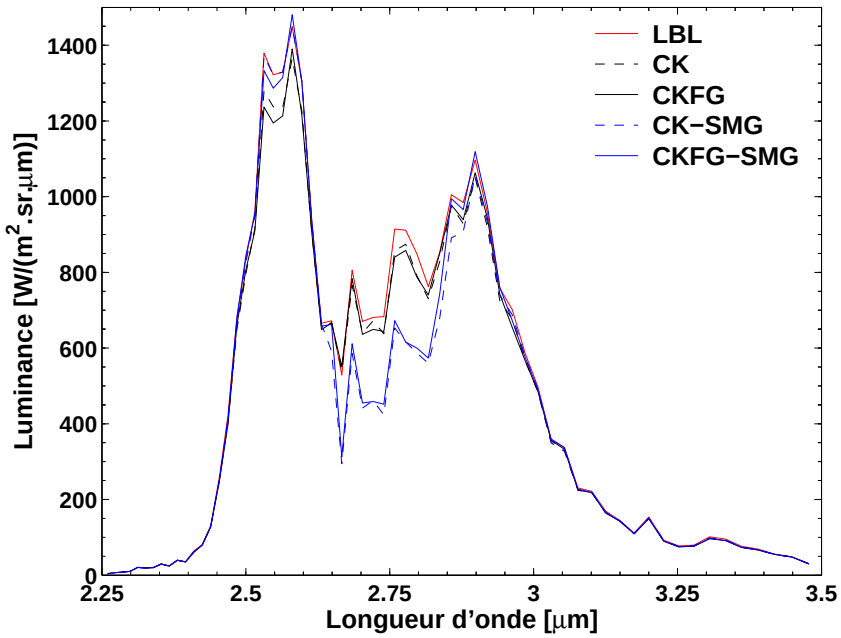


Fig. 4.27 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 0.5m et ℓ_{CO_2}= 0.5m.*

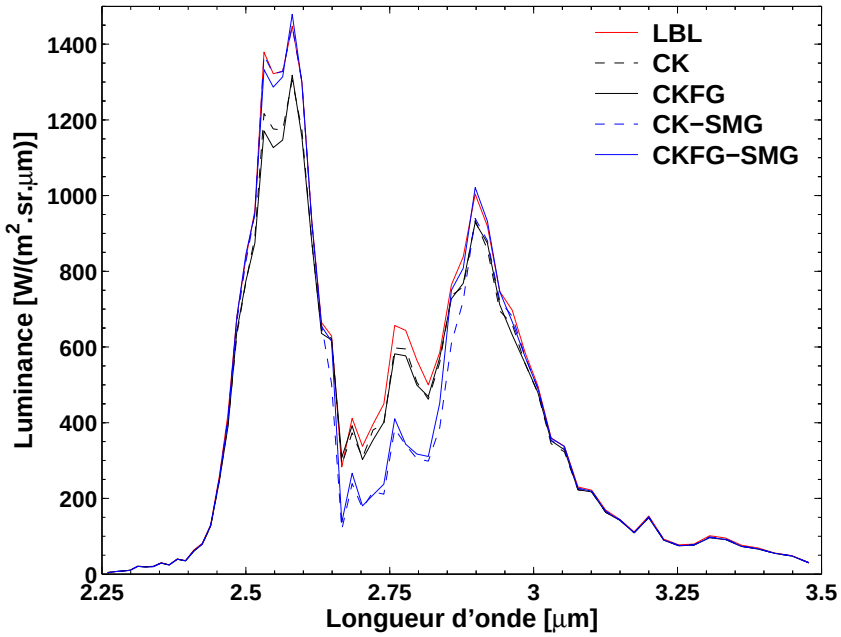


Fig. 4.28 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 0.5m et ℓ_{CO_2}= 1m.*

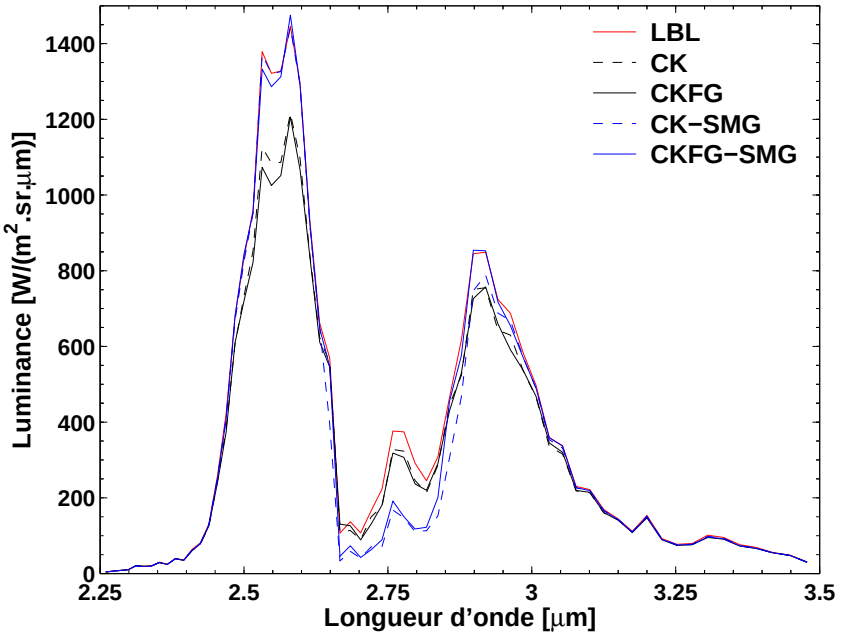


Fig. 4.29 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 0.5m et ℓ_{CO_2}= 2m.*

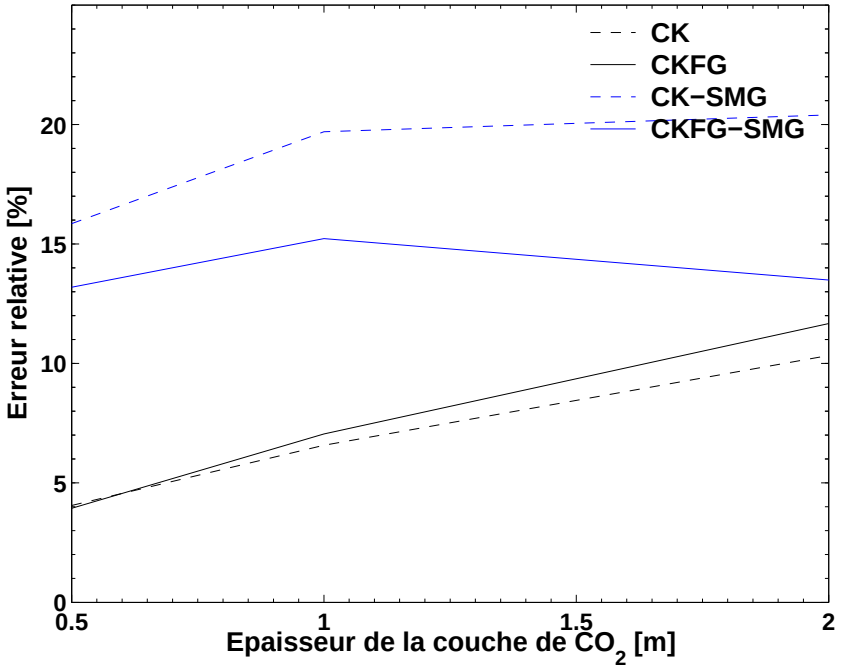


Fig. 4.30 : *Evolution de l'erreur relative intégrée entre 2.6 et 3 μm pour chaque modèle en fonction de l'épaisseur de la couche de CO_2 pour ℓ_{H_2O}= 0.5m.*

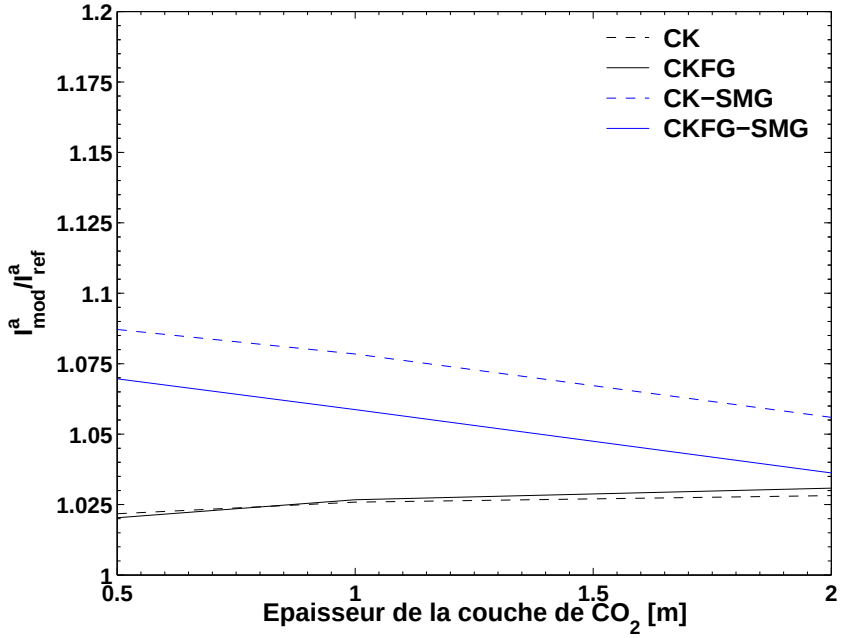


Fig. 4.31 : *Evolution de l'erreur intégrée entre 2.6 et 3 μm pour chaque modèle en fonction de l'épaisseur de la couche de CO_2 pour ℓ_{H_2O}= 0.5m.*

Résultats pour la configuration école avec ℓ_{H_2O}= 1m

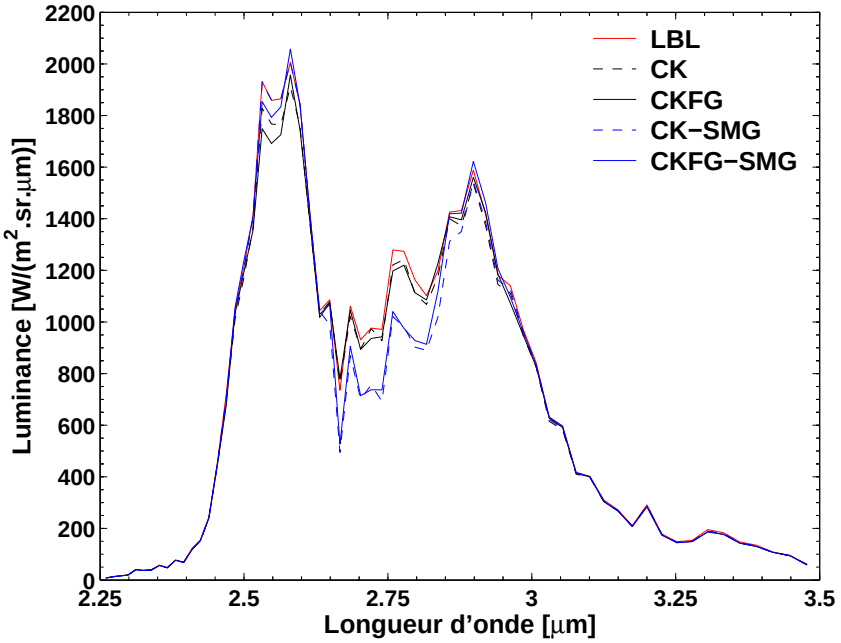


Fig. 4.32 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 1m et ℓ_{CO_2}= 0.5m.*

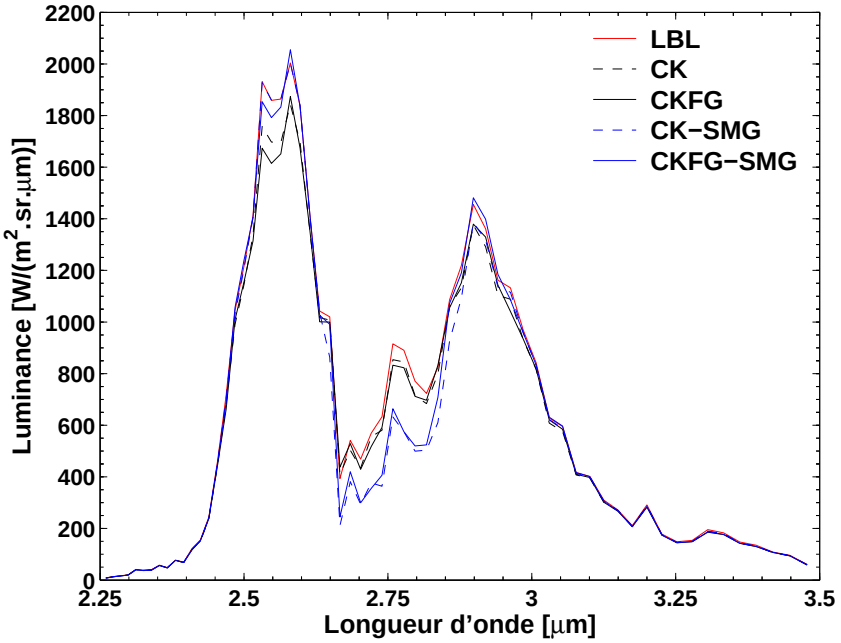


Fig. 4.33 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 1m et ℓ_{CO_2}= 1m.*

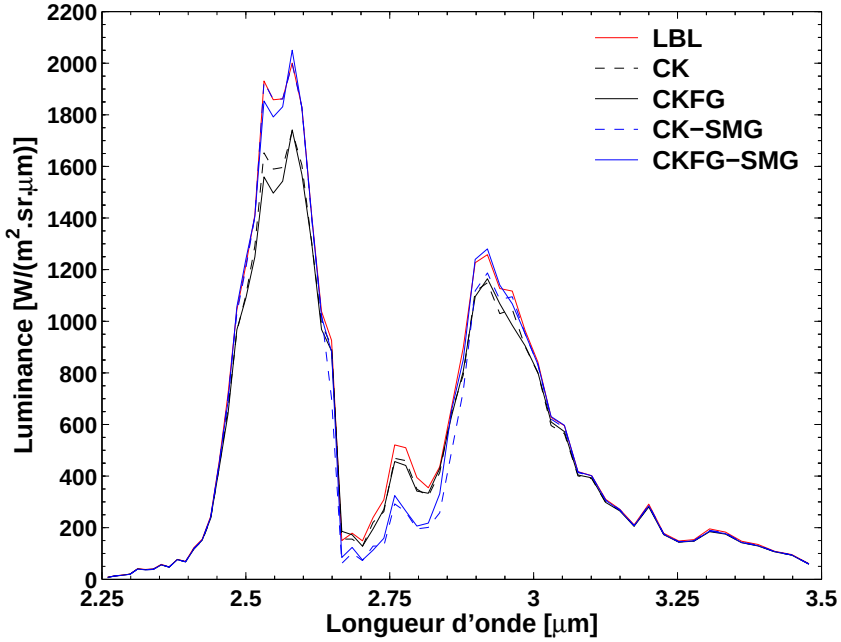


Fig. 4.34 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 1m et ℓ_{CO_2}= 2m.*

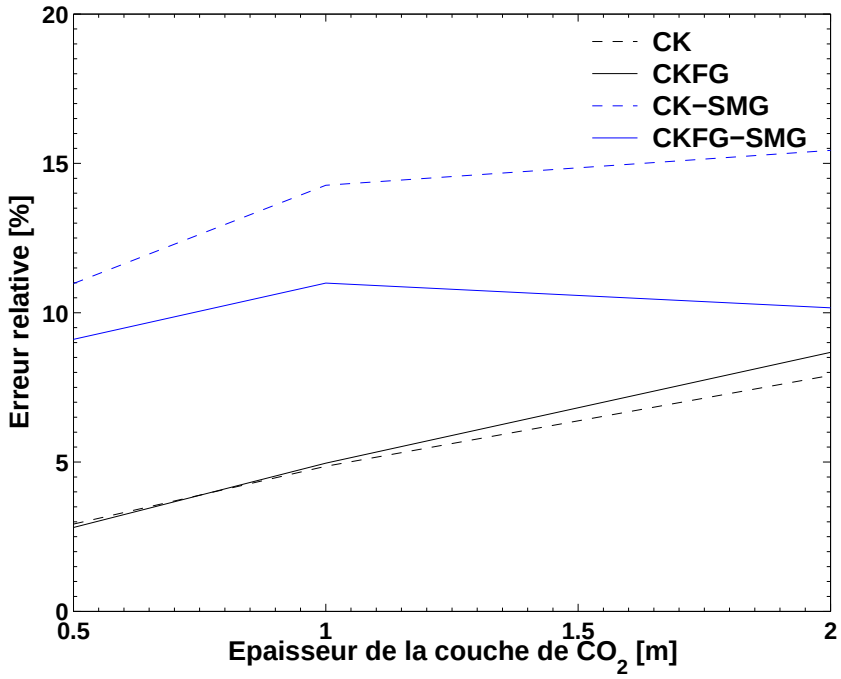


Fig. 4.35 : *Evolution de l'erreur relative intégrée entre 2.6 et 3 μm pour chaque modèle en fonction de l'épaisseur de la couche de CO_2 pour ℓ_{H_2O}= 1m.*

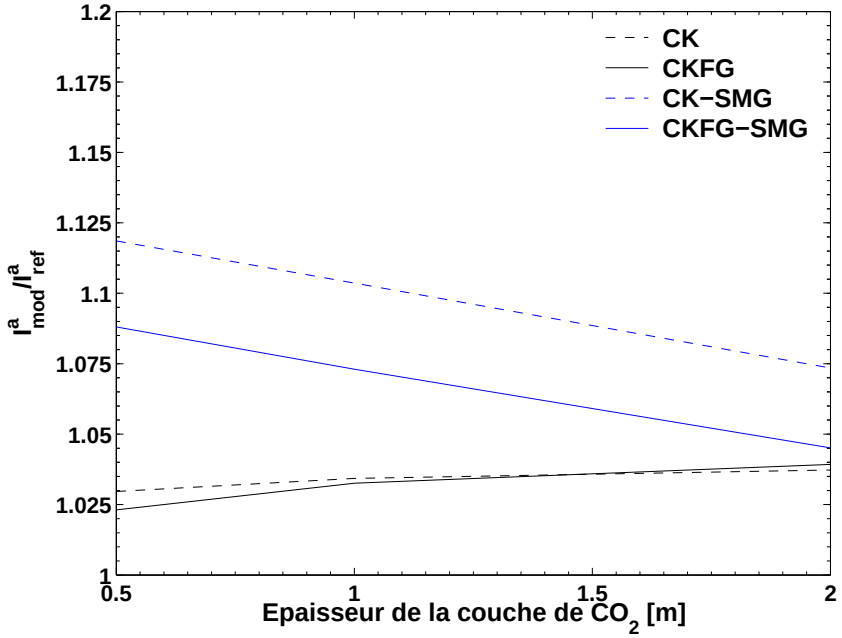


Fig. 4.36 : *Evolution de l'erreur intégrée entre 2.6 et 3 μm pour chaque modèle en fonction de l'épaisseur de la couche de CO_2 pour ℓ_{H_2O}= 1m.*

Résultats pour la configuration école avec ℓ_{H_2O}= 2m

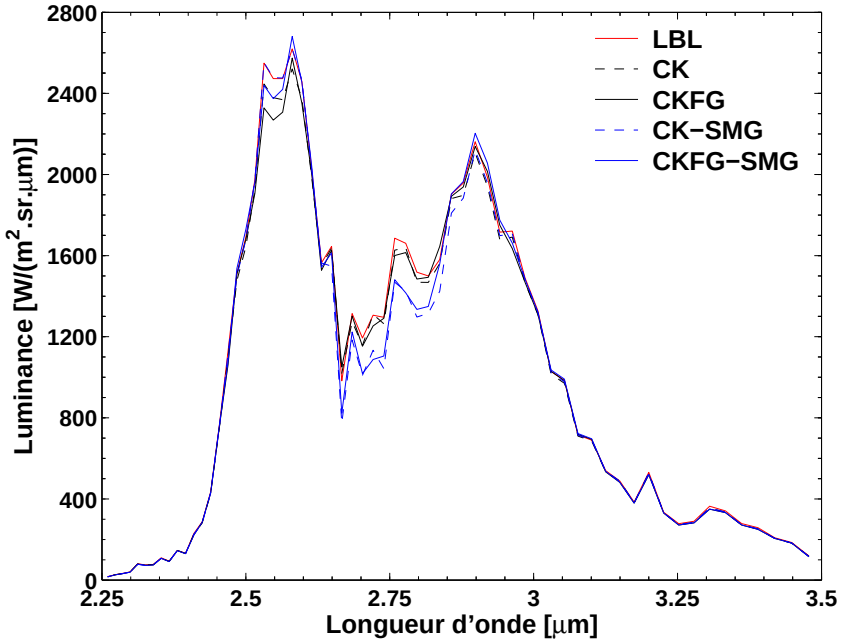


Fig. 4.37 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 2m et ℓ_{CO_2}= 0.5m.*

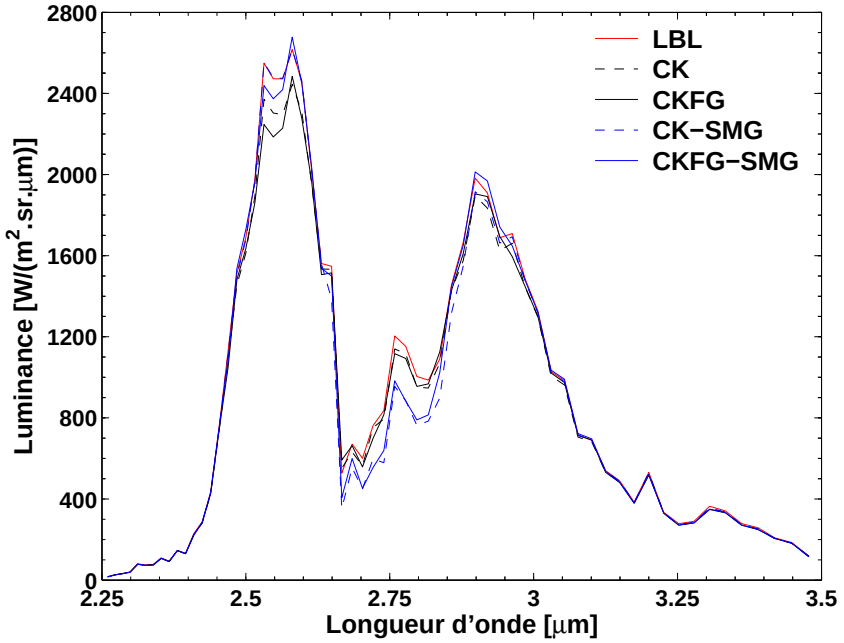


Fig. 4.38 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 2m et ℓ_{CO_2}= 1m.*

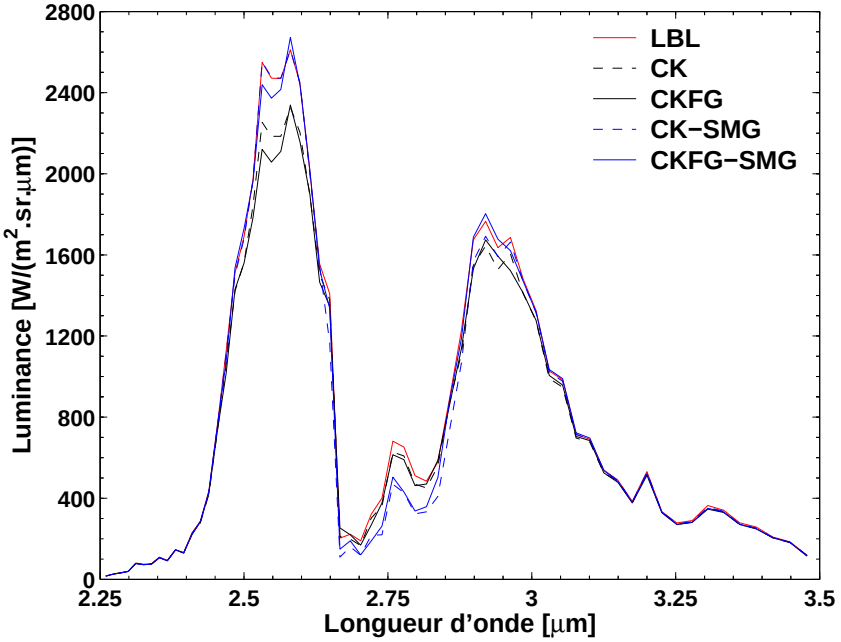


Fig. 4.39 : *Luminance transmise pour les couches avec ℓ_{H_2O}= 2m et ℓ_{CO_2}= 2m.*

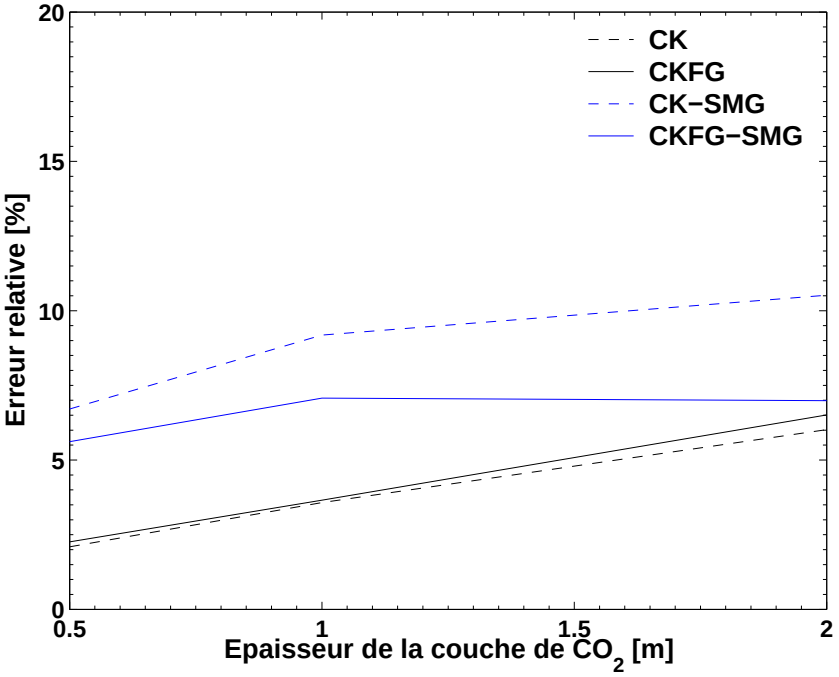


Fig. 4.40 : *Evolution de l'erreur relative intégrée entre 2.6 et 3 µm pour chaque modèle en fonction de l'épaisseur de la couche de CO_2 pour ℓ_{H_2O}= 2m.*

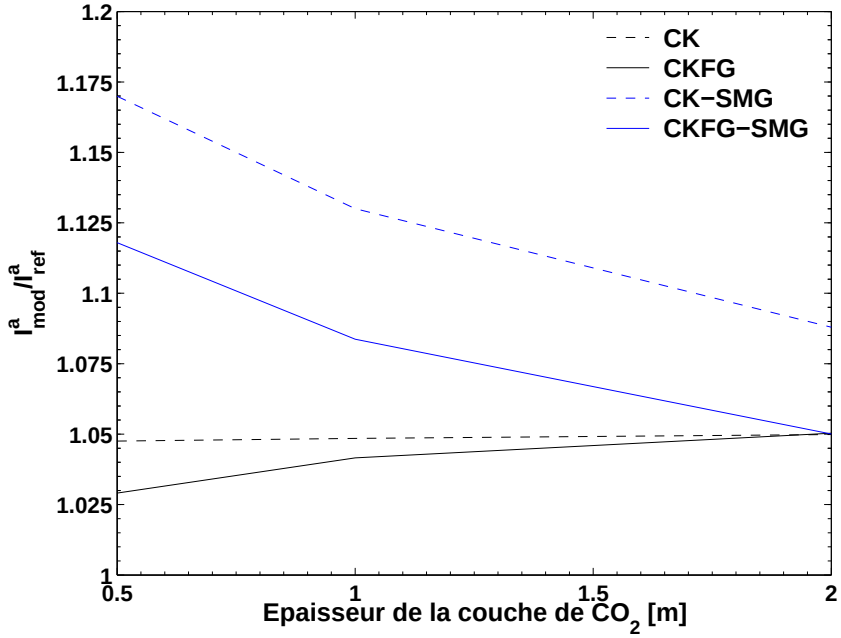


Fig. 4.41 : *Evolution de l'erreur intégrée entre 2.6 et 3 μm pour chaque modèle en fonction de l'épaisseur de la couche de CO_2 pour ℓ_{H_2O}= 2m.*

Discussion des résultats

Pour la configuration école, l'erreur maximale commise par les modèles ne doit pas être influencée par l'hypothèse des gaz fictifs, puisque le milieu est isotherme. Par contre, cette erreur dépend de l'utilisation de l'hypothèse SMG et de la précision atteinte lors des interpolations des paramètres des modèles.

Discussion sur l'erreur relative

Sur les figures 4.30, 4.35 et 4.40 qui donnent l'erreur relative (Eq. 4.50) pour chaque modèle, les valeurs des erreurs relatives de CK et CKFG sont proches et augmentent avec l'épaisseur de CO_2 (pour une épaisseur de la couche d'H_2O constante). Cette augmentation de l'erreur est due à une imprécision sur les interpolations des paramètres des k-distributions tabulés.

Pour les modèles CK-SMG et CKFG-SMG, il existe une différence entre les valeurs de leurs erreurs relatives et, en particulier, CK-SMG est moins précis que CKFG-SMG. Pour une épaisseur de la couche d'H_2O constante, l'erreur relative de CK-SMG augmente avec l'épaisseur de la couche de CO_2. Cependant, pour CKFG-SMG l'erreur relative augmente pour une épaisseur de CO_2 comprise entre 0.5m et 1m puis stagne (voire diminue) entre les épaisseurs de 1m et 2m.

Discussion de l'erreur sur la fraction absorbée

Sur les figures 4.31, 4.36 et 4.41 qui donnent l'erreur commise sur la fraction d'intensité absorbée (Eq. 4.51) pour chaque modèle, les valeurs des erreurs de CK et CKFG sont quasiment identiques et constantes en fonction de l'épaisseur de la couche de CO_2. Comme discuté dans le paragraphe précédent, c'est une erreur liée à la tabulation.

Pour les modèles CK-SMG et CKFG-SMG, les valeurs de leurs erreurs sur la fraction absorbée ne sont pas identiques et CK-SMG s'avère moins précis que CKFG-SMG. De plus, on observe que ces erreurs diminuent quand l'épaisseur de CO_2 augmente. La diminution de l'erreur sur la fraction absorbée causée par l'hypothèse SMG est provoquée par une saturation des raies de CO_2. En effet, plus l'épaisseur de CO_2 est importante plus ses raies s'élargissent et on se rapproche alors d'un milieu opaque absorbant qui génère peu d'erreur puisqu'il est décorrélé du milieu émetteur.

Enfin, la différence de précision entre CK-SMG et CKFG-SMG qui est observée sur le calcul de la fraction absorbée provient de la distribution des raies dans chaque gaz fictif. Avec le modèle CKFG-SMG les raies émettrices d'H_2O présentes dans le gaz fictif 1 sont corrélées avec les raies absorbantes du gaz fictif 1 du CO_2. L'erreur engendrée par l'hypothèse SMG dépend alors du nombre de raies présentes dans chacun des gaz fictifs corrélés (e.g. gaz fictif 1 de H_2O corrélé avec le gaz fictif 1 de CO_2 ; gaz fictif 2 de H_2O corrélé avec le gaz fictif 2 de CO_2 ; gaz fictif 3 de H_2O corrélé avec le gaz fictif 3 de CO_2).

Par exemple, si le gaz fictif 1 de H_2O contient toute les raies de H_2O et si le gaz fictif 1 de CO_2 ne contient aucune raie de CO_2 (e.g. elles sont toutes contenues dans le gaz fictif 2 de CO_2) alors l'erreur due à SMG est nulle.

Dans notre cas, c'est cette distribution des raies dans les gaz fictifs de H_2O et CO_2 qui est à l'origine de la meilleure précision atteinte par CKFG-SMG en comparaison avec celle de CK-SMG. Pour illustrer cette distribution, les émissivités des gaz fictifs de chacun des deux gaz sont représentées sur les figures 4.42 et 4.43. Sur ces figures, on constate que le gaz fictif 1 de H_2O contient presque toute les raies de H_2O alors que le gaz fictif 1 de CO_2 ne contient que la moitié des raies de CO_2.

Enfin, en ce qui concerne les temps de calcul entre le CK et le CK-SMG, on observe une diminution du temps de calcul d'un facteur deux puisqu'on diminue le nombre de gaz par deux. De même, entre CKFG et CKFG-SMG on considère respectivement 6 gaz fictifs et 3 gaz fictifs et le temps de calcul est deux fois plus rapide pour CKFG-SMG.

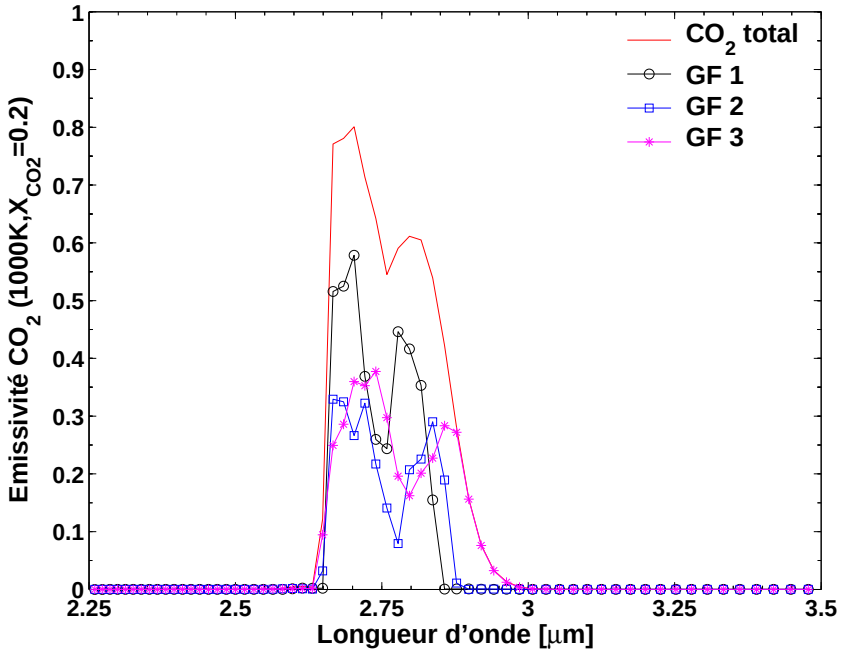


Fig. 4.42 : *Emissivité du CO_2 et émissivité de chaque gaz fictif pour une couche à 1000K (p=1atm et X_{CO_2}=0.2) avec ℓ=1m.*

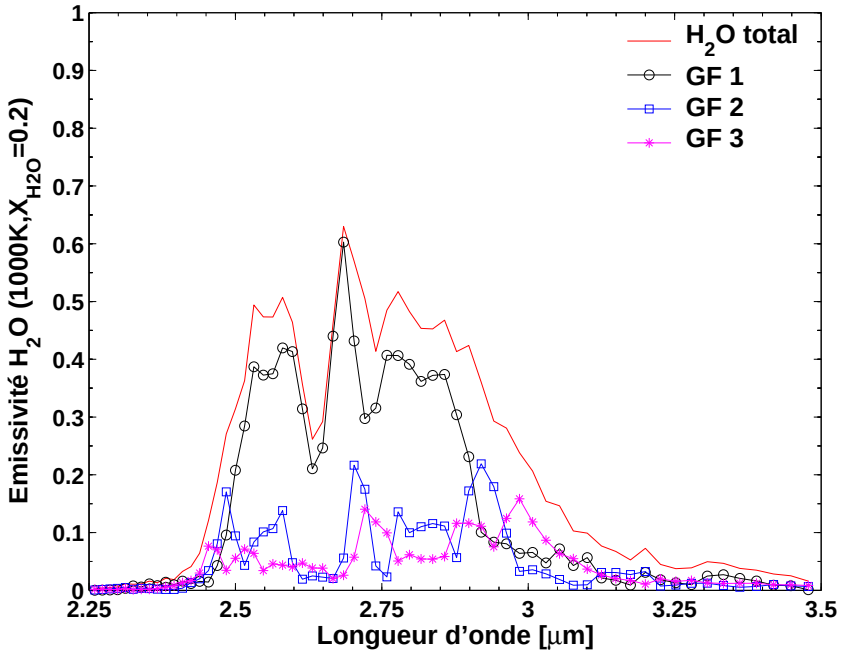


Fig. 4.43 : *Emissivité de H_2O et émissivité de chaque gaz fictif pour une couche à 1000K (p=1atm et X_{H_2O}=0.2) avec ℓ=1m.*

Les limites du modèle CKFG-SMG ayant été évaluées dans des configurations extrêmes, une conclusion sur les modèles spectraux d'absorption va être apportée dans le paragraphe suivant.

4.8 Conclusion

Dans cette partie sur les modèles de bandes étroites l'hypothèse des gaz fictifs apparaît indispensable dans le modèle de télédétection à retenir pour la suite de l'étude. En effet, sans cette hypothèse l'erreur relative maximale dans une bande étroite peut atteindre 40% (modèle CK) alors qu'en décomposant chaque gaz réel en gaz fictif, l'erreur relative maximale dans une bande étroite reste inférieure à 5% (modèle CKFG).

Compte tenu du contexte industriel de l'étude, les temps de calcul doivent être diminués. C'est la raison pour laquelle l'hypothèse d'un gaz unique de mélange (SMG) a été considérée. En situation de télédétection, le modèle CKFG-SMG comprenant l'approximation de gaz de mélange est discutable puisque les rapports de mélange des espèces dans le jet et dans l'atmosphère sont différents. Cependant, les limites des modèles CK-SMG et CKFG-SMG ont été évaluées dans des cas académiques où l'hypothèse de gaz unique est mise en défaut. Ces évaluations ont montré que l'erreur relative maximale dans une bande étroite ne dépasse pas 15% pour le CKFG-SMG et 50% pour le CK-SMG. Dans les configurations de télédétection, l'approximation d'un gaz de mélange (SMG) utilisée avec l'hypothèse des gaz fictifs entraîne une erreur qui est limitée dans le cas particulier du recouvrement des raies de H_2O, CO_2 et CO (dans les zones de recouvrement de ces gaz, les raies qui composent le spectre de chaque gaz fictif du mélange sont issues en majorité d'un gaz réel).

Le tableau 4.5 rassemble des informations relatives à différents modèles spectraux dans le but de les comparer. La comparaison est réalisée en terme de nombre de calcul d'une transmittivité monochromatique pour le LBL ou d'une transmittivité pseudo-monochromatique pour les modèles dérivés de la méthode CK. Ainsi, le nombre de calcul est donné pour l'intervalle spectral de notre étude (1625-6000cm^{-1} ou 1.7-6.3μm) composée de 176 bandes de 25cm^{-1} de large. Sur cet intervalle le nombre de gaz à prendre en compte dépend de la bande étroite (cf Tab. 4.4). La comparaison est aussi réalisée en terme d'erreur maximale dans une bande étroite pour évaluer la précision des modèles.

Dans le contexte industriel de l'étude, le choix du modèle spectral doit prendre en compte le temps de calcul et la précision. Le modèle LBL est trop coûteux en temps de calcul, et les modèles CK et CK-SMG sont trop imprécis. Par contre, les modèles CKFG et CKFG-SMG ont des temps de calcul et des précisions intéressants. Comme le temps de calcul du CKFG-SMG est plus faible que celui du CKFG et que la différence de précision est acceptable, le modèle spectral CKFG-SMG est le modèle de télédétection IR qui sera utilisé par la suite dans cette étude. Cependant, l'outil final de simulation de la signature infrarouge d'un jet diphasique à haute température pourra utiliser un des deux modèles

Tab. 4.5 : *Comparaison entre différents modèles spectraux du nombre de calcul et de leur précision (N_{bT}=176 bandes, N_q=10, N_g=N_{gf}=3, $N_b(N_g)$ signifie que le nombre de bande dépend du nombre de gaz présent dans la zone de recouvrement).*

	LBL	CKFG	CKFG-SMG	CK	CK-SMG
Formule	$(N_{bT}\Delta\nu)/\Delta\nu_{hr}$	N_g*N_{gf}*N_q*$N_b(N_g)$	N_{gf}*N_q*N_{bT}	N_g*N_q*$N_b(N_g)$	N_q*N_{bT}
Calculs	8 800 000	9030	5280	3010	1760
Précision	+++	++	+	−	− −
Erreur Max	0.3%	5%	15%	40%	50%

de télédétection (CKFG ou CKFG-SMG à choisir par l'utilisateur).

Le calcul des propriétés radiatives de la phase gazeuse ayant été présenté, le prochain chapitre traitera du calcul des propriétés radiatives d'un nuage de particules.

5

Calcul des propriétés radiatives d'un nuage de particules et étude de l'influence de la diffusion

Sommaire

5.1 Formation des particules 91
5.2 Introduction au rayonnement des particules 93
5.2.1 Paramètres de la diffusion 94
5.2.2 Indice de réfraction complexe 95
5.2.3 Paramètre de taille 96
5.3 Calcul des propriétés d'un nuage de particules à l'aide de la théorie de Mie 96
5.3.1 Sections efficaces 96
5.3.2 Facteurs d'efficacité 97
5.3.3 Fonction de phase 98
5.3.4 Sphères enrobées 99
5.3.5 Coefficients d'absorption, d'extinction et de diffusion 99
5.4 Étude de sensibilité à la diffusion de rayonnement par les particules 101
5.4.1 Influence du diamètre et de la fraction volumique en particules 101
5.4.2 Influence de l'indice complexe de réfraction 107
5.5 Conclusion 111

5.1 Formation des particules

Les particules présentes dans le jet sont formées durant la combustion du matériau pyrotechnique. Elles sont éjectées de la surface du matériau et sont transportées par

l'écoulement.

