



HAL
open science

Études 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

Laurent Ibgui

► **To cite this version:**

Laurent Ibgui. Études 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. Physique Atomique [physics.atom-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 2000. Français. NNT: . tel-00449935

HAL Id: tel-00449935

<https://theses.hal.science/tel-00449935>

Submitted on 24 Jan 2010

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.

ORSAY
No d'ordre: 6124

**UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD
U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY**

Thèse présentée par

Laurent IBGUI

pour obtenir le grade de

DOCTEUR EN SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ PARIS XI

Sujet:

**Études 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**

Soutenue le 14 avril 2000 devant la commission d'examen composée de:

M. F. BEULÉ
M. C. BOULET
M. J.-M. HARTMANN
M^{me} N. LACOME (rapporteur)
M. A. ROBLIN
M. J. TAINÉ (rapporteur)

REMERCIEMENTS

Les travaux présentés dans ce mémoire de thèse sont le fruit d'une collaboration multiple. Ils furent menés essentiellement au Laboratoire d'infrarouge du bâtiment 350 d'Orsay, qui a successivement appartenu au Laboratoire de Physique Moléculaire et Applications (LPMA) puis au Laboratoire de PhotoPhysique Moléculaire (LPPM). Les instigateurs du projet furent la SNECMA et l'ONERA. La thèse fut financée, dans le cadre d'une convention CIFRE, par la SNECMA et l'ANRT. Une des parties expérimentales fut effectuée au Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique (GSMA) de Reims, l'autre fut traitée par le Laboratoire de Physique des Atomes, Lasers, Molécules et Surfaces (LPALMS) de Rennes. À tous ces organismes, sociétés ou laboratoires, j'exprime mes sincères remerciements, pour m'avoir accueilli ou (et) aidé à mener à bien ma tâche.

Je tiens à remercier Messieurs Claude Camy-Peyret, directeur du LPMA, et Jean-Marie Flaud, directeur du LPPM, de m'avoir accueilli dans leurs laboratoires.

J'exprime ma profonde reconnaissance à Messieurs Michel Desaulty et Frédéric Beulé, chefs successifs du département d'Aéro-Combustion de la SNECMA, ainsi qu'à Monsieur Antoine Roblin, responsable de l'unité de Modélisation de la Scène Optronique du département d'Optique Théorique et Appliquée de l'ONERA, de m'avoir accueilli au sein de leur structure de recherche respective. À Messieurs F. Beulé et A. Roblin, j'exprime ma gratitude d'avoir manifesté l'intérêt qu'ils portaient pour mon travail, notamment en m'ayant fait l'honneur de participer au jury de cette thèse en tant qu'examineurs.

Je remercie vivement Monsieur Jean-Michel Hartmann, chargé de recherche au CNRS, qui a dirigé mes travaux de thèse, auprès de qui j'ai su apprécier et apprendre la rigueur de ses approches intellectuelles et avec qui les discussions furent souvent passionnées.

J'exprime mes vifs remerciements à Monsieur Christian Boulet, professeur à l'Université d'Orsay, qui m'a fait l'honneur d'accepter de présider le jury de la thèse. Madame Nelly Lacome, professeur à l'Université Paris VI et directeur du Laboratoire de Spectrochimie Moléculaire, a pris un soin tout particulier à rapporter ce mémoire de thèse. Je la remercie sincèrement de s'être consacrée pleinement à ce rôle. Je remercie aussi Monsieur Jean Taine, professeur à l'École Centrale Paris, d'avoir rapporté ce travail.

Les volets expérimentaux de cette étude n'auraient jamais pu voir le jour sans la collaboration des équipes scientifiques des deux laboratoires de Reims et de Rennes. J'exprime ainsi ma gratitude à Madame Marie-France Mérienne et à Messieurs Alain Jenouvrier et Jean-Pierre Lux du GSMA de Reims, pour avoir mis à ma disposition leur fameuse cuve à long parcours, mais aussi pour leur disponibilité et leur soutien dans l'utilisation de cet outil. Le matériel de mesure IR nous a été fourni par Monsieur Alain Valentin, directeur de recherche au CNRS au LPMA à Jussieu, qui a contribué à son installation. Je l'en remercie vivement. Enfin, je remercie chaleureusement Messieurs Roger Le Doucen et Behrouz Khalil du LPALMS de Rennes à qui je dois les mesures des spectres présentés dans le deuxième volet expérimental.

Je ne saurais exclure de mes remerciements mes interlocuteurs scientifiques de la SNECMA et de l'ONERA, avec qui les échanges furent constructifs: Monsieur François Leglaye, ingénieur à SNECMA, ainsi que Madame Véronique Joly et Monsieur Thierry Huet, chercheurs à l'ONERA.

Enfin, je tiens à remercier les personnes que j'ai côtoyées et avec qui j'ai pu partager des moments de vie amicale dans le cadre professionnel de la thèse durant ces trois années.

Tout naturellement, les êtres qui me sont chers savent que je leur suis infiniment reconnaissant.

Résumé

Les travaux dont les résultats font l'objet de ce mémoire de doctorat s'inscrivent dans le cadre de l'étude expérimentale et théorique des processus d'absorption/émission de rayonnement infrarouge par des milieux moléculaires gazeux. Il a été motivé par des besoins pratiques liés à la modélisation de la signature infrarouge et de la télédétection rencontrés par l'ONERA et la SNECMA, société dont l'intérêt pour le sujet s'est traduit par des contrats et un cofinancement de la bourse de thèse (CIFRE). Le problème posé est celui de l'élaboration, puis de la validation, d'une approche théorique et numérique permettant de prédire les spectres infrarouges des milieux gazeux rencontrés dans les applications de télédétection. Ces derniers ont la caractéristique de mettre en jeu des trajets optiques comprenant un long parcours froid (l'atmosphère) juxtaposé à une partie plus courte et chaude (gaz de combustion). En raison de la forte variabilité des conditions thermophysiques le long des rayons, du nombre considérable de ces rayons à prendre en compte pour l'intégration sur l'angle solide de visée, et de l'étendue du domaine spectral d'intérêt, le volume de calculs associés à la prédiction de la signature infrarouge est considérable. L'approche théorique se doit donc d'être très efficace et rapide tout en restant la plus précise possible. Ce problème a été abordé ici sur le plan théorique et expérimental.

L'approche prédictive développée repose sur un modèle "raie par raie" dans lequel le spectre résulte de l'addition des contributions individuelles des transitions infrarouges des espèces moléculaires présentes. Cette approche est dans l'ensemble très précise mais aussi très coûteuse en temps de calcul en raison du nombre de raies à prendre en compte et de la forte dynamique spectrale des spectres aux pressions modérées des milieux considérés. Une fois posées les bases du modèle, un effort important a été consacré à l'optimisation des calculs qui a été faite à plusieurs niveaux en autorisant des erreurs contrôlées sur le résultat final. Nous avons ainsi développé : • une technique (la plus) rapide d'évaluation du profil (Voigt) des raies ; • un système de grilles spectrales de pas différents minimisant le nombre de points de calcul ; • une méthode efficace d'élimination des raies de contribution négligeable ; • une technique de coupure des ailes de raies associée à l'utilisation de continua. Ces concepts ont servi de base pour la construction d'un code informatique profitant des fonctionnalités (notamment la gestion dynamique de la mémoire) du langage Fortran90 qui a été implanté à la SNECMA et à l'ONERA. Ce travail a été un succès **puisque l'outil développé a réduit le**

temps de calcul d'un facteur trente par rapport au code raie par raie déjà optimisé dont disposait la SNECMA. **Ceci a permis de mener, pour la première fois, un calcul complet de signature infrarouge avec une approche raie par raie.**

En parallèle, des études expérimentales ont été menées afin de tester la qualité des prédictions obtenues avec le code développé. Deux dispositifs différents et complémentaires ont été utilisés afin de reproduire, en laboratoire, des milieux "représentatifs" de ceux mis en jeu par les applications de signature. • Le premier, que nous avons conçu, construit, et exploité a été développé autour d'une cuve multi-passages de 50 m de base au GSMA à Reims. Ce travail a permis (pour la première fois) la **mesure de spectres de transmission** dans le domaine 2-14 μm , à température ambiante mais pression variable, **pour des trajets optiques supérieurs au kilomètre**, schématisant ainsi les longs parcours atmosphériques rencontrés dans les applications pratiques considérées. Les résultats obtenus ont permis de valider les calculs, à quelques exceptions mineures et locales près. • Le second dispositif a été développé, à notre suggestion, par une équipe du LPALMS à Rennes. Le montage repose sur la juxtaposition d'une courte cuve chaude et d'une longue cuve froide, schématisant ainsi l'aspect gaz chauds + gaz froids des milieux mis en jeu par les applications pratiques. **Des spectres du CO₂ ont été enregistrés à haute résolution spectrale** dans les régions de 10 et 4 μm **pour des températures allant jusqu'à 1000 K**. Ces données ont confirmé la qualité des calculs prédictifs sous réserve que des bases de données spectroscopiques "chaudes" soient utilisées.

Table des matières

I. INTRODUCTION GÉNÉRALE.....	3
--------------------------------------	----------

II. MISE EN ŒUVRE D'UNE TECHNIQUE DE CALCUL DE SPECTRES INFRAROUGES RAPIDE	9
---	----------

II-1. INTÉRÊTS D'UNE APPROCHE RAIE PAR RAIE RAPIDE	9
II-2. MODÉLISATION DE L'ABSORPTION MOLÉCULAIRE INFRAROUGE	12
<i>II-2-1 LE SPECTRE PERMIS.....</i>	<i>13</i>
<i>II-2-2 ABSORPTION INDUITE PAR COLLISIONS</i>	<i>17</i>
<i>II-2-3 MODÈLE RETENU POUR LE CALCUL RAIE PAR RAIE</i>	<i>18</i>
II-3. CALCUL OPTIMISÉ DU COEFFICIENT D'ABSORPTION LOCAL.....	23
<i>II-3-1 CALCUL RAPIDE DU PROFIL DE VOIGT.....</i>	<i>24</i>
<i>II-3-2 MAILLAGE À GRILLES MULTIPLES</i>	<i>31</i>
<i>II-3-3 TRI DES RAIES.....</i>	<i>47</i>
<i>II-3-4 COUPURE DES AILES DE RAIES.....</i>	<i>58</i>
<i>II-3-5 PRISE EN COMPTE DE LA SATURATION EN ÉMISSION</i>	<i>62</i>
II-4. LES DONNÉES UTILISÉES PAR L'APPROCHE RAIE PAR RAIE OPTIMISÉE	66
<i>II-4-1 LES BANQUES DE DONNÉES SPECTROSCOPIQUES</i>	<i>66</i>
<i>II-4-2 PRÉ-TRI DES BANQUES DE DONNÉES DE RAIES</i>	<i>70</i>
<i>II-4-3 LES TABLES DE CONTINUA.....</i>	<i>78</i>
II-5. LES CRITÈRES D'ERREURS	80
<i>II-5-1 CRITÈRES D'ERREURS DANS LE SEGMENT COURANT</i>	<i>81</i>
<i>II-5-2 ERREURS TOTALES.....</i>	<i>88</i>
<i>II-5-3 MÉTHODOLOGIE DU CHOIX DES ERREURS.....</i>	<i>94</i>
<i>II-5-4 BILAN; ILLUSTRATION CHIFFRÉE DE L'INFLUENCE DES CRITÈRES D'ERREUR; CONCLUSION</i>	<i>96</i>
II-6. MISE EN ŒUVRE PRATIQUE DU CODE RAIE PAR RAIE.....	101
<i>II-6-1 ARCHITECTURE DU CODE.....</i>	<i>102</i>
<i>II-6-2 RATIONNALISATION DE L'UTILISATION DE LA MÉMOIRE</i>	<i>106</i>
II-7. BILAN; GAINS CPU; PERSPECTIVES.....	112

III.MESURES D'ABSORPTION INFRAROUGE SUR DES TRAJETS KILOMÉTRIQUES 117

III-1.	INTRODUCTION: BUT DE L'ÉTUDE	117
III-2.	DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL – MISE EN OEUVRE	118
<i>III-2-1</i>	<i>LE DISPOSITIF.....</i>	<i>118</i>
<i>III-2-2</i>	<i>TRAITEMENT ET ACQUISITION DU SIGNAL.....</i>	<i>124</i>
III-3.	PROCÉDURES D'AQUISITION ET DE TRAITEMENT D'UNE MESURE	125
<i>III-3-1</i>	<i>MISE EN ŒUVRE D'UNE EXPÉRIENCE.....</i>	<i>125</i>
<i>III-3-2</i>	<i>OBTENTION DE LA TRANSMISSION DU GAZ.....</i>	<i>126</i>
<i>III-3-3</i>	<i>REPÉRAGE EN NOMBRE D'ONDE</i>	<i>129</i>
<i>III-3-4</i>	<i>DÉTERMINATION DE LA RÉOLUTION SPECTRALE: LA FONCTION D'APPAREIL.....</i>	<i>131</i>
III-4.	RÉSULTATS DES CAMPAGNES DE MESURES; COMPARAISON AVEC LES CALCULS	132
<i>III-4-1</i>	<i>NOMBRES D'ONDES ÉTUDIÉS; SYNTHÈSE DES RÉSULTATS</i>	<i>133</i>
<i>III-4-2</i>	<i>COMPARAISONS CALCULS/MESURES</i>	<i>138</i>
III-5.	CONCLUSION: BILAN DES CAMPAGNES DE MESURES, PERSPECTIVES	145

IV.MESURES D'ABSORPTION INFRAROUGE CUVE CHAUDE-CUVE FROIDE 147

IV-1.	INTRODUCTION: BUT DE L'ÉTUDE EXPÉRIMENTALE.....	147
IV-2.	DESCRIPTION DU DISPOSITIF.....	148
IV-3.	RÉSULTATS DES MESURES; COMPARAISONS AVEC LE CALCUL	151
<i>IV-3-1</i>	<i>VALIDITE DES BASES DE DONNÉES HITRAN ET HITEMP</i>	<i>154</i>
<i>IV-3-2</i>	<i>TESTS DANS DES CONFIGURATIONS CUVE CHAUDE-CUVE FROIDE.....</i>	<i>157</i>
<i>IV-3-3</i>	<i>COMPARAISONS DE SPECTRES EXPRIMÉS EN LUMINANCE.....</i>	<i>160</i>
<i>IV-3-4</i>	<i>PERSPECTIVES D'ÉTUDES SUSCITÉES PAR LES MESURES</i>	<i>163</i>
IV-4.	CONCLUSION, PERSPECTIVES	166

V.CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES..... 169

BIBLIOGRAPHIE 173

I. INTRODUCTION GÉNÉRALE

Le transfert d'énergie par rayonnement est un processus physique qui se manifeste dans de multiples phénomènes naturels ou provoqués par l'Homme. Des échanges radiatifs se produisent dans le domaine de l'astrophysique dans les enveloppes stellaires, en planétologie dans les atmosphères planétaires, ou plus prosaïquement sur Terre avec notamment l'étude du problème de la propagation du rayonnement solaire à travers les nuages, ou celui de la télédétection pour déterminer les profils verticaux des paramètres thermophysiques des colonnes atmosphériques, ou encore celui de l'évaluation de l'effet de serre. Nous pouvons aussi mentionner l'existence d'échanges au sein de couverts végétaux. Dans la catégorie des phénomènes provoqués, de multiples applications industrielles mettent en jeu des échanges radiatifs, comme les fours verriers, les moteurs thermiques, l'étude des flammes pour la sécurité des plates-formes pétrolières ou pour les foyers de propulseurs aérospatiaux. Nous n'oublions pas les couches de chocs réactives qui se forment à l'avant d'une navette spatiale ou d'une sonde entrant dans la haute atmosphère. Pour terminer ce tour d'horizon, nous citons le domaine de la signature infrarouge (SIR) où il s'agit d'évaluer le rayonnement d'un corps "chaud" vu à travers un milieu "froid". Parmi tous ces exemples, certains impliquent plus particulièrement le rayonnement thermique (infrarouge) en milieu gazeux à l'équilibre pour des espèces moléculaires: télédétection, atmosphères, flammes (en première approximation), fours, moteurs, SIR. Pour cette dernière application, la gamme des conditions thermophysiques qui sont rencontrées est large puisque les températures sont comprises entre 160 K et 3000 K, les pressions entre 10^{-4} atm et 40 atm, le domaine des longueurs d'onde d'intérêt va de 0.5 μm à 30 μm . La prévision des échanges radiatifs dans de telles situations nécessite des outils théoriques les plus précis possibles et qui allient en même temps rapidité et souplesse d'utilisation. La validation des modèles conçus à cette fin requiert des expériences reproduisant les configurations rencontrées.

Le travail dont la présentation fait l'objet de ce document s'inscrit dans cette problématique. Il vise à répondre à des besoins industriels pressants lié à la télédétection, et plus précisément à la signature infrarouge des aéronefs (SIR), émanant de la SNECMA¹ et de

¹ Société Nationale d'Études et de Constructions de Moteurs d'Aviation

l'ONERA¹, instigateurs de ce doctorat cofinancé par SNECMA dans le cadre d'une convention CIFRE. Une des nécessités dans la conception d'engins à combustion aérobique pour l'industrie aéronautique militaire est la furtivité. Or, ce sont les jets des moteurs qui contribuent essentiellement à l'émission dans le domaine infrarouge. Il est donc indispensable de comprendre et maîtriser la contribution des gaz moléculaires à l'absorption/émission de rayonnement infrarouge dans toutes les conditions susceptibles d'être rencontrées dans un trajet partant de la source émettrice (l'aéronef) pour atteindre l'observateur (tout capteur ou caméra infrarouge). Aux conditions de températures et pressions déjà évoquées, nous rajoutons à titre d'exemple les produits (fraction molaire de gaz absorbant \times pression \times trajet optique) de deux molécules particulièrement actives et rencontrées dans les applications infrarouges: jusqu'à quelques 10^3 m.atm pour H₂O et 40 m.atm pour CO₂. Ainsi, les recherches menées lors de la thèse couvrent un domaine de conditions vaste au sein duquel on pourrait trouver bien d'autres applications que la SIR qui fut l'objectif principal. Nos études se sont alors articulées autour de deux axes nécessairement liés et complémentaires: nous avons conçu un logiciel optimisé de calcul de spectres d'absorption/émission de mélanges moléculaires gazeux à l'équilibre. Nous avons aussi monté et exploité un dispositif de mesures de transmissions de colonnes de gaz atmosphériques, et suggéré, pour en exploiter les résultats, une expérience impliquant des gaz à haute température.

Ainsi, le premier volet de notre travail est d'ordre théorique et numérique. Il s'agit de concevoir une approche rigoureuse mais aussi optimisée sur le plan numérique et de la consommation CPU, permettant la prédiction de l'émission/absorption infrarouge de gaz. La première exigence, qui fait référence à la précision, est satisfaite si le modèle adopté par le calcul est fidèle aux processus physiques entrant effectivement en jeu. Nous avons à cet effet choisi l'approche dite "raie par raie". Celle-ci consiste en la reconstitution de spectres par la prise en compte de toutes les transitions quantiques associées à tous les constituants absorbants d'un mélange gazeux. Ces transitions se traduisent par une variabilité importante de la dynamique spectrale. Ainsi, du fait du nombre considérable de raies (quelques 10^6) et de la discrétisation spectrale nécessairement fine (quelques 10^5 voire 10^6 points de calcul), auxquels il faut rajouter le nombre important de colonnes de gaz discrétisant un angle solide de visée (quelques 10^5), il se dessine une double pénalisation du calcul, laquelle s'exprime en termes de temps de calcul et de place mémoire. Il apparaît ici que l'exigence de précision a pour conséquence la nécessité d'une optimisation poussée. Une part importante et essentielle

¹ Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales

de notre travail a donc consisté en des réflexions approfondies à ce sujet et à leur transcription informatique par la création d'un code de calcul.

Le deuxième axe de notre étude est expérimental. Il vise à répondre à des besoins de validation de notre approche théorique et des bases de données spectroscopiques associées. Sa nécessité résulte d'une double impossibilité, d'une part de mener des expériences sur des trajets "en extérieur" tout en maîtrisant les conditions thermophysiques des colonnes de gaz étudiées, d'autre part de réaliser des mesures à haute résolution de l'émission de gaz chauds en configuration industrielle. Il existe certes des dispositifs de mesures de spectres issus de jets sur bancs d'essais à SNECMA, mais la résolution est cantonnée au cm^{-1} et de nombreux éléments limitent la connaissance précise des conditions thermophysiques du milieu: l'aérodynamique et la prise en compte de la turbulence ainsi que les réactions chimiques de combustion dans un moteur d'avion ne sont pas maîtrisées de façon suffisamment fine pour déterminer avec précision en tout point la composition des gaz et les champs de température et de pression. Deux configurations furent alors envisagées et développées en laboratoire. La première, avec un parcours en cuve de 1 km, simule de longs trajets atmosphériques et rejoint ainsi la problématique SIR. Les expériences permettent en particulier de tester l'absorption des ailes lointaines de raies, lesquelles contribuent fortement à l'absorption globale dans de telles configurations. Le deuxième volet de l'aspect expérimental vise à reproduire des configurations types de télédétection, à savoir une couche gazeuse chaude dans une cuve atteignant 1000 K vue à travers un milieu froid. Ici, les paramètres thermophysiques sont maîtrisés et il est aisé, connaissant la transmission, de remonter à l'émission.

Ces trois voies d'étude (le volet théorique et les deux volets expérimentaux) de la modélisation du rayonnement infrarouge furent l'objet du travail de thèse présenté dans ce manuscrit qui s'articule donc autour de trois parties.

Le premier chapitre présente une nouvelle approche raie par raie que nous avons conçue et appliquée dans le cadre de l'élaboration d'un code de calcul de spectres d'émission/absorption de mélanges gazeux actifs dans l'infrarouge. Le but est de déterminer la transmission et la luminance dans le sens émetteur-observateur, d'une colonne de gaz inhomogène, anisobare, anisotherme. Nous montrerons en guise d'introduction de ce chapitre les intérêts de conserver une modélisation rigoureuse tout en optimisant sa vitesse d'exécution, les avantages fondamentaux étant d'une part de disposer d'un étalon pour tout modèle de calcul approché, avec des temps de calculs raisonnables qui autorisent son emploi

fréquent, d'autre part d'accroître le champ des possibilités d'application par rapport à ce que permettaient les anciens codes raie par raie. Nous décrivons dans les parties suivantes les techniques d'optimisation du code que nous avons développées et appliquées. Nous avons ainsi mis au point une méthode de calcul, la plus rapide à ce jour, d'un profil de raie (fonction de Voigt), conçu un procédé de génération de maillage à grilles multiples adapté à la dynamique du profil et limitant ainsi le nombre de calculs directs remplacés par des interpolations linéaires. Nous présentons ensuite comment nous pouvons déterminer avant tout calcul de spectre, par une méthode de tri, les raies contribuant le moins à l'absorption afin de les négliger. Dans le même ordre d'idées, nous proposons de couper les ailes des raies pour n'en conserver que les parties significatives, les contributions lointaines étant modélisées par des continua. Enfin, nous tirons parti de saturations possibles des émissivités, afin de stopper le calcul dans les zones spectrales concernées. Nous décrivons par la suite les données qui alimentent le code et la façon de pré-trier les banques de données de raies afin d'éliminer les raies négligeables encore plus rapidement que par la méthode de tri. Après, nous entamons une discussion approfondie sur la maîtrise, par un utilisateur du code, des erreurs qui permettent nos optimisations. Enfin, nous présentons le code sous l'aspect pratique algorithmique et informatique. Nous donnerons en conclusion de ce chapitre des résultats de gains chiffrés indicatifs. Nous verrons que l'issue de ce travail se révèle être un succès. En effet, **la SNECMA, premier destinataire, a pu bénéficier de la structure modulaire du code pour l'intégrer très rapidement dans ses propres logiciels à architecture parallèle (1 semaine de travail par 1 ingénieur). La société a ensuite procédé à des tests de temps CPU, sur des configurations réelles de signature, qui ont montré des gains d'un facteur multiplicatif de plus de 30 par rapport au code raie par raie optimisé qu'elle utilisait précédemment.** Par ailleurs, des tests préliminaires menés par l'ONERA, second destinataire du code, ont montré des gains d'un facteur 4 par rapport à un code américain rapide de renommée internationale, FASCODE.

Le deuxième chapitre traite de l'aspect expérimental axé sur la mesure de spectres infrarouges de transmission sur des trajets kilométriques. Nous avons conçu, monté et exploité un dispositif au GSMA à Reims autour d'une cuve à réflexions multiples, unique en Europe, de 50 m de long, laquelle préexistait et servait pour des mesures dans l'UV¹. **Les trajets optiques expérimentés furent supérieurs au kilomètre.** Nous décrivons dans ce

¹ Le système fut développé au cours des années 80 par Madame Marie-France Mérienne, Messieurs Alain Jenouvrier et Jean-Pierre Lux du GSMA (Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique – UFR Sciences Exactes et Naturelles, B.P 1039 51687 Reims cedex, France).

chapitre le dispositif qui se compose d'éléments optiques, le domaine de longueur d'onde étant sélectionné par un spectromètre à réseau, et de matériel électronique et informatique pour assurer le traitement du signal et les acquisitions. Un grand nombre de zones spectrales d'intérêt, dans la gamme $1.9 \mu\text{m} - 12.5 \mu\text{m}$, furent étudiées. Nous pouvions régler la pression dans la cuve, qui était à la température ambiante, en introduisant de l'air et parfois un excès de CO_2 pour simuler des trajets réels équivalents bien supérieurs au kilomètre. La résolution obtenue fut de l'ordre du cm^{-1} voire moins. Nous montrerons que les comparaisons des résultats obtenus avec nos calculs issus du programme raie par raie furent très satisfaisantes et qu'elles permirent de valider la prédiction du continuum de CO_2 . Nous montrerons aussi que des résultats préliminaires avec la vapeur d'eau ouvrent la perspective d'études plus complètes, axées notamment sur le continuum de H_2O .

Le troisième chapitre aborde l'aspect expérimental axé sur la simulation de configurations de télédétection du type signature infrarouge. Nous avons en effet inspiré un travail expérimental à une équipe du LPALMS à Rennes¹ qui a monté et exploité un dispositif reposant sur la juxtaposition d'une cuve chaude simple passage ($\sim 20 \text{ cm}$) et d'une cuve froide multi-passages (trajet de 48 m), la sélection de la longueur d'onde étant ici réalisée par un spectromètre à transformée de Fourier à haute résolution. Il était possible de régler la pression et la température des cuves. Deux régions de quelques centaines de cm^{-1} de large furent sondées, autour de $4.3 \mu\text{m}$ et de $10 \mu\text{m}$. L'originalité de ces expériences réside dans la température atteinte dans la cuve chaude, près de 1000 K . **Notons que c'est la première fois, à notre connaissance, qu'il a été possible de mesurer des spectres d'absorption à si haute résolution (0.025 à 0.050 cm^{-1}) et à si haute température (près de 1000 K), sur de larges gammes spectrales.** Après une description du dispositif expérimental, nous présenterons les résultats obtenus. Nous verrons que ceux-ci nous permettent de valider les calculs du code à haute résolution avec des bases de données chaudes du type HITEMP, de vérifier l'insuffisance des bases de données froides du type HITRAN pour traiter des couches chaudes, de mettre en évidence des phénomènes localisés comme les interférences entre raies dans les branches Q et dans le retournement du spectre au niveau de la tête de bande de la transition ν_3 de CO_2 .

¹ Messieurs Roger Le Doucen et Behrouz Khalil du LPALMS (Laboratoire de Physique des Atomes, Lasers, Molécules et Surfaces - Université de Rennes I, campus de Beaulieu, 35042 Rennes cedex, France).

Soulignons la cohérence entre les trois études menées. Les mesures servent à tester les limites de validité du modèle utilisé par le code, les bases de données spectroscopiques, et ouvrent des perspectives d'études théoriques.

II. MISE EN ŒUVRE D'UNE TECHNIQUE DE CALCUL DE SPECTRES INFRAROUGES RAPIDE

II-1. INTÉRÊTS D'UNE APPROCHE RAIE PAR RAIE RAPIDE

La simulation de grandeurs associées aux problèmes de télédétection ou de transfert radiatif suppose la maîtrise du calcul de l'émission/absorption infrarouge par des gaz. On peut être amené à chercher des flux, des densités d'énergie radiative, des pressions de radiation. Or ces quantités résultent de l'intégration spatiale selon un angle solide donné d'une grandeur caractérisant la propagation du rayonnement: la luminance. Il s'agit alors de calculer cette propagation à travers chaque constituant élémentaire de l'angle solide, à savoir une colonne. Mais celle-ci est par nature hétérogène, anisotherme, anisobare; une deuxième discrétisation en segments élémentaires aux conditions thermophysiques uniformes s'impose donc. Sachant que l'on cherche souvent à connaître les grandeurs dans plusieurs configurations de visées (angles solides pointant dans différentes directions, ou de tailles différentes), la lourdeur de la mise en œuvre peut se révéler très rapidement, surtout si on veut une description pointue des milieux étudiés qui se répercute inévitablement en discrétions plus fines, donc sur le nombre de colonnes (quelque 10^5) et de segments (quelques centaines par colonne). Enfin le calcul de la luminance nécessite la résolution de l'équation de transfert radiatif dans laquelle figure le coefficient d'absorption, la diffusion n'étant pas prise en compte ici. On est donc ramené au calcul de cette grandeur de base qui varie avec une très forte dynamique en fonction de la longueur d'onde. Si l'on veut être au plus près de cette évolution, il faut non seulement prendre en compte les transitions infrarouges (quelque 10^6 ou plus) de tous les gaz présents mais aussi discrétiser finement le domaine spectral d'étude (quelque 10^6 points de calcul pour les zones spectrales d'intérêt). On voit donc que pour accéder à une grandeur radiative totale et globale, il est nécessaire de décomposer le problème en une

quantité énorme de sous-problèmes à traiter individuellement. Il est donc nécessaire d'avoir une méthode de calcul fiable et rapide. L'objet de ce chapitre est de présenter l'approche retenue, qui respecte suffisamment les processus d'absorption/émission de gaz en sommant les contributions de toutes les transitions quantiques pour calculer un coefficient d'absorption. Il s'agit de l'approche dite "raie par raie", qui est par essence très coûteuse en temps de calcul.