La modélisation de la signature infrarouge d'un jet composé de particules nécessite la connaissance des propriétés optiques de chaque particule, leurs concentrations, leurs tailles, leurs températures et leurs positions. Toutes ces informations sont très difficiles à obtenir et nous manquons de données expérimentales décrivant la combustion des matériaux pyrotechniques dans les écoulements spécifiques à notre étude. Par contre, il est possible de considérer dans notre étude que le matériau pyrotechnique comporte des similitudes avec les propergols solides utilisés pour la propulsion des fusées. Par exemple, la combustion de nombreux propergols met en œuvre la combustion de particules d'aluminium qui s'oxydent pour former de l'alumine (Al_2O_3). Cependant, tous les phénomènes étudiés dans les propulseurs à propulsion solide ne peuvent pas être transposés dans notre étude compte tenu de la différence des régimes de pression et des combustibles utilisés. La combustion de notre matériau pyrotechnique a lieu dans l'air à la pression atmosphérique (1 bar) tandis que la pression dans les propulseurs peut atteindre 50 bar.

De nombreuses études ont été menées pour mieux comprendre la formation des particules dans un écoulement réactif et leurs comportements dans la chambre de combustion d'un propulseur. Par exemple, les travaux de Dupays [70] et de Lavergne [71] s'attachent à modéliser les écoulements diphasiques dans des propulseurs. Dans ces deux références, des modèles utiles à la modélisation de l'oxydation des particules d'aluminium de leurs coalescences et de leurs dispersions turbulentes sont présentés.

Des études expérimentales conduisent à identifier deux scénarios de formation des particules qui sont éjectées à la surface du propergol solide [72, 73, 74, 13]. Dans le cas du scénario dit de *faible agglomération* la plupart des particules quittent la surface en combustion sans s'être agglomérées ou sous la forme de petits agglomérats (parfois imbrûlés). D'après Glotov [74], l'effet du scénario de faible agglomération sur la distribution totale des tailles des particules est de former une distribution sans frontière marquée entre les grosses et fines particules. Dans le cas du scénario dit de *forte agglomération* les agglomérats sphériques commencent à brûler à la surface du propergol en formant un halo de fumées. La chaleur de la flamme provoque la fusion des particules d'aluminium qui peuvent s'agglomérer formant de grosses particules qui commencent à s'oxyder à la surface du propergol libérant une fumée de nanoparticules d'alumine [13]. Les très petites particules (nanoparticules) composant la fumée sont issues de la condensation des vapeurs d'oxydes métalliques [75] produites par la combustion des vapeurs métalliques libérées à la surface du propergol. Ces vapeurs métalliques s'oxydent et se refroidissent très rapidement alors que les grosses particules métalliques prennent du temps avant de s'oxyder entièrement et se refroidissent plus lentement. Même si le scénario est identifié, la modélisation des processus de formation des particules métalliques éjectées à la surface d'un propergol dépend de nombreux paramètres inconnus. Par exemple, pour un type de propergol, la vitesse de combustion, le temps de résidence, la structure géométrique du propergol, les propriétés physico-chimiques des composants leur granulométrie et les

échanges thermiques sont autant de paramètres dont le rôle reste difficile à quantifier. A ces difficultés, s'ajoutent les incertitudes concernant la combustion d'un métal dans une atmosphère gazeuse complexe [76, 75].

Dans notre étude il paraît évident que sans des données expérimentales sur les phénomènes se produisant in-situ, une grande incertitude domine sur d'une part, la caractérisation des particules éjectées du matériau pyrotechnique et d'autre part sur leurs évolutions dans le jet. Pour cette raison, nous avons effectué des études de sensibilité en fonction de paramètres dont les valeurs sont mal connus mais qui ont un rôle majeur sur l'émission du rayonnement par le jet. Ces paramètres sont le diamètre, la fraction volumique et l'indice complexe de réfraction des particules sphériques. Cette étude de sensibilité a permis d'évaluer l'influence du rayonnement des particules en fonction de ces paramètres. De plus, elle a donné des informations quand à l'influence des phénomènes de diffusion sur le rayonnement émis par le jet.

Dans la suite du chapitre et après une introduction au rayonnement des particules, la méthode de calcul des propriétés optiques d'un nuage de particules sphériques est exposée puis les résultats de l'étude de sensibilité sont présentés.

5.2 Introduction au rayonnement des particules

Les interactions entre une onde électromagnétique et une particule sont représentées, dans le cadre de l'optique géométrique [4], sur la figure 5.1. Ces interactions sont plus complexes lorsque la longueur d'onde est proche du diamètre des particules [8].

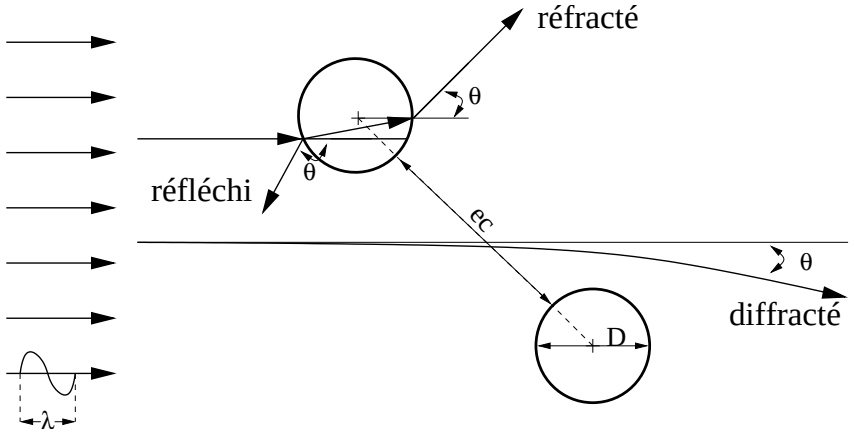


Fig. 5.1 : *Interaction entre des ondes électromagnétiques et des particules sphériques dans le cadre de l'optique géométrique.*

Ces interactions sont dues à trois phénomènes séparés composant la diffusion. Le premier phénomène est la diffraction. L'onde n'entre pas en contact avec la particule, mais sa direction de propagation est changée à cause de la présence des particules (interaction

avec les ondes de surfaces). Le deuxième est la réflexion d'une onde à la surface d'une particule. Le troisième phénomène est la réfraction d'une onde dans une particule. L'onde qui pénètre dans la particule, après une absorption partielle, sort avec une direction de propagation différente. De plus, La diffusion est considérée élastique quand la fréquence et l'énergie de l'onde électromagnétique incidente restent inchangées par la diffusion. En revanche, la diffusion est inélastique lorsque l'énergie et la fréquence sont modifiées. Dans le cas particulier où il n'y a pas de direction privilégiée de diffusion de l'onde incidente, la diffusion est appelée isotrope. Toutes les directions de diffusion sont alors considérées comme équiprobables. Par contre, la plupart du temps, il existe une distribution angulaire des directions de diffusion d'une onde électromagnétique incidente et la diffusion est alors anisotrope.

5.2.1 Paramètres de la diffusion

Les propriétés de diffusion d'une particule servent à modéliser l'intensité et la direction du rayonnement diffusé par cette particule. Le premier critère qui influence les propriétés de diffusion d'une particule, c'est la forme de cette particule. Cependant il est courant que dans un nuage de particules, la forme de chaque particule soit inconnue. Alors, une simplification répandue est de considérer des particules sphériques. De plus, pour formuler cette hypothèse il est considéré dans la bibliographie, que si plusieurs particules de formes irrégulières comportant des portions de surfaces convexes dont l'orientation est supposée aléatoire, alors, ces portions de surfaces ont une proportion égale d'éléments de surface orientés dans chaque direction angulaire. En moyenne, cette distribution des éléments de surfaces est similaire à celle d'un nuage de particules sphériques. Le résultat de cette approche simplificatrice permet de considérer que la distribution angulaire du rayonnement diffusé, vu à grande distance des particules, est semblable à la distribution angulaire du rayonnement diffusé par des particules sphériques. De plus, dans notre étude, les prélèvements effectués durant les campagnes expérimentales ont révélé la présence de particules quasi-sphériques. Ce résultat renforce alors l'hypothèse de sphéricité de ces particules. Cette forme des particules nous permettra, par la suite, d'utiliser la théorie de Mie qui permet le calcul des propriétés radiatives de nuages de particules.

Les propriétés de l'interaction entre une onde électromagnétique, de longueur d'onde λ, et plusieurs particules sphériques, chacune de diamètre D, sont gouvernées par trois paramètres indépendants et sans dimension :

- l'indice de réfraction complexe monochromatique, $m_\lambda = n_\lambda - ik_\lambda$, dépend de la nature du matériau constituant la particule,
- le paramètre de taille, $x = \frac{\pi D}{\lambda}$, qui donne la taille de la particule par rapport à la longueur d'onde du rayonnement incident,
- et la distance entre les particules (Fig. 5.1), *ec.*

Si des particules sont suffisamment éloignées les unes des autres il est alors possible d'étudier la diffusion pour une seule particule, sans tenir compte de l'influence des autres.

Ainsi, lorsque la diffusion d'une particule n'est pas affectée par la présence de particules environnantes, la diffusion est dénommée indépendante. Dans le cas contraire, elle est appelée diffusion dépendante. Tien et Drolen (1987) [77] ont montré que les effets de diffusion dépendante peuvent être négligés tant que la fraction volumique des particules reste strictement inférieure à 6.10^{-3} ($\frac{ec}{D} > 4$). Lorsque la diffusion est indépendante ($\frac{ec}{\lambda} \gg 1$), seuls les deux premiers paramètres sans dimension (m_λ et x) sont utiles pour décrire la diffusion. D'après Siegel et Howell (1992) [3], l'effet de l'augmentation de la concentration en particules, provoquant une diminution de l'écart ec entre particules, entraîne des phénomènes d'absorption et de diffusion dépendante. Les effets de dépendances tendent à augmenter l'absorption par rapport à celle calculée en utilisant l'hypothèse d'absorption indépendante. Par contre, la diffusion dépendante tend à diminuer la diffusion par rapport à celle prédite en utilisant l'hypothèse de diffusion indépendante. Dans notre cas, comme la fraction volumique est inférieure au seuil de 6.10^{-3} [77], les phénomènes de diffusion dépendantes sont négligeables et ne sont donc pas envisagés par la suite.

Si un rayon de lumière, traversant un nuage de particule, est diffusé plusieurs fois successivement avant de sortir du milieu, la diffusion est appelée diffusion multiple. Au contraire, la diffusion est appelée diffusion simple, lorsqu'une particule est exposée essentiellement au rayonnement incident sur le nuage de particules. Une limite suggérée dans certains ouvrages (Brewster (1992) [78], Siegel et Howell (1992) [3]) donne un critère d'utilisation de l'approximation de diffusion simple. Ce critère définit une épaisseur optique maximale, $\sigma_{p_\lambda}.s < 0.1$ tel que le libre parcours moyen de diffusion soit plus de dix fois plus grand que la longueur du trajet s caractéristique de la région. Si la diffusion simple est dominante dans un nuage, alors l'énergie diffusée par celui-ci augmentera dans les mêmes proportions que la concentration en particules.

5.2.2 Indice de réfraction complexe

L'indice de réfraction complexe monochromatique d'un milieu s'écrit :

$$m_\lambda = n_\lambda - ik_\lambda \tag{5.1}$$

Cette expression met en évidence deux effets. Le premier caractérise la propagation du rayonnement par le changement de vitesse de l'onde électromagnétique à la traversée d'un milieu. La partie réelle de l'indice de réfraction complexe, n_λ, détermine la vitesse de phase d'une onde électromagnétique traversant un milieu. n_λ est définie comme le rapport entre la vitesse de l'onde dans le vide (c_0) et sa vitesse dans le milieu considéré (c_λ), $n_\lambda = \frac{c_0}{c_\lambda}$. Le second effet caractérise l'absorption de l'énergie d'une onde incidente traversant un milieu. Cette atténuation est traduite dans la partie imaginaire de l'indice de réfraction complexe.

L'indice de réfraction complexe est un paramètre d'entrée des modèles qui est difficile à mesurer et il dépend de la nature de la particule dans l'application considérée. En général,

la partie imaginaire est la plus mal connue puisqu'elle varie fortement avec la composition de la particule et parfois avec la structure cristalline.

5.2.3 Paramètre de taille

Le paramètre de taille est un nombre sans dimension qui compare la longueur d'onde du rayonnement incident avec le diamètre de la particule sphérique : $x = \frac{\pi D}{\lambda}$. Ce paramètre est utile dans l'analyse de la diffusion puisqu'il renseigne sur le type de diffusion présent dans le milieu. En effet, lorsque la particule sphérique est soit de petite taille soit de grande taille devant la longueur de l'onde incidente, il est possible de connaître le type de diffusion prépondérante dans le milieu. Pour des sphères grandes par rapport à la longueur d'onde, $x > 5$, la diffusion est dominée par la réflexion qui peut être calculée avec les relations de l'optique géométrique. Pour des sphères petites par rapport à la longueur d'onde, $x < 0.3$, l'approximation de diffusion de Rayleigh peut être utilisée. De plus, pour une particule sphérique, la théorie de Mie permet le calcul de ses propriétés optiques quelque soit la valeur du paramètre de taille. En revanche, cette théorie est plus coûteuse en temps de calcul que celle de Rayleigh ou de l'optique géométrique.

5.3 Calcul des propriétés d'un nuage de particules à l'aide de la théorie de Mie

Lorsqu'une particule est éclairée par un rayonnement, l'intensité et la distribution angulaire du rayonnement diffusé par la particule, ainsi que la quantité absorbée, dépendent de la nature de la particule : sa forme, sa taille et le matériau qui la constitue. Les expériences au CEAT et au PROMES permettent d'avoir une idée du matériau constituant les particules et de la granulométrie du nuage. Cependant, ces deux paramètres restent encore mal connus tant ils sont soumis à des variations en fonction de la nature et de la combustion du matériau pyrotechnique. Néanmoins, les expériences montrent que les particules peuvent être considérées *sphériques* en première approximation. Il est alors possible d'utiliser la théorie de Mie [5] qui donne la solution exacte de la diffusion d'une onde électromagnétique, monochromatique et plane par une sphère homogène et isotrope, dans un milieu non absorbant. Les détails de cette théorie peuvent être trouvés dans des ouvrages tels que ceux de Kerker [6], Van de Hulst [7] et Bohren et Huffman [8]. Un bref rappel de cette théorie ainsi que le détail des calculs donnant les grandeurs utiles au calcul des propriétés radiatives sont donnés dans la partie qui suit.

5.3.1 Sections efficaces

Le cas d'un rayonnement interagissant avec une particule est résolu en considérant une onde plane monochromatique rencontrant une particule sphérique de taille et de pro-

priétés optiques données. La résolution est effectuée en considérant la diffusion élastique, indépendante, simple et anisotrope.

Dans ces conditions, la théorie de Mie permet de définir des sections efficaces d'extinction, de diffusion et d'absorption, schématisées sur la figure 5.2.

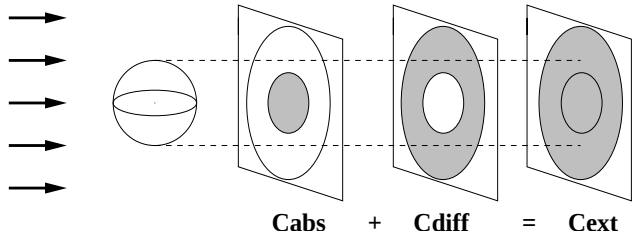


Fig. 5.2 : *Représentation schématique des sections efficaces.*

La puissance retirée au rayonnement incident sur une particule, est égale à un flux de rayonnement incident sur la section efficace C_e. De même, la puissance absorbée et diffusée, du rayonnement incident sur une particule, est égale à un flux de rayonnement incident sur les sections efficaces respectives C_a et C_d. La théorie de Mie permet de calculer les sections efficaces avec les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} C_e &= \frac{2\pi}{k^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)Re\{a_n+b_n\} \\ C_d &= \frac{2\pi}{k^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)(|a_n|^2+|b_n|^2) \\ C_e &= C_a + C_d \end{aligned}$$

Avec, k le nombre d'onde défini par $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ et les coefficients a_n et b_n sont appelés coefficients de Mie. Le calcul de ces coefficients est mené avec des relations de récurrence ascendante et descendante ([6], [7], [8]).

5.3.2 Facteurs d'efficacité

La section géométrique projetée G est définie pour représenter la surface projetée de la particule sur un plan perpendiculaire à la direction de propagation de l'onde incidente. Pour une sphère de rayon r, G devient $G = \pi r^2$. Les grandeurs sans dimension sont décrites par :

$$Q_e = \frac{C_e}{G}\ ,\ Q_a = \frac{C_a}{G}\ ,\ Q_d = \frac{C_d}{G}$$

Ces grandeurs sont appelées facteurs d'efficacité d'extinction Q_e, d'absorption Q_a et de diffusion Q_d. Généralement, ces facteurs dépendent de l'orientation de la particule et de l'état de polarisation du rayonnement incident. Dans tous les cas, la conservation de l'énergie s'applique :

$$Q_e = Q_a + Q_d$$

L'étude de sensibilité à la polarisation du rayonnement menée par Duval [79] révèle la nécessité de quantifier son influence dans notre étude. En effet, les propriétés de diffusion d'un nuage de particules et la distribution angulaire du flux émis par une couche plan-parallèle dépendent de l'état de polarisation du rayonnement. Les résultats de l'étude de sensibilité de Duval [79] montrent que la polarisation entraîne une erreur inférieure à 5% sur le flux total émis par un mur plan (épaisseur 10cm) constitué de particules sphériques (x=0.78). Dans cette étude, l'épaisseur de la couche, l'indice de réfraction (l'alumine), et le paramètre de taille ont des valeurs proches de celles rencontrées dans notre étude. Duval [79] montre que l'influence de la polarisation sur le flux radiatif est faible et par conséquent, puisque nous sommes dans des conditions proches de son étude, ce phénomène n'est pas pris en compte dans notre modèle de diffusion.

5.3.3 Fonction de phase

Le flux diffusé (I_d) qui traverse une unité d'angle solide, rapporté au flux incident (I_i) est noté F, avec d la distance au centre diffusant (d$\gg$1 en champ lointain) :

$$F = \frac{d^2 I_d}{I_i}$$

Si le rayonnement incident est non polarisé alors :

$$F = \frac{\|S_1\|^2 + \|S_2\|^2}{2k^2} \tag{5.2}$$

Pour un milieu isotrope tel qu'un nuage dont les particules sont orientées aléatoirement en étant elles mêmes anisotropes, le flux diffusé I_d et F sont indépendants de l'angle ϕ. On appelle fonction de phase la quantité :

$$p = \frac{F}{C_d} = \frac{\|S_1\|^2 + \|S_2\|^2}{2k^2 C_d} \tag{5.3}$$

définissant la distribution angulaire du rayonnement diffusé. La fonction de phase est une fonction de densité de probabilité qui est normée :

$$\int_{4\pi} p d\Omega = 1 \tag{5.4}$$

Par ailleurs, le calcul numérique de la fonction de phase doit inclure une étape de normalisation afin d'assurer la validité de l'équation Eq. 5.4. L'expression de la fonction de phase, par la théorie de Mie, fait intervenir des amplitudes complexes de diffusion S_1 et S_2 :

$$S_1(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n) \tag{5.5}$$

$$S_2(\theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n) \tag{5.6}$$

Le calcul numérique des sections efficaces et de la fonction de phase résulte du calcul des coefficients a_n, b_n, π_n, τ_n. Les formules permettant de calculer ces coefficients sont largement commentées dans la bibliographie et particulièrement dans [6], [7] et [8].

5.3.4 Sphères enrobées

Une particule sphérique peut être modélisée par un cœur constitué d'un matériau différent de celui présent dans l'enveloppe. De cette manière, le cas de la particule creuse peut être traité, dans le cadre de la théorie de Mie sur le rayonnement des particules. En effet, le cœur de la particule est constitué d'un gaz et l'enveloppe d'un matériau. La figure 5.3 représente une sphère enrobée ayant un cœur de rayon a et une enveloppe le recouvrant depuis le rayon a jusqu'au rayon b.

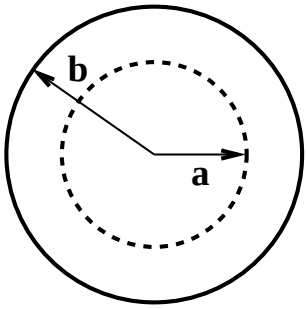


Fig. 5.3 : *Particule sphérique enrobée*

Aden et Kerker [80] ont appliqué, les premiers, la théorie de la diffusion de Mie dans le cas d'une sphère enrobée et ont trouvé les expressions des coefficients de diffusion de Mie, a_n et b_n. Ensuite, Toon et Ackerman [81] ont élaboré un algorithme avancé pour le calcul de ces coefficients. Cet algorithme permet d'éviter le mauvais conditionnement des formulations antérieures. Le programme numérique utilisé dans l'étude calcule les propriétés optiques d'une particule, soit pleine soit enrobée, avec l'algorithme de Toon et Ackerman [81].

5.3.5 Coefficients d'absorption, d'extinction et de diffusion

Dans un volume infinitésimal (milieu optiquement mince) occupé par des particules de tailles et de propriétés optiques différentes, les coefficients et la fonction de phase nécessaires à l'intégration de l'équation de transfert radiatif dans ce volume (milieu absorbant, émissif et diffusant) sont obtenus en additionnant les propriétés de diffusion de toutes les particules [82] (diffusion indépendantes). Dans le cas général, les particules de différentes tailles présentes dans un nuage peuvent être composées de matériaux (m_λ) différents. Un tel nuage renferme une polydispersion hétérogène de particules. Ainsi, comme à chaque

type i de particules (m_λ fixé) correspond une loi de distribution des tailles $N_i(r)$, les expressions des coefficients volumiques et de la fonction de phase deviennent :

$$\kappa_{e_\lambda} = \sum_i \int_0^\infty \pi r^2 Q_{e_{\lambda,i}}(r) N_i(r) dr \tag{5.7}$$

$$\kappa_{p_\lambda} = \sum_i \int_0^\infty \pi r^2 Q_{a_{\lambda,i}}(r) N_i(r) dr \tag{5.8}$$

$$\sigma_{p_\lambda} = \sum_i \int_0^\infty \pi r^2 Q_{d_{\lambda,i}}(r) N_i(r) dr \tag{5.9}$$

$$\overline{p}_\lambda(\theta,\phi) = \frac{1}{\sigma_{p_\lambda}} \sum_i \int_0^\infty \pi r^2 Q_{d_\lambda} p_{\lambda,i}(\theta,\phi) N_i(r) dr \tag{5.10}$$

$N_i(r)$ est le nombre de particule de type i par unité de volume ayant le rayon r et $N_i(r)dr$ est interprété comme le nombre de particules de type i par unité de volume ayant leurs rayons dans l'intervalle r et $r + dr$. Le nombre total de particules de type i par unité de volume est donné par :

$$N_{0,i} = \int_0^\infty N_i(r) dr \tag{5.11}$$

et la fraction volumique en particules de type i est :

$$f_{v_i} = \int_0^\infty \frac{4}{3} \pi r^3 N_i(r) dr \tag{5.12}$$

Dans le cas où toutes les particules sphériques composant un nuage sont identiques (même diamètre, même composition), comme par exemple dans un intervalle de discrétisation d'une distribution de particules d'un type i, il est possible d'obtenir l'expression des coefficients volumiques en fonction de la fraction volumique. La fraction volumique d'une monodispersion de particules sphériques de diamètre D et de type i s'écrit :

$$f_{v_i} = \frac{\pi}{6} D^3 N_i \tag{5.13}$$

et les coefficients volumiques ont alors pour expressions :

$$\kappa_{e_\lambda,i} = \frac{3}{2} \frac{Q_{e_{\lambda,i}} f_{v_i}}{D} \tag{5.14}$$

$$\kappa_{p_\lambda,i} = \frac{3}{2} \frac{Q_{a_{\lambda,i}} f_{v_i}}{D} \tag{5.15}$$

$$\sigma_{p_\lambda,i} = \frac{3}{2} \frac{Q_{d_{\lambda,i}} f_{v_i}}{D} \tag{5.16}$$

En ce qui concerne la fonction de phase du nuage, elle est identique à celle d'une seule particule de type i et de diamètre D.

Après un bref exposé des rappels concernant la modélisation du rayonnement et de la diffusion par les particules, nous allons présenter l'étude de sensibilité à la diffusion.

5.4 Étude de sensibilité à la diffusion de rayonnement par les particules

Le traitement de la diffusion dans un modèle de transfert radiatif augmente la complexité de mise en œuvre et le temps de calcul. Dans le contexte industriel de notre étude, comme le temps de calcul doit être le plus faible possible, l'influence de la diffusion sur le rayonnement émis par le jet doit être évaluée. Dans ce but, une étude de sensibilité à la diffusion a été menée dans une géométrie simplifiée. Cette étude de sensibilité porte sur le rayonnement émis par une couche plan-parallèle de gaz et de particules.

La connaissance de la granulométrie et de la nature des particules a été étayée par les campagnes expérimentales. Cependant, leurs connaissances restent approximatives et la distribution des particules dans le jet est difficile à modéliser. Pourtant, la distribution spatiale des concentrations des particules dans le jet va déterminer les coefficients d'absorption et de diffusion locaux caractérisant le rayonnement émis par le jet.

Dans un premier temps une étude de sensibilité est présentée dans l'objectif de quantifier la part de rayonnement émis par un mur plan composé uniquement de particules en comparaison avec le rayonnement issu d'un mur plan composé du mélange de gaz et de particules. L'étude paramétrique a été réalisée pour un type de particules et pour une large gamme de fractions volumiques et de diamètres. Cette étude de sensibilité donne une information quand à la proportion du flux rayonné soit par les particules soit par les gaz. De plus, une étude a été conduite qui compare le flux émis par le mur plan en tenant compte des trajets de multi-diffusion dans la couche, avec le flux émis en négligeant les phénomènes de diffusion.

Ensuite, une dernière étude paramétrique a été menée en fonction de plusieurs valeurs de la partie imaginaire de l'indice de réfraction et pour quelques couples de valeurs de la fraction volumique et du diamètre des particules. La variation de la partie imaginaire de l'indice de réfraction permet de mieux connaître l'influence de cette grandeur sur les phénomènes de diffusion. De plus, il existe une incertitude sur sa valeur dans le jet qui est due à une mauvaise connaissance de la composition des particules (oxydation partielle, impuretés etc.) dans le jet. L'influence de cette incertitude est alors quantifiée dans notre étude paramétrique puisque nous avons fait varier la partie imaginaire de l'indice de réfraction.

5.4.1 Influence du diamètre et de la fraction volumique en particules

Cette première étude paramétrique permet d'évaluer la part de rayonnement due aux particules et l'influence de la diffusion. L'étude est menée pour des couches composées du même mélange gazeux mais avec des monodispersions de particules sphériques couvrant une large gamme de diamètres moyens et de fractions volumiques.

Tout d'abord, l'étude paramétrique porte sur l'analyse du flux émis par une couche homogène ayant une géométrie plan-parallèle et composée de gaz et de particules. Les conditions aux limites de la couche sont résumées sur la figure 5.4.

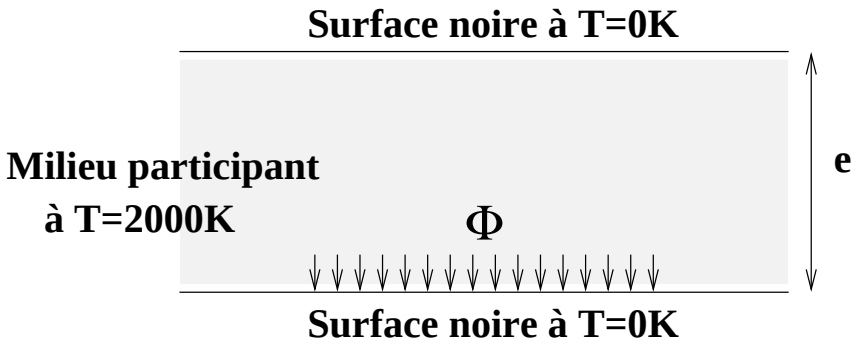


Fig. 5.4 : *Conditions aux limites du mur plan-parallèle et représentation du flux pariétal Φ calculé dans les études de sensibilité à la diffusion.*

Le calcul du flux émis par la couche (Fig. 5.4) est réalisé avec un algorithme de Monte-Carlo permettant la résolution des transferts radiatifs comprenant les phénomènes d'émission, d'absorption et de diffusion du rayonnement. Cet algorithme élaboré par Eymet et al. [83] est utilisé dans un code de transfert radiatif développé et validé dans le cadre d'analyses des transferts radiatifs infrarouges pour les atmosphères planétaires [84]. Ce code permet le calcul de la longueur moyenne du trajet de multi-diffusion dans la couche homogène. Le flux monochromatique émis par la couche diphasique à une température T, s'écrit :

$$\Phi_\lambda = \int_V dV \int_{4\pi} d\Omega(\vec{s}) \int_{\Gamma(V,S)} P_\Gamma(\gamma) d\gamma \quad \kappa_\lambda \exp[-\kappa_\lambda \cdot \ell_\gamma] L^o_\lambda(T) \tag{5.17}$$

avec, V le volume de la couche, Ω l'angle solide dans la direction $\vec{s}$, $\Gamma(V,S)$ est l'ensemble des chemins optiques émis par V et atteignant la surface S, γ est un trajet optique avec multi-diffusion parmi les Γ possibles ($\gamma \in \Gamma$), $P(\gamma)$ est la densité de probabilité d'occurence du chemin optique γ (le chemin est calculé selon une marche aléatoire), ℓ_γ est la longueur du chemin optique de multi-diffusion, κ_λ le coefficient d'absorption monochromatique total gaz-particules et L^o_λ la luminance de Planck prise à la température T de la couche.

Le modèle spectral utilisé pour le mélange diphasique est un modèle en k-distribution avec l'hypothèse des k-corrélés. Les paramètres des k-distributions du mélange de gaz sont obtenus directement depuis le spectre du mélange calculé avec un modèle raie-par-raie. Le code de transfert radiatif de Monte-Carlo utilise les propriétés spectrales du nuage de particules obtenues par la théorie de Mie. Le traitement spectral utilisé par l'algorithme de Monte-Carlo est détaillé dans [83]. Il consiste à utiliser un tirage aléatoire de la bande étroite ainsi que du coefficient d'absorption ($k(g)$ du mélange gaz+particules) dans cette bande étroite. Ensuite, le calcul de transfert (absorption et multi-diffusion) dans la couche est entrepris. Le facteur d'asymétrie g est calculé directement à partir de la fonction de

phase calculée par la théorie de Mie (Eq. 5.19). De plus, g est utilisé dans le code Monte-Carlo comme paramètre de la fonction de phase de Henyey-Greenstein [85] :

$$p_{HG}(\mu) = \frac{1}{4\pi}\frac{1-g^2}{\left[1+g^2-2g\mu\right]^{\frac{3}{2}}} \tag{5.18}$$

$$g = \int_{-1}^{1} \mu p(\mu) d\mu \tag{5.19}$$

avec, μ le cosinus de l'angle de diffusion et p la fonction de phase. L'expression de la fonction de phase par la fonction de Henyey-Greenstein est utilisée dans le code afin d'optimiser l'échantillonnage des tirages aléatoires et d'accélérer le temps de calcul.

En ce qui concerne le mélange gazeux, les paramètres du modèle CK ont été calculés directement à partir du spectre raie par raie du mélange de gaz pour 16 points d'une quadrature de Gauss-Legendre. Les paramètres CK du mélange de gaz sont calculés dans 288 bandes étroites, chacune de largeur 25cm^{-1}, dans la plage spectrale [800-8000cm^{-1}] du mélange gazeux.

En ce qui concerne les particules, les propriétés spectrales du nuage de particules sont calculées suivant la théorie de Mie pour une monodispersion de particules sphériques. Les coefficients d'absorption, de diffusion et le facteur d'asymétrie du nuage de particules sont calculés dans 968 bandes étroites, chacune de largeur 25cm^{-1}, composant l'intervalle spectral [800-25000cm^{-1}] ([0.4,12μm] en longueur d'onde). Les propriétés optiques des particules sont considérées constantes dans une bande étroite. Pour une monodispersion de particules sphériques, le coefficient d'absorption et de diffusion sont calculés en utilisant les équations 5.15 et 5.16.

L'étude paramétrique est menée en considérant une couche plan-parallèle (Fig. 5.4) d'épaisseur e=10cm caractéristique de la géométrie de notre étude. Cette couche est composée de particules et d'un mélange gazeux, 20% de H_2O et 10% de CO_2 (pourcentages molaires rencontrés typiquement dans une flamme d'hydrocarbure). La température de la couche diphasique isotherme est fixée à 2000K. Les paramètres qui varient sont le diamètre de la monodispersion ainsi que la fraction volumique. Pour chaque valeur de ces deux paramètres, la quantité de flux émis par la couche diphasique change en fonction de l'absorption, l'émission et la diffusion du rayonnement.

La nature des particules présentes dans le nuage peut être donnée par leur indice complexe de réfraction (Eq. 5.1) qui dépend de la longueur d'onde. Comme dans notre cas il existe une incertitude sur les valeurs monochromatiques de l'indice de réfraction nous considèrerons que sa valeur est constante sur tout le spectre. Le type de particules choisi correspond à des particules peu absorbantes comme les oxydes métalliques. La valeur de l'indice complexe de réfraction est alors pris égal à m=1.8-$i10^{-3}$, ce qui correspond à l'ordre de grandeur de l'indice de l'alumine que reporte Duval [79]. En effet, malgré de nombreux travaux sur la détermination de l'indice sa valeur reste approximative.

Dans l'objectif d'évaluer la contribution du rayonnement des particules par rapport à

celui des gaz, on définit le rapport :

$$R = \frac{\int \Phi_\lambda^p d\lambda}{\int \Phi_\lambda d\lambda} \tag{5.20}$$

R est le rapport entre le flux global émis par une couche composée seulement de particules, et le flux global émis par une couche composée de gaz et de particules. Les résultats sont représentés sur la figure 5.5 qui donne une cartographie du rapport R en fonction du diamètre et de la fraction volumique de la monodispersion de particules sphériques. L'écart type maximal rencontré lors du calcul des flux avec l'algorithme de Monte-Carlo est de 3%. La figure 5.5 montre que les particules peu absorbantes contribuent faiblement à l'émission de la couche. La contribution du rayonnement dû aux particules dépasse le seuil de 20% du rayonnement total lorsque la fraction volumique est supérieure ou égale à 10^{-5}.

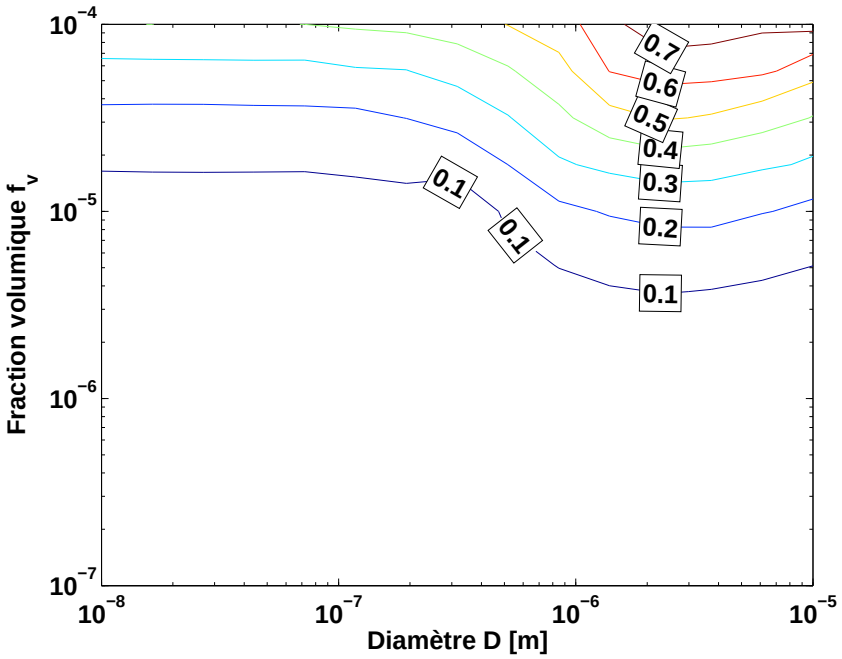


Fig. 5.5 : *Fraction volumique de particules correspondant à un rapport R fixé en fonction du diamètre.*

La cartographie, sur la figure 5.5, montre que pour une fraction volumique constante, lorsque le diamètre augmente, le flux émis par les particules présente un maximum. La gamme de diamètres où intervient l'extremum est large et s'étend de 0.1 à 10μm. L'apparition du maximum provient des valeurs que prend le quotient du facteur d'efficacité d'absorption sur le diamètre dans l'équation 5.15. En effet, la variation du flux émis par une couche composée uniquement de particules est engendrée par une variation du coefficient d'absorption de cette couche. De plus, le coefficient d'absorption est lui-même fonction du facteur d'efficacité d'absorption qui dépend de la longueur d'onde du rayonnement incident, de l'indice de réfraction et du diamètre de la particule. Le maximum

observé est alors dû à la concurrence entre l'augmentation de la valeur de Q_{a_λ} et l'augmentation du diamètre. Comme Q_{a_λ} dépend de la longueur d'onde, une grandeur moyenne pondérée par la luminance de Planck à la température de la couche, peut être calculée par l'expression :

$$Q_a^* = \frac{\int Q_{a_\lambda}(m,D) L_\lambda^o d\lambda}{\int L_\lambda^o d\lambda} \tag{5.21}$$

De la même manière on obtient une grandeur moyenne sur le spectre de l'efficacité de diffusion en calculant :

$$Q_d^* = \frac{\int Q_{d_\lambda}(m,D) L_\lambda^o d\lambda}{\int L_\lambda^o d\lambda} \tag{5.22}$$

La figure 5.6 donne l'évolution du quotient du facteur d'efficacité d'absorption moyen ou de diffusion sur le diamètre, en fonction du diamètre. La figure 5.6 permet de retrouver l'évolution du coefficient d'absorption pour une fraction volumique constante et ainsi d'expliquer l'apparition du maximum sur la cartographie de la figure 5.5. En effet, pour une fraction volumique constante et d'après l'équation 5.15, lorsque Q_a^*/D atteint un maximum le coefficient d'absorption et le flux émis par la couche atteignent aussi un maximum.

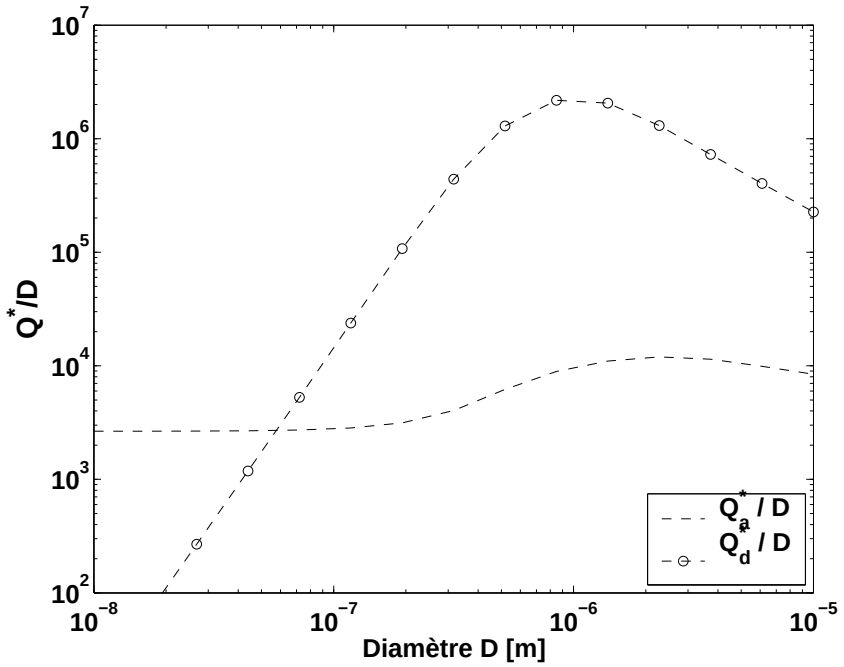


Fig. 5.6 : *Évolution du quotient du facteur d'efficacité moyen d'absorption et de diffusion sur le diamètre en fonction du diamètre.*

Le rapport R prend en compte les phénomènes de diffusion dans une couche composée uniquement de particules et une couche composée de gaz et de particules. Les processus de diffusion multiple provoque une dispersion du rayonnement et augmentent son trajet dans la couche. Le rayonnement est ainsi davantage absorbé et la diffusion agit alors comme un

phénomène qui permet une atténuation du rayonnement émis par la couche. L'influence de la diffusion est évaluée sur la figure 5.7 qui cartographie un rapport R_d défini par :

$$R_d = \frac{\int \Phi_\lambda^{sd} d\lambda - \int \Phi_\lambda d\lambda}{\int \Phi_\lambda^{sd} d\lambda} \tag{5.23}$$

Le flux émis par la couche sans une prise en compte de la diffusion est noté Φ^{sd} et est calculé en fixant un coefficient de diffusion nul. R_d permet d'indiquer sur les cartographies de la figure 5.7 les valeurs de fraction volumique et de diamètre pour lesquelles l'influence de la diffusion, sur le calcul du flux émis, peut être négligée. L'erreur commise, sur le flux émis par la couche, en négligeant la diffusion, peut atteindre 25% pour un diamètre des particules d'environ 1μm et une fraction volumique d'environ 10^{-4}. Pour une monodispersion sphérique, l'augmentation de la valeur de σ_d est déduite en étudiant l'évolution de Q_d/D sur la figure 5.6. Ainsi, les zones où R_d devient important correspondent aux zones où le coefficient de diffusion est grand. Par exemple, l'étude menée par Duval, [79] montre l'importance de la prise en compte de la diffusion dans les propulseurs de fusée, où c'est le même type de particules qui est rencontré et les diamètres de particules ainsi que les fractions volumiques sont respectivement de l'ordre de D=1μm et f_v=10^{-4} ([79]).