Pour contourner l'obstacle du temps de calcul, des modèles approchés ont été développés et font encore l'objet de recherches. Ils permettent, en des temps acceptables, d'effectuer des calculs lourds de transfert radiatif, notamment en trois dimensions pour décrire un avion complet par exemple. Citons les deux grandes catégories de modèles (voir la référence [PIER,99] et celles qui y sont citées). La première famille regroupe les modèles de type ck (correlated-k ou correlated distribution function). Ceux-ci sont une généralisation aux milieux gazeux non homogènes et anisothermes du modèle de "distribution de k" utilisé en astrophysique depuis les années 30. Ils consistent à réordonner le coefficient d'absorption à haute résolution, donc de structure complexe, selon une fonction monotone croissante du nombre d'onde. La deuxième famille est celle des modèles où l'on fait des hypothèses statistiques sur les positions des raies et la loi de répartition de leurs intensités au sein d'une bande spectrale. On raisonne ici en transmittivité et la notion physique de coefficient d'absorption disparaît. L'atout de ces méthodes est leur rapidité d'exécution, l'inconvénient est leur caractère approché qui restreint leurs domaines d'applications. **Le modèle raie par raie** étant le seul dont on est sûr de la précision du fait même de son approche physique du problème¹, **se retrouve donc être**, dans le domaine du transfert radiatif, **l'étalon** auquel toute méthode approchée cherchant une validation devra se confronter. Nous rappelons notre objectif posé en introduction générale, à savoir la mise au point d'un programme informatique de calcul rapide de spectres par ce modèle, les commanditaires étant la SNECMA et l'ONERA avec la gamme de conditions suivantes: températures de 160 K à 3000 K, pressions de 10^{-4} à 40 atmosphères, produits (fraction molaire de gaz absorbant \times pression \times trajet optique) jusqu'à quelques 10^3 m.atm pour H₂O et 40 m.atm pour CO₂.

Ce chapitre décrit la façon dont nous avons optimisé l'approche raie par raie afin de réduire sensiblement le temps inhérent à son application. Dans un premier temps, nous présentons dans le chapitre II-2 différents problèmes soulevés par la modélisation de l'absorption infrarouge, sachant que les travaux de recherche associés, qui sortent du cadre de

¹ On exclut cependant quelques phénomènes particuliers modifiant les profils de raies, lesquels seront abordés au chapitre II-2 traitant des modélisations physiques de l'absorption moléculaire infrarouge.

ce travail, constituent un domaine d'étude à part entière. Nous indiquerons alors le modèle retenu pour notre approche raie par raie. Nous décrivons ensuite les techniques d'optimisation employées pour calculer le coefficient d'absorption (chapitre II-3). Nous proposons d'abord un calcul rapide du profil de raie, puis la constitution d'un maillage des nombres d'onde à grilles multiples épousant au mieux la forme des profils. Puis nous présentons une technique de tri des raies afin d'éliminer celles dont la contribution est négligeable. Dans le même ordre d'idée, nous envisageons une coupure des ailes de raies et enfin un arrêt du calcul dans les zones spectrales saturantes en émission. Parallèlement à la réflexion sur les méthodes d'optimisation de l'approche raie par raie, nous avons développé un code de calcul appliquant les concepts développés. L'objet du logiciel est de calculer la transmission et la luminance (dans le sens émetteur \rightarrow observateur) d'une colonne de gaz inhomogène, anisotherme, anisobare. Le chapitre suivant (II-4) traite des données utilisées par le programme. Il s'agit d'abord de bases de données spectroscopiques donnant toutes les quantités nécessaires au calcul des contributions des raies. Ensuite nous montrons comment pré-trier ces bases de données, pour après les compléter par des nombres permettant d'accélérer très sensiblement la phase de tri des raies. Enfin nous évoquons un autre moyen d'accélérer le calcul par l'utilisation de tables modélisant les contributions lointaines de raies, appelées continua. Une originalité supplémentaire essentielle de l'approche que nous avons développée est la maîtrise des erreurs numériques engendrées par les techniques d'optimisation. Cela fait l'objet du chapitre II-5, lequel montrera aussi que l'utilisateur du code peut choisir les critères d'erreurs à imposer au calcul. Le chapitre II-6 est un peu plus technique car il présente l'aspect algorithmique du code et l'utilisation des nouvelles possibilités offertes par le langage Fortran90, notamment une facilitation de la conception d'une architecture modulaire, et la maîtrise de l'espace mémoire. Enfin nous montrerons en guise de conclusion (chapitre II-7) quel est l'impact des optimisations présentées aux chapitres précédents en termes de temps CPU, notamment la grande sensibilité au choix des critères d'erreurs (on a mesuré des facteurs multiplicatifs de 26, en maintenant une erreur faible). Nous montrerons pour conclure que l'objectif que nous nous étions fixé au départ, à savoir la construction d'une approche raie par raie sensiblement plus rapide que celles qui existaient auparavant, est doublement atteint. Sur le plan quantitatif d'abord car on a obtenu **des gains se chiffrant en facteurs multiplicatifs de 36 par rapport à des codes précédents déjà optimisés** mais qui ne donnaient aucune indication sur les erreurs engendrées par leurs optimisations. L'apport qualitatif découle du quantitatif: de nouvelles perspectives de calculs inenvisageables auparavant du fait de la

lenteur rédhibitoire des anciens codes raie par raie rentrent dans le domaine du possible. En effet, **grâce au code que nous avons développé, SNECMA a pu, pour la première fois, effectuer un calcul complet de signature infrarouge d'avion (200000 rayons) par l'approche raie par raie.**

II-2. MODÉLISATION DE L'ABSORPTION MOLÉCULAIRE INFRAROUGE

L'objet de ce chapitre est de rappeler rapidement quels sont les différents modèles associés au calcul de l'absorption infrarouge gazeuse, sachant que le coefficient d'absorption est la grandeur de base dont la connaissance est indispensable pour tout calcul de transfert radiatif dans un milieu non diffusant. À l'intention de tout lecteur souhaitant en savoir plus sur les recherches dans un domaine précis, des renvois bibliographiques accompagnent la présentation. Nous nous penchons dans le dernier paragraphe (II-2-3) sur le modèle adopté, avec une discussion sur son adéquation par rapport aux objectifs principaux que sont le calcul d'un flux moyenné et la reconstitution ou le traitement de spectres.

Si l'on considère un système gazeux dans lequel les phénomènes de diffusion peuvent être négligés, la luminance $L(\sigma, s_i \rightarrow s_f)$ au nombre d'onde σ , issue d'un trajet optique entre des abscisse curvilignes s_i et s_f est donnée par l'équation de transfert radiatif exprimée ici sous forme intégrale:

$$L(\sigma, s_i \rightarrow s_f) = L(\sigma, s_i) \times e^{-\int_{s_i}^{s_f} \kappa(\sigma, s) ds} + \int_{s_i}^{s_f} \left[\kappa(\sigma, s) \times L^o(\sigma, s) \times e^{-\int_s^{s_f} \kappa(\sigma, s') ds'} \right] ds, \quad (\text{II-1})$$

Dans cette expression, $L(\sigma, s_i)$ et $L^o(\sigma, s)$ sont respectivement la luminance à l'origine du chemin optique et celle du corps noir (luminance d'équilibre) donnée par la fonction de Planck:

$$L^{\circ}(\sigma, T) = \frac{c_1 \sigma^3}{e^{(c_2 \sigma / T)} - 1}, \quad (\text{II-2})$$

L'unité de luminance utilisée ici est le $\text{W.m}^{-2}.\text{st}^{-1}/\text{cm}^{-1}$, avec le nombre d'onde σ en cm^{-1} , la température locale T du gaz en K, et les constantes $c_1=1.19 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{cm}^4$, $c_2=1.4388 \text{ cm.K}$. L'équation (II-1) montre que la grandeur de base donnant la luminance est $\kappa(\sigma, s)$, coefficient d'absorption local au nombre d'onde σ . Le calcul rigoureux de cette quantité dans le cas des molécules gazeuses est un problème extrêmement complexe qui fait l'objet de recherches depuis de nombreuses années. Avant de décrire quelle est l'approche que nous avons retenue, nous rappelons ci-après quels sont les processus et paramètres principaux qui déterminent la forme et l'amplitude du coefficient d'absorption. Pour ce faire, et simplifier les notations, nous nous limiterons dans un premier temps au cas d'une seule espèce absorbante très fortement diluée dans un gaz transparent.

II-2-1 LE SPECTRE PERMIS

Le spectre "permis" résulte du couplage entre le rayonnement et le moment dipolaire (ou quadrupolaire) permanent ou induit par la vibration, de la molécule considérée. Cette interaction se traduit, dans un spectre à basse pression, par des raies issues des transitions entre les niveaux d'énergie rovibrationnelle. Leur prise en compte dans des calculs requiert d'en connaître la position, la surface (intensité intégrée), et la forme. Les deux premiers paramètres sont des quantités intrinsèques à la molécule isolée et leur connaissance dans l'infrarouge relève de la spectroscopie de vibration rotation. Pour la plupart des molécules d'intérêt pratique, ils sont relativement bien connus et fournis, sous la forme de listes, par des bases de données spectroscopiques (cf paragraphe II-4-1). Les problèmes soulevés par la connaissance des profils sont nombreux et complexes. En effet, si à (très) basse pression la forme des raies est bien connue et donnée par une gaussienne résultant de l'effet Doppler, la situation aux pressions mises en jeu par les applications est nettement moins favorable. Il faut alors tenir compte des effets des collisions intermoléculaires sur les profils spectraux dont les manifestations sont diverses. Nous en donnons ci-après un rapide aperçu avant de décrire quel modèle a été retenu.

a) Le modèle des raies isolées

Le modèle des raies isolées les unes des autres consiste à négliger les échanges de populations induits par les collisions entre les différents états (principalement rotationnels). On ne tient pas compte des transferts d'intensité entre raies (interférences, couplages, ou *line-mixing*) abordés un peu plus loin. Le spectre résulte alors de l'addition des contributions individuelles des transitions optiques. Dans ces conditions, le coefficient d'absorption κ au nombre d'onde σ , qui est proportionnel à la densité n_a de molécules actives, est donné par:

$$\kappa(\sigma) = n_a \sum_{\text{raies}} S_r \times \Phi_r(\sigma), \quad (\text{II-3})$$

où la somme est effectuée sur toutes les raies r d'absorption. La contribution de chacune d'entre elles est définie par son intensité S_r et son profil normalisé Φ_r . Le premier paramètre est propre à la molécule et ne dépend que des populations des niveaux et du moment de transition du tenseur de couplage rayonnement-matière (dipôle pour l'infrarouge). Le profil Φ , qui contient l'effet éventuel des collisions, dépend de la raie et des conditions thermophysiques du milieu. L'approximation contenue dans l'équation (II-3) est largement utilisée pour sa commodité et la simplification considérable qu'elle introduit dans les calculs. Elle n'est strictement valable qu'au proche voisinage des centres de raies lorsque le recouvrement spectral est faible¹, et permet, en pratique, de modéliser les régions proches des pics aux pressions modérées. À l'exception de quelques domaines spectraux particuliers², elle est généralement suffisante pour les calculs de transfert radiatif et pour le traitement des spectres des atmosphères (étant donné la précision et la résolution actuelles des mesures embarquées). Dans ce cadre, en première approximation, les raies ont un profil de Voigt, convolution de la forme gaussienne due à l'effet Doppler et du profil de Lorentz conséquence des interactions intermoléculaires. En notant σ_r l'écart en énergie entre les niveaux haut et bas de la transition optique (position de la raie non perturbée), $\gamma_{D,r}$ la demi-largeur à mi-hauteur du profil Doppler, $\gamma_{L,r}$ la demi-largeur à mi-hauteur du profil Lorentz, $\delta_{L,r}$ le shift collisionnel induit par les collisions, nous avons:

¹ "Proche des centres de raies lorsque le recouvrement spectral est faible" s'entend au sens où l'absorption au nombre d'onde considéré est, pour chaque bande, fortement dominée par une seule raie. On exclut donc les régions spectrales telles que les creux entre les raies et les ailes de bandes, car elles résultent des contributions simultanées de plusieurs transitions. On ne considère pas non plus les cas où les raies d'une même bande sont très proches les unes des autres et ont des profils qui se recouvrent notablement.

² En plus des ailes de raies et bandes, sont à exclure les groupes de transitions d'une même bande dont les positions spectrales sont très proches. C'est le cas de certains doublets, multiplets, et branches Q.

$$\begin{aligned}
\Phi_r^{\text{Lorentz}}(\sigma) &= \frac{1}{\pi} \text{Im} \left\{ \frac{\sigma - \sigma_r - \delta_{L,r} - i\gamma_{L,r}}{\pi[(\sigma - \sigma_r - \delta_{L,r})^2 + \gamma_{L,r}^2]} \right\} \\
\Phi_r^{\text{Doppler}}(\sigma) &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_{D,r}} e^{-\left[\frac{(\sigma - \sigma_r)^2 \ln 2}{\gamma_{D,r}^2} \right]} \\
\Phi_r^{\text{Voigt}}(x, y) &= \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_{D,r}} \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x - t)^2} dt
\end{aligned} \tag{II-4}$$

où les paramètres adimensionnés x et y sont:

$$\begin{cases} x = \sqrt{\ln 2} \frac{\sigma - \sigma_r - \delta_{L,r}}{\gamma_{D,r}} \\ y = \sqrt{\ln 2} \frac{\gamma_{L,r}}{\gamma_{D,r}} \end{cases}, \tag{II-5}$$

Les paramètres collisionnels régissant l'absorption sont alors la largeur Lorentz $\gamma_{L,r}$ et le déplacement spectral $\delta_{L,r}$, induits par les forces intermoléculaires entre l'espèce active et celle dans laquelle elle est diluée. Ces quantités de base dépendent de la pression¹ et de la température et sont définies pour chaque raie et couple (molécule active – partenaire de collision). Elles ont fait l'objet de nombreuses études théoriques et mesures de laboratoire [SMIT,92]. Il faut noter que, même pour des raies isolées, le profil de Voigt n'est qu'une approximation. Lorsque l'on étudie les profils à l'échelle typique du pour-cent, des effets fins doivent être pris en compte qui sont principalement liés à deux mécanismes (voir par exemple les références [HENR,96], [LANC,98], [PINE,99]). Le premier résulte des changements (en module et direction) de la vitesse de la molécule active engendrés par les collisions. Leur influence sur le profil spectral est un rétrécissement qui apparaît dans le régime de pression où les largeurs Doppler et Lorentz sont du même ordre (effet du type Dicke-Galatry). Le second problème vient du fait que le profil vrai résulte d'une moyenne de Boltzmann sur la distribution de vitesse absolue 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.

¹ Elles sont proportionnelles à la densité dans le domaine des densités modérées où l'on peut considérer que les collisions sont binaires c'est à dire lorsque l'intervalle de temps moyen séparant deux chocs successifs est grand devant la durée des collisions efficaces.

b) Prise en compte des effets de recouvrement des raies

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 comme isolées. C'est donc une situation que l'on rencontre toujours dans les ailes ou si la pression est suffisamment élevée. Elle apparaît aux densités modérées considérées ici dans des régions où les raies sont très proches, telles que les branches Q et certains doublets et multiplets. Dans ce cas, et en se limitant aux régions proches des centres de raies¹, le coefficient d'absorption sera proportionnel à: [LEVY,92]

$$\kappa(\sigma) = \frac{n_a}{\pi} \sum_{\text{raies } r} \sum_{\text{raies } r'} \rho_r \times d_r \times d_{r'} \times \text{Im} \left\{ \langle r' | \sigma - \mathbf{L}_0 - i\mathbf{W}^{-1} | r \rangle \right\}, \quad (\text{II-6})$$

où apparaît une double somme sur les raies d'absorption. Les quantités ρ_r et d_r sont propres à la molécule active et ne dépendent que des populations des niveaux (ρ_r) et du moment de transition (d_r) du tenseur de couplage rayonnement-matière (dipôle pour l'infrarouge). σ , \mathbf{L}_0 , et \mathbf{W} sont des opérateurs définis dans l'espace de Liouville ou espace des raies. Les deux premiers sont diagonaux, associés respectivement au nombre d'onde courant σ et aux positions σ_r des raies non perturbées. L'opérateur de relaxation \mathbf{W} contient tout l'effet des collisions sur le profil spectral. Ses éléments diagonaux sont associés aux élargissements et déplacements des raies, introduits précédemment:

$$\langle r | \mathbf{W} | r \rangle = \gamma_r - i\delta_r, \quad (\text{II-7})$$

et les éléments non diagonaux représentent les couplages entre les raies. On voit aisément qu'en l'absence d'interférences, \mathbf{W} est diagonal et que l'équation ci-dessus se réduit à l'addition de profils de Lorentz. Il faut noter que l'équation (II-6) ne tient pas compte de l'effet Doppler, ni des phénomènes liés aux changements de vitesse et à la moyenne sur la vitesse cités précédemment. Plusieurs types d'approches ont été proposées pour tenir compte des interférences entre raies qui sont principalement fondés sur l'utilisation de "lois d'échelle statistiques" ou "dynamiques" [LEVY,92]. Ces modèles permettent, à l'aide de quelques paramètres de base, de construire la partie réelle de \mathbf{W} , le problème de la partie imaginaire

¹ "Proche des centres de raies" s'entend au sens de la validité de l'approximation d'impact qui permet d'introduire un opérateur de relaxation indépendant du nombre d'onde. Un critère quantitatif est que l'écart $\Delta\sigma$ entre le point de calcul et les raies qui contribuent notablement à l'absorption doit être petit devant l'inverse de la durée τ_c des chocs efficaces (i.e.: $(2\pi c\Delta\sigma) \times \tau_c \ll 1$). Pour la plupart des systèmes ceci conduit à quelques cm^{-1} à la température ambiante.

restant à ce jour irrésolu (mais n'ayant que peu d'influence sur l'absorption). Ils ont été largement appliqués au cas de molécules linéaires où ils ont permis une étude fouillée dans le cas de CO_2 [RODR,98].

c) Absorption dans les ailes

Le calcul de l'absorption dans les ailes est un problème extrêmement complexe. En effet, il faut alors tenir compte des interférences entre raies, mais aussi du fait que les collisions ont une durée non nulle [HART,91]. Dans ces conditions, l'opérateur de relaxation \mathbf{W} de l'équation (II-6) dépend du nombre d'onde et aucun modèle ne permet à notre connaissance un traitement global du problème. Des approches, dites quasistatiques, permettent de traiter l'aile très lointaine et ont conduit à des résultats satisfaisants pour CO_2 et H_2O [BOUL,88], [MA,91]. Pour satisfaire les besoins des applications, des approches empiriques ont été proposées [CLOU,89], [PERR,89]. Elles consistent à corriger le profil Lorentz ou Voigt dans les ailes à l'aide d'un facteur de forme correctif χ . En rappelant l'hypothèse d'une seule espèce absorbante dans un gaz transparent g , on a :

$$\Phi(P, T, \sigma, r) = \Phi^{\text{Voigt}}(\sigma - \sigma_r - \delta_{L,r}, \gamma_{D,r}(T), P \times \gamma_L^o(r, g, T) \times \chi(\sigma - \sigma_r, g, T), \quad (\text{II-8})$$

où γ_L^o est le coefficient d'élargissement collisionnel de la raie r : $\gamma_{r,L} = \gamma_L^o \times P$ (P est la pression), et où l'on considère que la forme analytique de χ est indépendante de la raie r considérée. Les facteurs χ , qui sont en général ajustés sur des résultats expérimentaux, valent 1 près des centres de raies, ce qui assure que le profil de l'équation (II-8) est "valable partout".

II-2-2 ABSORPTION INDUITE PAR COLLISIONS

L'absorption induite par collision est un phénomène qui, bien que généralement faible, peut être observé lorsque les épaisseurs optiques (et en particulier la pression) sont importantes. Il résulte du fait que les forces intermoléculaires (collisions) induisent un dipôle. Le sujet a fait l'objet de nombreuses études dans le cas de molécules diatomiques homonucléaires [FROM,93]. Pour les autres espèces, les phénomènes induits dans l'infrarouge sont généralement cachés par les transitions permises et difficilement détectables

ou quantifiables sauf aux grandes longueurs d'onde quand la molécule considérée n'a pas de spectre rotationnel. Rappelons simplement que, pour un mélange actif-perturbateur fortement dilué, l'intensité intégrée du coefficient d'absorption induit par les collisions est proportionnelle au produit des densités $n_a \times n_{\text{perturbateur}}$ alors que celle associée au spectre permis est simplement proportionnelle à n_a .

II-2-3 MODÈLE RETENU POUR LE CALCUL RAIE PAR RAIE

Le modèle que nous avons retenu pour le calcul du spectre permis repose sur les équations (II-3), (II-4) et (II-8). Pour un mélange de N_g espèces gazeuses désignées par i de fractions molaires x_i et dont un certain nombre sont absorbantes, le coefficient d'absorption est alors donné par une somme sur les raies r représentant les transitions de tous les gaz absorbants a :

$$\kappa(\sigma) = \sum_{r,a} n_a S_{r,a}(T) \Phi_{r,a}^{\text{Voigt}}(\sigma - \sigma_r - \delta_{L,r}, \gamma_{D,r}, \gamma_{L,r}) \times \frac{\sum_{i=1}^{N_g} x_i \gamma_L^o(r, i, T) \chi(\sigma - \sigma_r, a, i, T)}{\sum_{i=1}^{N_g} x_i \gamma_L^o(r, i, T)}, \quad (\text{II-9})$$

L'élargissement et le déplacement de la raie d'une molécule dans un mélange s'expriment en fonction de ses élargissements et déplacements dans chacun des cas où la molécule est seule infiniment diluée dans un gaz partenaire de collision i :

$$\begin{cases} \gamma_{L,r} = P \times \sum_{i=1}^{N_g} x_i \gamma_L^o(r, i, T) \\ \delta_{L,r} = P \times \sum_{i=1}^{N_g} x_i \delta_L^o(r, i, T) \end{cases}, \quad (\text{II-10})$$

Dans l'approximation des gaz parfaits, justifiée dans nos applications où les densités sont modérées, on peut travailler non plus avec la densité n_a mais avec la fraction molaire x_a et la pression P . Dans (II-9), $n_a S_{r,a}(T)$ est alors remplacé par $S'_{r,a}(T) x_a P^1$.

¹ "autre définition" de l'intensité: $S'_{r,a}(T) = (0.101325/kT) \times S_{r,a}(T)$; avec k constante de Boltzmann en $J.K^{-1}$; $S_{r,a}(T)$ intensité en $cm^{-2}.molecule^{-1}.cm^3$, $S'_{r,a}(T)$ en $cm^{-2}.atm^{-1}$, dans (II-9), P en atm, $\Phi_{r,a}$ en cm, $\kappa(\sigma)$ en cm^{-1} .

Le coefficient d'absorption s'exprime donc comme la somme des contributions des raies individuelles d'où l'appellation "raie par raie" attribuée à cette méthode. Il faut noter que trois phénomènes ont été négligés, dont la prise en compte aurait des conséquences très importantes en terme de consommation CPU. Il s'agit des effets dus aux changements de vitesse, à la moyenne sur la vitesse de l'espèce active, et aux interférences entre raies près des centres de raies. Heureusement, les deux premiers phénomènes n'ont, pour les systèmes moléculaires d'intérêt, que des conséquences très faibles (il ne sont importants que pour des mélanges molécule active légère - perturbateur lourd, tels que H₂-Xe, par exemple). Les interférences entre raies, en revanche, peuvent conduire à des erreurs importantes allant jusqu'à un facteur deux. Néanmoins, les régions spectrales affectées sont peu nombreuses et très localisées. Ce sont celles, telles que les branches Q ou certains multiplets, où l'on trouve des transitions d'une même bande situées très près les unes des autres. Les erreurs liées au fait de négliger les interférences affectent donc des régions spectrales très étroites et n'auront qu'un poids négligeable sur le flux total, comme nous le vérifierons dans les chapitres III et IV de ce mémoire.

a) Introduction d'un continuum

Lorsque l'on est suffisamment loin dans l'aile d'une raie¹ l'expression du profil intervenant dans l'équation (II-9) peut être simplifiée:

$$\Phi_{r,a}^{\text{"loin"}}(x_1, x_2, \dots, x_{N_g}, P, T, \sigma, r) = \frac{P}{\pi(\sigma - \sigma_r)^2} \sum_{i=1}^{N_g} x_i \gamma_L^\circ(r, i, T) \chi(\sigma - \sigma_r, a, i, T), \quad (\text{II-11})$$

où le coefficient d'élargissement $\gamma_L^\circ(r, i, T)$ et le facteur $\chi(\sigma - \sigma_r, i, T)$ sont relatifs aux seules collisions entre l'espèce active a et le gaz i. Le coefficient d'absorption peut donc être séparé en deux contributions, qui dépendent du choix d'une distance au centre de raie $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$ et qui sont associées respectivement aux raies proches et lointaines:

$$\kappa(\sigma) = \kappa_{\text{local}}(\Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma) + \kappa_{\text{loin}}(\Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma), \quad (\text{II-12})$$

¹ Le critère est : $(\sigma - \sigma_r)^2 \gg \gamma_{L,r}^2$ et $(\sigma - \sigma_r)^2 \gg \gamma_{D,r}^2$, soit $|\sigma - \sigma_r| \gg \Delta\sigma_c^{\text{cont}} \sim \text{quelques cm}^{-1}$ dans les conditions de pression et température considérées.

Sous réserve que $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$ ne soit pas trop important et reste dans la région où le profil est du type Voigt ($\chi \approx 1$), le coefficient d'absorption local est donné par:

$$\kappa_{\text{local}}(\Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma) = P \times \sum_{\substack{\text{raies } r \text{ (des espèces } a) \\ \text{t.q. } |\sigma - \sigma_r| < \Delta\sigma_c^{\text{cont}}}} x_a S'_r(T) \Phi^{\text{Voigt}}(\sigma - \sigma_r - \delta_{L,r}, \gamma_{D,r}, \gamma_{L,r}), \quad (\text{II-13})$$

Le coefficient d'absorption des raies lointaines est donné pour chaque espèce absorbante a:

$$\kappa_{\text{loin}}(a, \Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma) = x_a P^2 \sum_{i=1}^{N_g} x_i C(a, i, \sigma, \Delta\sigma_c^{\text{cont}}, T), \quad (\text{II-14})$$

avec:

$$C(a, i, \sigma, \Delta\sigma_c^{\text{cont}}, T) = \sum_{\substack{\text{raies de } a \text{ tq} \\ |\sigma - \sigma_r| > \Delta\sigma_c^{\text{cont}}}} \frac{S'_r(T)}{\pi(\sigma - \sigma_r)^2} \gamma_L^o(r, i, T) \chi(\sigma - \sigma_r, a, i, T), \quad (\text{II-15})$$

$C(a, i, \sigma, \Delta\sigma_c^{\text{cont}}, T)$ est le continuum (normalisé en pression, en $\text{cm}^{-1}/\text{atm}^{-2}$) dû aux raies centrées à plus de $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$ de σ et aux collisions entre le gaz actif a et l'espèce i.

L'équation (II-14) est particulièrement intéressante sur un plan pratique. En effet, on voit que, pour chaque espèce absorbante, la contribution κ_{loin} des raies "lointaines" peut s'écrire comme une somme de "continua" qui ne dépendent que de l'espèce perturbatrice i, du nombre d'onde σ , et de la température T. Si on dispose de tabulations des continua, l'utilisation des équations (II-13) et (II-14) permet, par rapport à (II-9), une économie de temps CPU considérable pouvant aller jusqu'à deux ordres de grandeur. En effet, la somme sur les raies ne prend alors plus en compte que celles centrées dans un intervalle de largeur $2\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$ (quelques cm^{-1}) alors que l'équation (II-9) peut nécessiter de considérer des raies centrées jusqu'à plusieurs centaines de cm^{-1} du point de calcul. Il faut ajouter que les continua C varient relativement lentement avec la longueur d'onde et peuvent être tabulés avec un pas typique de $(1/4)\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$. Le temps CPU économisé dans les calculs raie par raie en utilisant l'approche proposée est considérable lorsque les continua contribuent de façon importante à l'absorption. Pour H_2O sur de longs parcours atmosphériques, par exemple, le calcul à l'aide de facteurs χ impose de considérer des raies centrées jusqu'à $\pm 1000 \text{ cm}^{-1}$ du nombre d'onde de calcul.

Remarque importante: L'utilisation de continua telle que décrite ci-dessus (équation (II-14)) requiert que l'on soit à une distance supérieure à $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$ du centre de raie, dans l'aile de la raie.

Le critère est $(\Delta\sigma_c^{\text{cont}})^2 \gg \text{Max}(\gamma_{L,r}^2, \gamma_{D,r}^2)$ qui doit impérativement être vérifié.

b) Assimilation de l'absorption induite par collisions (AIC) à un continuum:

L'absorption induite par collision a deux caractéristiques qui facilitent sa prise en compte pratique:

-Pour un mélange de gaz à densité modérée, elle se décompose en somme de contributions binaires proportionnelles au produit des pressions partielles¹ (comme les continua ci-dessus).