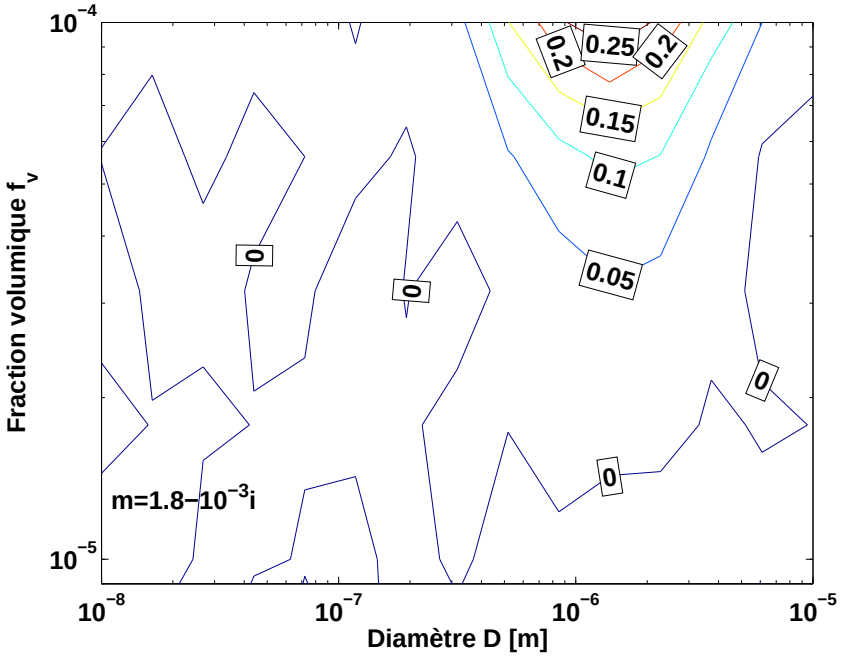


Fig. 5.7 : *Fraction volumique de particules correspondant à un rapport R_d fixé en fonction du diamètre.*

La démarche illustrée dans cette étude paramétrique permet d'une part, de quantifier la part de rayonnement due au mélange gazeux et d'autre part d'évaluer l'influence de la diffusion sur l'émission de rayonnement par la couche considérée. L'étude paramétrique

montre que la contribution du rayonnement des gaz à l'émission de la couche est prépondérante pour des valeurs de fractions volumiques inférieures à 10^{-5}. Elle montre également que la diffusion peut être négligée pour des fractions volumiques de particules inférieures à 6.10^{-5} quelque soit le diamètre.

Après avoir quantifié la part de rayonnement due aux particules ainsi que la part de rayonnement diffusé dans l'étude sur le flux émis par des couches plan-parallèles, une autre étude est conduite afin de quantifier l'influence de la partie imaginaire de l'indice de réfraction.

5.4.2 Influence de l'indice complexe de réfraction

La géométrie du mur plan-parallèle est adoptée (Fig. 5.4) pour étudier l'influence de la diffusion sur le flux émis par la couche diphasique et le même code de Monte-Carlo, décrit dans la précédente étude paramétrique, est utilisé dans cette étude de sensibilité.

L'étude paramétrique précédente prend en compte une valeur de l'indice complexe de réfraction constant sur tout le spectre. Cependant, la valeur de l'indice de réfraction dépend de la longueur d'onde et de la composition de la particule donc des processus conduisant à sa formation. Dans notre application, il est possible que la particule réagisse dans l'écoulement. Alors, sa composition peut évoluer en fonction de sa position dans le jet. De plus, l'indice complexe de réfraction et la composition des particules dans le jet n'ont pas pu être déterminés expérimentalement dans le cadre de notre étude. Donc, ne connaissant pas, a priori, cet indice, une étude paramétrique sur la diffusion est conduite pour plusieurs valeurs de l'indice d'absorption qui représentent plusieurs types de particules pouvant être présentes dans le jet. En revanche, la partie réelle de l'indice reste constante et égale à 1.8, ce qui correspond approximativement à la partie réelle d'un métal oxydé (par exemple, l'alumine [79]).

Le flux émis est calculé suivant l'équation 5.17 en tenant compte des multi-diffusions survenant dans la couche. Cette fois-ci, l'épaisseur de la couche plan-parallèle est fixée à la valeur e=20cm. La couche est constituée d'un mélange de gaz avec les fractions molaires suivantes, x_{H_20}=x_{CO}=x_{CO_2}=0.15, et de particules à T=2000K. L'algorithme de Monte-Carlo utilise le modèle CK pour le mélange diphasique avec une quadrature de Gauss-Legendre à 16 points. Les paramètres CK du mélange gazeux sont déterminés à partir d'un spectre raie par raie et les paramètres des nuages de particules sont calculés en utilisant la théorie de Mie.

Plusieurs nuages de particules sphériques constituant la couche sont pris en compte dans l'étude. Chaque nuage est une monodispersion de particules qui est décrit par un indice complexe de réfraction, un diamètre et une fraction volumique. Étant donné que la nature des particules peut évoluer au cours du temps, les calculs sont effectués pour quatre valeurs de la partie imaginaire de l'indice de réfraction : k=10^{-8}, 10^{-6}, 10^{-4}, 10^{-2}. Pour tenir compte des phénomènes de concentration des particules, deux valeurs élevées de fractions volumiques sont retenues dans les calculs, f_v=5.10^{-6} et 5.10^{-5}. Ces

valeurs de f_v sont supposées rendre compte des zones où les particules sont les plus concentrées. En ce qui concerne le diamètre des particules de la monodispersion, comme les résultats de l'analyse MEBE montrent que le diamètre des particules, D, est compris entre 10nm<D<500nm et comme les phénomènes d'agglomération peuvent augmenter la taille des particules, trois diamètres balayant une plage suffisante sont étudiés, 50nm, 500nm, 5μm. Les figures B.1 à B.6 de l'annexe B donnent les coefficients d'absorption et de diffusion des nuages composés des différentes monodispersions.

Dans cette étude paramétrique, l'écart type de chaque résultat est inférieur à 2%. Les figures 5.8 et 5.9 donnent la valeur des rapports R_A et R_S en fonction de la partie imaginaire de l'indice de réfraction. Ces rapports sont définis suivant :

$$R_A = \frac{\Phi_A}{\Phi_{gaz}} \tag{5.24}$$

$$R_S = \frac{\Phi_S}{\Phi_{gaz}} \tag{5.25}$$

avec, Φ_A et Φ_S les flux émis par la couche diphasique calculés respectivement en considérant les effets de la diffusion (Φ_A, Avec diffusion, σ_p non nul) et en les négligeant (Φ_S, Sans diffusion, $\sigma_p = 0$). Φ_{gaz} représente le flux émis par la couche composée uniquement de gaz. Les rapports R_A et R_S quantifient les effets de la diffusion ainsi que la part de rayonnement émise par les gaz sur le flux total émis par la couche. La figure 5.8 donne les valeurs des rapports R_A et R_S en fonction de k pour chaque nuage ayant des particules de diamètres différents mais avec une fraction volumique f_v=5.10^{-6}. La figure 5.9 donne les mêmes rapports mais pour une fraction volumique en particules des nuages plus élevée, f_v=5.10^{-5}.

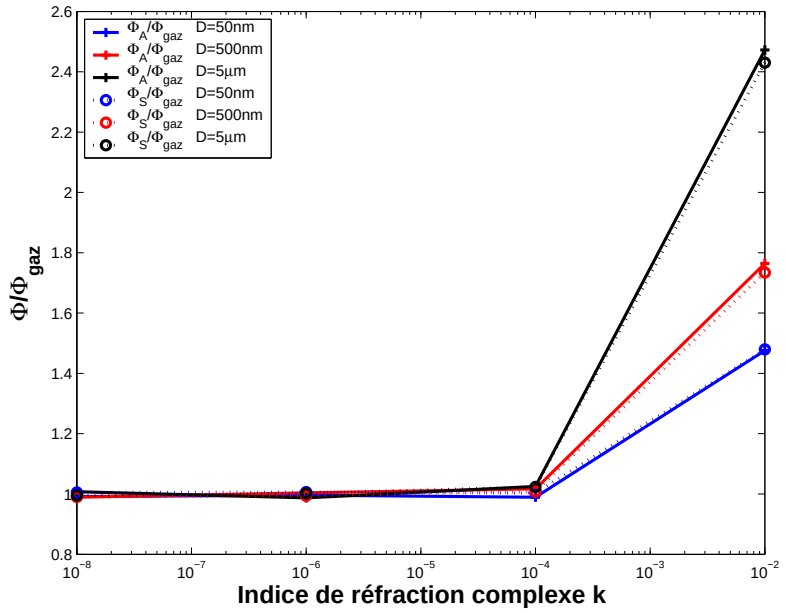


Fig. 5.8 : *Evolution des rapports R_A et R_S de la couche en fonction des parties imaginaires de l'indice de réfraction pour plusieurs diamètres de particules avec f_v=5.10^{-6}*

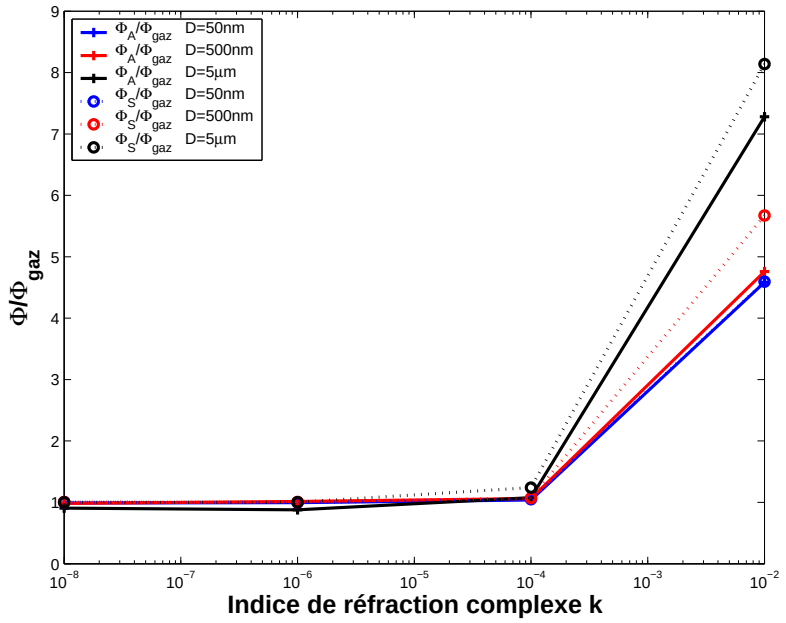


Fig. 5.9 : *Evolution des rapports R_A et R_S de la couche en fonction des parties imaginaires de l'indice de réfraction pour plusieurs diamètres de particules avec f_v=5.10^{-5}*

Les figures 5.8 et 5.9 montrent que le rayonnement émis par les particules est négligeable devant le rayonnement des gaz tant que la partie imaginaire de l'indice de réfraction

est inférieure à 10^{-4}. En revanche, pour k=10^{-2}, le flux émis par les particules est prépondérant sur celui émis par les gaz et les phénomènes de diffusion entraînent une diminution de 20% du flux émis pour la couche avec des particules de diamètres 500nm et une fraction volumique f_v=10^{-5}. Pour ce couple de paramètres, k et f_v, comme le coefficient de diffusion est important (Fig. B.2) le rayonnement à l'intérieur de la couche est diffusé de nombreuses fois et absorbé fortement. Les effets de la diffusion apparaissent pour ce nuage lorsque le coefficient d'absorption des particules est très élevé (k=10^{-2}, Fig. B.5). En effet, dans la zone spectrale où le coefficient de diffusion est important, l'émission par les gaz est faible. C'est donc le rayonnement émis par les particules qui est majoritairement diffusé et absorbé.

Enfin, pour chaque nuage (diamètres et fractions volumiques différentes), le rapport R_{ASD} est tracée en fonction de k sur la figure 5.10. R_{ASD} qui est défini par :

$$R_{ASD} = 100\frac{\Phi_S - \Phi_A}{\Phi_A} \tag{5.26}$$

R_{ASD} représente donc l'erreur relative en pourcentage qui est commise lorsque la diffusion est négligée pour le calcul du flux émis par la couche diphasique.

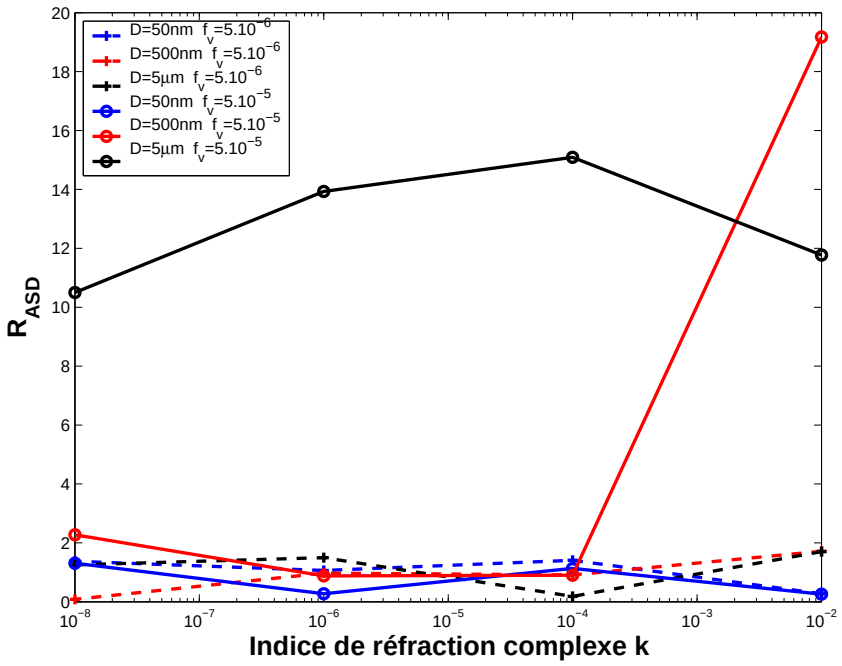


Fig. 5.10 : *Evolution du rapport R_{ASD} en fonction des parties imaginaires de l'indice de réfraction pour plusieurs diamètres de particules et fractions volumiques*

La figure Fig. 5.10 montre que les phénomènes de diffusion influencent significativement la valeur du flux émis (10-15%) par des couches composées de particules de diamètres 5μm pour une fraction volumique f_v=5.10^{-5} et pour toutes les valeurs de k. Le coefficient de diffusion (Fig. B.3) de ce nuage oscille dans la plage spectrale mais reste du même ordre

de grandeur. Ainsi, le rayonnement émis par les gaz est diffusé. Ce rayonnement est alors absorbé par les mêmes gaz puisque l'émission par les particules est très faible (Fig. 5.9) tant que la partie imaginaire de l'indice de réfraction reste inférieure à 10^{-4}. Par contre, pour k=10^{-2}, le rayonnement prépondérant est celui des particules (Fig. 5.9), il est diffusé et atténué principalement par les particules. Pour tous les autres nuages, l'influence de la diffusion n'est pas significative.

Comme énoncé dans le paragraphe précédent, les multi-diffusions augmentent le chemin parcouru par les photons dans la couche et par conséquent augmentent l'absorption. C'est pourquoi, la prise en compte de la diffusion conduit à des valeurs de flux émis, par la couche, plus faibles. Dans notre étude, les phénomènes de diffusion diminuent la valeur de flux émis lorsque la fraction volumique est supérieure à 10^{-5}. En effet, pour cette valeur de f_v, les épaisseurs optiques d'absorption et diffusion deviennent proche de 1 et engendrent une atténuation du rayonnement émis.

5.5 Conclusion

Les études paramétriques menées dans ce chapitre ont permis de mettre en évidence, d'une part, l'influence des processus de diffusion, et d'autre part l'influence relative du rayonnement des gaz et des particules sur l'émission globale d'une couche diphasique. En fixant l'épaisseur de la couche plan-parallèle et les propriétés radiatives des gaz et des particules, nous avons pu calculer le flux émis par la couche avec et sans diffusion.

Pour la première couche, la diffusion est négligeable si la fraction volumique est inférieure à 6.10^{-5} et quelque soit le diamètre des particules. Pour la seconde étude paramétrique, l'influence de la diffusion est significative pour une fraction volumique de 5.10^{-5}. Dans ce cas, les nuages composés de particules d'un diamètre de 5μm surestiment l'émission de 10 à 15% si la diffusion est négligée et quelque soit l'indice d'absorption. De plus, pour les nuages formés de particules de 500nm de diamètre, l'influence de la diffusion est significative seulement pour k=10^{-2} puisqu'elle atténue le flux émis de 19%.

Dans le cadre de l'étude sur les produits pyrotechniques classifiés, un modèle radiatif exposé dans le prochain chapitre a été développé sans tenir compte de la diffusion du rayonnement par les particules mais en prenant en compte l'absorption (et l'émission). Pour justifier cette hypothèse, nous avons, dans un premier temps, évalué et encadré des valeurs de paramètres tels que la fraction volumique, le diamètre et l'indice de réfraction des particules susceptibles d'être présentes dans le jet. Cette démarche nécessite le développement d'un modèle aérodynamique de dispersion des particules dans un jet à haute température. Ensuite, les valeurs de ces paramètres sont confrontées aux résultats des études paramétriques sur l'influence de la diffusion.

6

Comparaison modèles-expérimentation pour un cas test

Sommaire

6.1 Démarche adoptée 113

6.2 Modélisation de l'écoulement réactif diphasique 114

6.2.1 Modélisation de la phase gazeuse 114

6.2.2 Dispersion turbulente des particules 115

6.3 Modèle radiatif 115

6.3.1 Présentation du modèle radiatif 116

6.3.2 Validation de Sirjet 122

6.4 Comparaison modèle-expérience 130

6.4.1 Présentation des résultats expérimentaux 130

6.4.2 Présentation des résultats des simulations 132

6.4.3 Confrontation modèle-expérience 136

6.5 Conclusion 138

6.1 Démarche adoptée

La simulation de la signature infrarouge d'un jet réactif nécessite la connaissance des champs de températures et de concentrations (fractions molaires du mélange gazeux et fractions volumiques des particules). Cette connaissance permet de calculer les propriétés radiatives du jet diphasique qui vont être utilisées comme données d'entrée du modèle radiatif. De plus, pour des besoins industriels, une interface graphique a été développée dans le but d'obtenir un outil convivial de simulation de signature infrarouge. Cette in-

terface graphique relie les champs de températures et de concentrations du jet au modèle de résolution des transferts radiatifs en situation de télédétection.

Dans notre étude, les champs aérothermochimiques sont approchés par une simulation effectuée avec un code commercial de mécanique des fluides, Fluent. Les modèles utilisés pour décrire la phase gazeuse réactive et la phase dispersée sont présentés dans la prochaine section. Par la suite, le modèle radiatif permettant le calcul de la signature infrarouge du jet est présenté et une confrontation entre un résultat expérimental déclassifié et une simulation est exposée.

6.2 Modélisation de l'écoulement réactif diphasique

La modélisation de la signature infrarouge d'un écoulement diphasique nécessite au préalable la modélisation du milieu physique responsable de l'émission de rayonnement. L'écoulement diphasique est composé de gaz et de particules dont la nature et les propriétés thermophysiques, radiatives et chimiques doivent être connues. En effet, ces propriétés du milieu sont indispensables à la détermination des champs de vitesses, de pressions, de températures et de concentrations. Ces champs de variables sont les paramètres d'entrée des modèles de signature infrarouge.

La combustion de l'objet pyrotechnique a lieu dans un écoulement d'air à grande vitesse. Cette combustion entraîne la décomposition du matériau pyrotechnique qui produit une phase gazeuse et une phase condensée. Ces deux phases sont éjectées et se mélangent avec l'air. Selon la composition de ce matériau pyrotechnique, cette phase gazeuse peut réagir avec l'oxygène de l'air. La phase condensée est formée de particules métalliques, plus ou moins oxydées. La composition et la granulométrie de ces particules varient en fonction de leurs positions dans le jet.

La démarche adoptée pour la modélisation de l'écoulement diphasique comporte trois étapes :

1. le calcul des débits et températures de gaz et de particules éjectés par le matériau pyrotechnique dans l'écoulement d'air,
2. la modélisation de l'écoulement et de la combustion de la phase gazeuse dans l'air,
3. la modélisation de la dispersion turbulente de la phase condensée.

6.2.1 Modélisation de la phase gazeuse

Les propriétés des gaz éjectés à la surface du bloc pyrotechnique et les fractions massiques de chaque espèce sont obtenues par simulation numérique de la décomposition chimique du matériau. Les calculs d'équilibre thermodynamique sont menés grâce au code de calcul COPPELIA, développé à l'ONERA [86]. Ce code permet de déterminer la composition d'un mélange à l'équilibre thermodynamique. Le mélange final ainsi obtenu contient des espèces gazeuses auxquelles peut s'ajouter une phase condensée. Pour ce faire, le code

utilise les données thermodynamiques des tables JANAF. La mise en oeuvre d'un calcul avec le code COPPELIA nécessite de rappeler les hypothèses considérées :

1. la pression est constante et la combustion est adiabatique,
2. la combustion est complète,
3. le système est à l'équilibre thermodynamique,
4. le mélange gazeux est décrit comme un gaz parfait.

La composition finale est obtenue par une minimisation de l'énergie libre de Gibbs du système. Les espèces produites par la combustion du matériau pyrotechnique sont éjectées à la surface du bloc avec une vitesse V et un débit $\dot{m}_g$. Dans le jet, ces espèces peuvent réagir au contact de l'oxygène de l'air. La simulation du champ aérothermochimique dans le jet est assurée par une méthode stationnaire avec un modèle pour la turbulence et un modèle pour les réactions chimiques. Comme l'objectif de l'étude porte essentiellement sur le rayonnement émis par le jet, les modèles utilisés pour simuler l'écoulement diphasique réactif, sont des modèles simples et disponibles dans le code commercial FLUENT. Ainsi, le choix du modèle de turbulence s'est porté sur le modèle de fermeture à deux équations, le modèle standard κ-ϵ. De plus, la combustion dans l'air des gaz éjectés est décrite par un modèle de flamme non-prémélangée qui suppose les réactions chimiques instantanées. Enfin, la geométrie est choisie 2D axisymétrique car l'écoulement du jet en raffale se rapproche d'un écoulement axisymétrique et dans cette configuration 2D les calculs sont plus rapides.

6.2.2 Dispersion turbulente des particules

Les particules produites par la combustion du matériau pyrotechnique sont entraînées par l'éjection des produits gazeux. Pour prendre en compte ce phénomène, la dispersion turbulente des particules dans l'écoulement est calculée par Fluent avec un modèle stochastique de suivi des particules. Etant donné que la modélisation de l'écoulement n'est pas l'objectif de la thèse, une description détaillée est donnée en Annexe C concernant les modèles utilisés dans les simulations Fluent de l'écoulement diphasique réactif.

Les modèles de mécanique des fluides et de combustion permettent la simulation des profils de vitesses, de températures et de concentrations en gaz et particules. Ces profils constituent les données d'entrée du modèle radiatif que nous allons décrire dans le paragraphe qui suit.

6.3 Modèle radiatif

L'objectif du modèle radiatif est de calculer la signature infrarouge d'un jet tridimensionnel. Cette émission énergétique et spectrale du jet dépend des champs de concentrations et de températures ainsi que des gaz et des particules présents dans le jet. Dans

notre étude, les champs aérothermochimiques sont considérés comme des entrées du modèle radiatif et ils sont calculés par Fluent.

Dans un premier temps, nous décrirons le modèle radiatif qui permet le calcul de la signature infrarouge du jet et l'interface graphique. Ensuite, on présentera une confrontation entre le résultat d'une simulation complète de la signature infrarouge d'un leurre déclassifié avec sa signature obtenue expérimentalement.

6.3.1 Présentation du modèle radiatif

Les études de sensibilités menées dans le paragraphe 5.4 renseignent sur l'influence de la diffusion. Ces études paramétriques sont données pour plusieurs valeurs des diamètres, des fractions volumiques et des parties imaginaires de l'indice de réfraction des particules. Compte tenu des valeurs que prennent ces paramètres dans les jets étudiés pour la société Lacroix, nous avons considéré que la diffusion pouvait être négligée.

En conséquence, il est alors possible d'utiliser une méthode de lancer de rayon pour résoudre l'ETR sous sa forme intégrale. Ceci permet donc une description des propriétés optiques du mélange en terme de transmittivités. De plus, le modèle spectral CKFG-SMG tabulé dans cette étude est employé dans le modèle radiatif pour deux raisons. La première est la nécessité de l'hypothèse de gaz fictifs (FG) qui permet d'atteindre une bonne précision lorsque l'épaisseur optique du milieu froid est grande, et la seconde raison est qu'il est plus rapide que le modèle CKFG grâce à l'hypothèse de gaz unique pour le mélange (SMG).

Dans le but de connaître les champs aérothermochimiques dans le jet tridimensionnel en tous points de l'espace, le jet est discrétisé en volumes élémentaires cubiques. Le maillage structuré servant au modèle radiatif (appelé maillage Sirjet) est composé de volumes de contrôle où les concentrations et la température sont considérées constantes. Les concentrations et les températures dans les volumes de contrôle du maillage structuré sont interpolées à partir des données résultant d'une simulation Fluent. L'interpolation des données Fluent (2D axisymétriques) sur le maillage structuré régulier Sirjet, est réalisée en deux étapes. La première consiste à superposer le maillage Fluent avec le maillage Sirjet et à chercher les mailles Fluent inclues dans une maille de Sirjet. La seconde étape est le calcul de la valeur moyenne d'une grandeur $\overline{X}_i$ en tenant compte des N mailles Fluent présentes dans la i^{e}maille Sirjet :

$$\overline{X}_i = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} X_k \tag{6.1}$$

Avec X_k la valeur moyenne de X dans la k^{e} maille Fluent. Cette grandeur X peut être la fraction molaire de CO, de CO_2, de H_2O, la fraction volumique des particules f_v et la température T. Il est à noter que l'équation 6.1 suppose que les mailles Fluent inclues dans une maille Sirjet ont toutes la même aire. De cette manière, l'expression Eq. 6.1 ne tient pas compte de la taille des N mailles Fluent.

Une représentation schématique du maillage structuré utilisé pour le modèle radiatif et incluant le jet 3D est donnée sur la figure 6.1. La figure 6.1 représente une coupe axiale du maillage compris entre les valeurs (Xmin ;Xmax), (Ymin ;Ymax), (Zmin ;Zmax) des trois axes X, Y et Z. De plus, cette figure (Fig. 6.1) représente un détecteur qui vise un point Z_0 situé sur l'axe Z du jet, à une distance R et avec un angle θ par rapport à l'axe Z. Ainsi, comme le détecteur se trouve dans le plan X=0, les données Z_0, R et θ sont nécessaires à la définition du positionnement du détecteur dans l'espace. De plus, l'angle total de visée 2α permet de connaître les parties du jet que le détecteur voit. Comme cet angle de visée intercepte le plan Y=Ymin (Fig. 6.1) lui-même discrétisé en surface carré, l'angle solide total de visée du détecteur peut alors être discrétisé en plusieurs angles solides élémentaires.

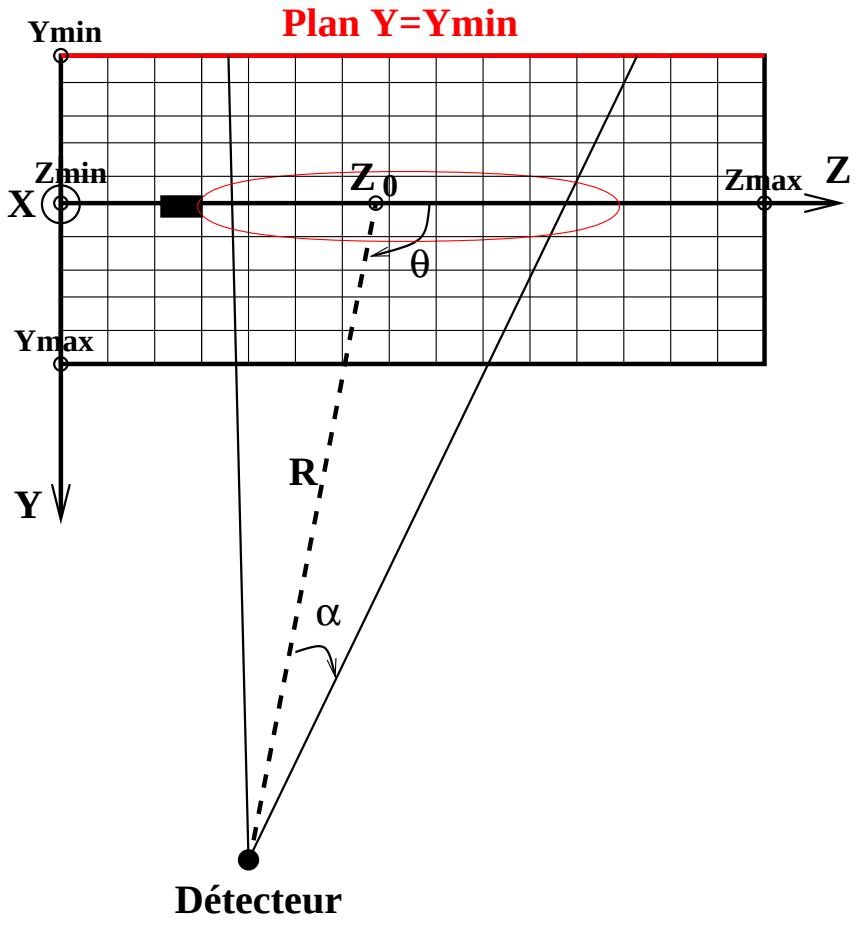


Fig. 6.1 : *Représentation de la scène optronique constituée d'un détecteur et du jet discrétisé en volume élémentaires.*

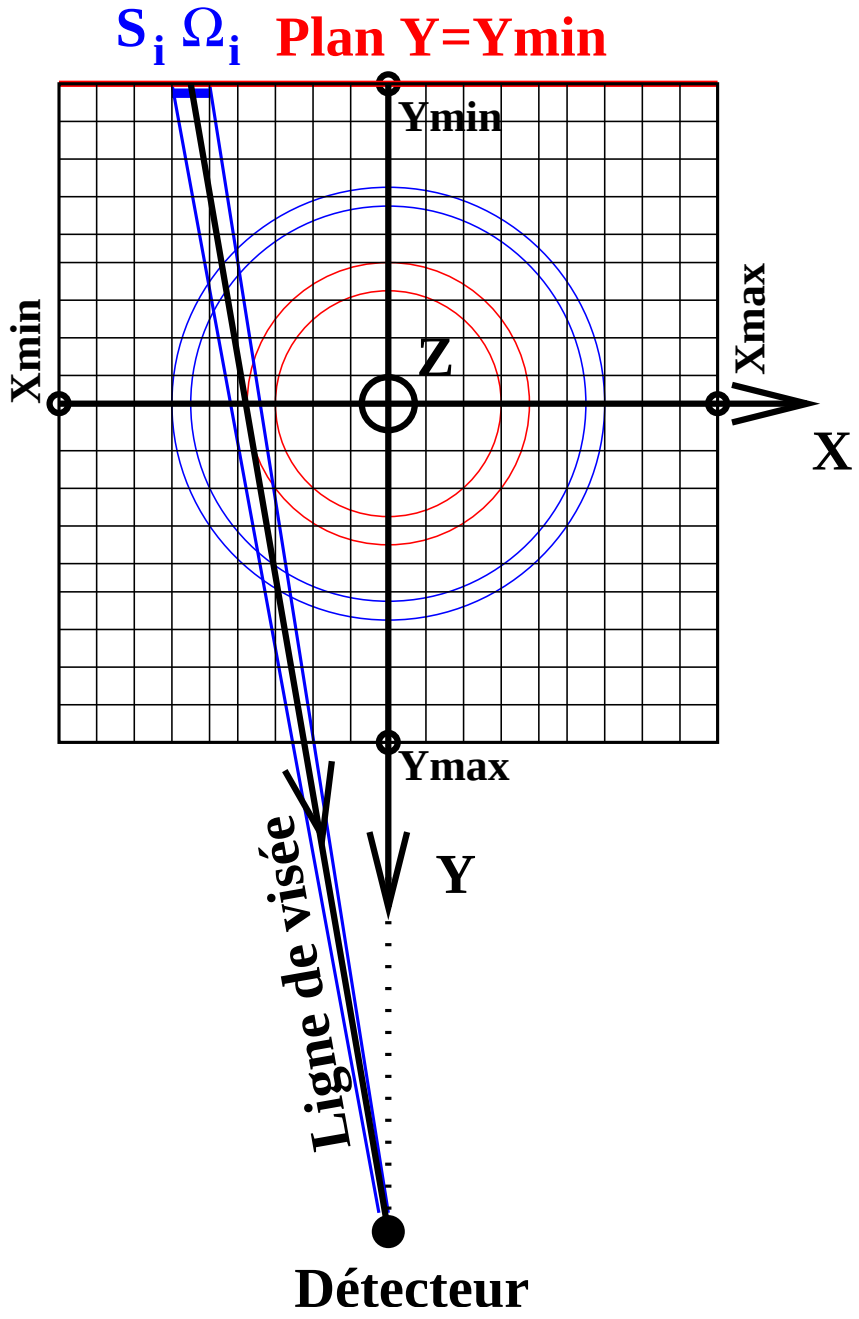


Fig. 6.2 : *Représentation d'une ligne de visée traversant le jet (coupe radiale) discrétisé en volume élémentaires.*

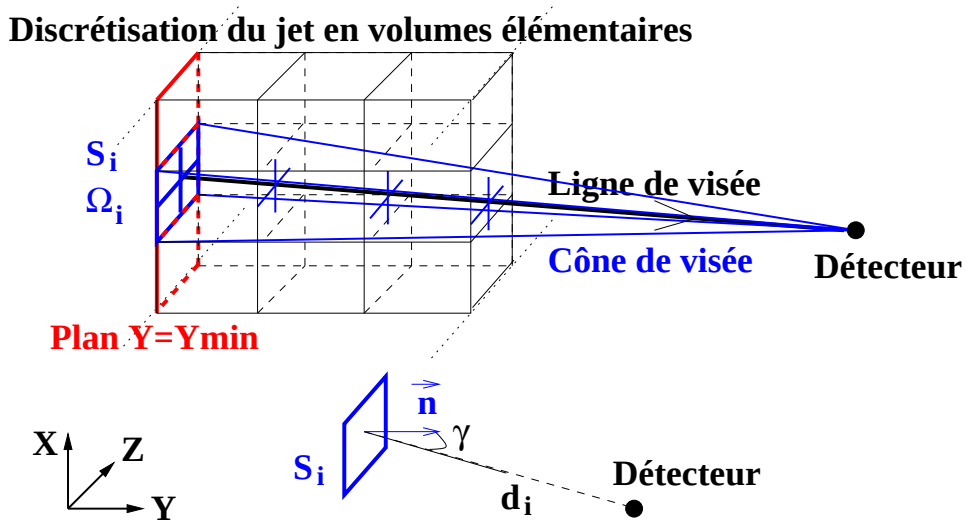


Fig. 6.3 : *Représentation d'une ligne de visée traversant le jet discrétisé en volume élémentaires.*

La figure 6.2 représente une coupe radiale du jet avec un cône de visée élémentaire d'angle solide Ω_i. Chaque surface élémentaire S_i du plan Y=Ymin est vue par le détecteur dans un angle solide Ω_i et chacune d'elle est alors reliée au détecteur par une ligne de visée comme schématisé en trois dimensions sur la figure 6.3.

Ω_i est fonction de S_i, une des surfaces élémentaires qui discrétisent le plan Y=Ymin en N_S surfaces, et de l'angle γ que fait la ligne de visée avec la normale $\vec{n}$ à cette surface (voir Fig. 6.3). Ω_i est alors donné par :

$$\Omega_i = \frac{S_i \cdot \cos\gamma}{d_i^2} \tag{6.2}$$

Cette discrétisation angulaire de la visée du détecteur constitue la première étape du calcul du rayonnement total émis par le jet. L'étape suivante consiste à considérer que le transfert de rayonnement dans le cône de visée le long de la ligne de visée est mono-dimensionnel (la densité spatiale de la luminance est uniforme dans le cône de visée élémentaire pour tous les points de la ligne de visée). Avec cette approximation, la ligne de vue qui traverse différents volumes élémentaires peut alors être discrétisée en N_c colonnes homogènes et isothermes représentant le trajet parcouru dans chaque volume élémentaire. La discrétisation d'une ligne de visée, schématisée sur la figure 6.3, est représentée sur la figure 6.4.

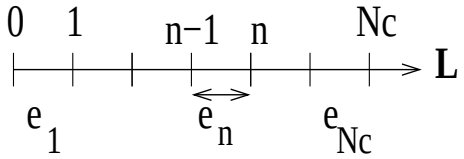


Fig. 6.4 : *Représentation d'une ligne de visée traversant une colonne hétérogène et anisotherme discrétisée en N_c éléments homogènes et isothermes.*

Donc, les équations retenues pour calculer la luminance tenant compte des émissions et absorptions successives le long d'une ligne de vue traversant le jet, sont les suivantes :

$$\overline{L}(d) = \sum_{n=1}^{N_c} \overline{L^o}(T_n)\Big[\overline{\tau}(n,N_c) - \overline{\tau}(n-1,N_c)\Big] \tag{6.3}$$

$$\overline{\tau}(n,N_c) = \prod_j \overline{\tau_j}(n,N_c) \tag{6.4}$$

$$\overline{\tau_j}(n,N_c) = \sum_{i=1}^{N_q} \omega_i \tau_{ij}(n,N_c) \tag{6.5}$$

$$\tau_{ij}(n,N_c) = \exp\Big[-\sum_{n'=n}^{N_c} k_j(g_i)e_{n'}\Big] \tag{6.6}$$

Dans un premier temps, les transmittivités pseudo-monochromatiques τ_{ij} de chaque gaz fictif j pour des couches hétérogènes et anisothermes, sont obtenues en multipliant chaque transmittivité pseudo-monochromatique de chaque couche élémentaire homogène et isotherme (Eq. 6.6). Ensuite, la transmittivité moyenne sur une bande étroite de la colonne (n, N_c) est calculée pour chaque gaz fictif en sommant les transmittivités pseudo-monochromatiques (Eq. 6.5). La transmittivité de colonne du mélange global est alors obtenue en multipliant entre elles les transmittivités de colonnes de chaque gaz fictif j (Eq. 6.4). Enfin, le calcul de la transmittivité de colonne du mélange est répété pour toutes les colonnes utiles à la résolution de la luminance sortante (Eq. 6.3).

Si le jet est composé de gaz et de particules, le coefficient d'absorption des particules dans chaque colonne homogène et isotherme est interpolé pour chaque bande étroite dans une tabulation. En effet, compte tenu de l'allure spectrale des propriétés radiatives des particules dans une bande étroite, elles sont considérées constantes dans une bande étroite et les coefficients d'absorption moyens sont directement tabulées. De cette manière, la transmittivité moyenne dans une bande étroite relative aux particules peut être calculée par l'équation 6.6. Ensuite, cette transmittivité est multipliée à la transmittivité moyenne du mélange de gaz pour donner la transmittivité moyenne de colonne du mélange diphasique (Eq. 6.4, avec j représentant chaque gaz et les particules). Enfin, la luminance est calculée en résolvant l'équation 6.3.

Dans le cas particulier où la ligne de vue traverse la bloc pyrotechnique, le calcul de la luminance sortante de la ligne de visée débute par l'émission du bloc et a pour expression :

$$\overline{L}(d) = \epsilon_b L^o(T_b)\overline{\tau}(1,N_c) + \sum_{n=1}^{N_c} \overline{L^o}(T_n)\Big[\overline{\tau}(n,N_c) - \overline{\tau}(n-1,N_c)\Big] \tag{6.7}$$

Le bloc pyrotechnique est assimilé à un corps gris avec une émissivité ϵ_b et une température T_b.

Le rayonnement émis par le jet, vers le détecteur, étant discrétisé par des lignes de vue, l'intensité moyennée dans une bande étroite et émise par le jet vers le détecteur est la somme des N_S intensités moyennes sortantes des N_S lignes de visée. De cette manière,

dans notre étude, on définit une intensité de bande étroite : cette intensité est calculée par unité d'angle solide, elle est notée I_Ω [W·μm^{-1}·sr^{-1}]. La surface émettrice de la luminance parcourant la ligne de vue est la surface apparente du jet située à une distance d du détecteur. Comme la surface S_i dans le plan Y=Ymin se trouve à la distance d_i du détecteur, et que la surface émettrice se trouve à une distance d, la surface du jet dans le plan focal, S'_i, est donnée par $S_i \frac{d}{d_i}$. L'expression de l'intensité dans une bande étroite prend alors la forme :

$$I_\Omega(R) = \sum_{i=1}^{N_S} L_i(d_i) S_i \cos\gamma \frac{d}{d_i} \quad [W \cdot \mu m^{-1} \cdot sr^{-1}] \tag{6.8}$$

Par la suite, les résultats de nos calculs seront donnés en terme d'intensité I_Ω puisque nous disposons de mesures réalisées dans cette unité. En effet, les spectroradiogrammes sont enregistrés dans cette unité comme détaillé dans la présentation de l'étalonnage du spectroradiomètre en annexe G.