-Elle ne présente pas de structure fine significative et varie lentement avec la longueur d'onde.

On pourra donc écrire le coefficient d'absorption pour l'espèce a sous la forme :

$$\kappa_{\text{AIC}}(a, \sigma) = x_a P^2 \sum_{i=1}^{N_g} x_i C^{\text{AIC}}(a, i, \sigma, T) \quad , \quad (\text{II-16})$$

où $C^{\text{AIC}}(a, i, \sigma, T)$ est la contribution normalisée en pression (en $\text{cm}^{-1}/\text{atm}^{-2}$) due aux collisions entre l'espèce active a et l'espèce i. En raison des incertitudes encore liées aux modèles théoriques de prédiction directe de C^{AIC} , cette grandeur est généralement déterminée expérimentalement (voir par exemple la référence [LAFF,96]). Les dépendances en pression apparaissant dans les équations (II-14) et (II-16) sont semblables, ce qui fait que l'absorption induite par collisions est souvent qualifiée de continuum. On parlera ainsi des continua infrarouge de l'azote et de l'oxygène.

Les continua, qu'ils soient dus aux ailes lointaines de transitions dipolaires électriques ou à l'absorption induite par collision, peuvent donc être traités de la même façon. Il faut cependant noter que les premiers sont associés à un choix de $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$, contrairement aux seconds.

c) Cas d'une colonne inhomogène de gaz:

Dans le cas général, la colonne gazeuse est anisotherme, anisobare, constituée d'un mélange non homogène de N_g gaz dont plusieurs absorbent. On la discrétise alors en N

¹ Nous avons choisi de travailler en pression totale et fractions molaires mais les équations peuvent s'écrire en fonction des pressions partielles p_g puisque l'on a la relation : $p_g = x_g P$.

segments élémentaires caractérisés par leurs longueurs ℓ_k et les paramètres thermophysiques $P_k, T_k, x_k(i), (i=1, N_g)$. Le coefficient d'absorption de la colonne totale s'écrit:

$$\kappa(\sigma) = \frac{\sum_{k=1, N_k} \kappa(\sigma, k) \ell_k}{\sum_{k=1, N} \ell_k}, \quad (\text{II-17})$$

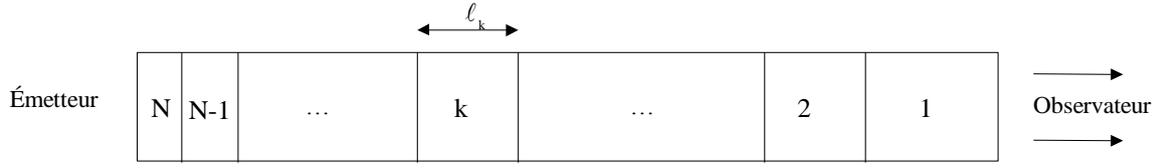
Une fois choisi un intervalle de coupure $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$, le coefficient d'absorption $\kappa(\sigma, k)$ du segment "k" peut être séparé en trois contributions, comme indiqué aux paragraphes précédents:

$$\kappa(\sigma, k) = \sum_{\substack{\text{tous les gaz a ayant} \\ \text{des transitions permises}}} \kappa_{\text{local}}(a, \Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma, k) + \sum_{\substack{\text{tous les gaz a ayant} \\ \text{des transitions permises}}} \kappa_{\text{loin}}(a, \Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma, k) + \sum_{\text{tous les gaz a}} \kappa_{\text{AIC}}(a, \sigma, k), \quad (\text{II-18})$$

CONCLUSION

Nous venons de présenter quelques rappels sur différents mécanismes déterminant l'absorption infrarouge. Le modèle retenu consiste en une somme de raies supposées isolées, et en l'introduction de continua qui tiennent compte des contributions des ailes lointaines et de l'absorption induite par collisions. Nous avons négligé les phénomènes physiques suivants: rétrécissements de raie, prise en compte de la vitesse absolue des molécules absorbantes pour établir un profil moyen, interférences entre raies près de leurs centres. Leurs effets sont faibles ou très localisés et leurs conséquences sur l'exactitude d'un calcul de flux sont donc négligeables, tandis que le coût en temps CPU de leur prise en compte est considérable. De plus, leurs études relèvent encore du domaine de la recherche et les données sont parcellaires. Par ailleurs, toute étude de ces phénomènes, que nous avons négligés, ne se fait que localement au cas par cas et ne nécessite donc pas une approche raie par raie optimisée en temps. En conclusion, compte tenu des objectifs qui sont un calcul de flux moyenné ou des traitements de spectres atmosphériques sur de larges intervalles de longueur d'onde, le modèle des raies isolées avec un profil de Voigt, couplé à des continua, suffit amplement.

L'objectif du code raie par raie, dont les caractéristiques seront présentées dans les chapitres suivants, est de calculer la transmission et la luminance d'une colonne de gaz inhomogène discrétisée en segments homogènes, colonne illustrée sur le schéma suivant:



La transmission est le produit des transmissions de chaque segment, chacune s'exprimant en fonction du coefficient d'absorption, selon la loi de Beer-Lambert (diffusion négligée):

$$\tau_{\text{colonne}}(\sigma) = \prod_{k=1}^N \tau_k(\sigma) = \prod_{k=1}^N e^{-\kappa(\sigma,k) \ell_k}, \quad (\text{II-19})$$

La luminance est celle allant dans le sens émetteur \rightarrow observateur. Elle s'écrit, en respectant la numérotation des segments dans le sens observateur \rightarrow émetteur:

$$L_{\text{colonne}}(\sigma) = \sum_{k=1}^N (1 - \tau_k) L_k^{\circ} \tau_{k-1 \rightarrow 1}, \quad (\text{II-20})$$

où τ_k désigne la transmission du segment k ($(1 - \tau_k)$ est l'émissivité du segment k), L_k° la fonction de Planck associée au segment k , $\tau_{k-1 \rightarrow 1}$ la transmission de la colonne partielle allant

du segment $k-1$ au segment 1: $\tau_{k-1 \rightarrow 1} = \prod_{k'=1}^{k-1} \tau_{k'}$. (par convention $\tau_{0 \rightarrow 1} = 1$).

II-3. CALCUL OPTIMISÉ DU COEFFICIENT D'ABSORPTION LOCAL

Nous décrivons dans ce chapitre les développements effectués pour optimiser le calcul du coefficient d'absorption local d'une couche homogène de gaz. Nous sommes partis de l'expression formelle du coefficient d'absorption local, qui est en définitive la quantité fondamentale à calculer si les continua sont connus. Nous rappelons l'équation (II-13):

$$\kappa_{\text{local}}(\Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma) = P \times \sum_{\substack{\text{raies } r \text{ (des espèces a)} \\ \text{t.q. } |\sigma - \sigma_r| < \Delta\sigma_c^{\text{cont}}}} x_a S_r'(\Gamma) \Phi^{\text{Voigt}}(\sigma - \sigma_r - \delta_{L,r}, \gamma_{D,r}, \gamma_{L,r})^1$$

Nous pouvons rechercher un gain en temps de calcul sur plusieurs éléments de cette équation. Tout d'abord le calcul du profil Φ^{Voigt} qui s'exprime par une intégrale impropre (équation (II-4)) traduisant la convolution de deux profils limites analytiques, Doppler et Lorentz, peut être optimisé. Ce problème sera traité au paragraphe II-3-1. Le coefficient d'absorption s'exprimant en fonction du nombre d'onde σ , éventuellement sur de larges intervalles spectraux, il est alors intéressant de se pencher sur le problème d'un maillage adéquat, optimisé par rapport aux profils Φ qui imposent la dynamique du spectre. Cette étude sera présentée au paragraphe II-3-2. Un autre aspect à exploiter est la sommation sur l'ensemble des raies. Toutes n'ont pas le même poids dans la somme, et ceci est très fortement dépendant des conditions thermophysiques du milieu. Il s'agit alors d'effectuer un tri pour éliminer les raies négligeables. La technique mise en œuvre sera présentée au paragraphe II-3-3. De même que des raies peuvent être entièrement négligées, d'autres peuvent ne l'être que partiellement; il s'agit en fait de les tronquer en coupant leurs ailes. La méthode développée sera expliquée au paragraphe II-3-4. Enfin, pour une couche homogène de longueur donnée, si le coefficient d'absorption est suffisamment élevé, il peut entraîner une saturation de l'émission. Nous pouvons mettre à profit ce résultat pour arrêter le calcul dans les zones spectrales suffisamment opaques. Nous verrons comment ce problème est abordé au paragraphe II-3-5.

II-3-1 CALCUL RAPIDE DU PROFIL DE VOIGT

Nous présentons une nouvelle méthode de calcul du profil de Voigt dont nous rappelons ici les équations (II-4) et (II-5):

$$\Phi_r(x, y) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_{D,r}} \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x-t)^2} dt \quad \text{avec} \quad \begin{cases} x = \sqrt{\ln 2} \frac{\sigma - \sigma_r}{\gamma_{D,r}} \\ y = \sqrt{\ln 2} \frac{\gamma_{L,r}}{\gamma_{D,r}} \end{cases}$$

¹ Afin d'alléger les notations, σ_r désignera désormais la position de la raie corrigée par le déplacement collisionnel $\delta_{L,r}$.

La grandeur que l'on se propose effectivement de calculer est la fonction de Voigt:

$$w(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x-t)^2} dt, \quad (\text{II-21})$$

Dans un premier temps, nous allons analyser quelques propriétés de cette fonction qui nous ont amenés à l'idée retenue qui est celle d'une tabulation. Ensuite, nous évoquerons la démarche de construction de la table, puis les principes de son utilisation. Enfin, nous évaluerons les performances de cette approche, du point de vue du gain en temps CPU.

a) Analyse du profil de Voigt; l'idée d'une tabulation

Vu que la fonction Voigt Φ est le produit de convolution des deux profils Lorentz et Doppler, il existe des zones du plan en (x, y) pour lesquelles les deux cas limites précédents sont valables, moyennant une erreur donnée sur le calcul du profil. Lorsque l'on se place dans l'aile à une distance suffisamment grande du centre par rapport à la demi largeur Doppler, la convolution se réduit à la fonction de Lorentz. Ainsi, le paramètre x quantifiant cette distance, le domaine $|x| \gg 1$ permet de s'approcher du cas limite Lorentz. Par contre, au voisinage du centre de la raie, c'est le paramètre y , quantifiant le rapport largeur Lorentz sur largeur Doppler, qui intervient. Le domaine $y \gg 1$ permet aussi de s'approcher du cas limite Lorentz. Le cas $y=0$ représente un profil Doppler pur. On déduit de ces considérations qu'il est possible de borner le domaine du plan (x, y) où la prédominance est du type Voigt ou Doppler, le reste du plan étant calculable par une fonction de Lorentz. Il est donc envisageable de fabriquer une table finie incluant la zone Doppler/Voigt.

Concrètement, on peut définir un domaine en coordonnées (x, y) tel que $x^2 + y^2 \gg 1$, où le calcul de la fonction de Voigt se réduit à celui de la fonction de Lorentz, moyennant une tolérance relative ε_p sur le calcul des profils que l'on peut définir ainsi :

$$\frac{|\Phi_v - \Phi_L|}{\Phi_v} < \varepsilon_p, \quad (\text{II-22})$$

La figure II.1 présente l'allure de la frontière profil Voigt – profil Lorentz, pour une erreur ε_p . La dépendance analytique avec ε_p s'obtient en appliquant un développement limité de l'équation (II-22) en utilisant (II-21), selon l'infiniment petit $1/(x^2 + y^2)$. Au vu de cette figure, nous avons décidé de tabuler la fonction de Voigt dans la zone bordée par la frontière pour basculer en calcul Lorentz au-delà. En $y=0$, c'est le profil Doppler qui est tabulé. Il est difficile d'approximer simplement la frontière vraie en fonction de x , y , ε_p . La solution

retenue est alors la table de domaine rectangulaire, donc de frontières uniformes sans pour autant autoriser une trop grande région lorentzienne tabulée. Hors de cette table, c'est le profil de Lorentz qui est directement calculé.

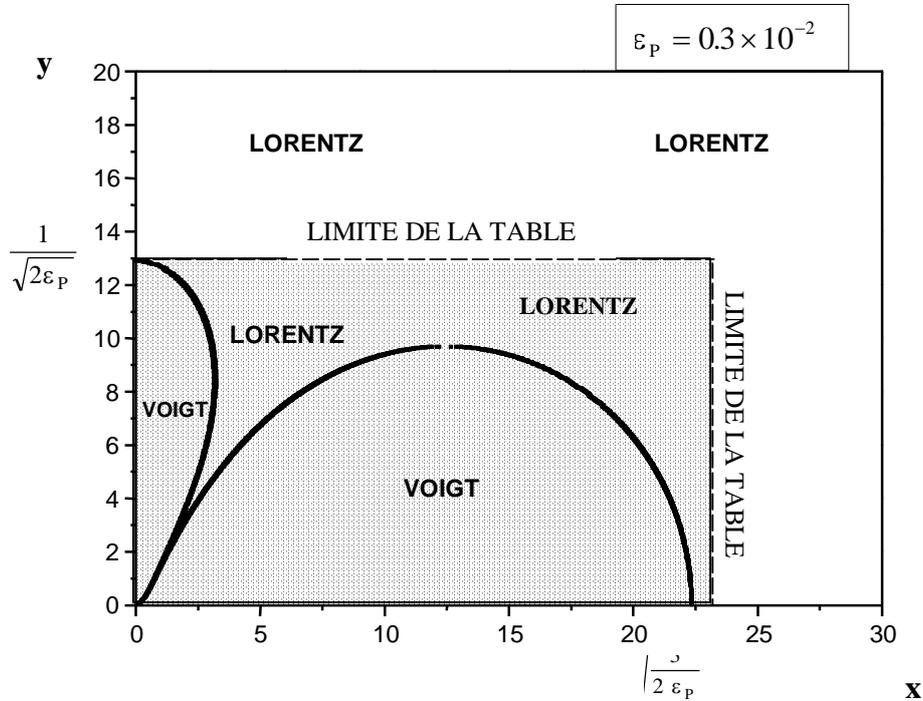


figure II.1: Courbe noire: frontière profil Voigt – profil Lorentz et sa dépendance avec l'erreur relative ϵ_p . Surface grisée: domaine d'application de la table.

L'erreur retenue effectivement pour l'établissement de la table est¹:

$$\epsilon_p = 0.3 \times 10^{-2}, \tag{II-23}$$

Les frontières sont:

$$\begin{cases} x_{\min} = 0; & x_{\max} = 23.0 \\ y_{\min} = 0; & y_{\max} = 13.0 \end{cases} \tag{II-24}$$

Remarquons qu'en $y = 0$, pour x hors du rectangle, le calcul sera, d'après la figure II.1, lorentzien, alors qu'il devrait être Doppler. Il ne faut néanmoins pas perdre de vue qu'il n'y sera en pratique jamais réalisé, car la troncature dans l'aile (cf § II-3-4) aura été mise en œuvre bien avant d'atteindre $x_{\max}=23^*$.

¹ qui est largement suffisante puisque les données spectroscopiques ne sont pas connues à mieux que quelques pour cents.

* $\Phi_D(x = 23) \propto e^{-23^2} = 10^{-230}$!!!!!

b) Construction d'une table de la fonction de Voigt

La démarche de construction de la table repose sur trois critères:

- Le calcul d'un point du profil se fera par interpolation linéaire entre des points de la table.
- L'erreur relative sur le résultat de ce calcul doit être majorée par ε_p .
- Le nombre de points de la table doit être le plus petit possible.

Les points de la table, qui sont considérés comme "exacts" sont calculés à l'aide de la sous-routine de Humlicek[HUML,79] dont l'erreur relative est majorée par 2×10^{-6} . D'autre part, la recherche d'une minimisation de la taille de la table s'avère possible. En effet, il est aisé de vérifier que l'erreur relative lors de l'interpolation linéaire d'une fonction dans un intervalle $x, x + \Delta x$ s'écrit au second ordre, avec $h \in 0, \Delta x$:

$$\varepsilon_{\text{rel}} = \frac{h(\Delta x - h)}{2} \frac{|f''|}{f}(x), \quad (\text{II-25})$$

Cette erreur est donc liée à la concavité relative de la courbe. Or, la figure II.2 montre la forte variabilité de cette concavité relative puis sa décroissance lorsqu'on s'éloigne dans l'aile, donc l'intérêt d'y calquer le plus possible la disposition des points de la table.

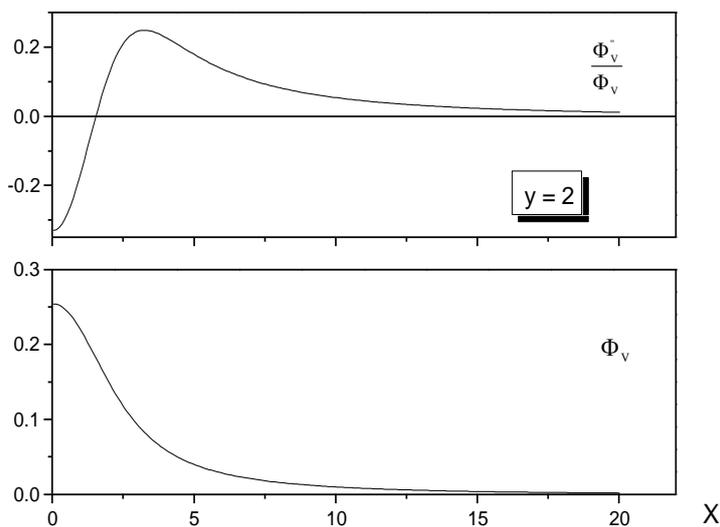


figure II.2: Concavité relative du profil de Voigt en regard du profil

Il est aisé, pour un profil donné (c'est-à-dire une valeur de y), d'obtenir une table respectant les trois conditions énoncées précédemment. On calcule tout d'abord la valeur au centre du

profil. On cherche ensuite le point suivant le plus éloigné possible du centre qui respecte les deux premiers critères. Il représente le deuxième point de la table. À partir de celui-ci, on réitère la démarche pour obtenir le troisième point et ainsi de suite jusqu'à $x_{\max} = 23$. On obtient ainsi une tabulation qui respecte scrupuleusement les trois critères pour un profil imposé. Par ailleurs, cette démarche de recherche peut tout aussi bien être menée en fixant x et en faisant varier y . Or, on peut aisément montrer que la dérivée seconde de la fonction de Voigt par rapport à y en x fixé est l'opposée de la dérivée seconde par rapport à x en y fixé. Cela renforce l'intérêt, déjà constaté avec la variable x , de la recherche d'une minimisation de la taille de table.

La mise en œuvre pratique, afin de balayer tout le domaine défini par (II-24), se présente en trois étapes:

⇒Étape 1: recherche des points d'une tabulation en x et y optimale du profil de Voigt respectant scrupuleusement les critères imposés.

Pour cela, on démarre de $y = y_{\max}$. En chaque y , on calcule les positions en x optimales par la méthode décrite précédemment. Pour chaque x , on calcule le saut en y maximal permettant de conserver l'erreur ε_p . Celui de plus faible amplitude nous contraint alors le y de recherche suivant. On continue ainsi, en adoptant 0 comme dernière valeur de y .

On obtient en fin de compte le minimum de points d'une table du profil de Voigt respectant les trois critères. Mais encore faut-il pouvoir s'y repérer facilement, sous peine de perte de gain CPU par recherche inefficace d'indices. Pour cela, deux étapes supplémentaires sont nécessaires.

⇒Étape 2: recherche d'un repérage analytique des indices en y .

À l'issue de l'étape 1, on dispose d'une courbe numérique donnant les indices de numérotation des points en y , courbe que l'on cherche à représenter par une fonction analytique. Afin de conserver l'erreur ε_p , cette fonction doit nécessairement conduire, pour deux points successifs en y , à des écarts d'indice supérieurs ou égaux à ceux de la courbe numérique. De plus nous imposons à cette fonction analytique de minimiser le nombre de points de la table. Le calcul de l'indice de repérage en y n'étant appelé qu'une fois par raie dans les calculs de spectre, nous pouvons nous permettre d'adopter une fonction quelque peu coûteuse en temps CPU, mais qui présente l'avantage d'être relativement proche de la courbe numérique. Nous sommes parvenus à:

$$j(y) = E \alpha \ln(y + \beta) + \gamma , \quad (\text{II-26})$$

α, β, γ étant des facteurs numériques, et $E(..)$ désignant la partie entière. Dès lors, on peut construire les points en y de la table effective de la fonction de Voigt en inversant cette formule.

⇒ Étape 3: recherche d'un repérage analytique des indices en x .

En chaque point de la table en y déterminée par l'équation (II-26), on calcule une courbe de positions optimales en x que l'on étudie de la même façon que celle décrite dans l'étape 2. Ici, contrairement au choix précédent, nous avons privilégié la rapidité de l'accès à l'indice par rapport au nombre de ces mêmes indices et avons donc choisi une simple droite comme fonction analytique, celle-ci devant être appelée en chaque point de calcul du profil:

$$i(x, y) = E a_{j(y)} x + 1, \quad (\text{II-27})$$

Ici on construit les points en x de la table effective en inversant le calcul de la droite.

Nous obtenons ainsi une table de la fonction de Voigt dans laquelle nous pouvons nous repérer grâce à deux fonctions analytiques, tout calcul d'un profil de Voigt se réduisant ensuite à une interpolation linéaire à quatre points.

c) Table utilisée en pratique pour le calcul de la fonction de Voigt

L'inconvénient de la table, telle qu'elle se présente à ce stade, est qu'elle nécessite trois interpolations linéaires, deux en x puis une en y . Pour limiter les calculs, nous avons choisi de repérer un couple (x, y) par le numéro k du trapèze formé par les quatre points qui l'entourent $(x_{i(j),j}; y_{i(j),j})$, $(x_{i(j)+1,j}; y_{i(j)+1,j})$, $(x_{i(j+1),j+1}; y_{i(j+1),j+1})$, $(x_{i(j+1)+1,j+1}; y_{i(j+1)+1,j+1})$. Dès lors, nous avons effectué un regroupement adéquat des facteurs des fonctions analytiques d'indices, ce qui nous amène à quatre termes fonctions de k : A_k, B_k, C_k, D_k . Les trapèzes sont numérotés dans le sens des x et des y croissants. Le calcul de la fonction de Voigt $w(x, y)$ est donc contenu dans les trois équations suivantes:

$$\begin{cases} j(y) = E \alpha \ln(y + \beta) + \gamma \\ k = E a_j x + E a_{j+1} x + k_j^{\text{deb}} \\ w(x, y) = (A_k y + B_k) x + (C_k y + D_k) \end{cases}, \quad (\text{II-28})$$

k_j^{deb} étant le numéro du premier trapèze de la ligne j repérant la position des y . L'intérêt d'une telle formulation apparaît encore plus nettement lorsqu'on mène effectivement le calcul d'une raie, puisque l'équation " $j(y)$ " n'est appelé qu'une fois, puis, le long du profil, seul le couple

"k" et "w(x,y)" est appelé. Signalons enfin que l'on peut aisément se passer d'un test systématique de la position du couple (x,y) par rapport au domaine couvert par la table [Eq.(II-24)]. En effet, pour une raie donnée, un seul test sur y nous renseigne sur l'utilisation possible de la table : au-dessus de la limite y_{\max} le calcul est entièrement lorentzien. Au-dessous, il est possible d'éviter tout test de la position de x par rapport à la limite x_{\max} , en repérant immédiatement un indice frontière d'utilisation de la table sur un maillage de calcul adéquat.

d) Performances de la nouvelle méthode de calcul du profil; comparaisons CPU

Nous avons mené des comparaisons de temps CPU en confrontant notre méthode de calcul du profil de Voigt et celle proposée par la subroutine de Drayson[Dray,76] qui fait partie des plus performantes selon Schreier[SCHR,92]. Les calculs ont été réalisés sur un ordinateur Origin 2000 de Silicon Graphics (SGI). La figure II.3 synthétise les résultats obtenus en affichant le rapport entre le temps CPU de la subroutine de Drayson et celui de notre méthode, en utilisant les équations (II-28) en tout point (donc sans profiter de l'avantage de la factorisation de l'équation "j(y)" pour le calcul d'une raie). On constate tout d'abord un gain minimum de 2, qui est atteint dans les zones à y ou x élevés: y ou x > 10. Dans ces zones en effet, le profil est proche d'une lorentzienne, donc plus aisément approché par une formule analytique simple et donc rapidement calculé par Drayson. La zone de gains les plus élevés (un facteur 9 à près de 17) se situe au voisinage de y=1, plus précisément pour y compris entre 0.3 et 2.5 avec le pic étroit autour de y=1; cela est valable jusqu'à x de l'ordre de 5. C'est donc surtout dans les parties centrales des raies que l'on gagne le plus. Les situations typiques engendrant de telles valeurs de y, pour H₂O (bande à 2.7 μm) et CO₂ (bande à 4.3 μm), sont des conditions atmosphériques de l'ordre de 0.01 à 0.1 atm, 180 K à 300 K, ou des conditions de combustion à la pression atmosphérique pour des températures supérieures à 1500 K¹. Ce sont des configurations souvent rencontrées dans les conditions de vol des avions. Dans les autres parties du plan en (x,y), les gains restent appréciables, avec notamment un facteur proche de 7 pour les faibles valeurs de y.

¹ On peut donner l'exemple suivant: pour CO₂ à 2500 cm⁻¹, à une pression de 0.2 bar (altitude de 10 km) et à 1200 K, on obtient les ordres de grandeur suivants:

$$\left. \begin{array}{l} \gamma_L \sim 7.5 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} \\ \gamma_D \sim 4.7 \times 10^{-3} \text{ cm}^{-1} \end{array} \right\} \Rightarrow y \sim 1.3$$

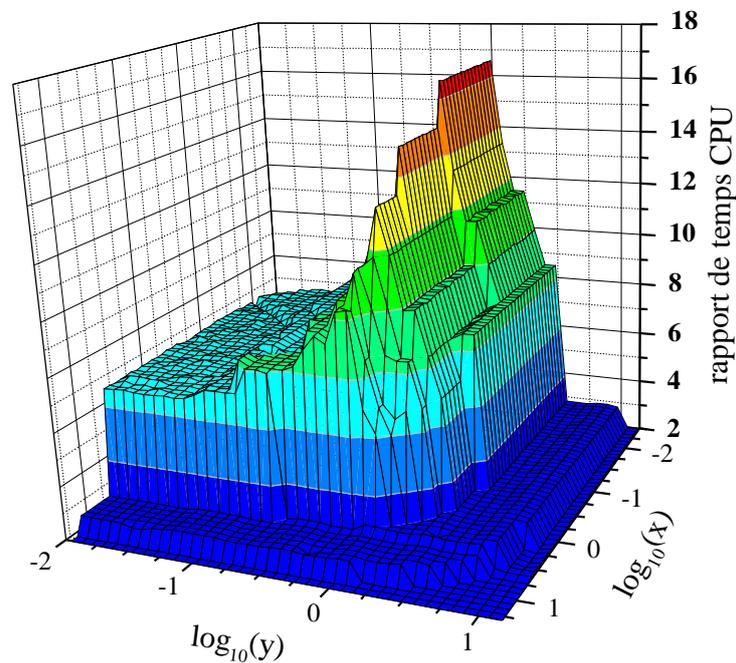


figure II.3: rapports de temps CPU entre le calcul avec la subroutine de Drayson et celui avec la table (ou avec le calcul Lorentz direct hors de la zone d'application de la table (cf figure II.1)).

II-3-2 MAILLAGE À GRILLES MULTIPLES

a) Présentation du problème

Si l'avantage d'un calcul raie par raie est de pouvoir fournir un spectre monochromatique, l'inconvénient inévitablement lié est le nombre de points du maillage du résultat, suffisamment élevé pour pouvoir échantillonner correctement les raies les plus fines. Or, le pas de sortie proposé par les méthodes développées jusqu'à présent représentait quelques points par demi largeur caractéristique d'une raie (quatre [PIER,97]) ou de l'ordre d'une demi largeur de la raie la plus fine (raie Doppler pour un spectre atmosphérique, d'où une distance typique de 10^{-3}cm^{-1} [FOMI,95]). Ainsi, chaque raie est potentiellement calculée en un grand nombre de points. En utilisant les continua, avec une coupure à 5cm^{-1} du centre, on dénombre $2*5/10^{-3}$ soit $\sim 10^4$ points par raie, ou bien 5.10^4 pour une coupure à 25cm^{-1} du centre. Alors, si on tient compte du nombre élevé de raies (HITRAN: $\sim 10^6$ raies,

HITEMP+HITRAN¹: 3.3×10^6 de raies), on aboutit à un nombre maximum potentiel de calculs $\sim 10^6 * 10^4 \sim 10^{10}$ pour HITRAN (5.10^{10} pour une coupure à 25 cm^{-1}), et $\sim 3.3 \times 10^6 * 10^4 \sim 3.3 \times 10^{10}$ pour HITEMP (1.6×10^{11} pour une coupure à 25 cm^{-1}), ce qui est totalement rédhibitoire.