Pour les besoins de l'étude et dans l'objectif de disposer d'un outil efficace et simple d'utilisation, une interface homme-machine a été développée par L. Moreau [87] durant son stage de fin d'étude. Cette interface graphique, appelée Sirjet (Fig. 6.5), permet de transformer les données Fluent (2D axisymétriques) en des données tridimensionnelles d'une part, et d'autre part, Sirjet permet le calcul des trajectoires des lignes de visée à partir du positionnement du détecteur. Ensuite, le modèle de télédétection CKFG-SMG résout l'ETR le long de chaque ligne de visée. On peut détailler le calcul d'une signature infrarouge par Sirjet en énumérant chaque étape :

1. Le choix des caractéristiques du jet simulé est nécessaire pour le chargement des champs aérothermochimiques depuis une banque de données. On renseigne aussi la présence et le type de particules.
2. Un maillage 3D structuré des champs aérothermochimiques peut alors être créé.
3. Les champs maillés peuvent être visualisés au centre de l'interface graphique.
4. Il est ensuite possible de choisir entre les modèles spectraux CK, CKFG, CK-SMG et CKFG-SMG qui sont tabulés.
5. Le bloc pyrotechnique ainsi que le détecteur sont alors définis. La température et l'émissivité du bloc sont demandées. Pour le détecteur, sa position Z_0 sur l'axe Z ainsi que sa distance R, les angles θ et γ suffisent pour le positionner.
6. La simulation peut alors commencer en utilisant le modèle spectral de télédétection infrarouge.
7. Les spectres des intensités moyennées dans une bande étroite s'affichent sur la fenêtre centrale soit en unité de nombre d'onde soit en unité de longueur d'onde.

Cette interface graphique inclue le modèle radiatif ainsi que toute les étapes utiles au déroulement du calcul de la signature infrarouge et du post-traitement des données. C'est pourquoi, dans le paragraphe suivant, une validation de Sirjet est réalisée sur deux cas tests.

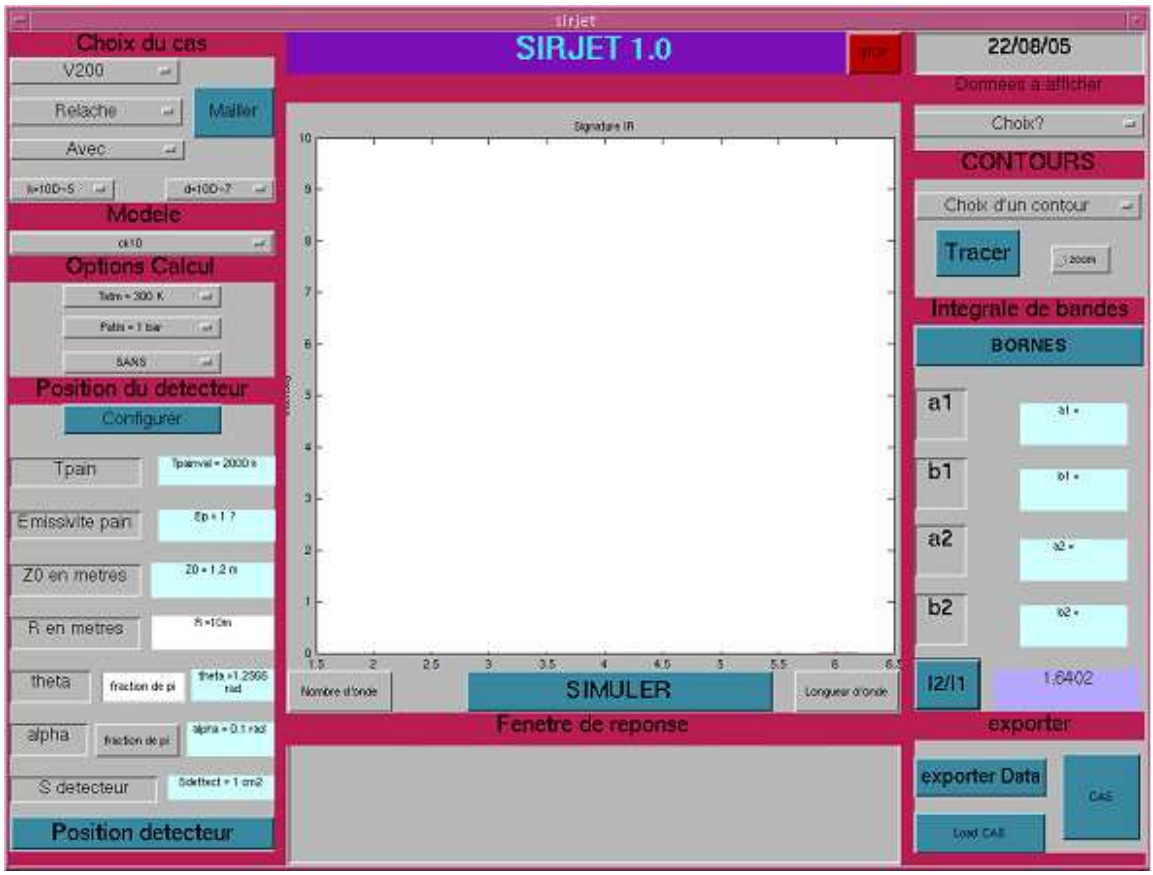


Fig. 6.5 : *Interface graphique homme-machine Sirjet.*

6.3.2 Validation de Sirjet

La validation de Sirjet porte sur le modèle radiatif utilisé dans deux configurations de cas tests :

1. le cas corps noir, où la concentration volumique en particules est uniformément fixée à l'unité et la température à 2000K,
2. le cas des couches de gaz qui comprend trois couches de gaz plan-parallèles à des températures différentes et remplies avec un mélange H_2O-CO_2.

Dans les deux configurations, le maillage structuré utilisé pour décrire le milieu est cubique et de 1cm de côté. De plus, dans les deux cas tests la position du détecteur est la même et est donnée par : Z_0=0.45m, R=-10m, $\theta = \frac{\pi}{2}$. Le détecteur est donc positionné face au centre des couches à mesurer. De plus, le milieu entourant les couches est supposé non absorbant, par conséquent, la totalité du flux émis est transmis jusqu'au détecteur.

Corps noir

La géométrie du cas corps noir est représentée sur les figures 6.6 et 6.7. Le domaine de calcul XYZ total est égal à 0.5*0.5*2.2 en mètres tandis que le barreau à 2000K mesure

0.1*0.1*0.5 (m). L'utilisation du modèle radiatif implique que le barreau soit traversé par des lignes de vue. La luminance sortante de ces lignes de visée doit être celle du corps noir à 2000K étant donné que le milieu est opaque. Cette émission corps noir à 2000K est la référence. Elle est représentée sur la figure 6.8. L'intensité calculée par Sirjet est I_Ω qui est comparée à celle de référence, soit $L^o(2000K) * S$, sur la figure 6.8 (S=0.5m^2). Les deux courbes sont superposées et leur comparaison donne une erreur relative de Sirjet de 8.10^{-4} qui fixe l'ordre de grandeur de la précision numérique de Sirjet.

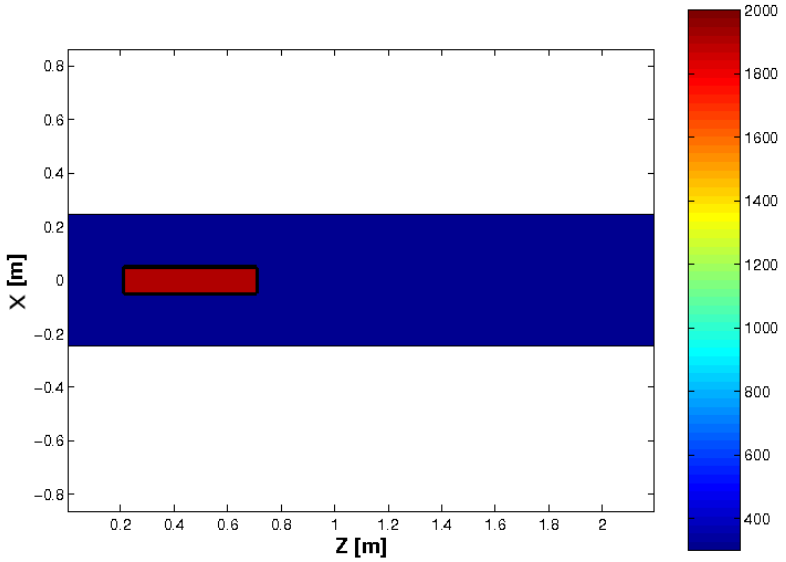


Fig. 6.6 : *Contour de température axial du corps noir à 2000K.*

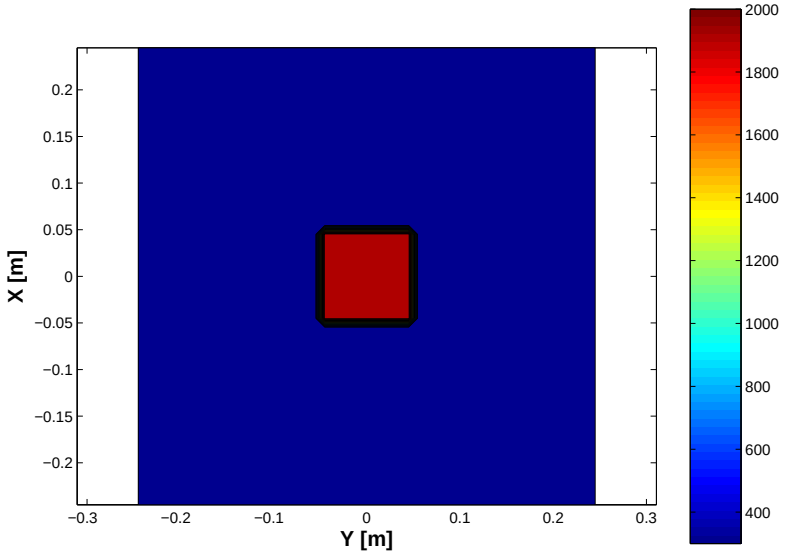


Fig. 6.7 : *Contour de température radial du corps noir à 2000K.*

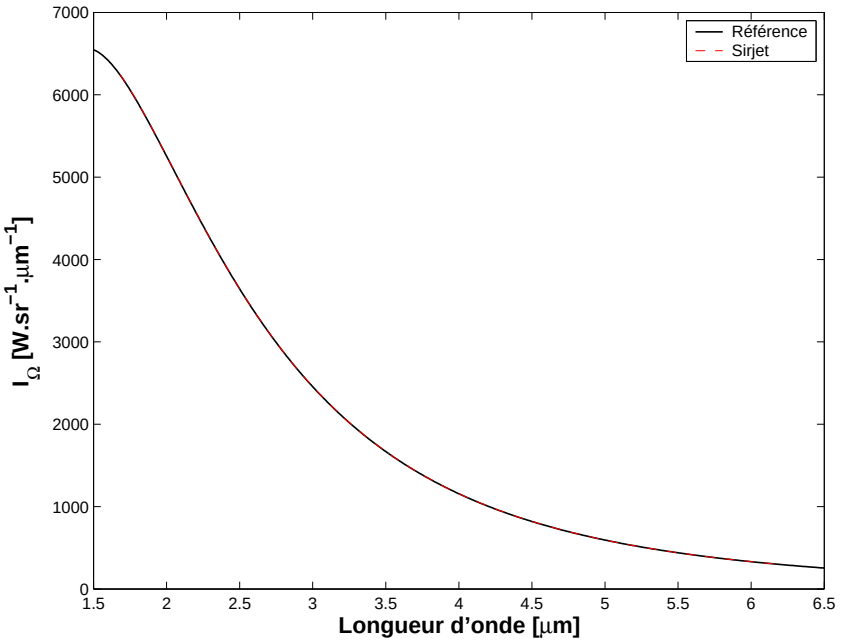


Fig. 6.8 : *Comparaison entre l'intensité I_Ω de référence et celle calculée par sirjet pour le cas test du corps noir.*

Couches de gaz

En ce qui concerne la géométrie des couches de gaz plan-parallèles, elle est représentée sur les figures 6.9 et 6.10. Le milieu est constitué de trois couches de gaz, chacune d'épaisseur 3cm et chacune composée de 20% de CO_2 et 10% de H_2O avec de l'air. La couche du dessus (Fig. 6.9 et 6.10) est à 2000K et émet à-travers une couche centrale à 1200K et une dernière à 500K. Le domaine de calcul correspondant au milieu gazeux est donc égal à 0.09*0.1*0.5 en mètres. Le détecteur vise le centre des couches et il est positionné en face de celles-ci. Dans ce cas test, l'intensité de référence est calculée avec le modèle LBL pour un milieu monodimensionnel constitué de trois couches de gaz. La luminance sortante des couches plan-parallèles issue du LBL est alors pondérée par la surface S=0.5m^2. De plus, un calcul 1D de référence a été mené avec le modèle CKFG-SMG dont les paramètres sont calculés directement avec un LBL. En effet, ce qui distingue le CKFG-SMG tabulé de Sirjet avec le CKFG-SMG de référence est l'interpolation à partir de la tabulation. Les comparaisons entre les intensités de référence LBL et CKFG-SMG et l'intensité calculée avec Sirjet (CKFG-SMG tabulé) sont représentées sur la figure 6.11. Il est à noter que les intensités de références calculées par le LBL et le CKFG-SMG sont pratiquement superposées. Les erreurs absolues sont données sur la figure 6.12 afin de quantifier les erreurs entre les calculs de Sirjet et ceux de références. De ces deux figures (Fig. 6.11 et 6.12), il ressort que Sirjet commet une erreur non négligeable entre 2.5 et 2.8μm. De plus, la partie du spectre au delà de 5.5μm est aussi mal représentée (erreur relative supérieure à 10%) bien qu'elle ne participe que faiblement à l'énergie totale (intégrée sur tout le spectre)

émise par les couches. Ailleurs dans les zones du spectre où le signal est significatif, l'erreur relative reste inférieure à 5%. Pour la fenêtre spectrale entre 2.5 et 2.8μm l'erreur est due à l'interpolation des paramètres tabulés de CKFG-SMG dans Sirjet. Cette erreur pourra être diminuée en discrétisant plus finement la tabulation des mélanges.

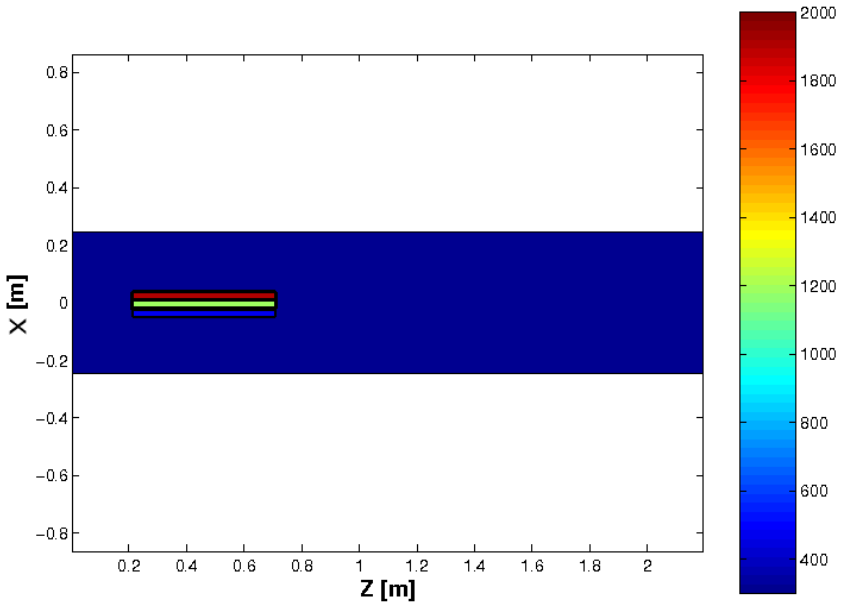


Fig. 6.9 : *Contour de température axial des trois couches de gaz à 2000K, 1200K, 500K.*

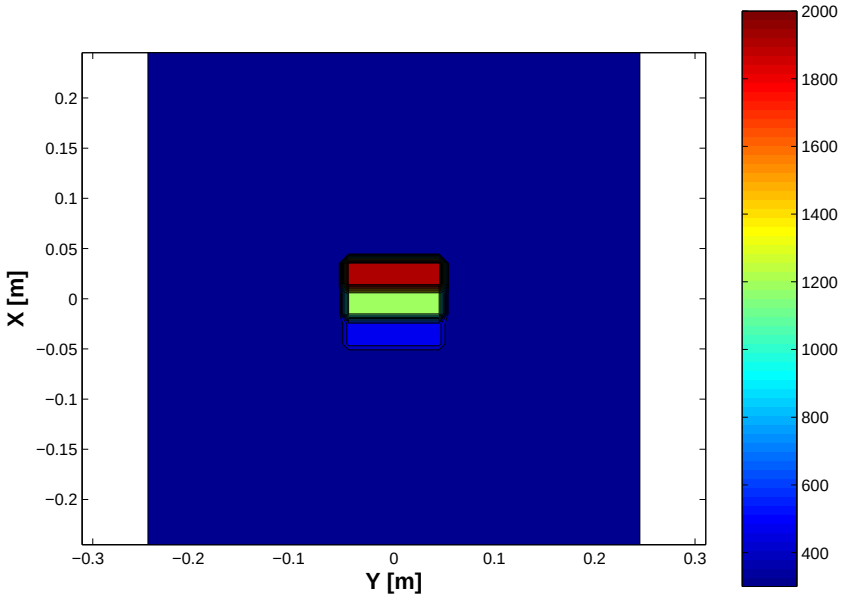


Fig. 6.10 : *Contour de température radial des trois couches de gaz à 2000K, 1200K, 500K.*

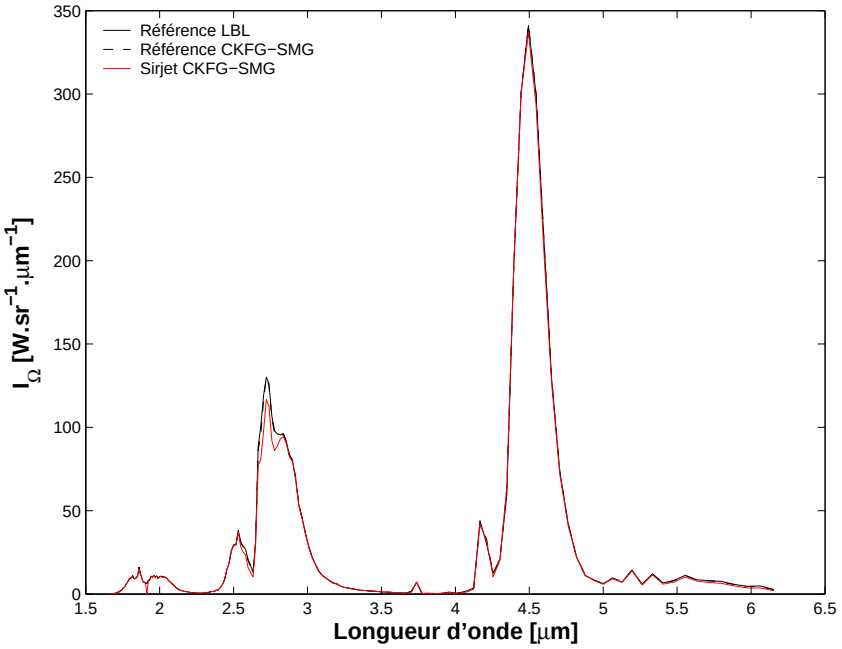


Fig. 6.11 : *Comparaison entre les intensités I_Ω de référence et celle calculée par Sirjet pour le cas test des couches de gaz.*

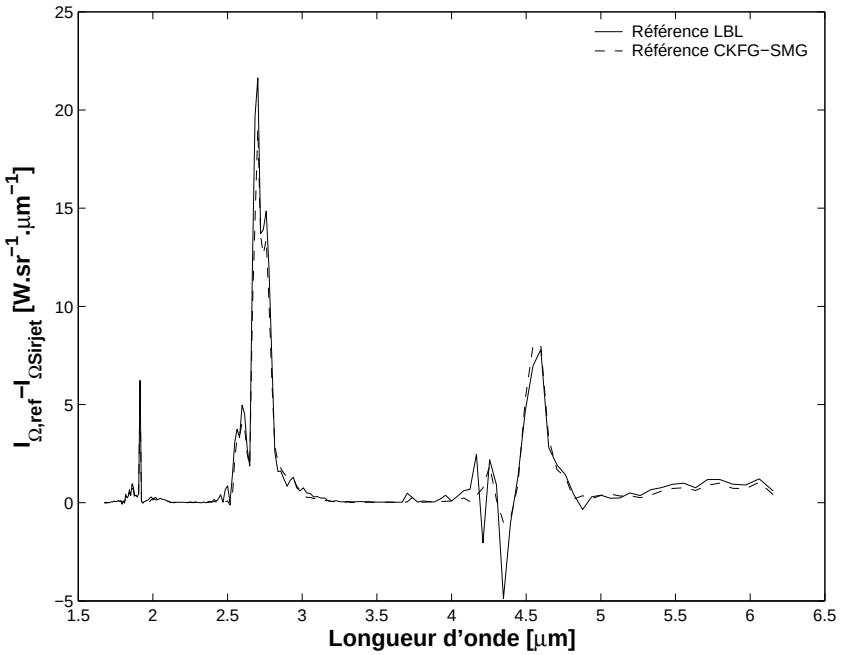


Fig. 6.12 : *Comparaison entre les erreurs absolues commises entre Sirjet et les calculs de référence pour le cas test des couches de gaz.*

La configuration des trois couches de gaz est utilisée dans ce cas test supplémentaire en tenant compte de l'absorption par une atmosphère lors du trajet du rayonnement depuis les couches émissives jusqu'au détecteur. Le même type de comparaison a été entrepris mais avec cette fois un détecteur positionné à 200m des couches. Le rayonnement émis par les couches est ainsi atténué par l'atmosphère à 300K constitué de X_{H_2O}=0.02 et X_{CO_2}=370ppm. Comme précédemment, les intensités de référence sont calculées avec le modèle LBL et le modèle CKFG-SMG (paramétré avec le LBL) pour un milieu mono-dimensionnel constitué de trois couches gazeuses. Les luminances sortantes des couches plan-parallèles issues des calculs de références sont multipliées par la surface apparente des couches de gaz (S=0.5m^2) afin d'obtenir une intensité de référence (I_Ω de référence en $W \cdot \mu m^{-1} \cdot sr^{-1}$]).

Les comparaisons entre les intensités de référence LBL et CKFG-SMG et l'intensité calculée avec Sirjet (CKFG-SMG tabulé) sont représentées sur la figure 6.13. La figure 6.13 montre un spectre très atténué dans les fenêtres spectrales 2.5-2.8μm (absorption par H_2O et CO_2) ainsi qu'à 4.3μm (absorption par CO_2). Les erreurs absolues sont données sur la figure 6.14 pour mieux quantifier les erreurs entre les calculs de Sirjet et ceux de références. Dans ce cas test, autour de 4.5μm l'erreur commise est inférieure à 5% dans une bande étroite.

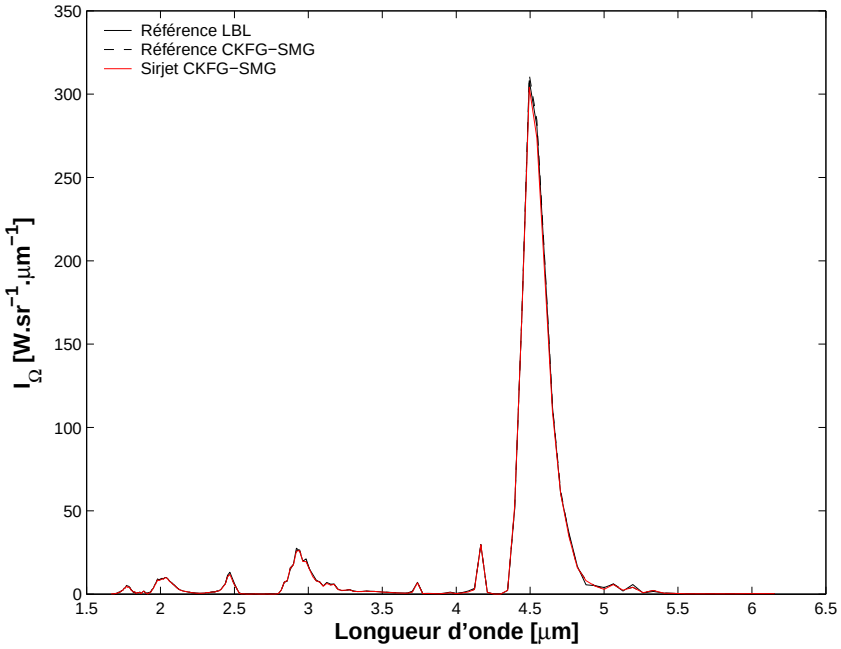


Fig. 6.13 : *Comparaison entre les intensités I_Ω de référence et celle calculée par Sirjet pour le cas test des couches de gaz avec R=200m.*

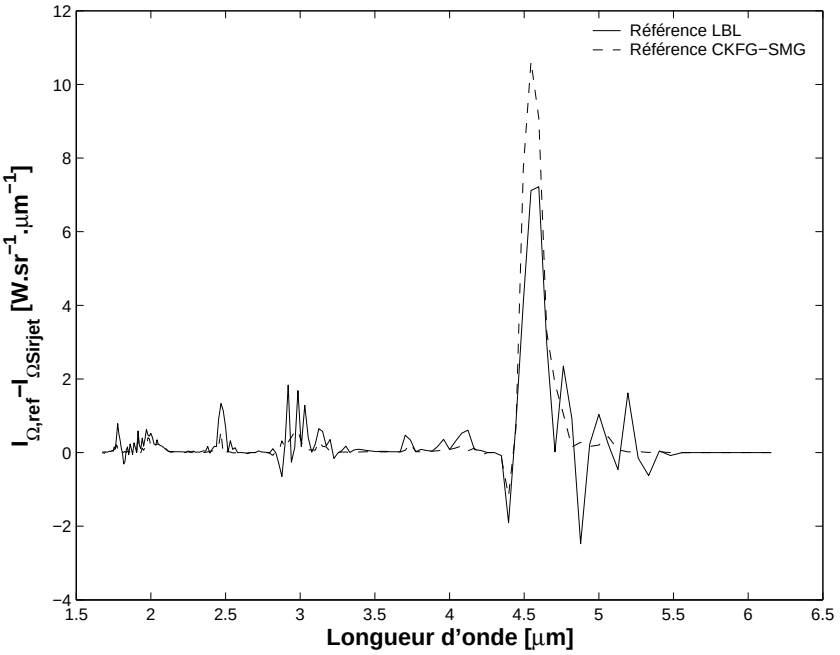


Fig. 6.14 : *Comparaison entre les erreurs absolues commises entre Sirjet et les calculs de référence pour le cas test des couches de gaz avec R=200m.*

Les résultats d'un dernier cas sont donnés pour une configuration de trois couches de gaz entourées par une atmosphère. Cette fois, la distance du détecteur est fixée à 13.3m des couches afin de reproduire la distance du détecteur existante dans les mesures effectuées au CEAT. Les spectres de référence sont représentés sur la figure 6.15 et les erreurs absolues sont tracées sur la figure 6.16. Encore, pour ce dernier cas test, l'erreur commise reste en-dessous de 5% dans une bande étroite.

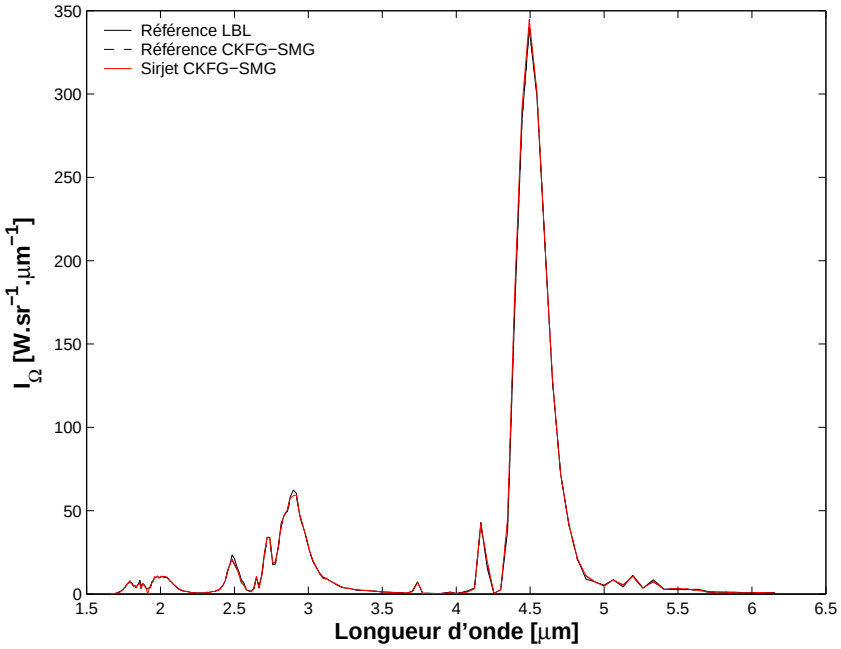


Fig. 6.15 : *Comparaison entre les intensités I_Ω de référence et celle calculée par Sirjet pour le cas test des couches de gaz avec R=13.3m.*

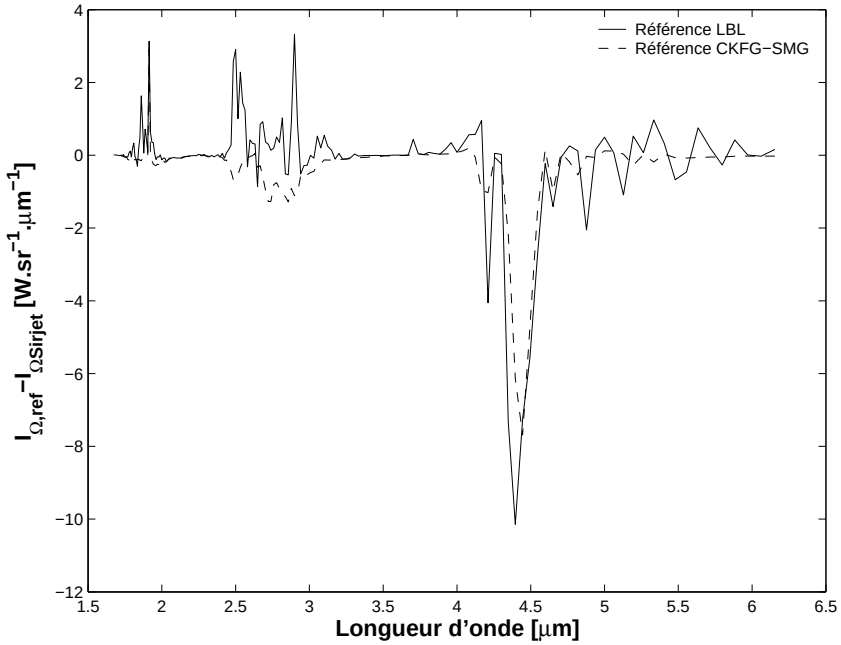


Fig. 6.16 : *Comparaison entre les erreurs absolues commises entre Sirjet et les calculs de référence pour le cas test des couches de gaz avec R=13.3m.*

La vérification du modèle radiatif inclus dans Sirjet donnant des résultats satisfaisants, il est maintenant possible de comparer les résultats d'une modélisation complète de l'émission du rayonnement d'un jet avec une mesure expérimentale.

6.4 Comparaison modèle-expérience

Dans cette section, les résultats de différentes mesures pendant la combustion d'un objet pyrotechnique sont montrés dans un premier temps. Ensuite, les conditions aux limites d'une simulation Fluent sont énoncées et les résultats en termes de champs aérothermochimiques sont exposés. Enfin, une confrontation entre une mesure spectroradiométrique et un spectre d'intensité résultant d'une simulation du rayonnement émis avec Sirjet est discutée.

Avant la présentation des résultats expérimentaux, il est utile de rappeler que la démarche de cette comparaison a été développée pour un type de leurre différent de celui présenté dans ce chapitre. En effet, l'étude porte sur des leurres classifiés alors que le leurre utilisé pour la comparaison est déclassifié.

6.4.1 Présentation des résultats expérimentaux

Une campagne d'essais au CEAT dans la soufflerie Rafales a permis de collecter des mesures expérimentales sur la combustion d'un objet pyrotechnique. La combustion de l'objet pyrotechnique est réalisée dans un écoulement d'air à grande vitesse dont l'évolution au cours du temps est mesurée et représentée sur la figure 6.17.

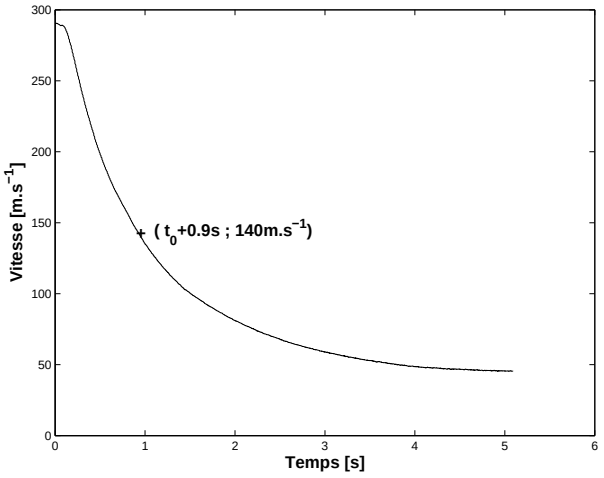


Fig. 6.17 : *Evolution temporelle de la vitesse de la rafale incidente sur l'objet pyrotechnique (données CEAT).*

A un instant t_0+0.9s, la vitesse mesurée est approximativement 140m$\cdot s^{-1}$ (voir Fig. 6.17). A cet instant quatre types de mesures ont été réalisées :

1. une image visible enregistrée par une caméra sensible dans le domaine du rayonnement visible,
2. une image infrarouge enregistrée par une caméra sensible dans le domaine de rayonnement infrarouge (AGEMA 900),
3. un spectroradiogramme enregistré par un spectroradiomètre (HGH) (cf. Annexe G),

L'image, dans le domaine du rayonnement visible, du leurre en combustion dans l'écoulement, est donnée sur la figure 6.18. Au même instant, l'image infrarouge donnée sur la figure 6.19 représente des contours de plusieurs niveaux de température équivalente corps noir. De plus, le spectroradiogramme mesuré est tracé sur la figure 6.20 et les fenêtres de couleurs délimitent les parties du spectre mal enregistrées. Autour de 2.5μm et vers 4μm, des défauts de filtres sont à l'origine de la perte du signal.

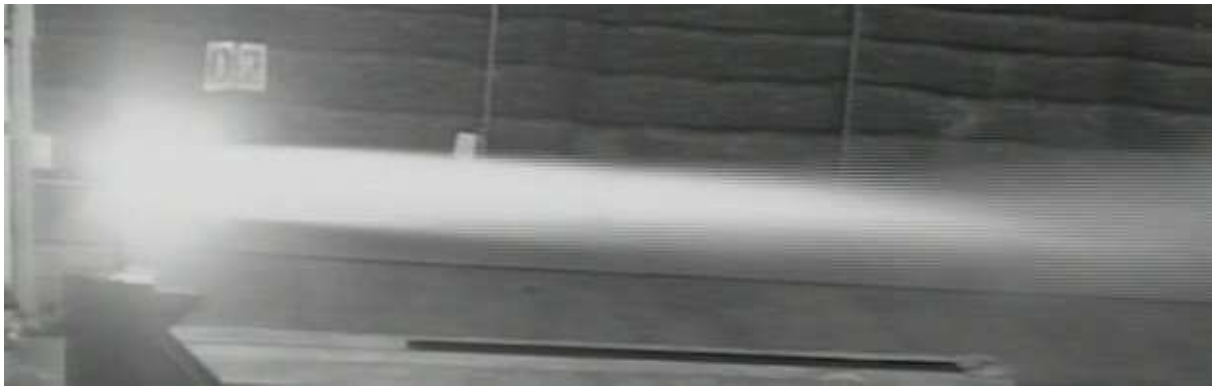


Fig. 6.18 : *Image visible prise à t_0+0.9s de la combustion d'un objet pyrotechnique dans une rafale à 140 m·s^{-1}.*

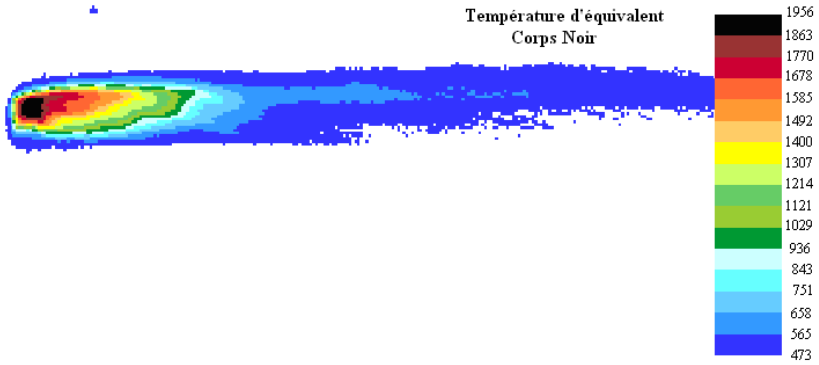


Fig. 6.19 : *Contour de température équivalente corps noir d'une image infrarouge prise à t_0+0.9s de la combustion d'un objet pyrotechnique dans une rafale à 140 m·s^{-1}.*

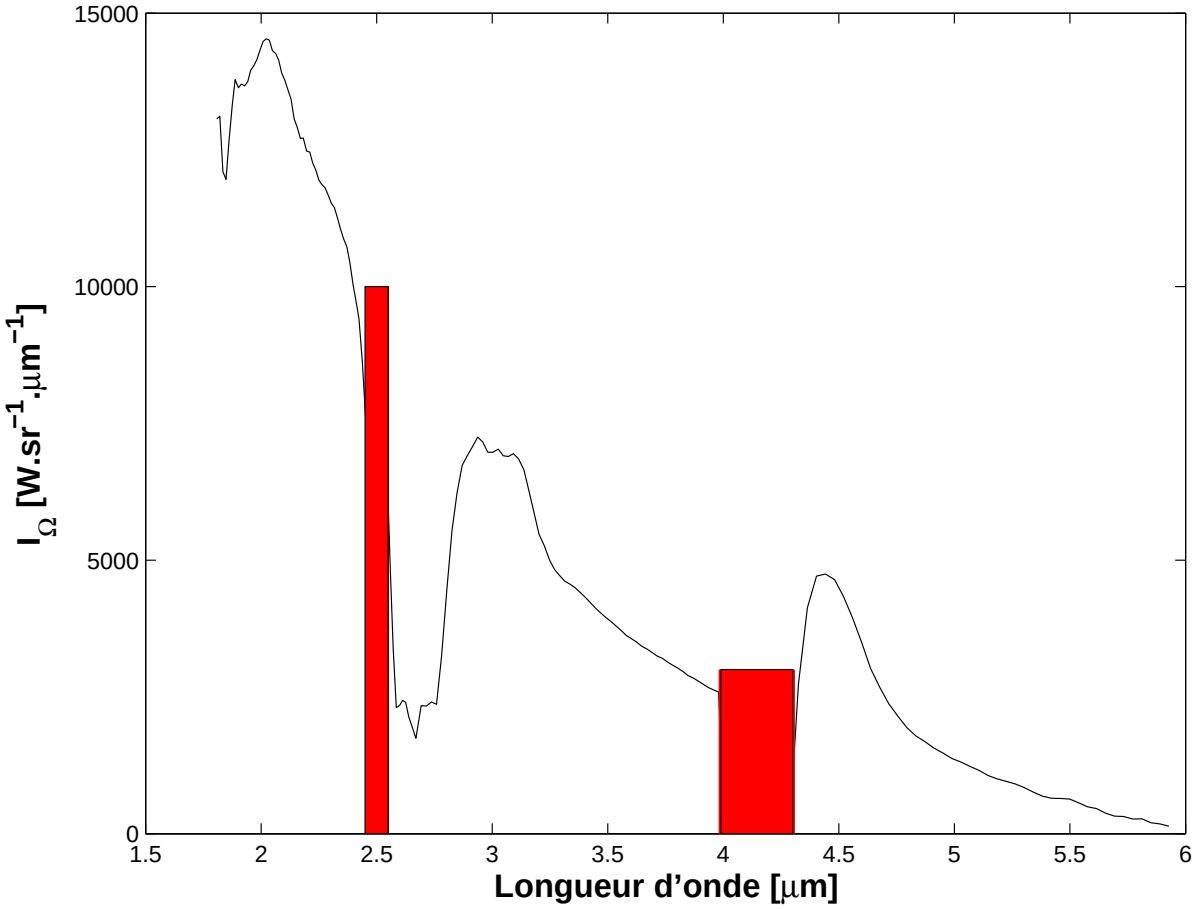


Fig. 6.20 : *Spectroradiogramme global à t_0+0.9s de la combustion d'un objet pyrotechnique dans une rafale à 140 m·s^{-1}. Les fenêtres de couleurs délimitent des parties mal représentées du spectre de la signature infrarouge (défaut du filtre).*

6.4.2 Présentation des résultats des simulations

La configuration choisie pour la simulation effectuée par le logiciel Fluent doit être comparable à la situation réelle. Lors de la mesure au CEAT, le bloc pyrotechnique est maintenu par un support dans l'axe du jet. Ceci nécessite une simulation du jet et du support en trois dimensions. Cependant, compte tenu des vitesses autour de l'obstacle et par conséquent de la finesse du maillage requis et des temps de calcul induits, la géométrie 2D axisymétrique des simulations Fluent permet d'avoir un nombre de maille et des temps de calcul raisonnables. Le domaine de calcul ainsi que le maillage non structuré (triangles) sont représentés sur la figure D.1 de l'annexe D. Cette géométrie et les conditions aux limites adoptées pour la simulation du jet sont schématisées en annexe sur la figure 6.21.