Diverses solutions limitant le nombre de calculs furent proposées dans la littérature. La propriété fondamentale utilisée, déjà remarquée dans le paragraphe précédent, est la diminution de la variabilité relative du profil de raie en s'éloignant de son centre. Ainsi, Drayson [DRAY,66] fut le premier à proposer le calcul des ailes lointaines de raies sur des grilles de maillages lâches. En effet, il suggère d'adopter une grille avec des intervalles de 1 cm^{-1} de large et de calculer un profil de Lorentz en chacune des extrémités de ces intervalles et en leurs centres, pour les raies distantes de plus de 7.5 cm^{-1} . Les points intermédiaires sont obtenus par interpolation quadratique. Ensuite, il propose de mailler le domaine à l'aide d'une grille de pas non uniforme, très resserrée (10^{-3} cm^{-1}) près des centres de raies puis se relâchant en s'éloignant dans les ailes jusqu'à 0.1 cm^{-1} . Le résultat est alors intégré sur 0.1 cm^{-1} par une quadrature à quatre points de Gauss-Legendre. Cette méthode fut la base de l'élaboration d'autres codes raie par raie. Citons Kunde et Maguire [KUND,74] qui prirent comme coupure de basculement vers une grille lâche de pas 0.1 cm^{-1} , une distance de 3.5 cm^{-1} du centre de raie. Leur originalité par rapport à Drayson fut de rajouter des résultats d'ajustements sur des continua, lorsqu'ils étaient disponibles, sur la grille lâche. Ce fut le cas pour CO_2 dans la région $500\text{-}800 \text{ cm}^{-1}$, et la vapeur d'eau dans la région $400\text{-}1400 \text{ cm}^{-1}$. Citons aussi Susskind et Searl [SUSS,78] qui prennent une grille "fine" dont le pas correspond à deux points par demi-largeur d'une "raie type", et qui introduisent aussi une grille lâche pour les contributions à plus de 3 cm^{-1} du centre de raie, avec introductions de continua de H_2O et de N_2 et de fonctions χ pour CO_2 .

On retiendra de ces méthodes la recherche systématique de la limitation du nombre de points de calcul direct, qui tient compte de la non-uniformité de la variabilité d'un profil de raie, et l'utilisation d'interpolations pour les points intermédiaires, sans oublier l'inclusion de continua. Néanmoins la mise en œuvre pratique de l'idée d'un maillage à pas variable ne tient pas compte de la réalité de la densité de raies dans les centres de bandes. En pratique, sauf dans les cas rares où les distances entre centres de raies sont très grandes par rapport aux demi largeurs de ces mêmes raies, l'accumulation des raies fera en sorte qu'un tel

¹ HITRAN ET HITEMP sont des bases de données spectroscopiques. La première est valable pour des applications atmosphériques. La validité de la seconde est étendue à de hautes températures. Pour plus de détails, cf § II-4-1.

maillage sera nécessairement fin en tout point, alors qu'en réalité il n'a pas besoin de l'être pour chaque raie prise individuellement.

Une autre méthode fut employée pour éviter ce problème. Clough et Kneizys [CLOU,79] introduisirent la notion de décomposition d'un profil en quatre fonctions calculées sur des pas plus lâches pour chaque nouvelle fonction, avec reconstitution d'un spectre par le cycle en cascade suivant: interpolation, par méthode de Lagrange à quatre points, du résultat d'une grille lâche sur la grille immédiatement plus fine et addition du résultat sur cette dernière. Une ambiguïté demeure sur le processus de décomposition du profil qui semblerait être approximé par des polynômes bicarrés du quatrième degré, moyennant des contraintes sur leurs valeurs et celles de leurs dérivées en leurs points de raccords. Quant au pas de la grille d'échantillonnage, il se voit attribuer une valeur égale au quart d'une demi largeur de raie, sans précision supplémentaire sur le choix de cette demi largeur. Uchiyama [UCHI,91] reprit la démarche de Clough et Kneizys en précisant son choix de demi largeur: la plus grande entre la demi largeur Lorentz moyenne ou la demi largeur Doppler moyenne, déterminées sur l'intervalle spectral de calcul. On retiendra de cette deuxième approche méthodologique l'avantage d'un maillage à grilles multiples. Cependant, on peut regretter la démarche décomposition-approximation des profils qui introduit des erreurs non contrôlées. Cette conséquence découle également de l'application uniforme à toutes les raies de frontières de basculement identiques entre deux sous-fonctions, et de la détermination d'un pas d'échantillonnage qui ne tient pas compte de la disparité des largeurs de raies.

Citons aussi des méthodes plus récentes qui reprennent les idées précédemment évoquées en apportant quelques améliorations. Fomin [FOMI,95] construit un maillage à grilles multiples, chacune ayant un pas double de sa précédente, et y projette directement un "vrai" profil sans passer par la décomposition citée précédemment. La détermination des basculements entre deux grilles fut établie à l'aide d'un modèle d'aile de raie lorentzien du type $1/(\sigma-\sigma_r)^2$ dont l'auteur prétend être la fonction entraînant l'erreur la plus grande pour l'interpolation entre deux points de calcul (interpolation quadratique ou à 5 points), par comparaison avec une fonction de Voigt. Pour la partie centrale dont la limite est définie par $(2/3 \times (\gamma_L + \gamma_D))$, l'auteur suggère un polynôme d'interpolation. La limite dans l'aile est fixée à un ordre de grandeur de 3 ou 4 cm^{-1} du centre. Comme Clough et Kneizys, une interpolation en cascade est réalisée après projection de toutes les raies. Nous retiendrons de cette méthode l'extension de l'emploi d'un maillage à grilles multiples à frontières prédéfinies, le nombre de

celles-ci étant plus important que dans la version de Clough et Kneizys, avec l'utilisation du profil effectif sur les différentes grilles, sauf en la partie centrale de la raie. Toutefois, nous pouvons déplorer l'uniformité des domaines d'applications des grilles, déjà évoquée dans le paragraphe précédent, pénalisante non seulement dans le contrôle de l'erreur, mais aussi en temps si le pas proposé est inutilement petit. De plus, le pas de la grille fine n'est toujours pas clairement défini. Le problème de l'erreur fut mieux abordé et étudié par Sparks [SPAR,97] qui proposa de déterminer, pour une interpolation quadratique, des courbes de contours d'iso-erreur résultant de cette interpolation, pour un profil de raie Lorentz en fonction de l'espacement entre points de calculs directs, et du nombre de points de calcul depuis le centre, l'adimensionnement étant réalisé par la demi largeur de raie. La grille la plus lâche a un nombre de points au moins égal au nombre de points nécessaires pour l'interpolation (trois si elle est quadratique), le pas de chaque grille suivante étant divisé par 2, le nombre d'intervalles de la grille fine étant nécessairement un multiple de 2. Selon Sparks, l'erreur aux points de calcul du résultat est indépendante du nombre de ces points. Mais on désire en général déduire d'un spectre "haute résolution" un résultat "dégradé" par convolution avec une fonction d'appareil. Or, pour évaluer l'intégrale, il est important de s'assurer de l'erreur en tout point entre deux points de maillage, ce que le maillage proposé par Sparks ne garantit pas.

Citons pour terminer un article très récent (1999) de Kuntz et Höpfner [KUNT,99] qui reprennent et étendent la notion de courbe d'iso-erreur à un profil de Voigt. Ces réseaux de courbes doivent en principe être pré-calculés pour chaque y ($\sim \gamma_L/\gamma_D$), afin d'être tabulés, ce qui est inconcevable du point de vue mémoire d'ordinateur. Pour contourner cet obstacle, les auteurs proposent de ne tabuler les courbes que pour les cas Doppler et Lorentz, et d'approximer les résultats en Voigt en considérant la valeur maximale des erreurs issues des deux cas limites pondérés respectivement par le carré des rapports $\gamma_D/(\gamma_L + \gamma_D)$, $\gamma_L/(\gamma_L + \gamma_D)$. Le critère de validation de cette approximation repose sur une simple comparaison visuelle avec les courbes vraies, ce qui peut paraître insuffisant. Mentionnons un point pénalisant en temps: lorsque, pour une raie, un jeu de points approprié optimal est déterminé, un classement systématique de ces points selon le nombre d'onde croissant est effectué. Enfin, l'auteur utilise une grille de sortie qu'il qualifie de "quasi-uniforme", car son interpolation en cascade s'arrête, pour une zone de nombre d'onde donnée, sur la grille la plus fine utilisée dans cette zone, laquelle n'est pas nécessairement la plus fine utilisée sur l'ensemble de l'intervalle de calcul. Si certes on peut espérer une économie de mémoire si une seule molécule est utilisée dans une unique condition thermophysique, on peut douter de la réelle efficacité de cette méthode si

une colonne de gaz traverse l'atmosphère avec une forte variation d'altitude et de conditions et molécules rencontrées. L'effort numérique consenti notamment pour ne construire que les points de maillage nécessaires, avec les problèmes de tests et de repérages qui en découlent et donc une répercussion inévitable sur la consommation de temps, semblerait ne pas justifier une telle méthode.

En conclusion, nous pouvons retenir de cette étude bibliographique l'idée essentielle, souvent reprise, d'utiliser plusieurs grilles de maillage de pas différents. L'adaptation d'une raie à une grille de maillage donnée est ou bien présumée à partir d'études simplificatrices (profil Lorentz chez Fomin), ou bien extrapolée à partir de courbes d'erreurs tabulées en régimes Lorentz et Doppler (Kuntz et Höpfner). Le contrôle de l'erreur sur le coefficient d'absorption n'est donc qu'approché. De plus, la détermination du pas de la grille de résultat se fonde sur des estimations de largeurs moyennes, lesquelles ne tiennent pas compte de la forte variabilité des largeurs avec la raie considérée (pour l'eau en particulier).

Nous allons exposer dans la suite une méthode de détermination de maillage à multiples grilles qui répond aux insuffisances signalées dans les approches résumées précédemment, notamment le problème du pas de la grille haute résolution et la projection optimale des raies sur une grille donnée à partir de courbes tenant compte de la forme exacte du profil (fonction de Voigt), le tout piloté par un seul critère d'entrée: l'erreur relative sur le coefficient d'absorption final en tout point.

b) Échantillonnage optimal d'un profil de raie

Dans toute la suite, le profil de raie étudié est le profil de Voigt, mais la démarche suivie pourrait se transposer à un autre type de fonction décrivant l'élargissement de raie. Nous rappelons ici l'expression du profil de Voigt (cf équations (II-4) et (II-5)):

$$\Phi_r(x, y) = \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\gamma_{D,r}} \frac{y}{\pi} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-t^2}}{y^2 + (x-t)^2} dt}_{w(x,y)}, \quad \text{avec} \begin{cases} x = \sqrt{\ln 2} \frac{\sigma - \sigma_r}{\gamma_{D,r}} \\ y = \sqrt{\ln 2} \frac{\gamma_{L,r}}{\gamma_{D,r}} \end{cases}, \quad (\text{II-29})$$

Nous avons cherché à déterminer¹, pour la fonction de Voigt $w(x,y)$, pour une raie (un y) donnée, et en partant de son centre $x = 0$ (la fonction est paire par rapport à x) pour s'éloigner

¹ comme pour établir la tabulation du profil de Voigt, cf II-3-1

dans l'aile, le saut optimal Δx tel qu'une interpolation (linéaire ici) en tout point compris entre x et $x+\Delta x$ soit juste à une erreur relative ε_m près. La figure II.4 schématise le type de résultat obtenu en comparant le profil 'exact' à celui issu de l'interpolation. Nous nous assurons, par le choix des x_i , qu'en tout point compris entre deux points d'échantillonnage, l'erreur relative entre le profil vrai et le profil interpolé est majorée par ε_m , comme le précise l'équation:

$$\forall x \in [x_i, x_{i+1}], \frac{|w_{\text{interpolé}}(x, y) - w_{\text{vrai}}(x, y)|}{w_{\text{vrai}}(x, y)} < \varepsilon_m, \quad (\text{II-30})$$

L'allure de la courbe de saut optimal $\Delta x(x)$ est représentée sur la figure II.5 pour différentes valeurs de y . Bien que sa détermination soit numérique, il est possible de l'approximer analytiquement à partir du résultat général suivant: on montre que la position du maximum de l'erreur lors d'une interpolation linéaire d'une fonction de signe constant approximée au second ordre, est exactement au centre de l'intervalle d'interpolation si on parle d'erreur absolue, et voisine du centre si on parle d'erreur relative. Moyennant cette approximation, il est possible de déterminer analytiquement la valeur de l'erreur relative maximale dans un intervalle d'interpolation, et d'en déduire le pas optimal d'interpolation. Mais au cours du développement analytique, on est obligé d'admettre que la dérivée seconde de la fonction est différente de zéro en tout point, sinon il faudrait développer la fonction au troisième ordre, le calcul du saut optimal n'est alors plus analytique. Cela se produit au niveau du point d'inflexion du profil de Voigt, repéré sur la courbe de saut optimal par le maximum relatif.

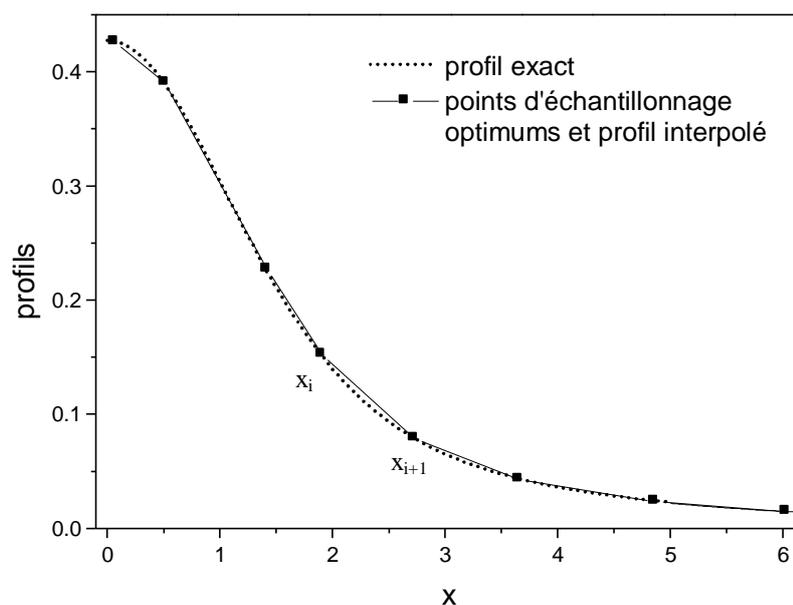


figure II.4: Illustration du principe d'échantillonnage de raie

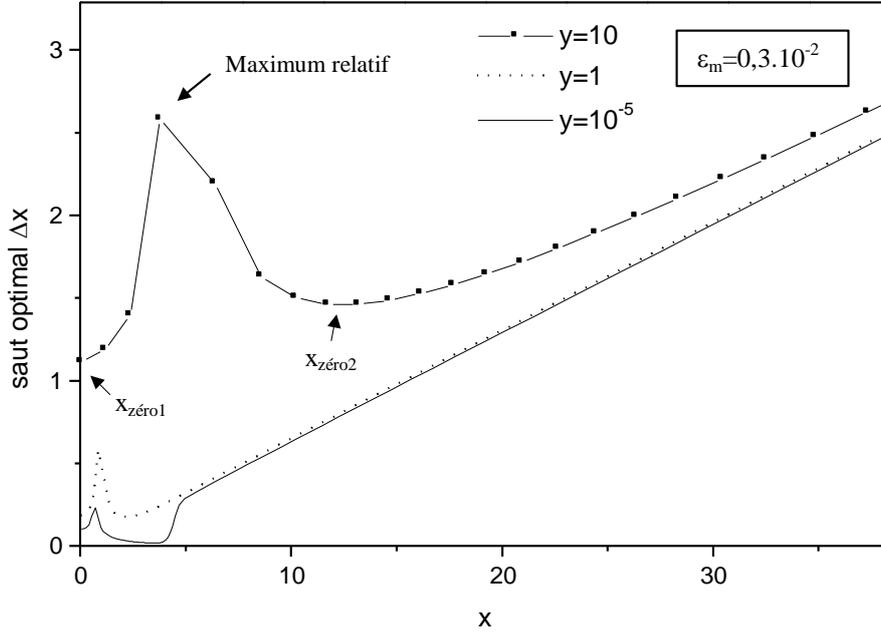


figure II.5: courbes de saut optimal pour différentes valeurs de y

On constate sur la figure II.5 que toutes les courbes tendent vers une même direction asymptotique que l'on peut décrire analytiquement. En effet, partant de la propriété selon laquelle tout profil de Voigt tend dans ses ailes vers un profil Lorentz, pour tout y non nul, nous pouvons calculer l'interpolation linéaire en régime Lorentz. Le paramètre y étant fixé, nous pouvons toujours considérer x suffisamment grand pour avoir $x \gg y$. Nous parvenons alors à l'expression suivante:

$$\forall y \neq 0, \quad \frac{\Delta x}{x} \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} \left[\frac{2}{1 + \varepsilon_m} (3 + 2\varepsilon_m - \sqrt{9 + 8\varepsilon_m}) \right]^{\frac{1}{2}} \underset{\varepsilon_m \ll 1}{\approx} \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\varepsilon_m}, \quad (\text{II-31})$$