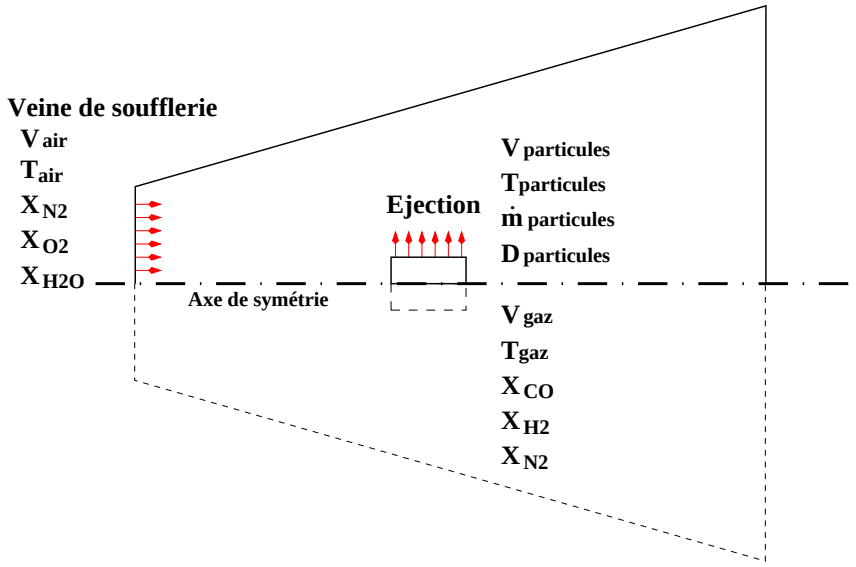


Fig. 6.21 : *Géométrie axisymétrique adoptée pour la simulation de l'écoulement diphasique.*

Le bloc pyrotechnique est placé au centre de l'écoulement d'air à grande vitesse créé par la soufflerie du CEAT. Le bloc est placé sur l'axe de symétrie et comporte une éjection de gaz et de particules à hautes températures. Les gaz et les particules éjectés à la surface du bloc sont supposés être les produits résultant de la combustion du matériau pyrotechnique. La composition des produits est calculée en utilisant le logiciel Coppelia. Le matériau pyrotechnique est composé de magnésium, de résine polyester et de Teflon. Les résultats des calculs de thermodynamique à l'équilibre effectués par Coppelia donnent les espèces et leurs fractions massiques produites par la combustion en milieu non-oxydant. Si on suppose que le carbone solide produit s'oxyde totalement en CO, les espèces et leurs débits sont donnés dans le tableau 6.1. De plus, la température de la réaction calculée par Coppelia est de 2130K.

Tab. 6.1 : *Débits massiques des espèces supposées éjectés par le bloc à t_0+0.9s.*

Espèces	Débits massiques [kg.s^{-1}]
CO	0.0475
H_2	0.000372
MgF_2(l)	0.0712
Mg(s)	0.0494

Le gaz primaire éjecté par le bloc est donc composé de CO et de H_2. Ce gaz constitue le combustible dans le modèle de flamme non-prémélangée de Fluent. Le débit de combustible éjecté est alors la somme des débits de CO et H_2. Le comburant, par contre, entre par

Tab. 6.2 : *Facteurs d'efficacité d'absorption ("émissivités") pour m=1.732-i·k et pour plusieurs diamètres D.*

k	Diamètre D [μm]				
	1.0E-7	1.0E-6	5.0E-6	1.0E-5	1.0E-4
1.0E-5	2.1E-6	5.5E-5	4.6E-4	8.6E-4	5.3E-3
0.01	2.1E-3	0.054	0.334	0.472	0.899
1.0	0.188	1.576	1.219	1.044	0.810

la veine de la soufflerie et est constitué d'air (78% molaire de N_2, 21% O_2) contenant 1% molaire de H_2O. La vitesse et la température de l'air à la sortie de la veine de la soufflerie sont fixées respectivement à 140m·s^{-1} et 300K. Les gaz produits par la combustion du matériau pyrotechnique réagissent avec l'oxygène de l'air.

Les gaz générés par la combustion du matériau pyrotechnique constituent l'écoulement porteur pour les particules se détachant du bloc. Le débit massique total de la phase dispersée est supposé être la somme des espèces condensées, MgF_2(l) et Mg(s), données par Coppelia (Tab. 6.1). De plus, toutes les particules sont supposées être de la même nature et avoir un indice de réfraction fixé à 1.732-i10^{-2}. La partie réelle de cet indice correspond à du MgO et la partie imaginaire est fixée égale à 10^{-2} de manière arbitraire. Les facteurs d'efficacité d'absorption (émissivités), intégrés sur tout le spectre et pondérés par la luminance de Planck (Eq. 5.21), sont données dans le tableau 6.2 pour des particules ayant une partie réelle de l'indice de réfraction égal à 1.732 avec trois valeurs la partie complexe et pour différents diamètres.

Une hypothèse supplémentaire est faite concernant la granulométrie des particules. Les particules sont considérées sphériques et de même diamètre égal à 5μm (monodispersion). Leur température à l'éjection est supposée la même que celle du gaz à savoir 2130K. La vitesse des particules à l'éjection est prise égale à 1m·s^{-1} comme mesurée dans [13].

Après convergence de la simulation Fluent les champs de températures, de concentrations en CO, CO_2 et H_2O ainsi que la fraction volumique en particules (D=5μm) sont sauvegardés pour être lus par Sirjet. Ces champs sont représentés en Annexe D dans les figures D.1 à D.11. Les champs utiles à Sirjet sont alors interpolés depuis Fluent sur un maillage structuré régulier (cubes de 1cm de côté) et sont donnés en Annexe E sur les figures E.1 à E.10.

Une fois les champs aérothermochimiques connus dans Sirjet, la position et l'angle de visée du détecteur doivent être renseignés. Comme durant l'expérience, le détecteur est positionné, dans Sirjet, à 13.3m avec un angle θ=90° et il vise dans un angle 2α=20° le point Z_0=1.8m. La représentation schématique de cette visée est donnée sur la figure 6.22. De plus, l'émissivité et la température du bloc pyrotechnique nécessaires au calcul du rayonnement émis par le bloc sont fixés à ϵ_b=1 et T=2130K. Le cône de visée est discrétisé

en 220*50=11000 angles solides élémentaires puisque le plan Y=Ymin est constitué de carré de 1cm de côté.

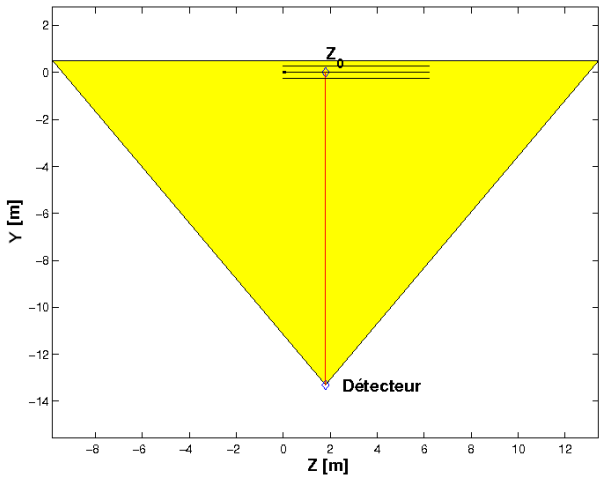


Fig. 6.22 : *Schématisation de la position et de l'angle de visée du détecteur.*

Les entrées du modèle radiatif étant connus, le calcul de la signature infrarouge peut maintenant être réalisé. Le spectre de l'intensité I_Ω résultant de la simulation Sirjet du rayonnement émis par le jet est représenté sur la figure 6.23. La comparaison entre le spectre simulé par Sirjet et celui mesuré est réalisée dans le paragraphe suivant.

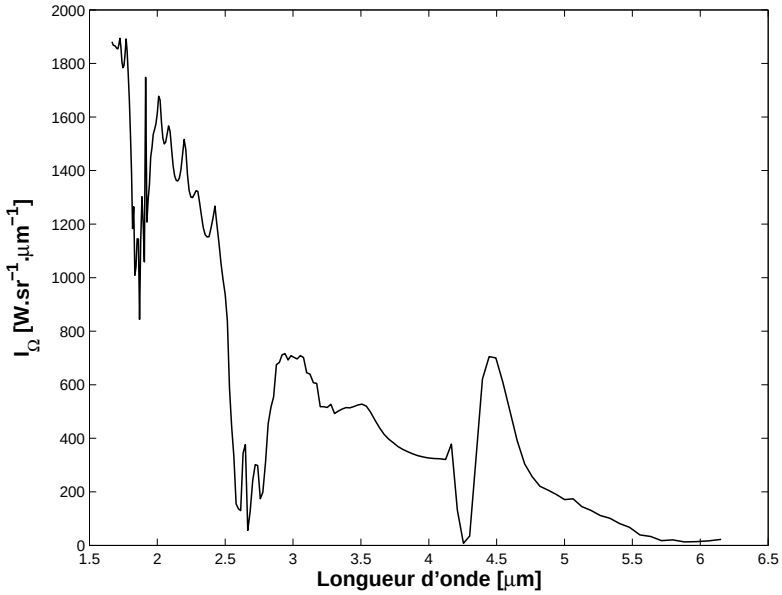


Fig. 6.23 : *Spectre de l'intensité I_Ω résultant de la simulation Sirjet.*

Le spectre de la figure 6.23 a été obtenu en utilisant le modèle spectral CKFG-SMG. Le même spectre a été obtenu en utilisant le modèle spectral CKFG et leur comparaison donnée sur la figure 6.24, montre que les deux spectres concordent avec une très bonne

bonne précision puisque la différence entre les deux spectres est inférieure à 3% dans une bande étroite.

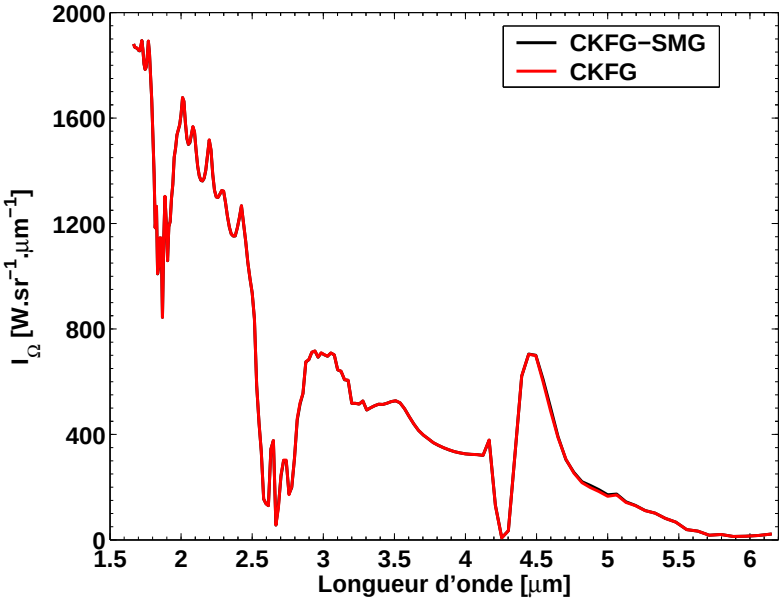


Fig. 6.24 : *Comparaison des spectres simulés avec les méthodes CKFG-SMG et CKFG.*

En ce qui concerne la comparaison des temps de calcul liés aux deux modèles spectraux, le tableau 6.3 ci-après montre que le CKFG-SMG est plus rapide que le CKFG d'un facteur 2.4.

Tab. 6.3 : *Comparaison des temps de calcul de sirjet avec deux modèles spectraux de télédétection infrarouge.*

CKFG	CKFG-SMG
41	17

Il est utile de rappeler que dans un contexte industriel le critère de rapidité de temps de calcul est important. En effet, si l'on dispose d'une nouvelle méthode plus rapide lors d'étude de sensibilité alors un plus grand nombre de calcul peut être réalisé et donc un plus grand nombre de résultat est obtenu.

6.4.3 Confrontation modèle-expérience

La figure 6.20 donne le spectre mesuré et la figure 6.23 donne celui simulé par Sirjet. On donne aussi, la comparaison du spectre mesuré avec celui simulé sur la figure 6.25

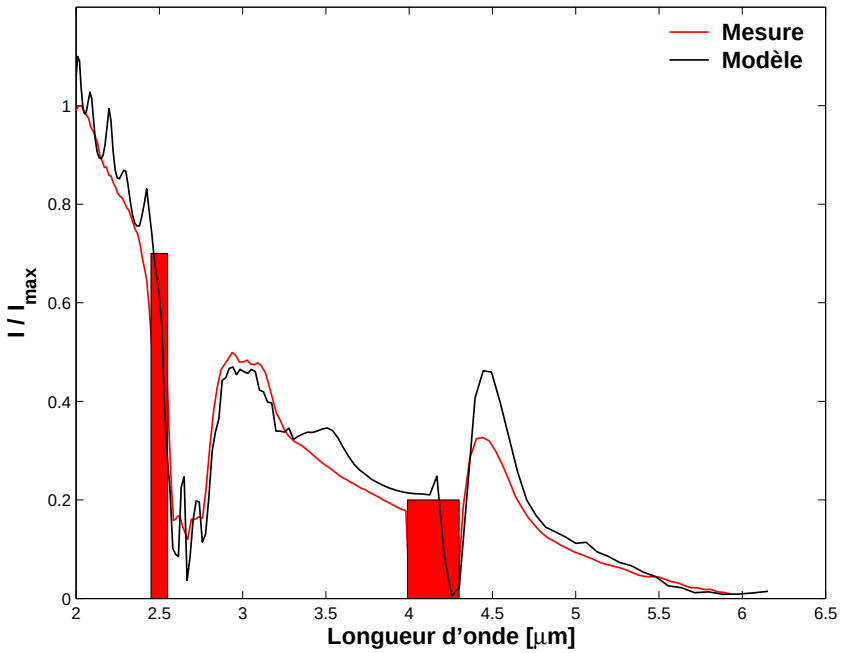


Fig. 6.25 : *Comparaison des spectres d'intensité I_Ω adimensionnés résultant de la simulation Sirjet et de la mesure.*

où les deux spectres sont adimensionnés par leurs valeurs respectives à 2μm. De cette manière, il est possible de comparer leur allure en relatif.

Globalement, l'allure du spectre mesuré coïncide jusqu'à 3.3μm avec celle du spectre simulé. Cependant, entre 3.5μm et 4μm le spectre calculé par Sirjet donne une intensité spectrale supérieure à celle mesurée. Ceci peut s'expliquer par une émissivité spectrale des particules réelles qui n'est pas correctement simulée. On rappelle que l'émissivité du nuage de particules dépend de la granulométrie, de la fraction volumique et du spectre de l'indice de réfraction. D'ailleurs, l'hypothèse de la monodispersion sphérique est responsable de la structure oscillante observée entre 2 et 2.5μm. En effet, si une polydispersion est choisie, l'allure du spectre de l'intensité sera plus lisse. De plus, vers 4.5μm l'allure des deux spectres ne coïncide plus. Sirjet surestime l'émission due à CO_2 et aux particules par rapport à l'émission mesurée dans cette bande (4.3-4.7μm).

L'intensité absolue mesurée à 2μm est de l'ordre de 15000 W·sr^{-1} · μm^{-1} tandis que celle simulée par Sirjet n'est que de 1600 W·sr^{-1} · μm^{-1}. Le facteur ≈9 existant entre la mesure et la simulation est indépendant du modèle radiatif (i.e., l'erreur liée à la tabulation du CKFG-SMG est faible, de l'ordre du pourcent). Par contre, l'erreur dépend de la modélisation des champs de températures et de concentrations des gaz et des particules. Les hypothèses considérées dans la simulation Fluent ne sont pas adaptées à la modélisation de la combustion de l'objet pyrotechnique mesuré.

En effet, le débit et la vitesse des gaz et des particules lors de l'éjection peuvent être différents et influencés les profils. De plus, il est probable que les particules réagissent

dans le jet et que leurs températures augmentent. Aussi, concernant la simulation de la dispersion des particules il a été considéré une monodispersion de particules. Cette hypothèse conduit à concentrer les particules dans le jet à des positions qui sont liées à la taille de ces particules. Par contre, si une granulométrie avait été prise en compte, notamment avec des particules de diamètre supérieur à 5μm, la surface apparente du jet serait augmenté et la signature plus intense.

Cependant, une source d'erreur importante peut être liée à la géométrie utilisée dans la simulation Fluent. Cette géométrie a été choisie axisymétrique et elle ne comporte donc pas le support du bloc. Ce support provoque une perte de charge sous le bloc et crée une dépression. Ainsi, les profils de vitesses sont différents entre la réalité et la simulation. Le jet axisymétrique simulé avec Fluent n'est donc pas directement comparable au jet réel. En effet, le support provoque une perte de charge importante qui créée une zone de faible vitesse plus étendue que celle simulée par Fluent. Les particules éjectées du bloc se concentrent dans cette zone du jet à haute température. De plus, pour ce type de leurre, comme le jet est très chargé en particules, une augmentation de l'étendue du jet provoque une augmentation de l'émission qui est principalement due au particules. En effet, au CEAT, les particules occupent une plus grande surface apparente que dans l'écoulement simulé par Fluent.

Si on avait modélisé le jet 3D avec le support, compte tenu des vitesses d'écoulement, le maillage aurait été trop important et les temps de calcul trop longs. A titre d'illustration l'image thermographique du jet mesuré et une coupe axiale de la température du jet donnée par Fluent sont comparées en terme d'étendue spatiale sur la figure F.1 de l'annexe F. Il apparaît clairement que la surface apparente du jet est bien supérieure dans le cas de la thermographie. De plus, comme le jet est très chargé en particules, il rayonne comme un corps gris. D'où l'importance que prend une détermination correcte de l'étendue spatiale du jet. Cette détermination passe par la prise en compte de la géométrie réelle en trois dimensions. De cette façon, les profils de température et de fraction volumique en particules dans le jet pourraient être plus proche de ceux mesurés.

Néanmoins, bien qu'une différence existe, dans la confrontation présentée, entre la mesure et la simulation, la démarche s'applique en totalité pour la confrontation avec d'autres leurres. En effet, le leurre donné en exemple dans cette partie n'a pas fait l'objet d'une étude approfondie alors que la démarche a été développée pour des leurres classifiés. Pour ces autres leurres, les résultats des simulations sont très proches des mesures (erreur$<$10%).

6.5 Conclusion

Nous avons présenté les modèles pour l'écoulement diphasique réactif utilisés par le logiciel de simulation Fluent. De nombreuses hypothèses simplificatrices ont été exposées concernant les conditions aux limites, les réactions chimiques et l'écoulement des gaz et

des particules.

Ensuite, le modèle de transfert radiatif permettant le calcul de la signature infrarouge d'un jet diphasique a été décrit. De plus, une interface graphique, Sirjet, a été présentée. Elle permet de relier les profils aérothermochimiques Fluent avec le modèle radiatif dans un cas de télédétection que l'utilisateur doit configurer.

La démarche d'utilisation de ces outils et modèles a été illustrée dans une confrontation entre une simulation et une mesure de signature infrarouge. Cependant, l'approche développée durant cette étude a été basée sur des leurres classifiés différents de celui présenté dans le document public. Les résultats relatifs aux leurres classifiés ont été transmis à la société Lacroix et ont fait l'objet d'une étude à part.

Dans cette comparaison, il est apparu que les signatures infrarouges n'avaient pas le même niveau. Une discussion sur l'origine de cette différence a été proposée. En effet, le jet étudié étant très opaque, l'influence de la surface apparente du jet est importante. Dans cette confrontation qui illustre l'utilisation de Sirjet, il est apparu que les champs aérothermochimiques étaient mal représentés notamment à cause des hypothèses simplificatrices (monodispersion de particules, etc.) de la simulation et celles sur les réactions chimiques dans le jet.

La plupart des étapes constituant la démarche de l'étude réalisées durant la thèse ayant été présentées, la conclusion générale ainsi que les perspectives à cette étude vont être données.

7

Conclusion générale et perspectives

Sommaire

7.1 Conclusion générale 141

7.2 Perspectives 143

7.1 Conclusion générale

Cette étude présente une modélisation de la signature infrarouge d'un jet diphasique réactif en situation de télédétection.

La signature infrarouge dépend de nombreux paramètres tels que les conditions thermophysiques et les propriétés radiatives des gaz et des particules.

Pour mieux comprendre les phénomènes physiques se produisant soit durant la combustion du matériau pyrotechnique, soit dans le jet, une campagne d'essais a été menée au CEAT et une autre dans le laboratoire PROMES. Ces deux types de campagnes expérimentales ont mis en évidence la présence des gaz H_2O, CO_2 et CO dans les produits de combustion. Ces essais nous ont permis de rassembler des données inexistantes auparavant dans le but de constituer notre propre base de connaissances sur les phénomènes physiques se produisant lors de la combustion et de l'émission de rayonnement.

La nature et les conditions thermophysiques des gaz et des particules ne suffisent pas à la modélisation du rayonnement émis par un jet diphasique. Il faut aussi connaître, avec une bonne précision, les propriétés radiatives des gaz et des particules.

En ce qui concerne les gaz, des bases de données spectroscopiques contiennent les informations utiles au calcul de spectres synthétiques caractérisant leur rayonnement. Dans cette étude, la base de données spectroscopiques choisie pour H_2O a été fournie par l'ONERA. CDSD1000 a été utilisée pour CO_2 et HITEMP pour CO. Pour tracer les spectres d'absorption des gaz, un code de référence, raie-par-raie, a été développé et validé en le confrontant à des mesures expérimentales.

La résolution spectrale du raie-par-raie étant très fine, le temps de calcul associé à ce modèle n'est pas envisageable dans ce type d'application industrielle. C'est pourquoi, un modèle de bandes étroites a été développé pour calculer une signature infrarouge en situation de télédétection. De cette manière, plusieurs modèles ont été tabulés et ces bases de données ont été comparées à des calculs de référence afin d'être validées. D'une part, les modèles classiques, CK et CKFG, faisant intervenir chaque gaz, H_2O, CO_2 et CO ont été tabulés. D'autre part, deux modèles, CK-SMG et CKFG-SMG, ont été tabulés et validés et les limites de l'approximation de gaz unique pour le mélange ont été étudiées. Ces modèles font intervenir un seul gaz de mélange composé de raies issues de H_2O, CO_2 et CO. Comme cette approximation a pour fonction de diminuer le nombre de gaz, le temps de calcul est diminué par le même facteur. Mais, cette approximation diminue la précision dans les zones spectrales de recouvrement des gaz. C'est pourquoi, une étude de la précision a été menée dans ce manuscrit montrant que dans les configurations testées, soit l'erreur est négligeable (comme c'est le cas pour des configurations réalistes de télédétection), soit l'erreur relative intégrée sur la fenêtre de recouvrement reste inférieure à 15% comme indiqué au paragraphe 4.7.3 (cas d'école). Notre choix s'est alors porté vers le modèle CKFG-SMG pour le modèle radiatif. En effet, les modèles CK et CK-SMG sont plus appropriés pour le calcul de transfert radiatif dans les milieux en combustion où la transmission atmosphérique sur de longs trajets n'est pas considérée. De plus, compte tenu des erreurs négligeables engendrées par le CKFG-SMG par rapport au CKFG, et de sa rapidité, il a été retenu pour constituer le modèle spectral du modèle radiatif de télédétection d'une signature infrarouge d'un jet diphasique.

En ce qui concerne les propriétés radiatives des particules contenues dans le jet, une approche utilisant la théorie de Mie pour des particules sphériques uniformes ou enrobées, a été utilisée. Les particules ont donc été supposées sphériques et de composition uniforme. Les phénomènes de diffusion et d'absorption dépendantes ont été négligés ainsi que les effets de la polarisation. Afin d'étudier l'influence de la diffusion dans ce type d'application, une étude de sensibilité a été menée afin de connaître son influence sur le rayonnement émis par une couche plan-parallèle à propriétés uniformes composées de gaz et de particules. L'étude paramétrique a montré l'influence des processus de diffusion sur l'émission d'un flux par une couche et nous a conduit à négliger les phénomènes de diffusion dans le calcul de la signature infrarouge.

Pour le calcul d'une signature infrarouge et plus particulièrement les propriétés radiatives des gaz et des particules dans le jet, la connaissance des champs de concentrations et de températures est nécessaire afin de disposer des conditions thermophysiques de chaque espèce du mélange diphasique en chaque point de l'espace. Comme la modélisation de l'écoulement diphasique réactif n'est pas directement l'objet de l'étude, nous avons reconstitué des profils d'espèces rayonnantes et de températures proches d'une situation de combustion pyrotechnique à l'aide du logiciel Fluent.

Nous avons alors d'un côté les champs aérothermochimiques calculés par Fluent, et de

l'autre les propriétés spectrales de chaque gaz et des particules. Le lien entre ces données a été réalisé par l'intermédiaire d'une interface graphique, Sirjet. Le modèle radiatif de Sirjet a été validée dans une configuration de visée d'un corps noir et dans une configuration de visée d'un milieu composé de plusieurs couches de gaz. Cette interface a été développée pour que la société Lacroix dispose d'un outil précis et convivial pour simuler des signatures infrarouges dans des configurations de télédétection. Cette interface graphique permet le chargement des champs aérothermochimiques et la configuration de la scène de télédétection (définition de l'angle de visée et de la position du détecteur). Toutes ces données sont alors couplées à un modèle de transfert radiatif. Les résultats spectraux qui ont été obtenus par la simulation peuvent alors être comparés aux résultats expérimentaux. Dans ce manuscrit, le résultat expérimental utilisé dans la confrontation entre le modèle et l'expérience représente une mesure effectuée sur un jet de leurre déclassifié. Bien que ce type de jet comporte des différences avec ceux rencontrés dans notre étude, la démarche de simulation de la signature infrarouge, développée durant la thèse, lui a été appliquée. Bien qu'il existe un écart de niveau dans la confrontation présentée entre la simulation et la mesure, lorsque la même démarche est appliquée aux leurres classifiés (pour qui l'étude est réalisée) les écarts sont très faibles (<10%).

7.2 Perspectives

L'approche, présentée dans cette étude, permet une compréhension des phénomènes ou des grandeurs qui influencent l'émission et l'absorption par des gaz et des particules. En effet, les processus et les grandeurs responsables de la signature infrarouge d'un jet diphasique, vont être étudiés au-travers d'une étude de sensibilité sur les paramètres d'entrée de Sirjet.

La création de Sirjet a mis en évidence le besoin de renforcer la connaissance des différents paramètres d'entrée de la simulation. Ceci amène naturellement à un développement des processus métrologiques mis en œuvre au sein de la société lors de l'observation de la combustion des systèmes pyrotechniques. Par exemple, une collecte de particules pourra être réalisée in-situ. Il sera alors possible d'étayer notre base de connaissances concernant l'influence des particules sur la signature infrarouge.

L'outil de simulation de la signature infrarouge utilise des champs aérothermochimiques comme données d'entrée. La détermination de ces champs constitue un axe principal devant motiver de futures études. Les incertitudes sur les espèces produites par la combustion du matériau pyrotechnique ainsi que leur débit devront, d'une part, faire l'objet d'une étude approfondie. D'autre part, l'influence de l'écoulement pourra être testée en prenant en compte une géométrie 3D pour les calculs Fluent. De plus, les processus de combustion se produisant dans le jet devront aussi être détaillés pour mieux comprendre les valeurs des profils de températures et de concentrations. La simulation des profils aérothermochimiques pourrait alors faire l'objet d'une étude à part entière incluant la

modélisation de la combustion du matériau pyrotechnique et son couplage avec l'écoulement.

Par la suite, le code raie-par-raie et les outils numériques développés comme, par exemple, les codes de tabulation des modèles approchés, pourront être utilisés afin de calculer des spectres de références ou des tabulations pour d'autres espèces actives.

En ce qui concerne les perspectives de cette étude concernant le modèle de télédétection CKFG-SMG, il sera utile de tester la précision de cette approximation avec des paramètres tabulés pour de faibles pressions. Pour l'étude du modèle de télédétection infrarouge un choix des bornes des classes de gaz fictif a été réalisé. Ce choix s'est basé sur une étude de sensibilité qui devra être approfondie. De plus, les limites du modèle CK-SMG pourront être étudiées dans des configurations classiques de combustion (e.g. chambre de combustion).

L'évolution de l'outil Sirjet vers un mode de rendu infrarouge du jet pourra s'avérer intéressante. La surface apparente tridimensionnelle du jet sera pixélisée et transformée pour créer une image comparable à celle issue d'une camera infrarouge. La transformation de l'image simulée par Sirjet dépendra de la fonction d'appareil et des caractéristiques de la caméra infrarouge utilisée pour la comparaison.

Enfin, Sirjet évoluera en fonction des besoins de la société Lacroix dans l'objectif de restituer avec fidélité et rapidité les signatures infrarouges de jets tridimensionnels en situation de télédétection.

A

Emissivités spectrales de H_2O, CO_2 et CO

Les émissivités spectrales de H_2O, CO_2 et CO ont été calculées avec le LBL à haute résolution et ensuite moyennées sur une bande étroite ($\Delta\nu$=25cm^{-1}). Les calculs ont été réalisés pour une couche de gaz homogène isotherme, à la pression atmosphérique, avec une fraction molaire de 0.1 (x_{air}=0.9) et une épaisseur de 10cm. Ces conditions sont valables pour les spectres de chaque gaz. Sur les figures A.1 et A.2, les émissivités sont données pour quatre températures 1000K, 1300, 1700 et 2000K soit en fonction du nombre d'onde (Fig. A.1) soit en fonction de la longueur d'onde (Fig. A.2). Le graphe du haut représente l'émissivité de H_2O, celui du milieu l'émissivité du CO_2 et le dernier représente l'émissivité de CO.

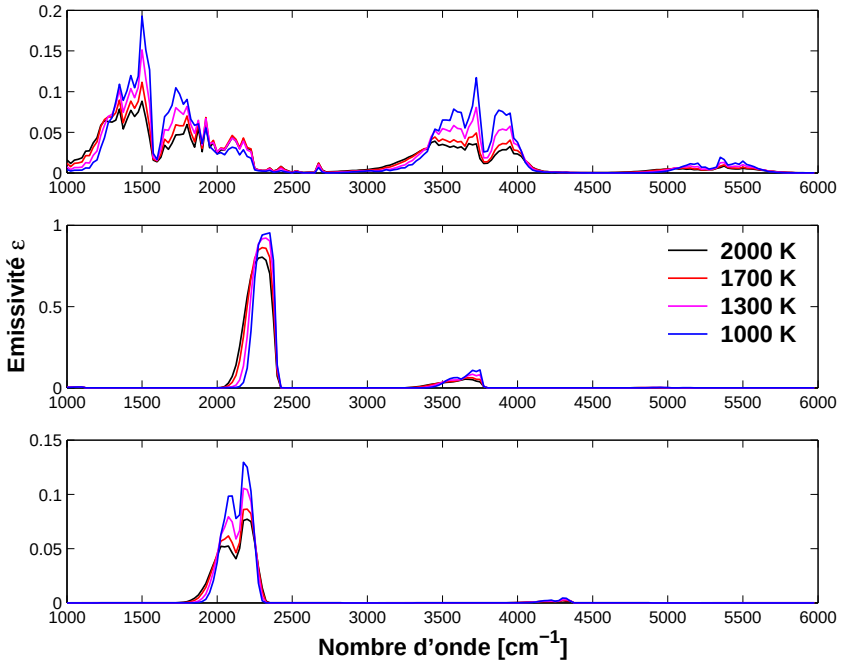


Fig. A.1 : *Emissivités spectrales de H_2O, CO_2 et CO (de haut en bas) en fonction du nombre d'onde.*

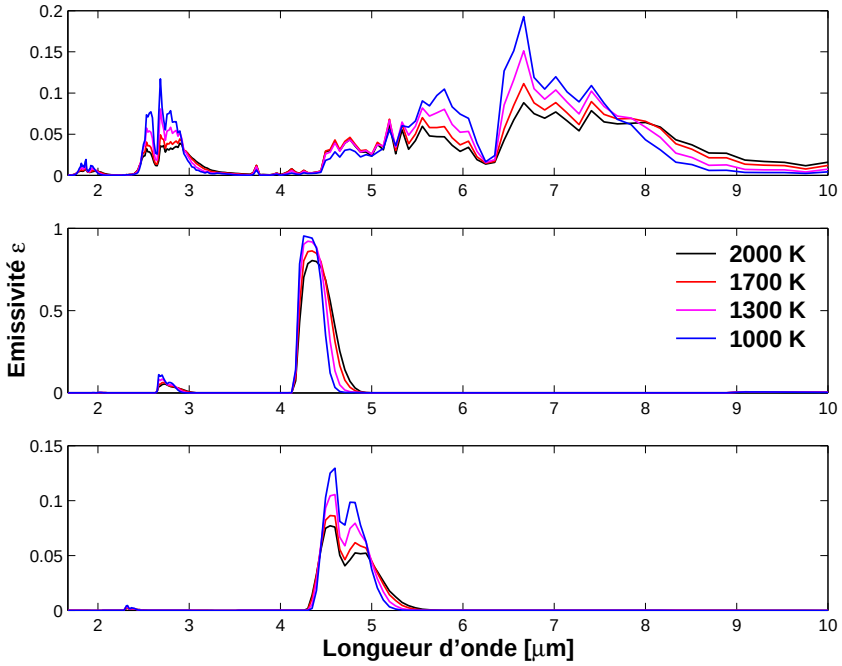


Fig. A.2 : *Emissivités spectrales de H_2O, CO_2 et CO (de haut en bas) en fonction de la longueur d'onde.*

B

Spectres de coefficient d'absorption et de diffusion de nuages de particules

Les spectres de coefficients d'absorption et de diffusion de nuages constitués de particules sont présentés dans les figures B.1-B.6. Sur chaque figure, les coefficients sont donnés pour des valeurs différentes de la partie imaginaire de l'indice réfraction et pour deux fractions volumiques : en légende, 5 signifie f_v=5.10^{-5} et 6, f_v=5.10^{-6}. Il est à noter que les traits des figures B.1-B.6 sont en pointillés (....) pour une valeur de f_v=5.10^{-6}, et en trait continus (—-) pour $f_v = 5.10^{-5}$. De plus, les courbes sont de la couleur rouge pour k=10^{-8}, bleu pour k=10^{-6}, noir pour k=10^{-4} et vert pour k=10^{-2}.

Les valeurs des propriétés optiques des nuages sont proportionnelles à la fraction volumique en particules (Eqs. 5.14-5.16). Les coefficients de diffusion pour le nuage de particule avec D=50nm et pour celui avec D=500nm ne dépendent que de la fraction volumique et pas de k (courbes superposées). Pour les faibles valeurs de diamètre, D=50nm et D=500nm, on explique l'allure des coefficients d'absorption et de diffusion en étudiant l'approximation de diffusion de Rayleigh. Cette approximation permet le calcul des facteurs d'efficacité de diffusion et d'absorption avec les formules :

$$Q_{d_\lambda} = \frac{8}{3}x^4\left|\frac{m^2-1}{m^2+2}\right|^2 \tag{B.1}$$

$$= \frac{8}{3}x^4\frac{[(n^2-k^2-1)(n^2-k^2+2)+4n^2k^2]^2+36n^2k^2}{[(n^2-k^2+2)^2+4n^2k^2]^2} \tag{B.2}$$

$$Q_{a_\lambda} = 4x\Im\left\{\frac{m^2-1}{m^2+2}\right\} \tag{B.3}$$

$$= 24x\frac{nk}{(n^2-k^2+2)^2+4n^2k^2} \tag{B.4}$$

Ces expressions expliquent d'une part l'allure du coefficient d'absorption qui est proportionnel à la partie imaginaire de l'indice de réfraction et d'autre part l'allure du coefficient

de diffusion qui dépend fortement de la partie réelle de l'indice complexe de réfraction puisque $n \gg k$. Les valeurs des coefficients de diffusion et d'absorption, pour les diamètres de particules D=50nm et 500nm, sont plus importantes dans la région spectrale des faibles longueur d'onde. En effet, les dépendances à la longueur d'onde sont données par les équations B.2 et B.4 au-travers du paramètre de taille x.

Pour des diamètres de particules plus grands, D=5μm, une structure oscillante apparaît qui traduit les effets des interférences se produisant entre le rayonnement diffusé et le rayonnement incident. De plus, une structure de rides se superpose à l'oscillation primaire (*ripple structure*, [8]). Elle est associée à des modes de surfaces résonants se traduisant par une minimisation des dénominateurs des coefficients a_n et b_n.

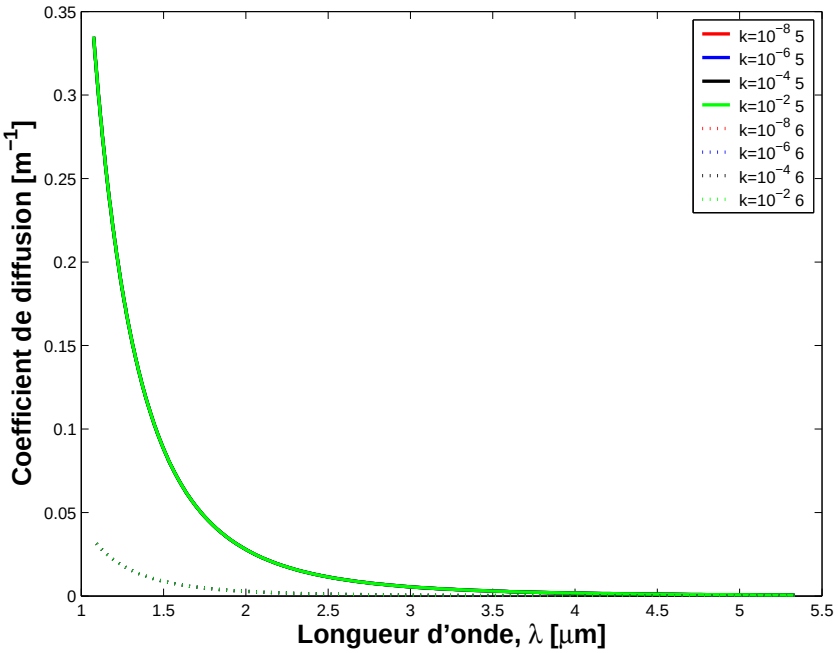


Fig. B.1 : σ_{d_λ} *pour D=50nm.*

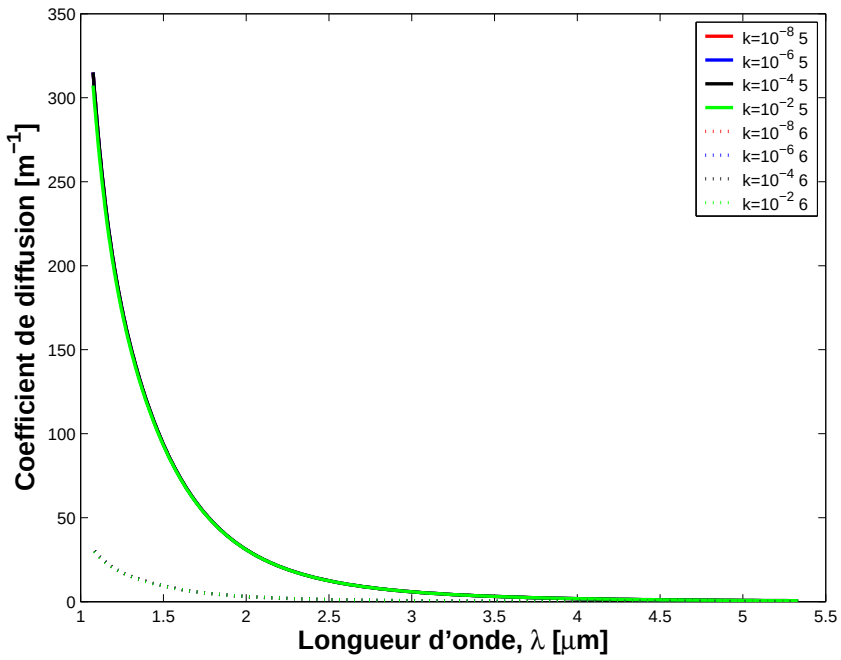


Fig. B.2 : σ_{d_λ} *pour D=500nm.*

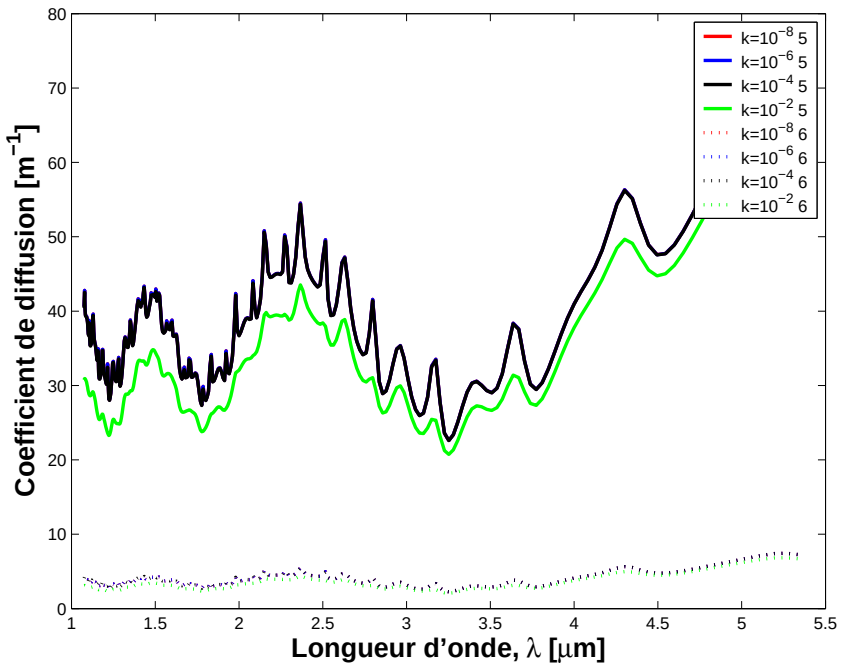


Fig. B.3 : σ_{d_λ} *pour D=5μm.*

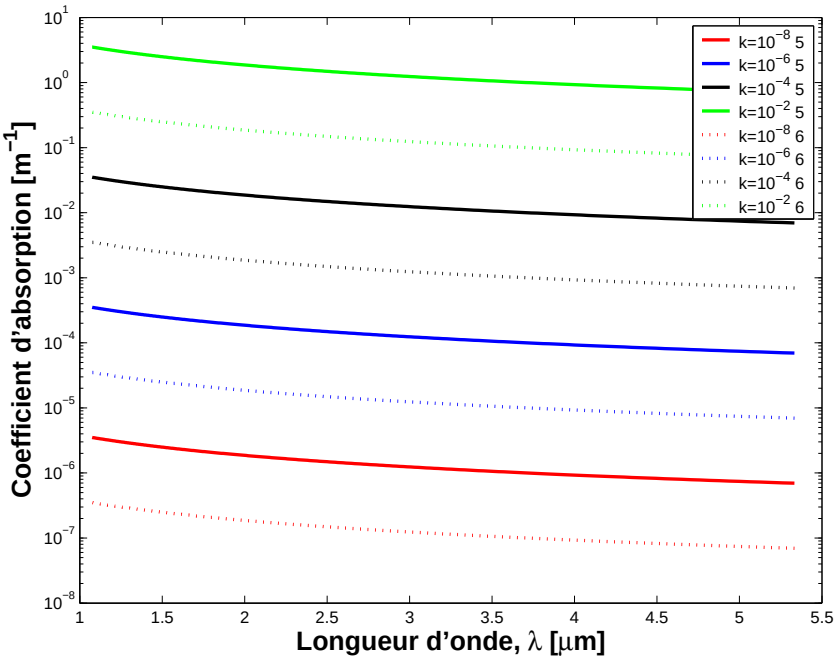


Fig. B.4 : κ_{a_λ} *pour D=50nm.*

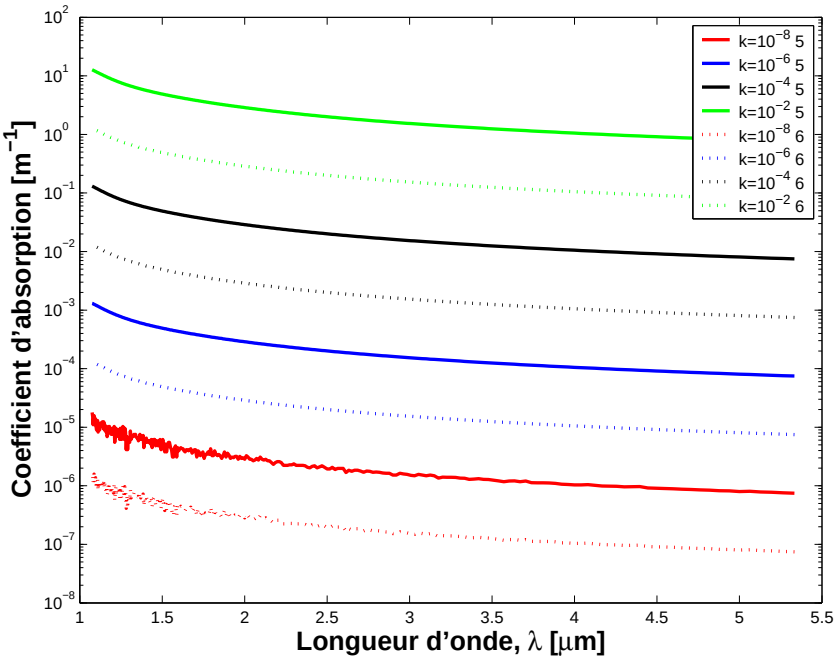


Fig. B.5 : κ_{a_λ} *pour D=500nm.*

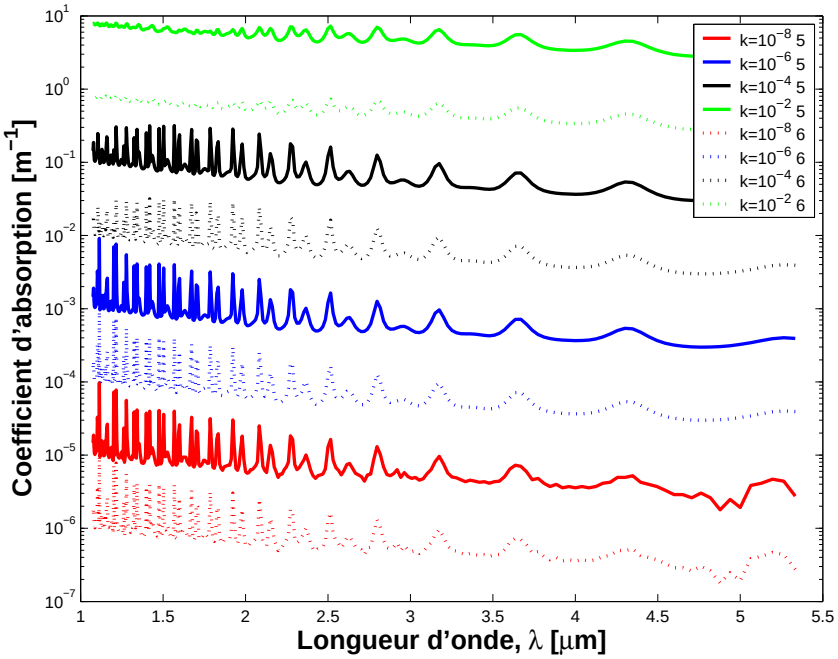


Fig. B.6 : κ_{a_λ} *pour* D=5μm.

C

Modélisation de l'écoulement diphasique réactif

C.1 Modélisation de la phase gazeuse

C.1.1 Equations de bilan en régime turbulent

Pour les écoulements gazeux non réactifs, cinq variables doivent être considérées : les trois composantes de la vitesse et deux paramètres thermodynamiques (par exemple la pression et l'enthalpie). Le but d'un modèle mathématique est la détermination de ces cinq variables comme une fonction de la position et du temps. Le nombre de variables étant de cinq, le modèle mathématique doit comporter, au moins, cinq équations indépendantes.

Dans un écoulement turbulent, les vitesses, pressions, températures et autres champs scalaires connaissent des fluctuations temporelles. La décomposition de Reynolds considère que les variables instantanées Φ intervenant dans les équations instantanées de Navier-Stokes peuvent être décomposées en une somme d'un champ moyen $\overline{\Phi}$ et d'un champ de fluctuation Φ' autour de ce champ moyen.

$$\Phi = \overline{\Phi} + \Phi' \tag{C.1}$$

où Φ est une grandeur conservative. La valeur moyenne est définie par la relation :

$$\overline{\Phi} = \frac{1}{\delta t}\int_0^{\delta t} \Phi(t)dt \tag{C.2}$$

où δt est une échelle de temps filtrant les mouvements turbulents (notons que, par définition, la valeur moyenne des fluctuations est nulle). Pour les écoulements à masse volumique variable, il est plus commode de définir toutes les grandeurs extensives par des moyennes pondérées par la masse volumique du fluide ρ, avec $\rho = \overline{\rho} + \rho'$, sauf pour ρ et la pression locale p, qui sont déjà des grandeurs volumiques :

$$\Phi = \tilde{\Phi} + \Phi''; \qquad \tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho\Phi}}{\overline{\rho}}; \qquad \overline{\rho\Phi''} = \overline{\rho(\Phi - \tilde{\Phi})} = 0 \tag{C.3}$$

La substitution de cette décomposition dans les équations de continuité et de quantité de mouvement donne, dans le cas stationnaire et pour un fluide newtonien, les expressions suivantes :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u}_j}{\partial x_j} = S^m \tag{C.4}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j}{\partial x_j} = \overline{F_i} - \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}\mu\Big[\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}\Big] - \frac{\partial}{\partial x_j}\Big(\overline{\rho}\widetilde{u_i''u_j''}\Big) + S_i^u \tag{C.5}$$

Les u_i sont les trois composantes de vitesse u_x, u_y, u_z et S^m représente une source de génération de masse par unité de volume. μ est la viscosité dynamique du fluide, les S_i^u sont les sources de quantité de mouvement par unité de volume dans les trois directions de l'espace, et les termes F_i représente l'action des forces de volume sur la particule fluide.

Les termes $\widetilde{u_i''u_j''}$ forment le tenseur de Reynolds qui fait apparaître des termes supplémentaires et qui oblige à réaliser une procédure de fermeture du système d'équations.

C.1.2 Modèle κ-ϵ standard

Une solution complète des équations de Navier-Stokes pour des écoulements turbulents à grands nombres de Reynolds et dans une géométrie complexe, n'est pas réalisable de nos jours. Deux méthodes alternatives peuvent être employées pour transformer les équations de Navier-Stokes de telle manière que les fluctuations turbulentes de petites échelles n'ont pas à être simulées directement : la décomposition de Reynolds (Reynolds Average Navier-Stokes equations, RANS) et le filtrage (Large Eddy Simulation, LES). Ces deux méthodes introduisent des termes supplémentaires dans les équations de Navier-Stokes qui nécessitent d'être modélisé afin de fermer les équations (la fermeture implique qu'il y a un nombre suffisant d'équations pour toutes les inconnues).

Les équations de Navier-Stokes moyennées au sens de Reynolds (RANS) représentent les équations de transport pour seulement les variables moyennes de l'écoulement, avec toute les échelles de la turbulence modélisées. Cette approche permet de trouver une solution pour les variables de l'écoulement moyen et réduit fortement les temps de calculs. L'approche RANS est généralement adoptée dans les applications industrielles avec différents modèles. Dans notre étude qui requiert les champs de températures et de concentrations pour les calculs de transferts radiatifs, nous décidons d'utiliser le modèle κ-ϵ pour sa robustesse et sa rapidité de convergence.

Pour fermer le système d'équations, plusieurs modèles de turbulence sont disponibles dans le code Fluent et nous avons choisi le modèle standard κ-ϵ [88, 89, 90]. La procédure de fermeture employée, consiste à utiliser l'hypothèse de Boussinesq. Une version simplifiée de l'hypothèse de Boussinesq, pour un écoulement incompressible à ρ variable, est donnée par l'expression suivante :

$$-\overline{\rho}\widetilde{u_i''u_j''} = \mu_t\Big(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\Big) - \frac{2}{3}\Big(\overline{\rho\kappa} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}\Big)\delta_{ij} \tag{C.6}$$

La constante de proportionnalité μ_t est appelée viscosité turbulente. Le modèle κ-ϵ standard est un modèle semi-empirique basé sur les équations de transport de l'énergie cinétique de la turbulence, $\kappa = \frac{1}{2}\widetilde{u_i'' u_i''}$, et du taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente en chaleur, $\epsilon = \frac{\mu}{\overline{\rho}}\widetilde{\frac{\partial u_i}{\partial x_j}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}}$. Ces deux équations de transport permettent la détermination de la viscosité turbulente selon la relation de Prandtl-Kolmogorov :

$$\mu_t = \overline{\rho} C_\mu \frac{\kappa^2}{\epsilon} \tag{C.7}$$

κ et ϵ sont calculés avec les deux équations de transport suivantes :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\kappa}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\kappa\tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\kappa}\right)\frac{\partial \kappa}{\partial x_j}\right] + G_\kappa + G_b - \overline{\rho}\epsilon \tag{C.8}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\epsilon}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\epsilon\tilde{u}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon}\right)\frac{\partial \epsilon}{\partial x_j}\right] + C_{1\epsilon}\frac{\epsilon}{\kappa}G_\kappa + C_{2\epsilon}\overline{\rho}\left(\frac{\epsilon^2}{\kappa}\right) \tag{C.9}$$

où C_μ, $\sigma\kappa$, σ_ϵ, $C_{1\epsilon}$ et $C_{2\epsilon}$ sont des constantes qui en général prennent les valeurs présentées dans le tableau C.1. Ces constantes sont celles proposées par Launder et Sharma [90]. G_κ représente la production d'énergie cinétique de turbulence et est donnée par :

$$G_\kappa = \mu_t\left(\sqrt{2S_{ij}S_{ij}}\right)^2 \qquad \text{avec} \qquad S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\right) \tag{C.10}$$

G_b représente la génération de turbulence due à la force thermogravitationnelle et est évaluée par l'expression :

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t}\frac{\partial T}{\partial x_i} \qquad \text{avec} \qquad \beta = -\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_p \tag{C.11}$$

β, g_i et Pr_t représentent, respectivement, le coefficient d'expansion thermique, le vecteur gravitationnel dans la direction i et le nombre de Prandtl turbulent. Dans ce modèle, Pr_t est considéré égal 0.85.

$C_{1\epsilon}$	$C_{2\epsilon}$	C_{mu}	σ_κ	σ_ϵ	Pr_t
1.44	1.92	0.09	1.0	1.3	0.85

Tab. C.1 : *Constantes du modèle κ-ϵ Standard*

C.1.3 Modèle de flamme non-prémélangée

La simulation du processus de combustion turbulente non-prémélangée en phase gazeuse nécessite un schéma qui modélise simultanément le mélange et les réactions de toutes les espèces chimiques présentes. Quand on modélise les flammes de diffusion turbulentes deux approches simplificatrices sont souvent utilisées. Ces deux modèles peuvent être classés selon deux échelles de temps : l'échelle de temps de réaction et l'échelle de temps de

mélange turbulent. L'échelle de temps de réaction est l'échelle de temps caractéristique nécessaire aux espèces pour réagir complètement jusqu'à atteindre l'équilibre. L'échelle du temps de mélange turbulent est le temps requis pour que les grosses structures se cassent et se réduisent jusqu'à une échelle où les interactions moléculaires auront lieu.

Dans les flammes de diffusion, le combustible et le comburant sont amenés séparément dans la flamme. Ceci est par exemple le cas lors de l'oxydation des gaz éjectés par le matériau pyrotechnique. Avant que les réactions aient lieu, un contact intime entre les deux fluides au niveau moléculaire est nécessaire. Dans ces conditions, on peut considérer que le temps de mélange turbulent est beaucoup plus long que le temps chimique. De plus, ce modèle impose des réactions chimiques instantanées (vitesse de réaction infinie). La combustion est donc simplifiée à un problème de mélange. Une fois que le combustible et le comburant sont mélangés, la chimie peut être modélisée en utilisant l'hypothèse d'équilibre chimique.

La base de l'approche employée pour traiter le cas de la flamme de diffusion consiste à lier les propriétés thermochimiques instantanées du fluide (température, masse volumique et fraction massique) à une grandeur scalaire conservative appelée *fraction de mélange*, notée f. La fraction de mélange représente la fraction de masse du combustible dans le mélange air-combustible et peut être décrite en fonction de la masse atomique :

$$f = \frac{Z_j - Z_{j,ox}}{Z_{j,c} - Z_{j,ox}} \tag{C.12}$$

où Z_j est la fraction massique élémentaire de l'élément j.

$$Z_j = \sum_{i=1}^{n} \frac{a_{ij} M_j}{M_i} y_i \qquad j = 1, 2, ..., n_e \tag{C.13}$$

M_i est la masse molaire de l'espèce i, a_{ij} est le nombre d'atome de l'élément j, dans la molécule de l'espèce i et y_i est la fraction massique de l'espèce i. L'avantage de la fraction de mélange est que l'on peut calculer à partir d'une valeur locale de f n'importe quel autre scalaire conservatif Φ fonction de f, tel que l'enthalpie, la fraction massique. Les équations pour les espèces individuelles ne sont donc pas résolues et les difficultés associées au problème de fermeture des vitesses de réactions moyennes sont évitées. Ainsi, la concentration des espèces est dérivée à partir du champ correspondant à la fraction de mélange. Les interactions entre la turbulence et la chimie sont prises en compte grâce à l'utilisation d'une fonction densité de probabilité (pdf). Cette approche nécessite que la diffusion turbulente de toutes les espèces en phase gazeuse soit la même. Si cela est le cas, les équations des espèces peuvent être réduites à une seule équation pour la fraction de mélange f car les termes sources des équations des espèces s'annulent. f est donc une quantité scalaire.

L'équation de transport pour la fraction de mélange s'écrit, avec la moyenne de Favre de la façon suivante :

$$\frac{\partial \overline{\rho} \tilde{u}_j \tilde{f}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\overline{\mu_t}}{\overline{\sigma_t}} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j} \right) + S_f \tag{C.14}$$

Dans un environnement turbulent, la fraction de mélange peut fluctuer de façon chaotique. Pour modéliser ces fluctuations on calcule sa variance. Si la moyenne de la fraction de mélange est donnée par l'équation précédente, la variance $\tilde{f'^2}$ peut s'écrire :

$$\tilde{f'^2} = \overline{\left(f - \tilde{f}\right)^2} = \frac{1}{\delta t}\int_0^{\delta t}\left[f(t) - \tilde{f}\right]^2 dt \tag{C.15}$$

Pour modéliser la variation de $\tilde{f'^2}$ dans un écoulement, Launder et Spalding [90] ont dérivé une équation de transport pour $\tilde{f'^2}$. L'équation de transport pour la variance de la fraction de mélange est donnée par :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u}_j\tilde{f'^2}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial \tilde{f'^2}}{\partial x_j}\right) + C_{g1}\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_j}\right)^2 - C_{g2}\frac{\overline{\rho}\epsilon\tilde{f'^2}}{\kappa} \tag{C.16}$$

Les valeurs utilisées pour les constantes C_{g1}, C_{g2} et σ_t proviennent de Jones et Whitelaw [91]. Ces valeurs sont C_{g1}=2.86, C_{g2}=2 et σ_t=0.85. Cependant pour calculer les grandeurs temporelles moyennes, $\tilde{f}$ et $\tilde{f'^2}$ nous avons besoin d'une pdf associée à f : $p(f)$. La forme de la pdf peut être calculée à partir des résultats expérimentaux ou bien on peut la définir à priori. C'est cette dernière approche qui est généralement utilisée. La pdf la plus couramment utilisée est une fonction du type β :

$$p(f) = \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}}{\int f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}df} \tag{C.17}$$

avec,

$$\alpha = \tilde{f}\left[\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{\tilde{f'^2}} - 1\right] \quad \text{et} \quad \beta = (1-\tilde{f})\left[\frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{\tilde{f'^2}} - 1\right] \tag{C.18}$$

$p(f)$ est une représentation temporelle des fluctuations de f dans un écoulement turbulent. Elle est utilisée pour calculer les grandeurs moyennes dépendantes de f. Pour un système non-adiabatique, l'expression suivante est utilisée pour calculer les grandeurs moyennes dépendantes de f :

$$\tilde{\Phi}_i = \int_0^1 p(f, \tilde{H})\Phi_i(f)df \tag{C.19}$$

où H est l'enthalpie totale instantanée :

$$H = \sum_j \dot{m}_j h = \sum_j \dot{m}_j \int_{T_{ref,j}}^{T} C_{p,j}dT + h_j^0(T_{ref,j}) \tag{C.20}$$

où $\dot{m}_j$ est le débit massique de l'espèce j et $h_j^0(T_{ref,j})$ est l'enthalpie de formation de l'espèce j à la température de référence $T_{ref,j}$. La détermination de $\tilde{\Phi}_i$, dans un système non-adiabatique, requiert la solution de l'équation de transport pour l'enthalpie H :

$$\frac{\partial \overline{\rho}\tilde{u}_j\tilde{H}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\overline{k_t}}{\overline{C_p}}\frac{\partial \tilde{H}}{\partial x_j}\right) + S_H \tag{C.21}$$

où k_t est le coefficient de conduction turbulente et S_H est un terme source de chaleur volumique qui tient compte du rayonnement et de l'échange de chaleur avec la phase discrète. Sous l'hypothèse que le nombre de Lewis soit égal à l'unité, les termes de conduction et de diffusion des espèces se combinent pour donner le premier terme du membre de droite.

Pour économiser du temps de calcul, les calculs d'équilibre chimique et l'intégration de la pdf sont effectués par un code de calcul externe à Fluent appelé PrePdf. Dans PrePdf, le modèle d'équilibre chimique est utilisé avec la fonction densité de probabilité présumée pour effectuer l'intégration de l'équation C.19. Les résultats sont stockés dans des tableaux qui relient les variables thermochimiques moyennes $\tilde{\Phi}$ (température, masse volumique et fraction massique) aux valeurs de $\tilde{f}$, $\tilde{f'^2}$ et H. Ensuite, Fluent résoud les équations de transports de $\tilde{f}$, $\tilde{f'^2}$ et H puis utilise les tableaux issus de PrePdf pour déterminer les variables thermochimiques moyennes (température, masse volumique et fraction massique).

C.1.4 Transfert de chaleur par rayonnement

Comme l'objectif n'est pas d'avoir une résolution très précise du champ aérothermochimique, l'influence du rayonnement sur l'écoulement diphasique est modélisé par une approche de type P-N [92]. Le modèle P-N est basé sur l'utilisation d'un développement en série pour la luminance en terme d'harmoniques sphériques, notées P. Les détails de ce modèle sont biens connus et peuvent être trouvés dans [3]. Le modèle de rayonnement P-1 est le cas le plus simple du modèle plus général P-N. Le modèle P-1 est valide pour des épaisseurs optiques supérieures ou égales à l'unité. De plus, ce modèle à tendance à surestimer les flux radiatifs intervenant dans l'équation de transport de l'enthalpie (Eq. C.21). Néanmoins, même si le milieu est optiquement mince par endroit, le choix de cette méthode permet de tenir compte de l'influence du rayonnement par les particules et par les gaz sur l'écoulement à un faible coût numérique. Pour un milieu gazeux gris, absorbant et émettant contenant des particules absorbantes, émissives et non-diffusantes, l'équation de transport pour le rayonnement incident est définie par :

$$\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{1}{3(a+a_p)}\frac{\partial G}{\partial x_j}\right) + 4\pi\left(a\frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p\right) - (a+a_p)G = 0 \tag{C.22}$$

avec,

$$G = \int_0^{4\pi}\int_0^{\infty} L_\nu d\nu d\Omega \tag{C.23}$$

G représente le rayonnement incident dans toutes les directions en W·m^{-2}. E_p est l'émissivité équivalente des particules, a_p le coefficient d'absorption des particules et a le coefficient d'absorption des gaz. Ces variables sont fixées à des valeurs constantes durant les calculs.

$$E_p = \sum_{n=1}^{N} \epsilon_{pn} A_{pn} \frac{\sigma T_{pn}^4}{\pi V} \tag{C.24}$$

$$a_p = \sum_{n=1}^{N} \epsilon_{pn} \frac{A_{pn}}{V} \tag{C.25}$$

$$A_{pn} = \frac{\pi d_{pn}^2}{4} \tag{C.26}$$

La sommation porte sur les N particules dans le volume V de la maille. ϵ_{pn}, A_{pn}, T_{pn} et d_{pn} sont respectivement, l'émissivité, la section projetée, la température et le diamètre de la particule n. Le coefficient d'absorption de la phase gazeuse a est calculé par :

$$a = -\frac{\ln(1-\epsilon)}{s} \tag{C.27}$$

où ϵ est l'émissivité du gaz calculé avec le modèle Weighted-Sum-of-Gray-Gases (WSGG) par l'expression :

$$\epsilon = \sum_{i=0}^{I} a_{\epsilon,i}(T)(1 - exp[-\kappa_i ps]) \tag{C.28}$$

$a_{\epsilon,i}$ est un facteur de pondération de l'émissivité pour le gaz gris i, le terme entre parenthèses représente l'émissivité du gaz gris i, κ_i est le coefficient d'absorption du gaz gris i. p est la somme des pressions partielles des gaz absorbants et s est l'épaisseur de la maille. Les coefficients $a_{\epsilon,i}$ et κ_i sont tabulés pour H_2O et CO_2 par [93] [94] pour une large gamme de températures et pressions. Lorsque toutes les propriétés optiques du milieu ont été calculées par Fluent, l'équation de transport de G (Eq. C.22) est résolue. Dés lors, Fluent inclue le terme source de chaleur par rayonnement (S_H^{rad}) dans l'équation C.21. L'expression de S_H^{rad} est donnée par :

$$S_H^{rad} = -4\pi\left(a\frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p\right) + (a + a_p)G \tag{C.29}$$

C.1.5 Résolution des équations de conservation

La résolution des équations de la dynamique des fluides est effectuée en discrétisant le domaine de calcul. De cette manière, tous les points discrets constituent le maillage du domaine de calcul. A chaque point discret du domaine fluide, Fluent emploie la méthode des volumes finis pour obtenir des expressions algébriques qui remplacent les équations aux dérivées partielles et qui peuvent être résolues numériquement. C'est donc un ensemble d'équations algébriques qui permettent de prédire la masse, la quantité de mouvement, l'énergie et les espèces chimiques dans tous les points discrets du maillage. La méthode des volumes finis consiste à intégrer les équations de conservation sur chaque volume de contrôle. Ceci permet d'obtenir des équations discrètes conservant chaque variable dans un volume de contrôle.

La discrétisation des équations de conservation peut être illustrée en considérant l'équation de transport stationnaire du scalaire Φ. L'équation de transport présentée sous sa forme intégrale, pour un volume de contrôle V, est :

$$\oint \rho\Phi\vec{v} \cdot d\vec{A} = \oint \Gamma_\Phi \nabla\Phi \cdot d\vec{A} + \int_V S_\Phi dV \tag{C.30}$$

où

ρ	=	masse volumique
$\vec{v}$	=	vecteur vitesse ($=u\vec{i}+v\vec{j}$ en 2D)
$\vec{A}$	=	surface orientée
Γ_Φ	=	coefficient de diffusion pour Φ
$\nabla\Phi$	=	gradient de Φ ($=\frac{\partial Phi}{\partial x}\vec{i}+\frac{\partial Phi}{\partial y}\vec{j}$ en 2D)
S_Φ	=	source volumique de Φ

L'équation C.30 est appliquée pour chaque volume de contrôle dans le domaine de calcul. La cellule triangulaire bidimensionnelle présentée sur la figure C.1 est une exemple d'un volume de contrôle. La discrétisation de l'équation C.30 dans une cellule donne :

$$\sum_{f}^{N_{faces}} \rho_f \vec{v}_f \Phi_f \cdot \vec{A}_f = \sum_{f}^{N_{faces}} \Gamma_\Phi (\nabla\Phi)_n \cdot \vec{A}_f + S_\Phi V \tag{C.31}$$

avec

N_{faces}	=	nombre de faces de la cellule
Φ_f	=	valeur de Φ convectée à-travers la face f
$\rho_f \vec{v}_f \cdot \vec{A}_f$	=	flux massique traversant la face f
$\vec{A}_f$	=	aire de la face f, $\lvert A\rvert$ ($=\lvert A_x\vec{i}+A_y\vec{j}\rvert$ en 2D)
$(\nabla\Phi)_n$	=	valeur de $\nabla\Phi$ perpendiculaire à la face f

Les équations résolues par Fluent prennent généralement la même forme présentée ci-dessus et sont transposables à des maillages tridimensionnels et non-structurés composés de polyèdres quelconques.

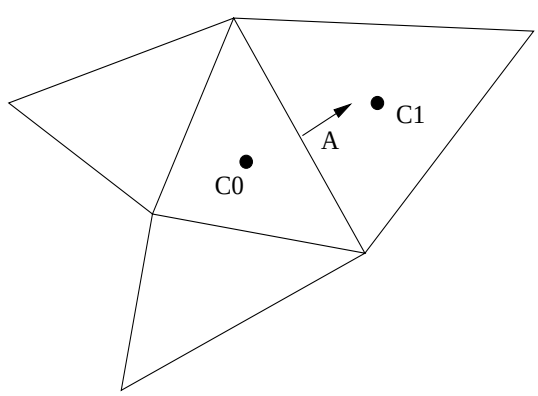


Fig. C.1 : *Volume de contrôle utilisé pour illustrer la discrétisation de l'équation de transport d'un scalaire*

Par défaut, Fluent stocke des valeurs discrètes du scalaire Φ au centre des cellules (C0 et C1 sur la figure C.1). Cependant, les valeurs aux faces Φ_f sont nécessaires pour le calcul du terme de convection (Eq. C.31). Ces valeurs sont calculées par interpolation à partir des valeurs au centre des mailles. Ceci est réalisé en utilisant un schéma du type *amont* premier ordre (upwind, en anglais) ; les Φ_f sont calculées à partir des valeurs de Φ dans la cellule placée en amont par rapport à la direction de la vitesse perpendiculaire à la face

de la maille. Le schéma amont premier ordre est utilisé pour sa stabilité et sa robustesse. La dérivée $\nabla\Phi$ est calculée en utilisant le théorème de Gauss-Green-Ostrogradsky :

$$(\nabla\Phi)_{C0} = \frac{1}{V}\sum_f \overline{\Phi}_f \vec{A}_f \tag{C.32}$$

avec la valeur moyenne à la face $\overline{\Phi}_f$ donnée par la moyenne arithmétique des valeurs aux centres des cellules :

$$\overline{\Phi}_f = \frac{\Phi_{C0} + \Phi C1}{2} \tag{C.33}$$

Le couplage vitesse-pression est effectué en utilisant l'algorithme SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations). C'est une méthode itérative dont le but est d'obtenir la pression exacte en corrigeant un champ approché p^* par une quantité p' à chaque itérations. SIMPLE utilise une relation entre la vitesse et les corrections de pression pour assurer la conservation de la masse et pour obtenir le champ de pression.

Pour plus de détails sur la méthode des volumes finis, il est possible de consulter l'ouvrage de Patankar [95]. De même, les discrétisations de Fluent peuvent être obtenues en consultant le guide d'utilisation de Fluent [96].

C.2 Dispersion turbulente des particules

Le suivi des particules est effectué par Fluent avec un modèle Lagrangien qui réalise un bilan de quantité de mouvement et de chaleur sur chaque particule sphérique. Au cours de sa trajectoire, la particule est soumise à des phénomènes difficiles à modéliser. En effet, la reproduction du mouvement d'une particule, non nécessairement sphérique, est complexe à reproduire car elle peut changer de phase et interagir avec d'autres particules (collision, coalescence). La complexité de ces phénomènes oblige à recourir à des hypothèses simplificatrices :

1. La particule sphérique est indéformable et isolée des autres particules.
2. L'écoulement gazeux autour de la particule est stationnaire.

On définit le nombre de Reynolds particulaire Re_p qui compare les effets des forces d'inertie de la goutte sphérique (relativement à la vitesse du gaz autour de la particule) aux forces de viscosité du gaz et qui a pour définition :

$$Re_p = \frac{\rho\|\vec{u}_p - \vec{u}\|d_p}{\mu} \tag{C.34}$$

ρ et μ sont la masse volumique et la viscosité dynamique du gaz, d_p est le diamètre de la particule, $\vec{u}$ et $\vec{u}_p$ sont respectivement la vitesse du gaz et celle de la particule. On définit aussi le temps de relaxation de la particule dont l'expression, valable pour une $Re_p \approx 1$, est donnée par :

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu} \tag{C.35}$$

Ce temps correspond au temps nécessaire à une particule, soumise à une variation de la vitesse de l'écoulement, pour atteindre 63% de sa vitesse finale. Les interactions de la particules avec les structures turbulentes peuvent être appréhendées en calculant le nombre de Stokes qui compare le temps de relaxation de la particule à un temps caractéristique de l'écoulement gazeux (ou d'une structure tourbillonnaire) :

$$St = \frac{\tau_p}{\tau_g} \tag{C.36}$$

Lorsque les temps de relaxation des particules sont du même ordre de grandeur que le temps caractéristique du fluide, les particules interagissent fortement avec la turbulence et sont toutes concentrées dans une zone préférentielle située à la périphérie des structures turbulentes. Les particules plus petites ($St < 1$) vont suivre l'écoulement et rester à proximité du même élément fluide durant leur trajet. De telles particules ne peuvent pas être préférentiellement concentrées [97]. Des particules très grosses ($St > 1$) ne peuvent pas interagir avec une structure tourbillonnaire puisque leur temps de réponse est beaucoup plus grand que le temps caractéristique du vortex. Ces particules traversent les structures turbulentes et ne sont pas concentrées préférentiellement dans l'écoulement.

Pour calculer la trajectoire d'une particule, Fluent utilise l'équation d'Odar et Hamilton [98] simplifiée et résout alors le système :

$$\frac{d\vec{u_p}}{dt} = \frac{3\rho C_d}{4\rho_p d_p}\|\vec{u}_p - \vec{u}\|(\vec{u}_p - \vec{u}) + \vec{g} \tag{C.37}$$

$$\frac{d\vec{X_p}}{dt} = \vec{u_p} \tag{C.38}$$

C_d est le coefficient de traînée qui est calculé par Fluent pour des particules sphériques et pour une large gamme de Re_p par l'expression de Morsi et Alexander [99]. Ce système n'est valable que dans les conditions rappelées ci-dessous :

1. La densité des particules est faible, ce qui permet de supposer qu'il n'y a pas d'interaction entre les particules (le coefficient de traînée C_d présenté avant n'est valable que pour une particule isolée).
2. Les particules sont inertes sphériques et indéformables.
3. Les particules ne sont pas en rotation.
4. La masse volumique des particules est grande devant celle de l'écoulement gazeux.

Pour calculer la dispersion turbulente, Fluent utilise un modèle stochastique de suivi des particules. La prédiction de la dispersion turbulente est réalisée en intégrant les équations des trajectoires de chaque particules qui prennent en compte la vitesse instantanée du fluide qui est la somme d'une vitesse moyenne et d'une vitesse fluctuante $\vec{u} = u_i = \tilde{u}_i + u_i''$. Comme la simulation du champ aérodynamique est assurée par une méthode stationnaire avec le modèle κ-ϵ pour la turbulence, la composante fluctuante de la vitesse instantanée

doit être recréée. Le modèle de dispersion turbulente utilisé pour calculer des fluctuations turbulentes de vitesse, $\tilde{u''}_x$, $\tilde{u''}_y$ et $\tilde{u''}_z$, est le modèle stochastique. Celui-ci suppose que, puisque ces fluctuations sont aléatoires, il suffit de les déterminer à l'aide d'un tirage aléatoire. De plus, comme les fluctuations de vitesse sont reliées à l'énergie cinétique turbulente $\kappa = \frac{1}{2}(\tilde{u''^2}_x + \tilde{u''^2}_y)$il est possible d'écrire :

$$\tilde{u''^2}_x = \tilde{u''^2}_y = \frac{2}{3}\kappa \tag{C.39}$$

Cette expression suppose les hypothèses suivantes :

1. La turbulence est homogène et isotrope (ceci n'est pas toujours vérifié, surtout dans les zones cisaillées).
2. Les fluctuations de vitesse sont décorrélées suivant les trois directions.

Avec l'expression Eq. C.39 il est alors possible de calculer une vitesse fluctuante aléatoire :

$$u''_i = r\sqrt{\frac{2}{3}\kappa} \tag{C.40}$$

où r est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1. Les fluctuations de vitesse de la phase gazeuse n'étant pas constantes dans le temps, chaque tirage aléatoire doit avoir une durée de vie limitée. En effet, après un tirage aléatoire il peut exister deux situations :

1. soit la particule traverse la structure tourbillonnaire et s'éloigne,
2. soit la structure est dissipée (le temps de vie de la structure est dépassé).

Le temps caractéristique de la turbulence τ_g qui est le rapport entre l'échelle spatiale de la turbulence $l_g = C_\mu^{\frac{3}{4}} \frac{2}{3}\frac{\kappa}{\epsilon}$ (la longueur de mélange) et la vitesse moyenne turbulente (vitesse fluctuante) est défini par :

$$\tau_g = \frac{l_g}{\sqrt{\frac{2}{3}\kappa}} = \sqrt{\frac{2}{3}} C_\mu^{\frac{3}{4}} \frac{\kappa}{\epsilon} \tag{C.41}$$

Fluent l'approche par $\tau_g = 0.3\frac{\kappa}{\epsilon}$. De plus, Gossman [100] définit un temps de transit τ_t de la particule à-travers la structure tourbillonnaire tel que :

$$\tau_t = -\tau_g \ln\left[1 - \frac{l_g}{\tau_p \|\vec{u}_p - \vec{u}\|}\right] \tag{C.42}$$

Ainsi, Fluent réalise un nouveau tirage aléatoire à chaque fois que le temps de simulation dépasse le plus petit des temps entre celui de la durée de vie de la structure τ_g et le temps de transit τ_t.

Le suivi des particules s'accompagne d'un bilan d'énergie sur chaque particule :

$$m_p C_{p_p} \frac{dT_p}{dt} = hA_p(T - T_p) \tag{C.43}$$

m_p, C_{p_p}, T_p et A_p sont respectivement la masse, la capacité calorifique, la température et la surface de la particule. Le coefficient conducto-convectif h est calculé par Fluent en utilisant la relation de Ranz et Marshall [101] [102] :

$$Nu = \frac{hd_p}{k} = 2 + 0.6Re_p^{\frac{1}{2}}Pr^{\frac{1}{3}} \tag{C.44}$$

où k est la conductivité thermique du gaz et Pr le nombre de Prandtl de la phase gazeuse ($Pr = \frac{C_p\mu}{k}$). Le gain ou la perte d'énergie pour la particule à sa traversée dans une maille est reportée dans l'équation de bilan de l'enthalpie de la phase gazeuse (Eq. C.21) dans le terme source S_H.

D

Champs aérothermochimiques Fluent

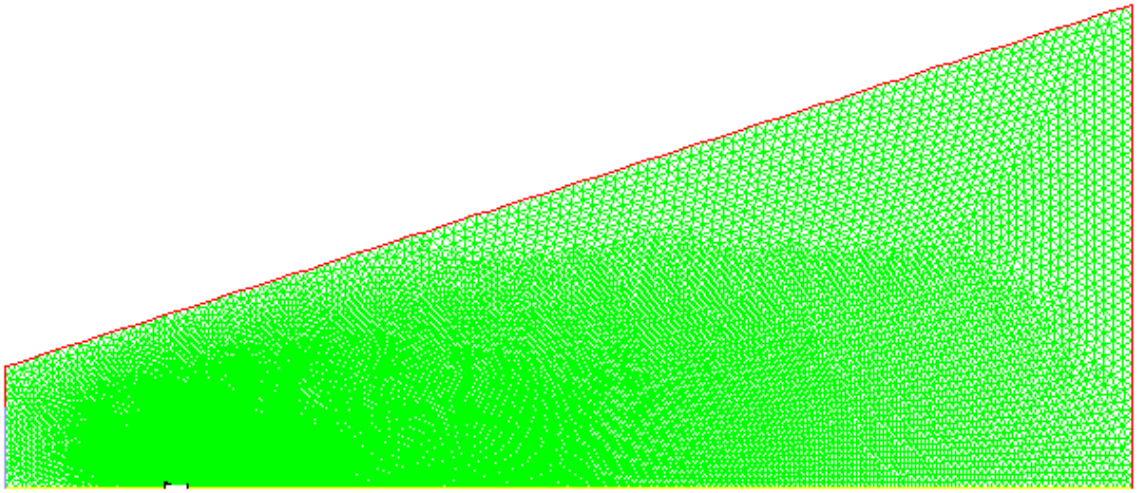


Fig. D.1 : *Domaine de calcul axisymétrique et maillage adoptés pour la simulation de l'écoulement diphasique.*

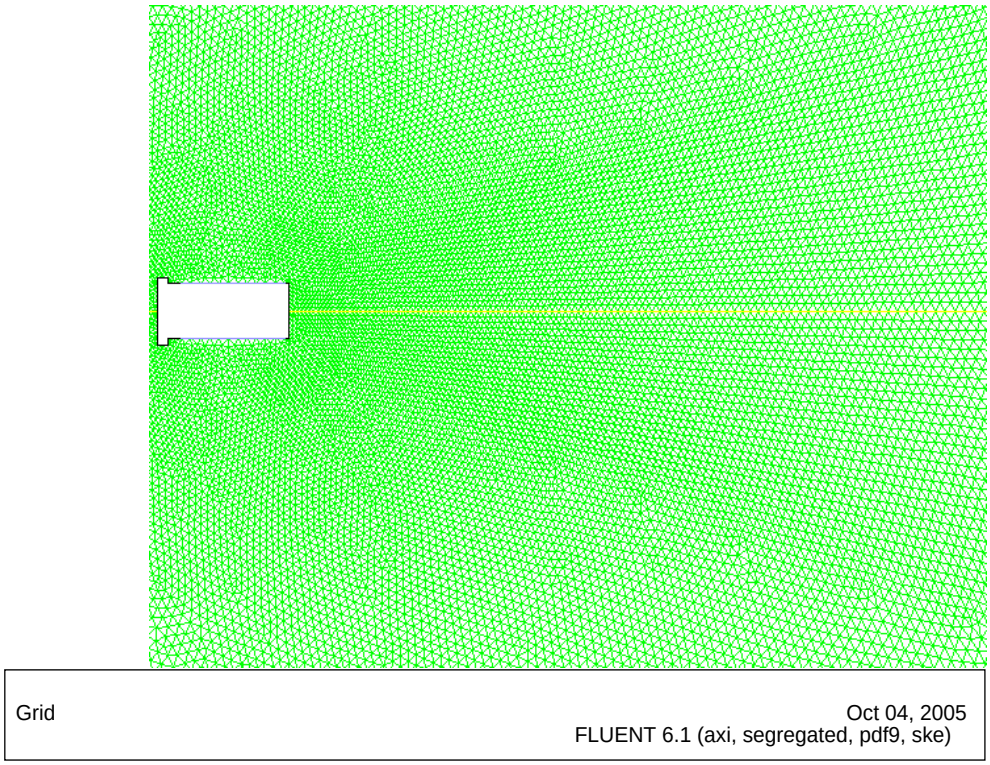


Fig. D.2 : *Maillage adopté autour du bloc pyrotechnique.*

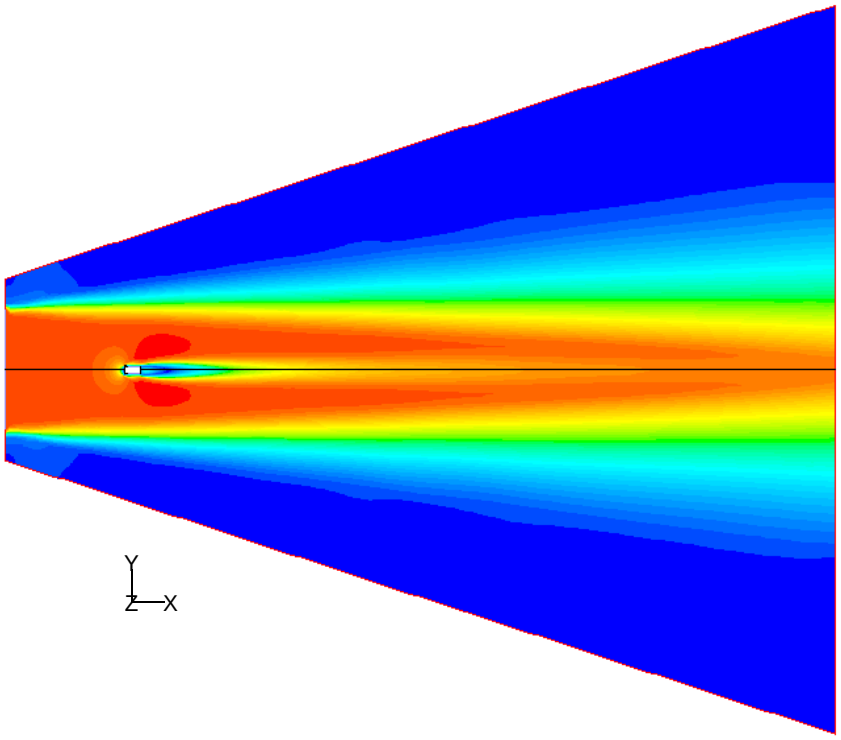


Fig. D.3 : *Contours de vitesse dans le domaine de calcul.*

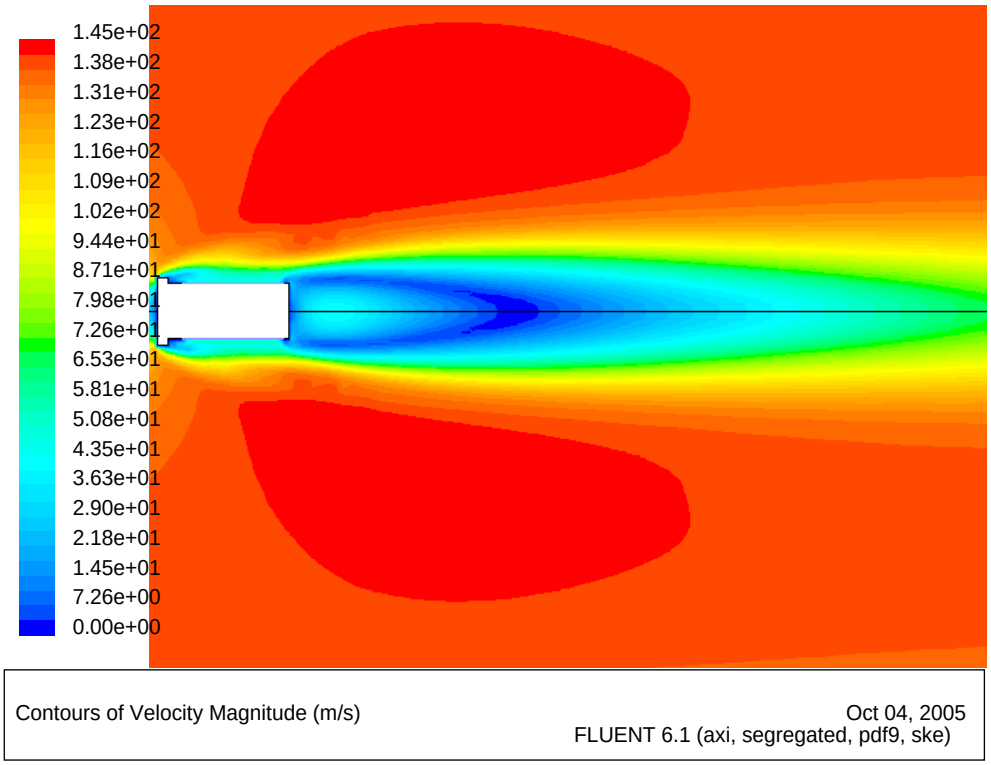


Fig. D.4 : *Contours de vitesse dans le jet.*

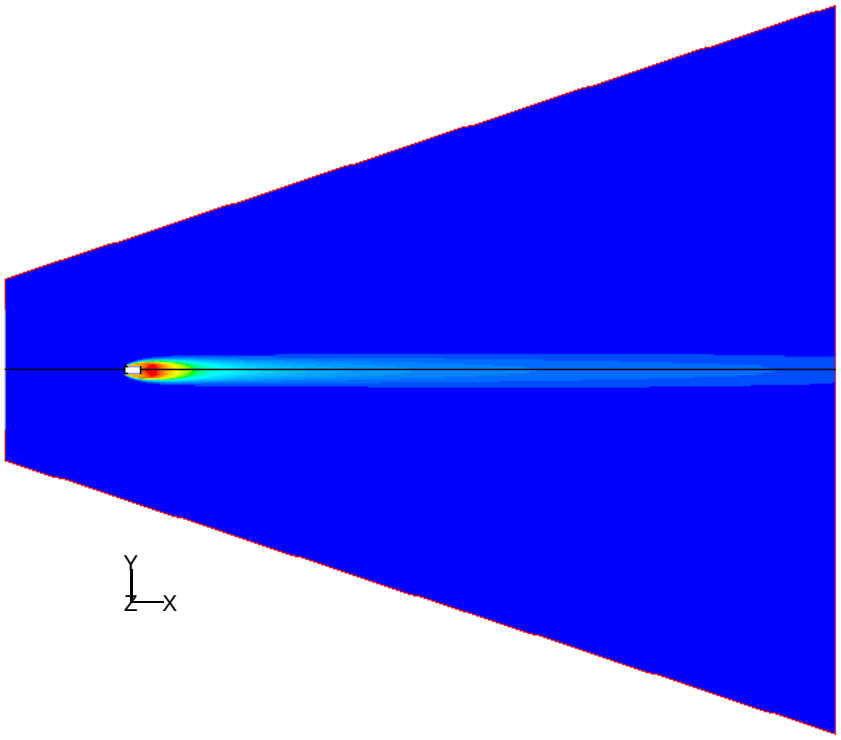


Fig. D.5 : *Contours de température dans le domaine de calcul.*

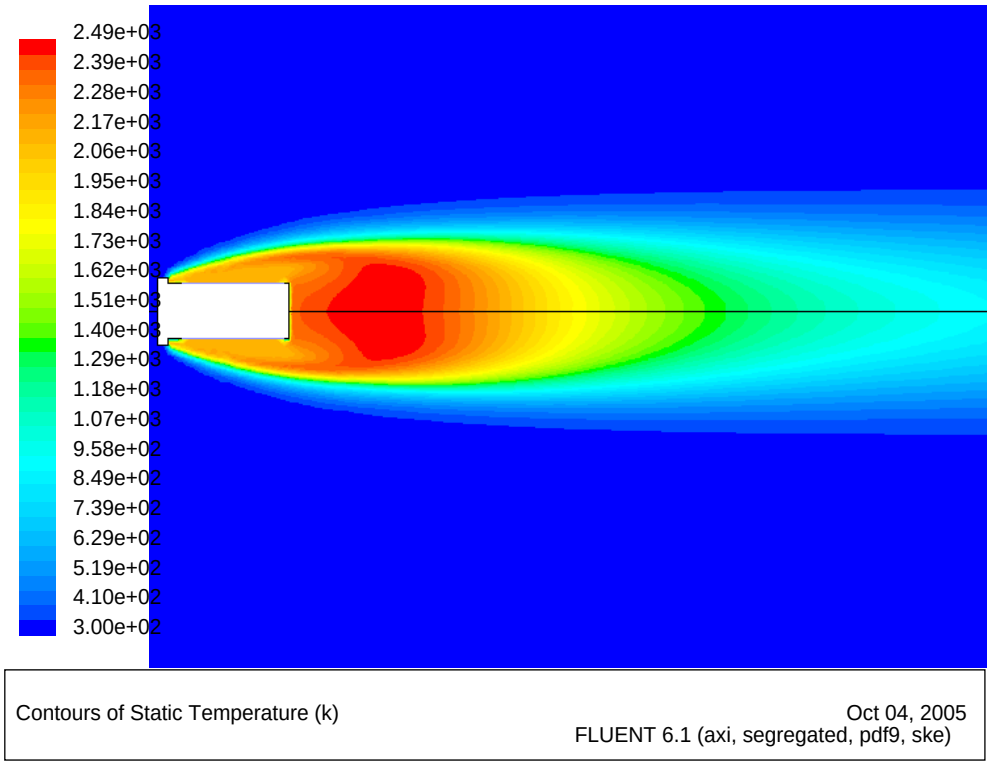


Fig. D.6 : *Contours de température dans le jet.*

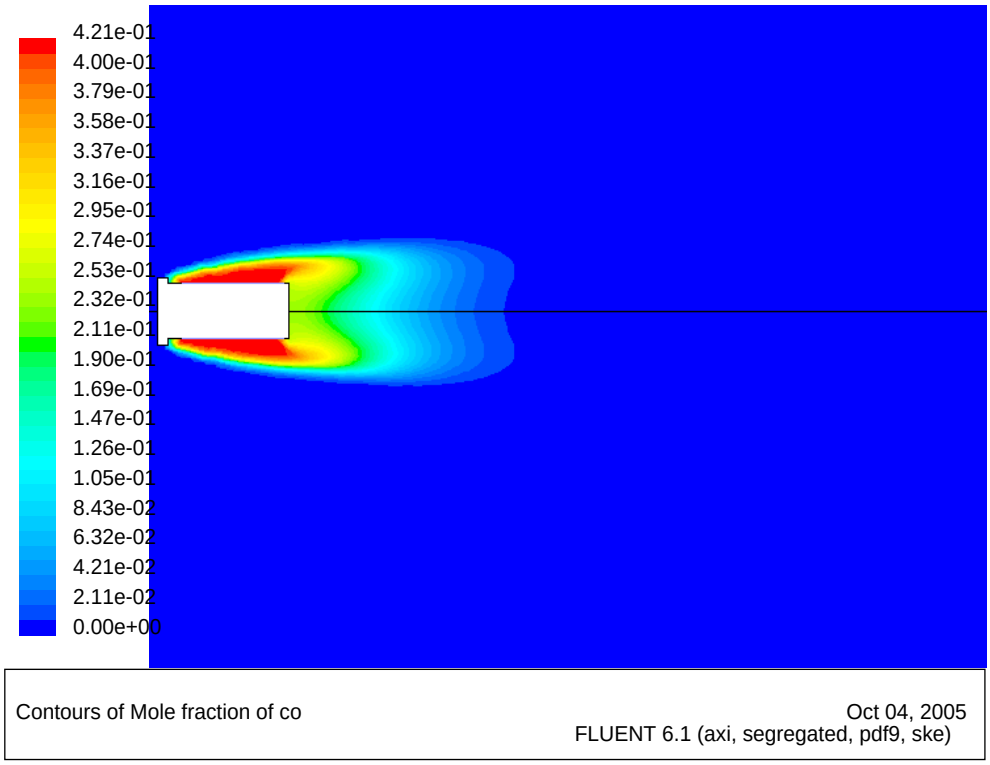


Fig. D.7 : *Contours de fraction molaire de CO dans le jet.*

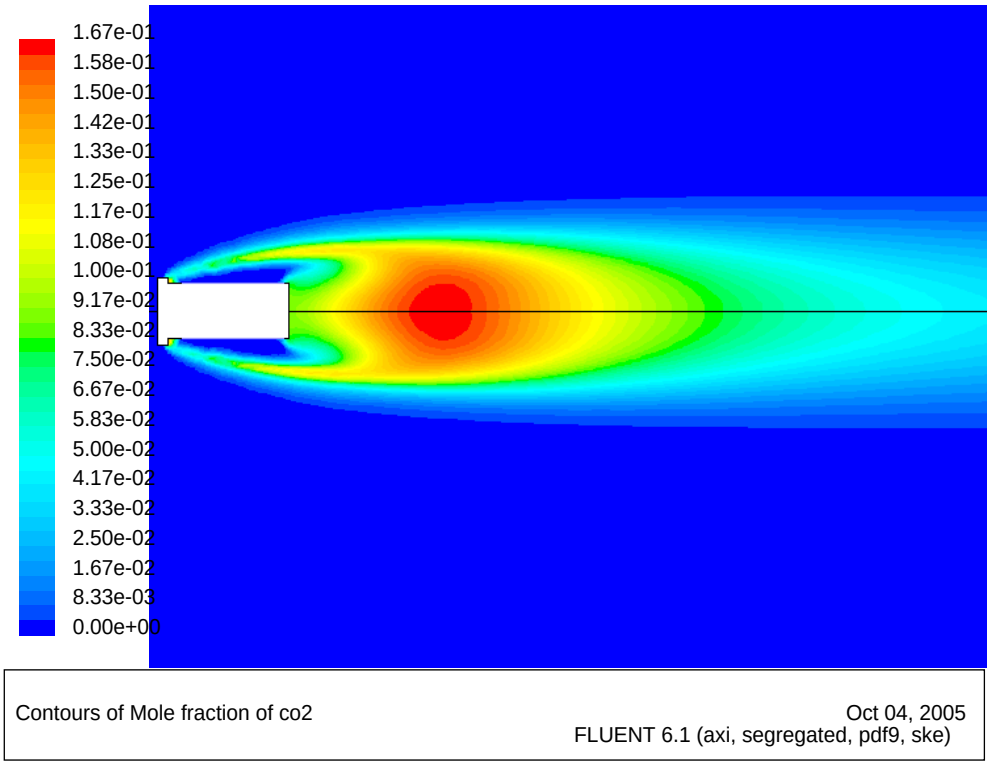


Fig. D.8 : *Contours de fraction molaire de CO_2 dans le jet.*

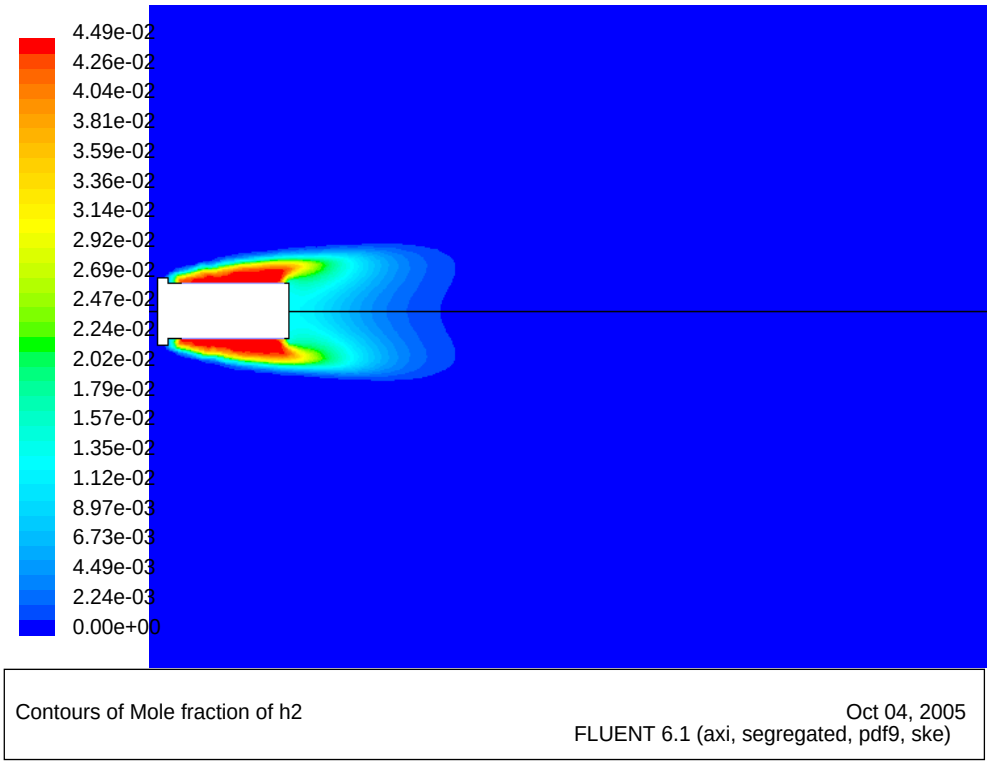


Fig. D.9 : *Contours de fraction molaire de H_2 dans le jet.*

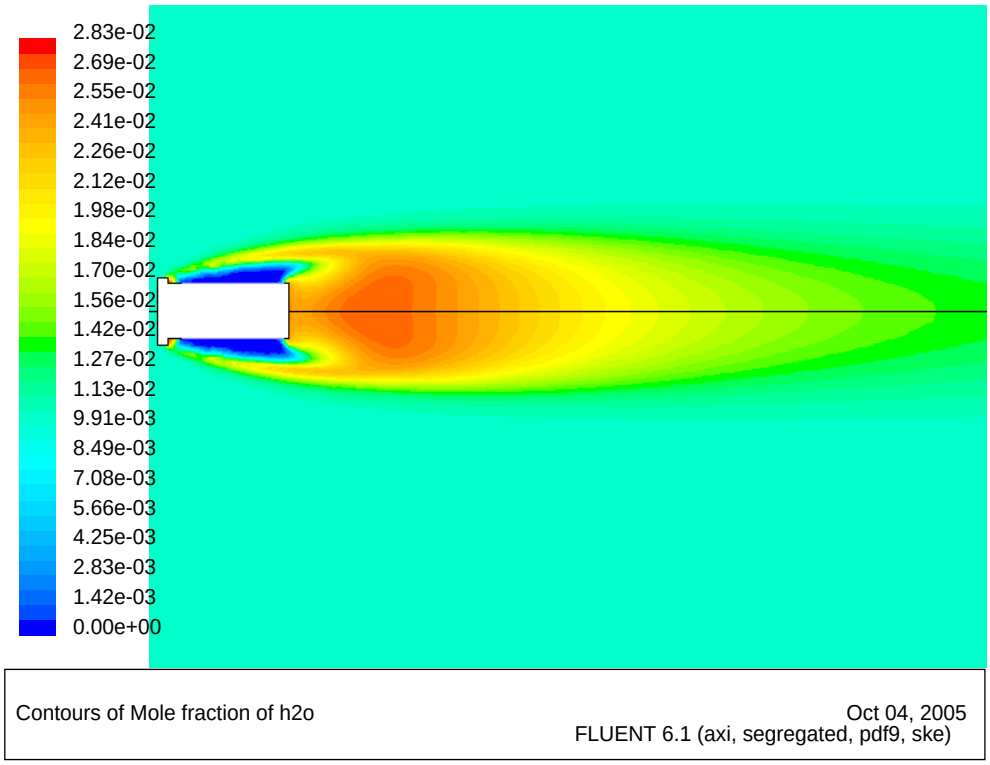


Fig. D.10 : *Contours de fraction molaire de H_2O dans le jet.*

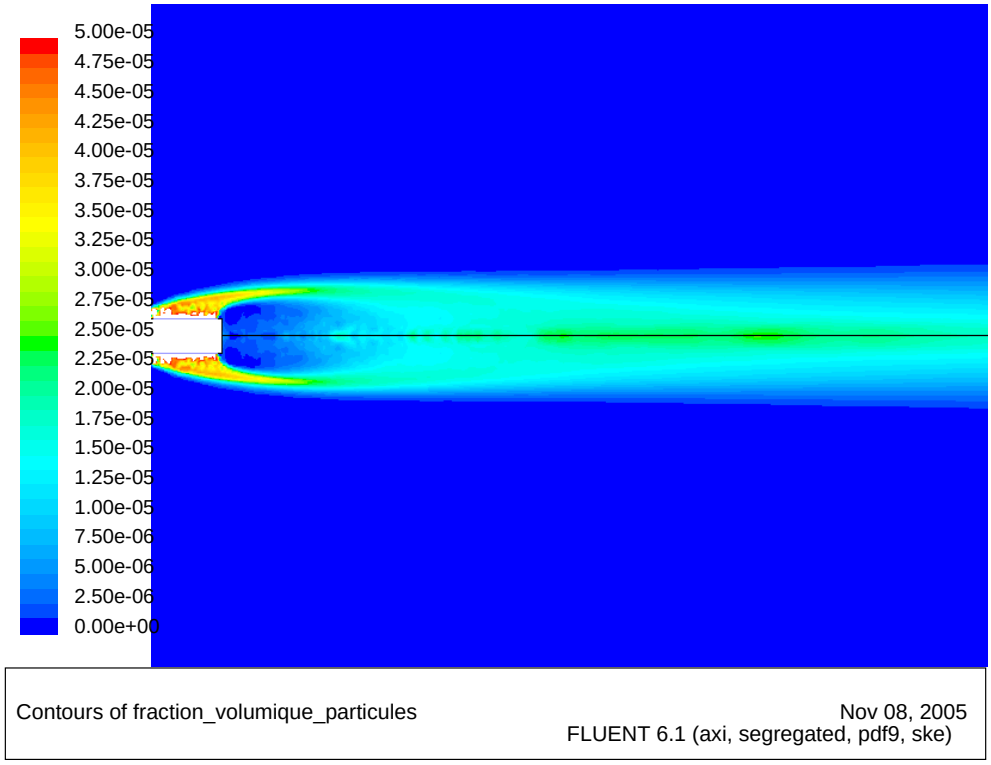


Fig. D.11 : *Contours de fraction volumique en particules (D=5μm) dans le jet. A proximité du bloc, f_v atteint 1.3 10^{-4}.*

E

Champs aérothermochimiques Sirjet

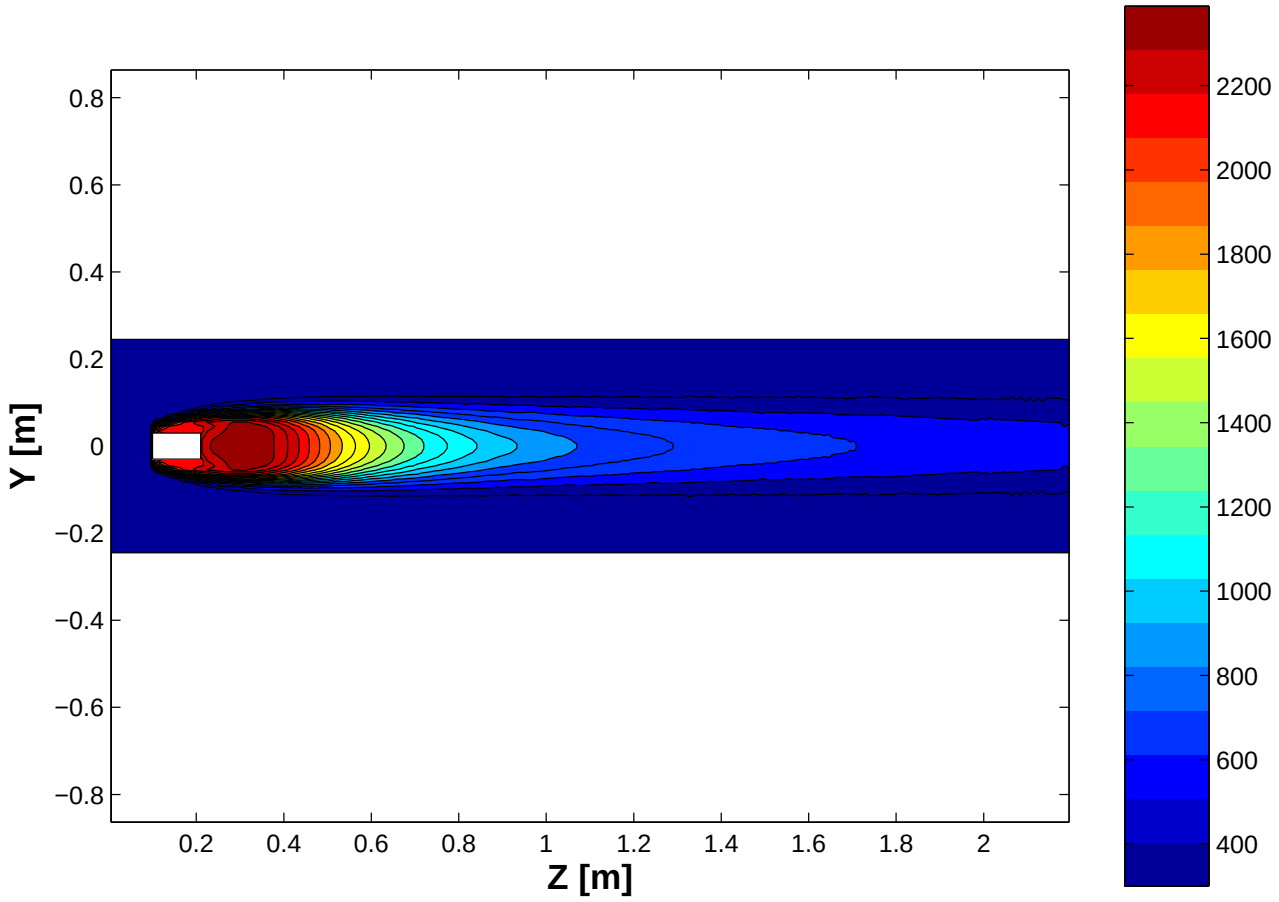


Fig. E.1 : *Coupe axiale des contours de température dans le jet (plan X=0).*

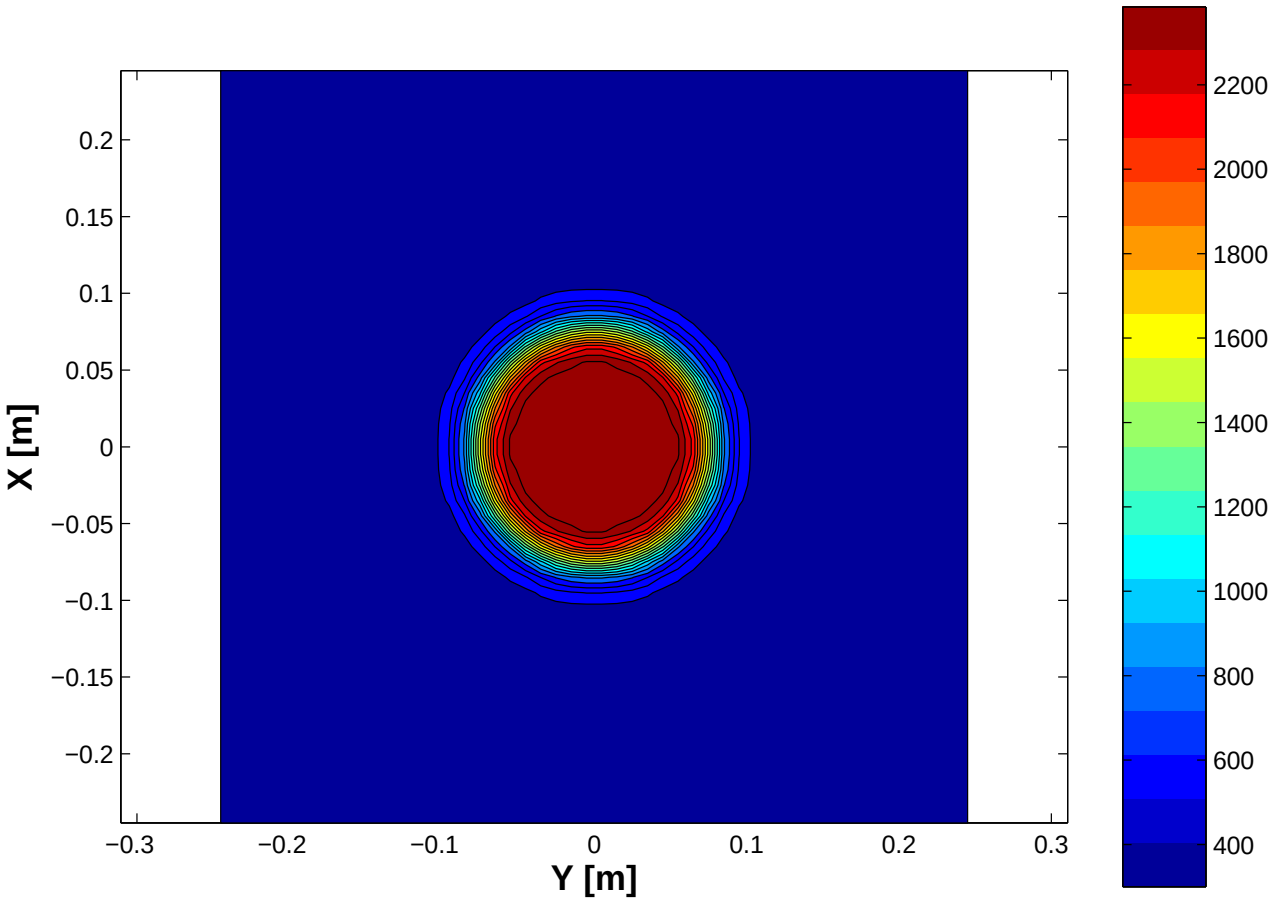


Fig. E.2 : *Coupe radiale des contours de température dans le jet à Z=0.3m.*

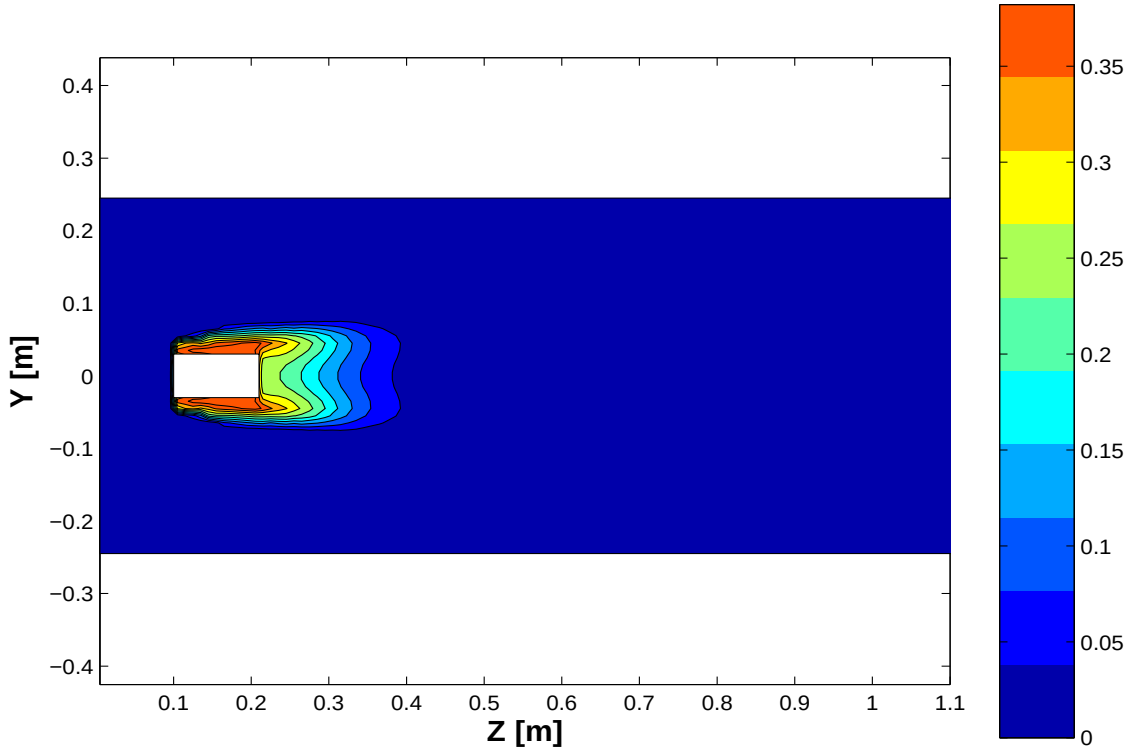


Fig. E.3 : *Coupe axiale des contours de fraction molaire en CO dans le jet (plan X=0).*

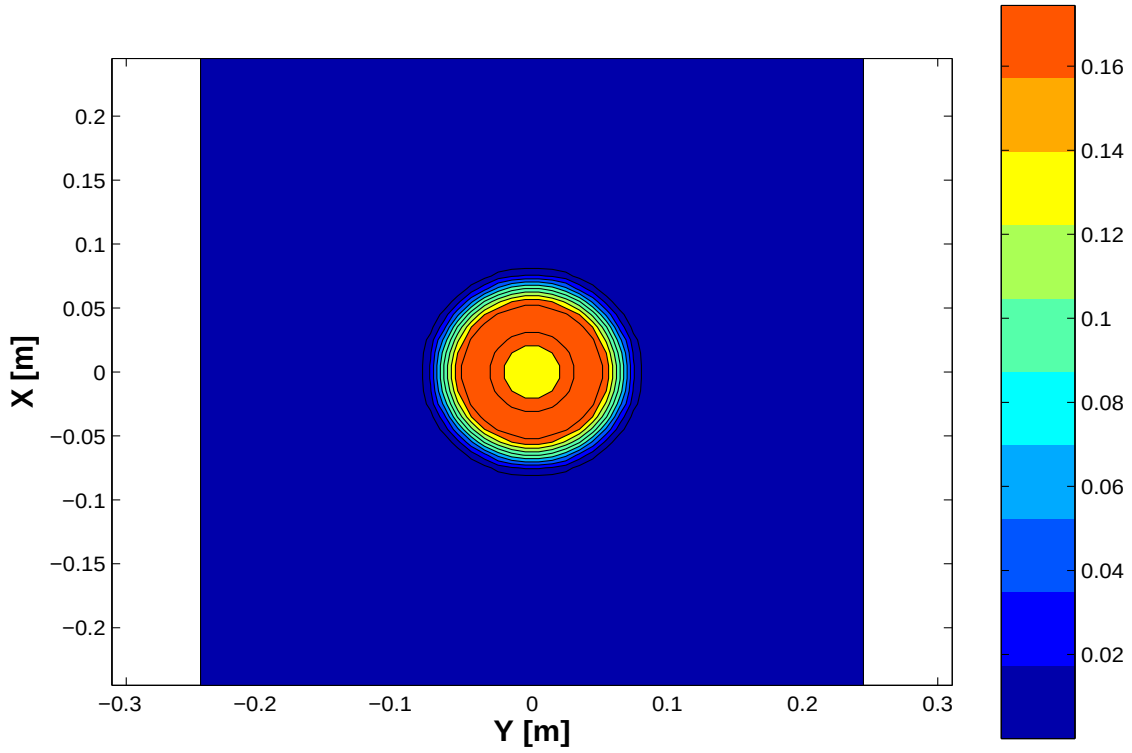


Fig. E.4 : *Coupe radiale des contours de fraction molaire en CO dans le jet à Z=0.3m.*

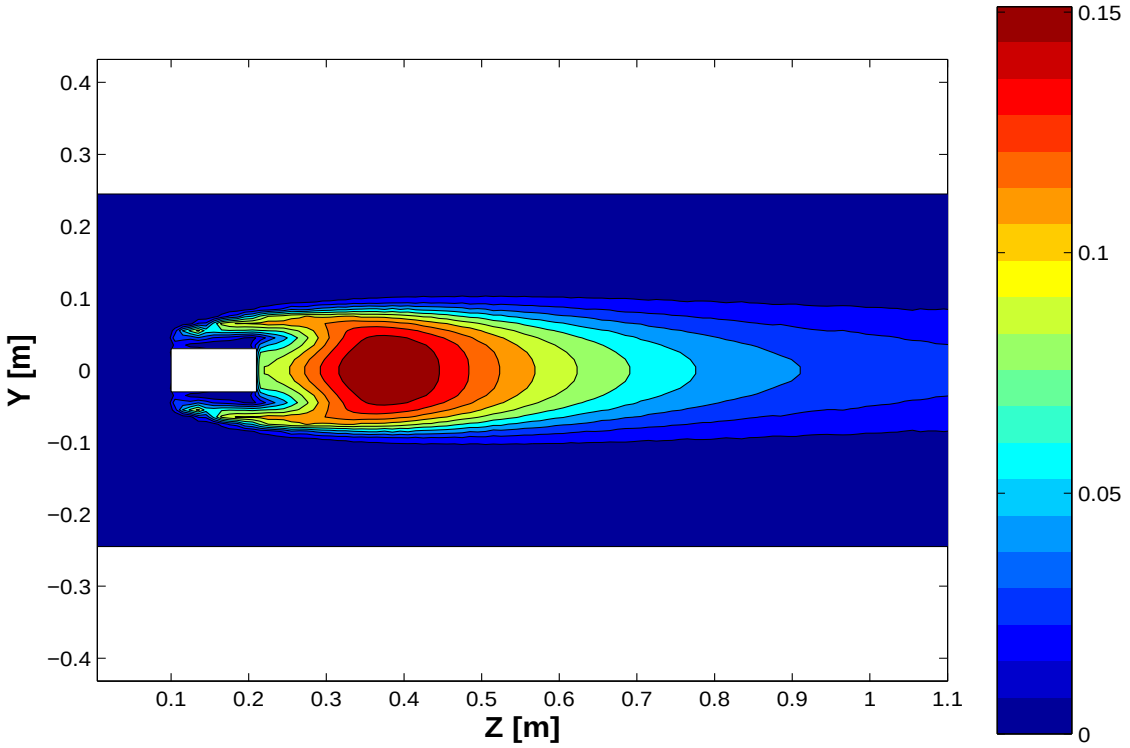


Fig. E.5 : *Coupe axiale des contours de fraction molaire en CO_2 dans le jet (plan X=0).*

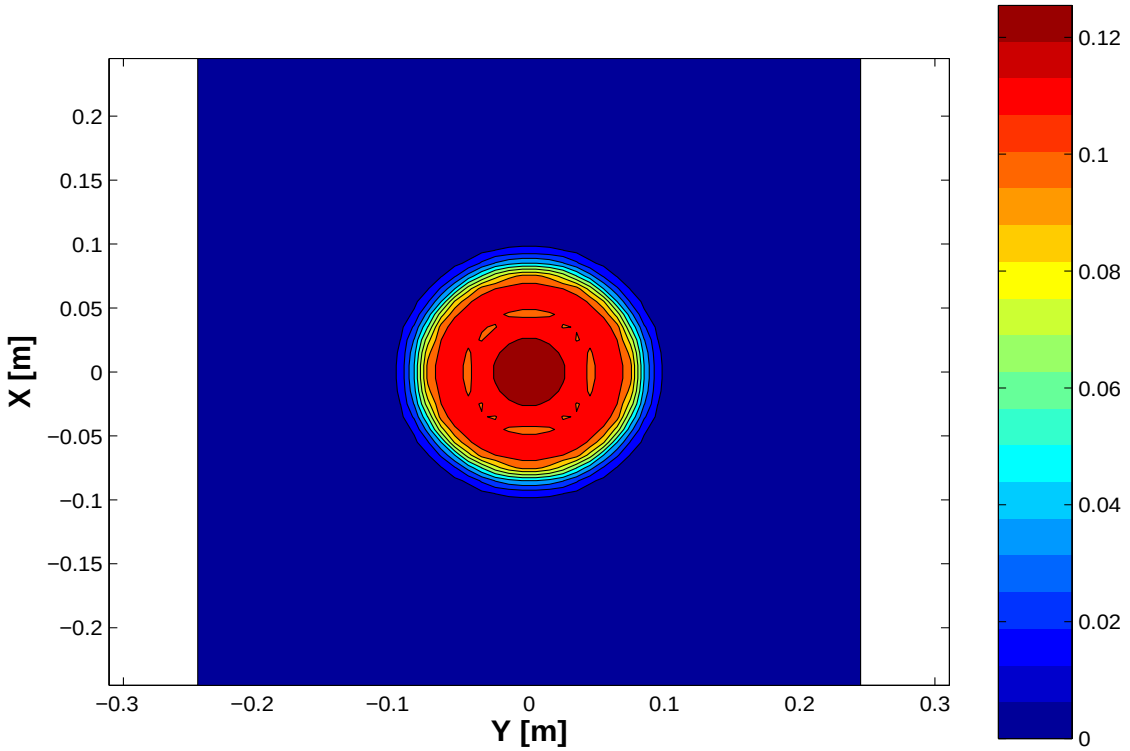


Fig. E.6 : *Coupe radiale des contours de fraction molaire en CO_2 dans le jet à Z=0.3m.*

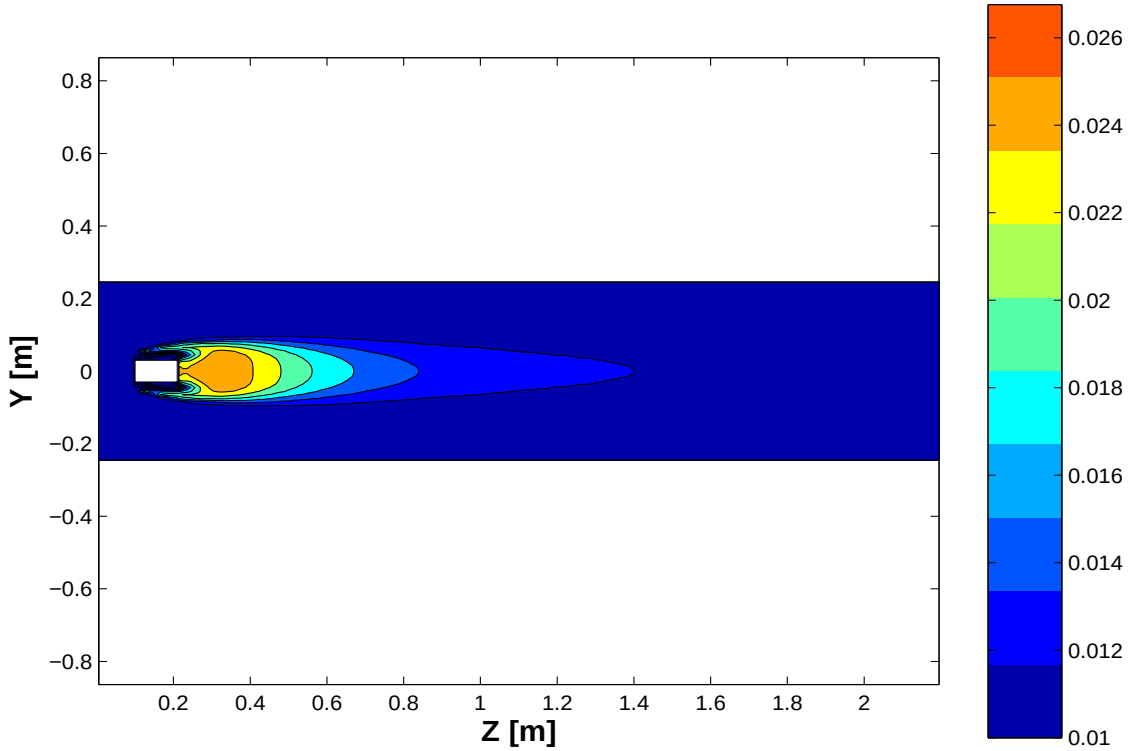


Fig. E.7 : *Coupe axiale des contours de fraction molaire en H_2O dans le jet (plan X=0).*

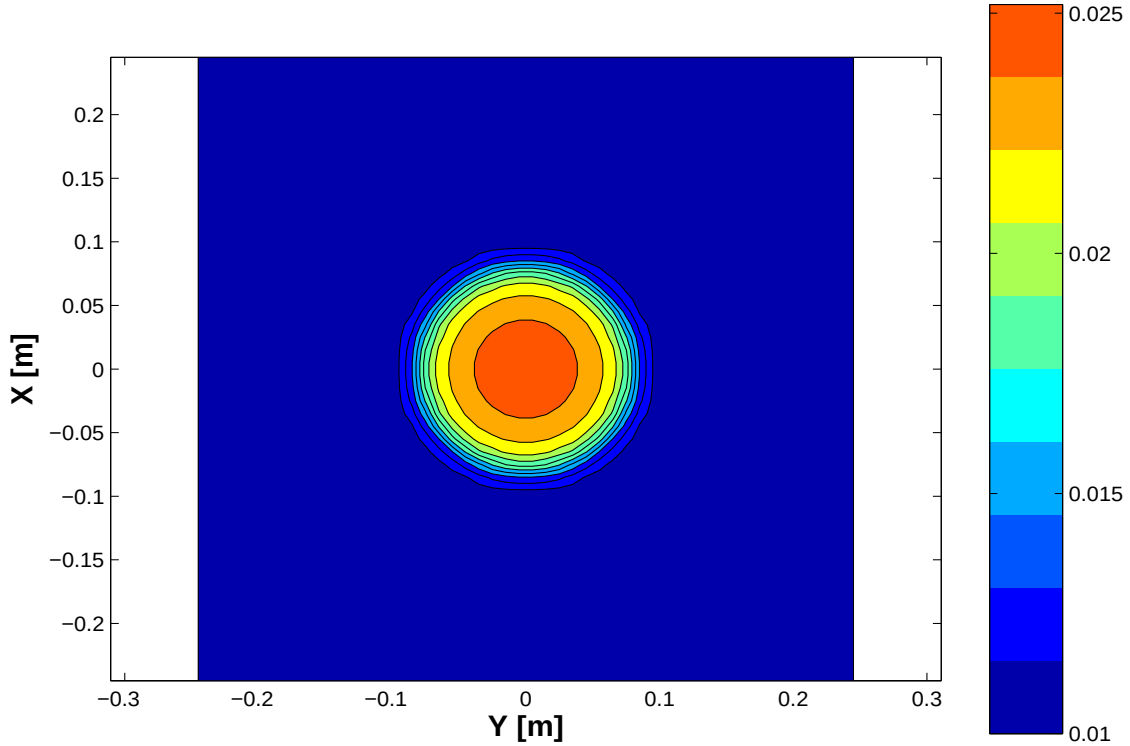


Fig. E.8 : *Coupe radiale des contours de fraction molaire en H_2O dans le jet à Z=0.3m.*

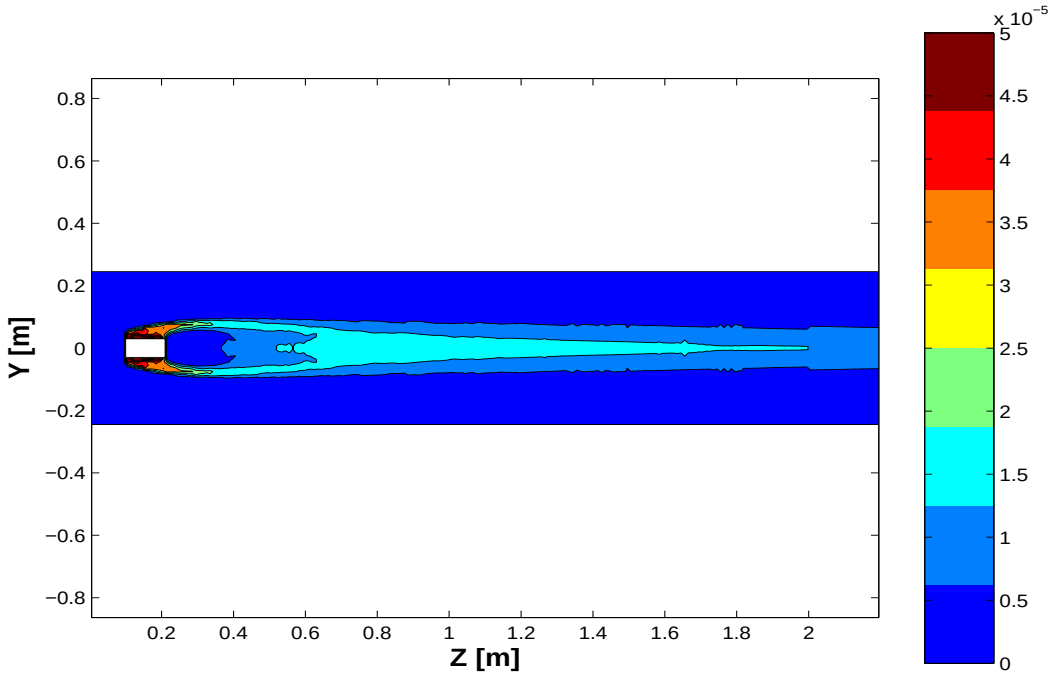


Fig. E.9 : *Coupe axiale des contours de fraction volumique en particules dans le jet (plan X=0).*

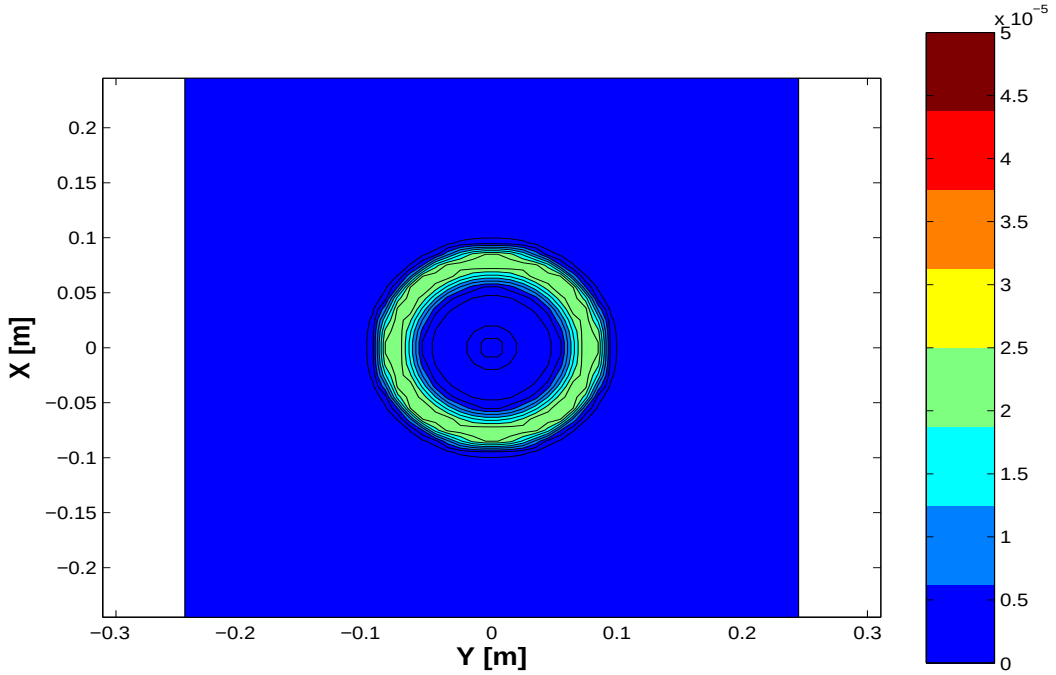


Fig. E.10 : *Coupe radiale des contours de la fraction volumique en particules dans le jet à Z=0.3m.*

F

Comparaison du jet simulé et mesuré

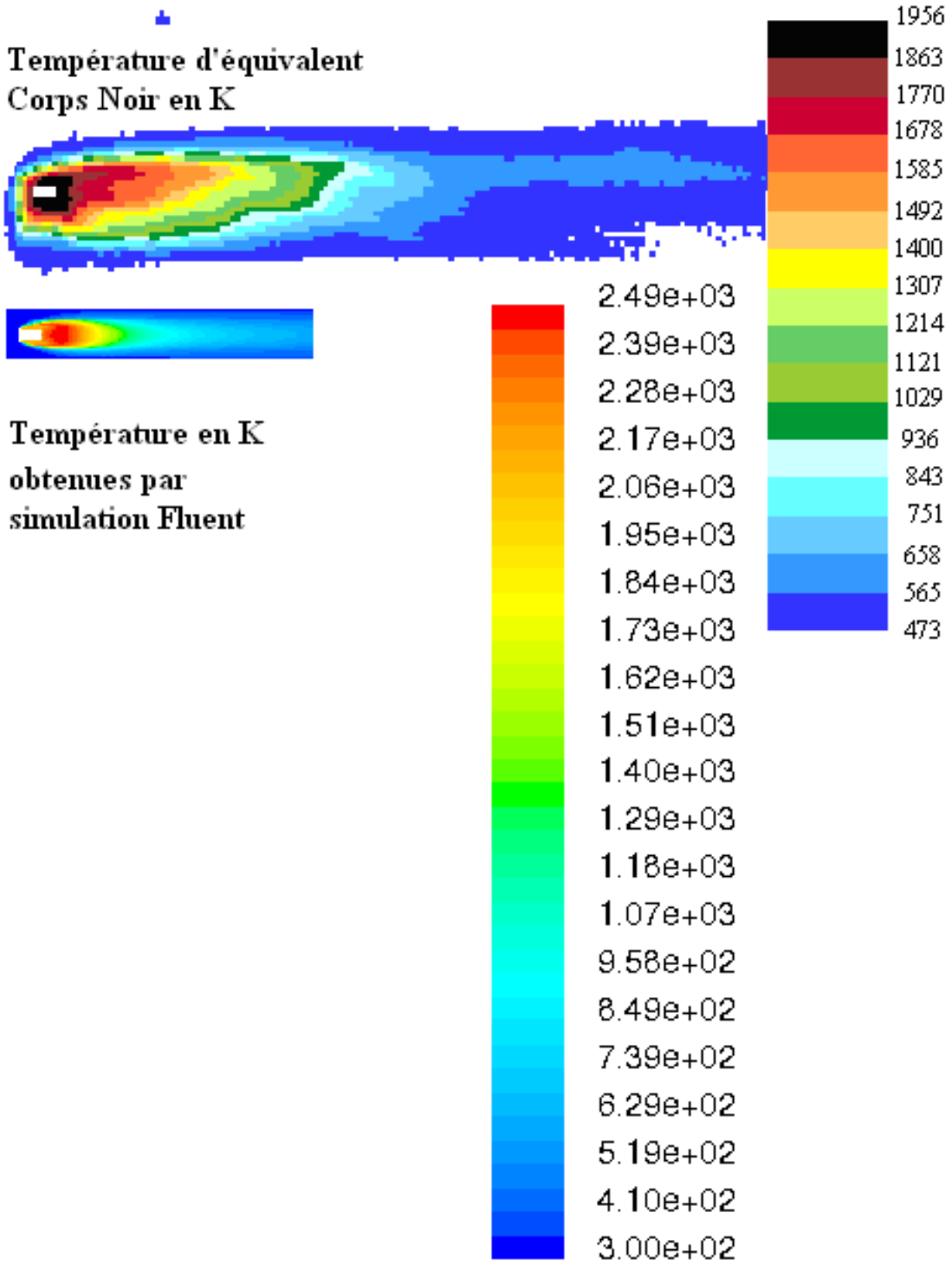


Fig. F.1 : *Comparaison de l'étendue spatiale du jet réel avec l'étendue spatiale du jet simulé par Fluent. La taille du bloc pour les deux jets est identique.*

G

Etalonnage et mesures spectroradiométriques

La société Lacroix utilise un spectroradiomètre HGH SPR 314 utilisant un filtre de longueur d'onde tournant, un mirroir Cassegrain et un détecteur sandwich (InSb et HgCdTe) refroidi par de l'azote liquide. Cet instrument est décrit dans la référence [103] dont le principe est donné sur la figure G.1 ci-après.

L'étalonnage a été réalisé devant un corps noir à haute température (1500K). Le signal V_{CN} reçu par le détecteur lors de l'étalonnage est converti en luminance d'un corps noir à la température T_{CN} suivant la relation :

$$V_{CN} = KL^o(T_{CN})\frac{S_{CN}}{d_{CN}^2} \tag{G.1}$$

avec K le coefficient de conversion du signal dans chaque bande étroite du spectre mesuré, S_{CN} est la surface du corps noir et d_{CN} la distance séparant le spectroradiomètre du corps noir. Lors de l'étalonnage le coefficient K est déterminé dans chaque bande spectrale du spectroradiomètre. Ainsi, lors d'une mesure, l'expression de l'intensité spectrale mesurée est donnée dans une bande par :

$$I_\Omega = L_m S_m = \frac{V_m}{V_{CN}} L^o(T_{CN})\frac{S_{CN}}{d_{CN}^2} d_m^2 \tag{G.2}$$

avec L_m, S_m, d_m la luminance, la surface et la distance de mesure respectivement. A la différence de l'étalonnage, la luminance émise par un objet n'est pas homogène sur sa surface. La quantité $L_m S_m$ mesurée est alors une intensité spectrale moyenne émise par un objet et reçue par un détecteur. Cette intensité est notée I_Ω.

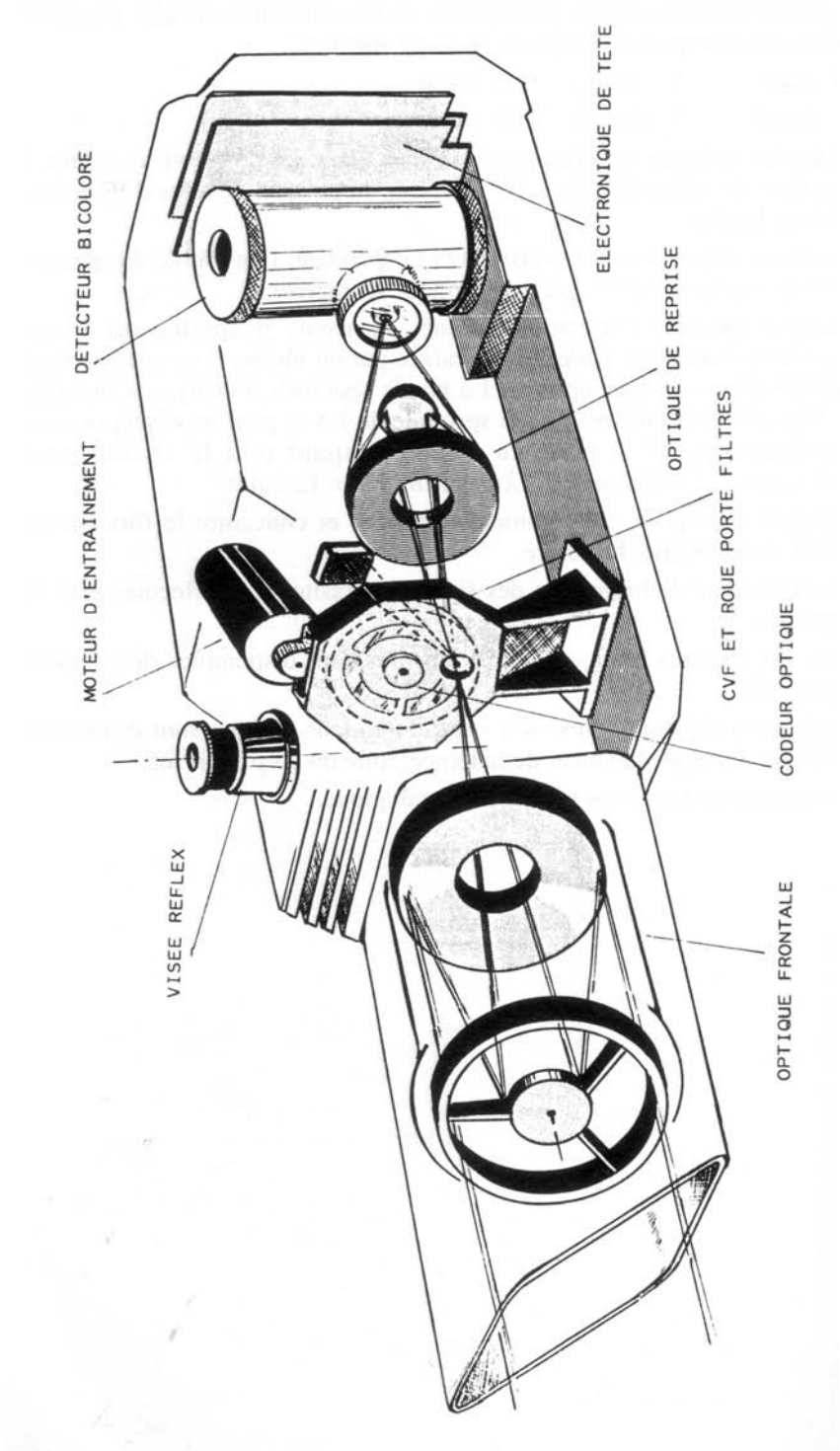


Fig. G.1 : *Architecture de la tête optique du SPR 314 (HGH).*

Bibliographie

[1] A. Soufiani and J. Taine. *Eléments de physique du rayonnement des gaz.* Ecole de printemps de rayonnement thermique (C.N.R.S., S.F.T.), 1996.

[2] *Quantitative Molecular Spectroscopy and Gas Emissivities.* Addison-Wesley, Massachusetts, 1959.

[3] *Thermal Radiation Heat Transfer.* Hemisphere Publishing Corporation, 1992.

[4] *Radiative Heat Transfer.* Mc Graw Hill, 1993.

[5] G. Mie. Optics of turbid media. *Ann. Phys.*, 25(3) :377–445, 1908.

[6] *The Scattering of Light and Other Electromagnetic Radiation.* Academic Press, New York, 1961.

[7] *Light Scattering by Small Particles.* Dover, New York, 1981.

[8] *Absorption and Scattering of Light by Small Particles.* Wiley, New York, 1983.

[9] *Atmospheric Radiation.* Oxford Univ. press, Oxford, 1989.

[10] J. Taine and A. Soufiani. Gas ir radiative properties : From spectroscopic data to approximate models. *Advances in Heat Transfer*, 33 :295–41, 1999.

[11] *Compilation of mass spectral data/Index de spectres de masse.* Heyden & Sons, 1966.

[12] S. Gossé. *Caractérisation de l'alumine issue de la combustion de propergols aluminisés. Contribution à l'évaluation de l'émissivité de l'alumine à haute température, influence de l'ambiance gazeuse environnante.* PhD thesis, Orléans, 2004.

[13] V.V. Karasev, A.A. Onischuk, O.G. Glotov, A.M. Baklanova, A.G. Maryasov, V.E. Zarkoa, V.N. Panfilova, A.I. Levykin, and K.K. Sabelfeld. Formation of charged aggregates of al2o3 nanoparticles by combustion of aluminum droplets in air. *Combustion and Flame*, 138 :40–54, 2004.

[14] C. J. Tsao and B. Curnutte. Line-widths of pressure-broadened spectral lines. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 2 :41–91, 1962.

[15] R. J. Wells. Rapid approximation to the voigt/faddeyeva function and its derivatives. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 62(1) :29–48, 1999.

[16] S. R. Drayson. Rapid computation of the voigt profile. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 16 :611–614, 1976.

[17] M. Kuntz. A new implementation of the humlicek algorithm for the calculation of the voigt profile function. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 57(6) :819–824, 1997.

[18] R. H. Dicke. The effects of collisions on the doppler width of spectral lines. *Phys. Rev.*, 89 :472–473, 1953.

[19] L. Galatry. Simultaneous effect of doppler and foreign gas broadening on spectral lines. *Phys. Rev.*, 122 :1218–1223, 1961.

[20] B. H. Winters, S. Silverman, and W. S. Benedict. Line shape in the wing beyond the band head of the 4.3μm band of co_2. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 4 :527–537, 1964.

[21] D. E. Burch, D. A. Gryvnak, R. R. Patty, and C. E. Bartky. Shape of collision-broadened co_2 lines. *J. Opt. Soc. Am.*, 59 :267–280, 1969.

[22] S. A. Clough, F. X. Kneizys, and R. W. Davies. Line shape and the water vapor continuum. *Atmospheric Research*, 23 :229–241, 1989.

[23] C. Cousin, R. Le Doucen, C. Boulet, and A. Henry. Temperature dependence of the absorption in the region beyond the 4.3 μm band head of co_2. 2 : n_2 and o_2 broadening. *Appl. Opt.*, 24(22) :3899–3907, 1985.

[24] R. Le Doucen, C. Cousin, C. Boulet, and A. Henry. Temperature dependence of the absorption in the region beyond the 4.3 μm band head of co_2. 1 : Pure co_2 case. *Appl. Opt.*, 24(6) :897–906, 1985.

[25] V. Menoux, R. Le Doucen, and C. Boulet. Line shape in the low frequency wing of self broadened co_2 lines. *Appl. Opt.*, 26(3) :554–562, 1987.

[26] V. Menoux, R. Le Doucen, and C. Boulet. Line shape in the low frequency wing of n_2 and o_2 broadened co_2 lines. *Appl. Opt.*, 26(23) :5183–5189, 1987.

[27] V. Menoux, R. Le Doucen, J. Boissoles, and C. Boulet. Line shape in the low frequency wing of self and n_2 broadened ν_3 co_2 lines : temperature dependence of the asymmetry. *Appl. Opt.*, 30(3) :281–286, 1991.

[28] M. Y. Perrin and J.-M. Hartmann. Temperature dependent measurements and modeling of absorption by $co_2 - n_2$ mixtures in the far line wings of the 4.3 μm co_2 band. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 42 :311–317, 1989.

[29] J.-M. Hartmann and M. Y. Perrin. Measurements of pure co_2 absorption beyond the ν_3 bandhead at high temperature. *Appl. Opt.*, 28(13) :2550–2553, 1989.

[30] J.-M. Hartmann, M. Y. Perrin, Q. Ma, and R. H. Tippings. The infrared continuum of pure water vapor : calculations and high-temperature measurements. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 49(6) :675–691, 1993.

[31] W. J. Lafferty, A. M. Solodov, A. Weber, Wm. B. Olson, and J.-M Hartmann. Infrared collision-induced absorption by n_2 near 4.3μm for atmospheric applications : measurements and empirical modeling. *Appl. Opt.*, 35(30) :5911–5917, 1996.

[32] F. Thibault, V. Menoux, R. Le Doucen, L. Rosenmann, J.-M. Hartmann, and C. Boulet. Infrared collision induced absorption by o_2 near 6.4μm for atmospheric applications : measurements and empirical modeling. *Appl. Opt.*, 36(3) :563–567, 1997.

[33] Rothman L. S. The hitran molecular spectroscopic database : edition of 2000 including updates through 2001. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 82 :5–44, 2003.

[34] H. Partridge and D. W. Schwenke. The determination of an accurate isotope dependent potential energy surface for water from extensive ab initio calculations and experimental data. *J. Chem. Phys.*, 106(11) :4618–4639, 1997.

[35] S. A. Tashkun et al. Cdsd-1000, the high-temperature carbon dioxide spectroscopic databank. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 82 :165–196, 2003.

[36] C. Delaye, J.-M. Hartmann, and J. Taine. Calculated tabulations of h_2o line broadening by h_2o, n_2, o_2 and co_2 at high temperature. *Appl. Opt.*, 28(23) :5080–5087, 1989.

[37] L. Rosenmann, J.-M. Hartmann, M. Y. Perrin, and J. Taine. Accurate calculated tabulations of ir and raman co_2 line broadening by co_2, h_2o, n_2, o_2 in the 300–2400 k temperature range. *Appl. Opt.*, 27(18) :3902–3907, 1988.

[38] J.-M. Hartmann, L. Rosenmann, M. Y. Perrin, and J. Taine. Accurate calculated tabulations of co line broadening by h_2o, n_2, o_2 and co_2 in the 200–3000 k temperature range. *Appl. Opt.*, 27(15) :3063–2065, 1988.

[39] L. Ibgui. *Etudes de spectres infrarouges pour des applications de télédétection : développement d'un calcul raie par raie optimisé - mesures en laboratoires, sur des trajets kilométriques ou à haute température.* PhD thesis, Université de Paris Sud, 2000.

[40] L. Rosenmann, S. Langlois, C. Delaye, and J. Taine. Diode laser measurements of co_2 line intensities at high temperature in the 4.3μm region. *J. Molec. Spectrosc.*, 149 :167–184, 1991.

[41] C. B. Ludwig. Measurements of the curves-of-growth of hot water vapor. *Appl. Opt.*, 10(5) :1057–1073, 1971.

[42] P. Perez, A. Boischot, L. Ibgui, and A. Roblin. A spectroscopic database for water vapor adapted to spectral properties at high temperature, and moderate resolution. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*

[43] P. Rivière, S. Langlois, A. Soufiani, and J. Taine. An approximate data base of h2o infrared lines for high temperature applications at low resolution. statistical narrow-band model parameters. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 53(2) :221–234, 1995.

[44] R. Goody, R. West, L. Chen, and D. Crisp. The correlated-k method for radiation calculations in nonhomogeneous atmospheres. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 42(6) :539–550, 1989.

[45] W. C. Gardiner, T. Hidaka, and T. Tanzawa. Refractivities of combustion gases. *Combustion and Flames*, 40 :213–219, 1981.

[46] R. M. Goody. A statistical model for water vapour absorption. *Quart. J. R. Meteorol. Soc.*, 78 :165–169, 1952.

[47] W. Malkmus. Random band lorentz with exponential-tailed s^{-1} line-intensity distribution function. *J. Opt. Soc. Am.*, 57 :323–329, 1967.

[48] A. R. Curtis. Contribution to a discussion of 'a statistical model for water vapour absorption' by r. m. goody. *Quart. J. R. Meteorol. Soc.*, 78 :638–640, 1952.

[49] W. L. Godson. The evaluation of infra-red radiative fluxes due to atmospheric water vapour. *Quart. J. R. Meteorol. Soc.*, 79 :367–379, 1953.

[50] G. H. Lindquist and F. S. Simmons. A band model formulation for very non uniform paths. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 12 :807–820, 1972.

[51] S. J. Young. Nonisothermal band model theory. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 18 :1–28, 1978.

[52] D. E. Burch, J. N. Howard, and D. Williams. Infrared transmissions of synthetic atmospheres. v. absorption laws for overlapping bands. *J. Opt. Soc. Am.*, 46 :452, 1956.

[53] G. L. Stephens. The parameterization of radiation for numerical weather prediction and climate models. *Mon. Wea. Rev.*, 112 :826–867, 1984.

[54] A. Arking and K. Grossman. The influence of line shape and band structure on temperatures in planetary atmospheres. *Journal of the Atmospheric Sciences*, 29 :937–949, 1972.

[55] G. A. Domoto. Frequency integration for radiative transfer problems involving homogeneous non-grey cases : The inverse transmission function. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 14 :935–942, 1974.

[56] M.-D. Chou and A. Arking. Computation of infrared cooling rates in the water vapor bands. *J. Atmos. Sci.*, 37 :855–867, 1980.

[57] V. Ambartzumian. The effect of the absorption lines on the radiative equilibrium of the outer layers of the stars. *Publ. Obs. Astron. Univ. Leningrad*, 6 :7–18, 1936.

[58] A. Soufiani and J. Taine. Application of statistical narrow-band model to coupled radiation and convection at high temperature. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 30 :437–447, 1987.

[59] L. Zhang, A. Soufiani, and J. Taine. Spectral correlated and non-correlated radiative transfer in a finite axisymmetric system containing an absorbing and emitting real gas-particle mixture. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 31 :2261–2272, 1988.

[60] P. Rivière, A. Soufiani, and J. Taine. Correlated-k and fictitious gas methods for h2o near 2.7μm. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 48(2) :187–203, 1992.

[61] M. F. Modest and R. J. Riazzi. Assembly of full-spectrum k-distributions from a narrow-band database ; effects of mixing gases, gases and nongray absorbing particles, and mixtures with nongray scatterers in nongray enclosures. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 90(2) :169–189, 15 January 2005.

[62] M. F. Gerstell. Obtaining the cumulative k-distribution of a gas mixture from those of its components. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 49(1) :15–38, 1993.

[63] V. P. Solovjov and B. W. Webb. A local-spectrum correlated model for radiative transfer in non-uniform gas media. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 73 :361–373, 2002.

[64] Q. Fu and K.-N. Liou. On the correlated k-distribution method for radiative transfer in nonhomogenous atmospheres. *J. Atmos. Sci.*, 49(22) :2139–2156, 1992.

[65] *Handbook of Infrared Radiation From Combustion Gases*. National Aeronautics and Space Administration, Washington D.C., 1973.

[66] R. Levi Di Leon and J. Taine. A fictive gas-method for accurate computations of low resolution ir gas transmissivities : application to the 4.3μm co_2 band. *Revue Phys. Appl.*, 21 :825–831, 1986.

[67] A. Soufiani, F. André, and J. Taine. A fictitious-gas based statistical narrow-band model for ir long-range sensing of h_2o at high temperature. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 73 :339–347, 2002.

[68] L. Pierrot, A. Soufiani, and J. Taine. Accuracy of narrow-band and global models for radiative transfer in h2o, co2, and h2o-co2 mixtures at high temperature. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 62 :523–548, 1999.

[69] F. Liu, G. J. Smallwood, and Ö. L. Gülder. Application of the statistical narrow-band correlated-k method to low-resolution spectral intensity and radiative heat transfer calculations - effects of the quadrature scheme. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 43(17) :3119–3135, 2000.

[70] J. Dupays. Two-phase unsteady flow in solid rocket motors. *Aerospace Science and Technology*, 6 :413–422, 2002.

[71] G. Lavergne. Modélisation de l'écoulement multiphasique dans le propulseur à poudre p230 d'ariane v. Ecole de combustion, 2004.

[72] E. W. Price. *Combustion of Metalized Propellants, In : Fundamentals of Solid Propellant Combustion*, volume 90, pages 479–514. Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, 1984.

[73] O.G. Glotov, V.E. Zarko, V.V. Karasev, and M.W. Beckstead. Condensed combustion products of metallized propellants of variable formulation. *AIAA Paper 98-0449*, pages 1–7, 1998.

[74] O.G. Glotov, V.E. Zarko, V.V. Karasev, and M.W. Beckstead. Condensed combustion products of aluminized propellants. *Trans. Aeronaut. Astronaut. Soc. Rep. China*, 34 :247–256, 2002.

[75] E.L. Dreizin. Phase changes in metal combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26 :57–78, 2000.

[76] E.L. Dreizin. Experimental study of stages in aluminum particle combustion in air. *Combustion and Flame*, 105 :541–556, 1996.

[77] C. L. Tien and B. L. Drolen. Thermal radiation in particulate media with dependent and idependent scattering. *Annual Review of Numerical Fluid Mechanics and Heat Transfer, Hemisphere, Washington, D.C.*, 1 :1–32, 1987.

[78] *Thermal Radiative Transfer and Properties*. Wiley, New York, 1992.

[79] R. Duval. *Transfert radiatif dans des chambres de combustion de propulseurs à propergol solide aluminisé*. PhD thesis, Ecole centrale de Paris, 2002.

[80] A. L. Aden and M. Kerker. Scattering of electromagnetic waves from two concentric spheres. *J. Appl. Phys.*, 22 :1242, 1951.

[81] O. B. Toon and T. P. Ackerman. Algorithms for the calculation of scattering by stratified spheres. *Appl. Opt.*, 2 :3657–3660, 1981.

[82] D. Diermendjian. *Electromagnetic Scattering on Spherical Polydispersions*. Elsevier, 1969.

[83] V. Eymet, R. Fournier, S. Blanco, and J.-L. Dufresne. A boundary-based net exchange monte-carlo method for absorbing and scattering thick media. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 91 :27–46, 2005.

[84] V. Eymet. *Simulation Monte-Carlo et analyse en Puissances Nettes Echangées des transferts radiatifs infrarouge avec diffusion : vers une paramétrisation dans un modèle de circulation générale atmosphérique*. PhD thesis, Université Paul Sabatier, 2003.

[85] L. G. Henyey and J. L. Greenstein. Diffuse radiation in the galaxy. *Astrophys. J.*, 93 :70–83, 1941.

[86] B. Bourasseau. Présentation du code coppelia. Rapport technique 5/3589ey, ONERA, 1989.

[87] L. Moreau. Développement d'une interface graphique et modélisation de l'émission infrarouge d'un jet composé de gaz et de particules. Technical report, Rapport du stage de fin d'étude, ENSIACET-Ecole des Mines d'Albi, 2005.

[88] *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, London, 1972.

[89] W. P. Jones and B. E. Launder. The prediction laminarization with a two-equation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15 :301–314, 1972.

[90] B. E. Launder and B. I. Sharma. Application of the energy dissipation of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer*, 1 :131–138, 1974.

[91] W. P. Jones and J. H. Whitelaw. Calculation methods for reacting turbulent flows : A review. *Combust. Flame*, 48 :1–26, 1982.

[92] P. Cheng. Two-dimensional radiating gas flow by a moment method. *AIAA Journal*, 2 :1662–1664, 1964.

[93] T. F. Smith, Z. F. Shen, and J. N. Friedman. Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model. *J. Heat Transfer*, 104 :602–608, 1982.

[94] A. Coppalle and P. Vervisch. The total emissivities of high-temperature flames. *Combust. Flame*, 49 :101–108, 1983.

[95] *Numerical heat transfer and fuid flow.* Hemisphere Publ. Corp., 1980.

[96] *Fluent User's Guide, Release 6.1.* Fluent Inc., 2003.

[97] J. K. Eaton and J. R. Fessler. Preferential concentration of particles by turbulence. *Int. J. Multiphase Flow*, 20 :169–209, 1994.

[98] F. Odar and W. S. Hamilton. Forces on a sphere accelerating in a viscous fluid. *Journal of Fluid Mechanics*, 18 :302–314, 1964.

[99] S. A. Morsi and A. J. Alexander. An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. *J. Fluid Mech.*, 55 :193–208, 1972.

[100] A. D. Gossman and E. Ioannides. Aspects of computer simulation of liquid fuelled combustors. In *Proceedings of the 19th AIAA Aerospace Sciences Meeting*, number AIAA 810323, St Louis, Missouri, USA, 1981.

[101] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops, part i. *Chem. Eng. Prog.*, 48 :141–146, 1952.

[102] W. E. Ranz and W. R. Marshall. Evaporation from drops, part ii. *Chem. Eng. Prog.*, 48 :173–180, 1952.

[103] G. Gaussorgues. *La thermographie infrarouge : Principes, technologies, applications.* Lavoisier, 1999.

Résumé

Les travaux réalisés durant la thèse s'inscrivent dans une problématique scientifique liée à l'étude des transferts radiatifs. Plus particulièrement, l'application de cette étude est la télédétection infrarouge d'un écoulement diphasique réactif et turbulent à haute température. Cette étude a pour objectif la modélisation et la simulation du rayonnement infrarouge émis par cet écoulement et reçu par un détecteur. Pour développer un outil de simulation numérique de la signature infrarouge d'un jet de gaz et de particules à haute température, les espèces majoritaires qui sont responsables de l'émission du rayonnement ont été identifiées lors d'expérimentations. Les campagnes expérimentales ont permis la construction de bases de données concernant les gaz (CO2-CO-H2O) et les particules (oxydes métalliques) présents dans le jet. Connaissant la nature des gaz et des particules, le calcul de leurs propriétés radiatives doit être réalisé. Cette étape est nécessaire puisque ces propriétés caractérisent l'émission de rayonnement par le jet et elles doivent être connues pour résoudre l'équation de transfert radiatif. Pour les gaz, un code de calcul raie par raie de spectres synthétiques a été développé. De plus, pour diminuer le temps de calcul d'une signature infrarouge, il est préférable d'utiliser des modèles spectraux de bandes étroites. Le modèle de télédétection infrarouge est un modèle spectral utilisant des k(coefficient d'absorption)-distributions sous l'hypothèse des k-corrélés avec l'approximation d'un gaz unique pour le mélange associée à l'hypothèse des gaz fictifs. Les paramètres de ce modèle (CKFG-SMG), ont été tabulés et validés dans l'étude. En ce qui concerne les propriétés radiatives des nuages de particules sphériques, le modèle de Mie est utilisé car il est valable pour les gammes de fractions volumiques rencontrées. Pour tester l'influence de la diffusion, une étude de sensibilité à la diffusion a été réalisée. En effet, nous avons quantifié l'erreur commise sur le flux émis par différentes couches si les processus de diffusion du rayonnement sont négligés. Cette étude a montré que l'influence de la diffusion peut être négligée dans le cadre de notre étude. La modélisation de la signature infrarouge du jet diphasique réactif issu de la combustion du matériau pyrotechnique, nécessite la connaissance des températures et des concentrations en gaz et particules, en tous les points du jet. Ce jet diphasique réactif a été simulé à l'aide du logiciel Fluent. De plus, une interface graphique a été développée qui recrée la scène optronique en se servant des profils aérothermochimiques du jet diphasique et des données concernant la position du détecteur. De cette façon, un outil de simulation numérique de la signature infrarouge du jet (SIRJET) a été développé qui inclue un modèle de transfert radiatif (lancer de rayon) ainsi que les paramètres tabulés (gaz et particules) du modèle spectral de télédétection infrarouge (CK, CKFG, CK-SMG, CKFG-SMG). Enfin, une confrontation est présentée entre une mesure et le résultat d'une simulation de la signature infrarouge d'un

jet diphasique à haute température.

Mots-clés: transfert radiatif infrarouge, modèle CK, gaz fictifs, single mixture gas, atmosphère, écoulement réactif turbulent, combustion, haute température

Abstract

The works realized during the thesis join a scientific problem connected to the study of radiative transfer. More particularly, the application of this study is the infrared remote sensing of a two-phase reactive turbulent flow at high temperature. This study has for objective the modelling and the simulation of the infrared intensity emitted by this jet and received by a detector. To develop a software dedicated to the simulation of the infrared signature of a jet containing gases and particles at high temperature, the major species involved were identified during experiments. Knowing the nature of gases (H2O-CO2-CO) and particles (oxidised metal), the calculation of their radiative properties must be realized. This stage is necessary because these properties characterize the infrared emission by the jet and they have to be known to resolve the radiative transfer equation. For gases, a line-by-line code was developed to compute synthetic spectra. Furthermore, to decrease the time of calculation of an infrared signature, it's better to use spectral models of narrow bands. The model of infrared remote sensing is the correlated-k model with the single mixture gas assumption used with the fictitious gases idea. The parameters of this model (CKFG-SMG) were tabulated and validated in the study. As regards, the radiative properties of the spherical particles clouds were computed with the Mie theory that is valid for the range of volume fraction considered in our study. To test the influence of scattering, a sensitivity study to the volume fraction and the refractive index was done which allows us to neglect scattering processes in the development of radiative transfer software designed to compute infrared signature within the framework of our study. Infrared signature modelling of the hot jet requires the knowledge of temperatures and concentrations of gases and particles, at each position in the jet. This two-phase reactive and turbulent flow was simulated with the commercial Fluent software. Furthermore, a graphic interface was developed which simulate the optronic scene by means of aerothermochemical profiles of the jet and datas concerning the position of the detector. In this way, a software of infrared signature computation (SIRJET) was developed which includes a model of radiative transfer (ray tracing) as well as tabulated parameters (gases and particles) of various spectral model used in infrared remote sensing (CK, CKFG, CK-SMG, CKFG-SMG). Finally, a confrontation is presented between a measure and a simulated infrared signature of a hot jet.

Keywords: infrared radiative transfer, CK model, fictitious gas, single mixture gas, atmosphere, turbulent reactive flow, combustion, high temperature