Le seul cas où l'asymptote décrite par (II-31) n'est pas valable est le cas Doppler pur: $y=0$. On montre alors que

$$\Delta x \xrightarrow[x \rightarrow +\infty]{y=0} \frac{\ln(1 + \varepsilon_m) + \sqrt{2\varepsilon_m + \varepsilon_m^2}}{x} \underset{\varepsilon_m \ll 1}{\approx} \frac{\sqrt{2\varepsilon_m}}{x}, \quad (\text{II-32})$$

et donc que le pas tend vers zéro. La figure II.6 illustre le comportement des courbes de saut aux y faibles, avec le cas limite Doppler ($y=0$): plus le y est faible, plus le rattrapage de l'asymptote se fait loin dans l'aile, jusqu'à ne jamais se produire en $y=0$. Néanmoins, dans tout

calcul de spectre représentatif d'un phénomène physique, nous n'atteignons jamais un régime Doppler pur. Donc ce cas ne se rencontrera pas en pratique.

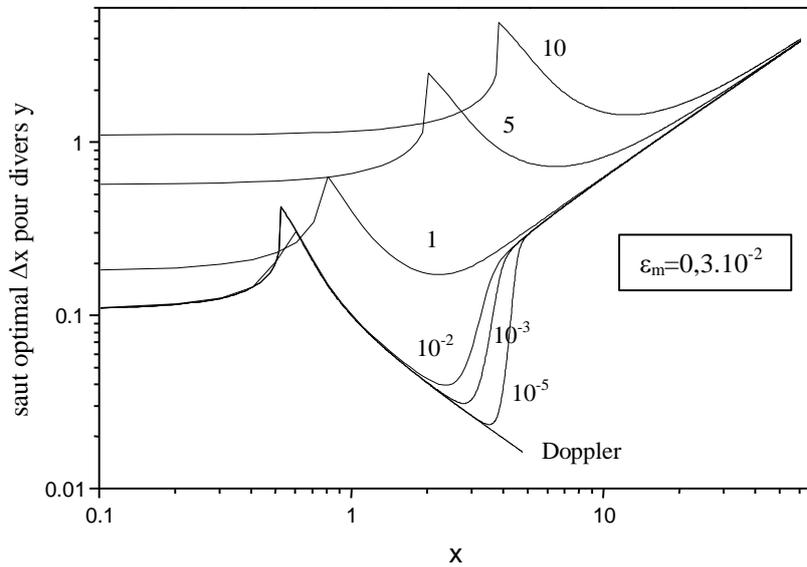


figure II.6: allure des courbes de saut pour différents ordres de grandeurs de y , notamment y faible.

Nous constatons que les courbes de saut optimal présentent deux minima locaux: en $x_{zéro1}=0$ et en $x_{zéro2}>0$ (cf figure II.5). À ϵ_m fixé, le minimum absolu se situe en $x_{min}=x_{zéro2}$ pour les y faibles et bascule en $x_{min}=x_{zéro1}$ pour les y grands. Sa valeur nous impose le minimum des pas d'échantillonnages maximaux tolérés par une raie, donc, dans l'optique d'un maillage à grilles multiples, le pas de la grille la plus fine. Nous pouvons ainsi clairement définir le pas le plus fin à prendre pour échantillonner correctement une raie, en accord avec une précision relative ϵ_m sur le coefficient d'absorption.

Vu qu'il est bien évidemment exclu de calculer dans le programme raie par raie une telle courbe de saut pour chaque raie, il apparaît essentiel de la modéliser afin d'obtenir pour chaque raie un critère d'évaluation rapide du pas maximum qu'elle tolère en chacun de ses points de calcul. Le choix de cette modélisation va de paire avec celui de la technique de maillage adoptée pour le calcul d'un spectre. Celle-ci repose sur la génération de plusieurs grilles, la première désignant la plus fine, chacune des suivantes ayant un pas multiple de la précédente, multiple unique, noté m . Le choix de pas adaptés à une raie se fait alors de la façon suivante (cf figure II.7): on adopte un palier correspondant au saut minimum exigé par la raie, puis on colle à l'asymptote avec une droite de pente p_{maill} donnée par l'équation (II-31). Le multiple m conditionne le point de départ de cette droite. Celui-ci est défini comme suit. Soit le point de la courbe, au-delà du deuxième minimum relatif $x_{zéro2}$, en lequel le saut vaut le

saut minimal multiplié par m . On trace la droite partant de ce point puis on la translate suivant l'axe des x jusqu'à ce qu'elle minore en tout point la courbe vraie. Ainsi, pour une erreur relative ε_m donnée, sachant que les pas de maillage de deux grilles consécutives ont un rapport de m , deux paramètres suffisent pour modéliser l'échantillonnage optimal d'une raie caractérisant le paramètre y d'une fonction de Voigt $w(x,y)$:

- le saut minimal: $\Delta x_{\min}(y)$
- le point de basculement vers l'asymptote: $x_2(y)$,

étant entendu que la pente de l'asymptote est commune à toutes les raies et ne dépend que de l'erreur ε_m [Eq.(II-31)].

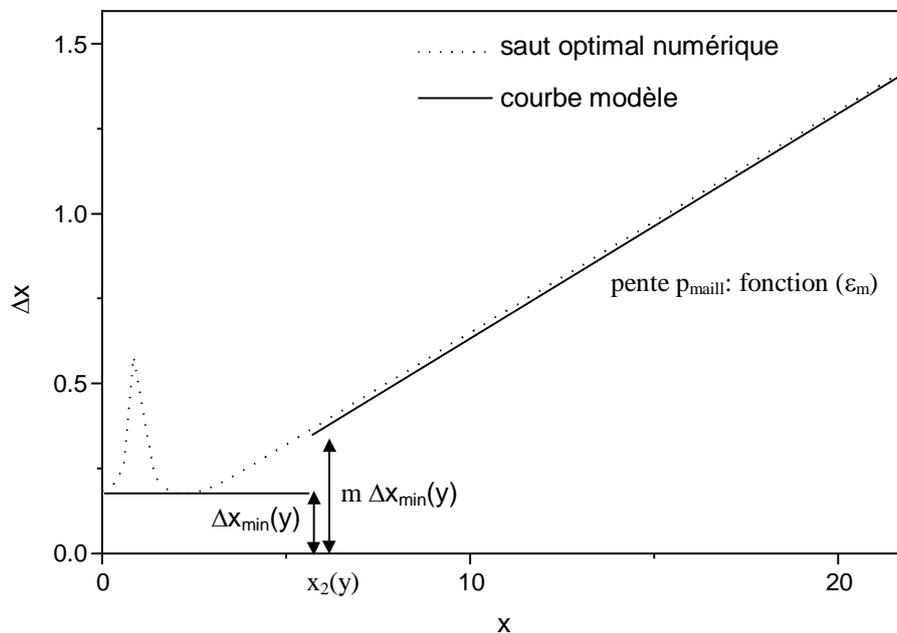


figure II.7: modélisation du maillage d'échantillonnage optimal d'une raie à l'aide de trois paramètres: $\Delta x_{\min}(y)$, $x_2(y)$, p_{maill} , paramétrés par ε_m .

L'objectif suivant est de généraliser cette modélisation à toute la gamme de paramètres y susceptibles d'être rencontrés dans des calculs de spectres. Pour cela, nous avons engendré systématiquement la courbe de saut optimal $\Delta x(x,y)$ en mémorisant, pour chaque valeur de y , les paramètres $\Delta x_{\min}(y)$ et $x_2(y)$, et ce pour une erreur relative¹ $\varepsilon_m = 0.3 \times 10^{-2}$. La gamme des y retenue s'étend de 8.25×10^{-12} à 10^5 . La valeur minimale de y est normalement amplement suffisante pour couvrir les applications envisagées. En effet, un balayage de l'ensemble des

¹ Cette erreur relative sur le coefficient d'absorption est amplement suffisante, vu que les paramètres spectroscopiques (intensités et largeurs) disponibles dans les bases de données sont connus dans le meilleur des cas à 4% près (cf § II-4-1).

raies de toutes les molécules des bases de données HITRAN et HITEMP, en prenant $T_{\max}=4000\text{K}$, ce qui est une majoration très confortable, montre que la valeur minimale de y permet de descendre jusqu'à:

$$P_{\min} \sim 10^{-9} \text{ atm}, \quad (\text{II-33})$$

cette valeur est imposée par une raie de la vapeur d'eau. Ces conditions sont particulièrement drastiques et ne sont pas en pratique rencontrées dans les applications envisagées ici. Néanmoins, nous avons prévu dans le code de calcul raie par raie d'adopter les valeurs de Δx et de x_2 en $y=8.25 \times 10^{-12}$, pour le cas, a priori improbable, où le y demandé serait inférieur à cette limite.

En ce qui concerne la limite supérieure de y (10^5), un basculement vers un calcul analytique est effectué au-delà, car, vu la valeur élevée de y , le profil peut être considéré de type Lorentz. Le calcul direct nous amène à une équation polynomiale du quatrième degré. En utilisant l'approximation $\Delta x \ll y$, nous aboutissons à un résultat manipulable analytiquement:

$$\begin{cases} \Delta x_{\min} = 2y\sqrt{\varepsilon_m} \\ x_2 = 3.0 y \end{cases}, \quad (\text{II-34})$$

Les courbes numériques $\Delta x_{\min}(y)$ et $x_2(y)$ corroborent ces comportements asymptotiques, comme l'illustre la figure II.8.

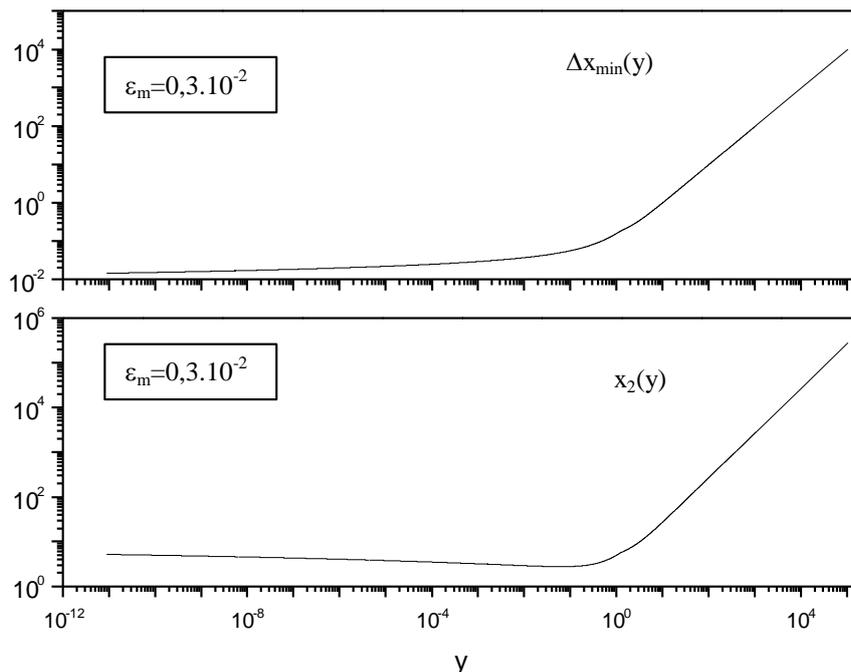


figure II.8:

- saut minimal $\Delta x_{\min}(y)$
- position du double du saut minimal $x_2(y)$

Courbes tabulées jusqu'à $y=10^5$: tabulations avec un pas constant en $\ln y$, d'où un repérage du type:

$$i = 1 + E(\text{cte}_1 \ln y + \text{cte}_2)$$

L'évolution en fonction de ε_m , pour ε_m petit, est:

$$\begin{cases} \Delta x_{\min} \text{ proportionnel à } \sqrt{\varepsilon_m} \\ x_2 \text{ indépendant de } \varepsilon_m \end{cases}$$

La conversion de leurs asymptotes est directe, en utilisant l'équation (II-34). Nous rappelons que la pente p_{maill} de la courbe modèle dépend explicitement de ε_m par (II-31).

À ce stade, nous disposons de tables à accès rapide [$\Delta x_{\min}(y)$ et $x_2(y)$] et de formules analytiques simples permettant d'avoir un modèle d'échantillonnage optimal d'une raie quelconque. Dans la rubrique suivante, nous allons montrer comment utiliser ces outils pour construire un maillage multi-grilles et y projeter les raies.

c) Construction du maillage multi-grilles et techniques de projection des raies

Les modèles de saut optimal associés aux raies servent de fondement pour la construction des grilles de maillage et pour y projeter les raies. Ils offrent en effet le précieux double avantage de permettre le contrôle des erreurs et d'être suffisamment simples (un palier et une droite) pour une utilisation avec un coût en temps CPU négligeable.

Nous présentons dans un premier temps la méthode suivie pour construire un maillage à grilles multiples. Le choix du pas de maillage d'échantillonnage $\Delta\sigma_{\text{HR}}$ du spectre final est dicté par le plus petit des $\Delta\sigma_{\min}^r$ imposé par l'ensemble des raies r du calcul:

$$\Delta\sigma_{\text{HR}} = \underset{r}{\text{Min}} (\Delta\sigma_{\min}^r), \quad (\text{II-35})$$

avec:

$$\Delta\sigma_{\min}^r = \frac{\gamma_{D,r} \Delta x_{\min}(y_r)}{\sqrt{\ln 2}}, \quad (\text{II-36})$$

Le maillage effectivement adopté est légèrement inférieur afin d'avoir un nombre entier d'intervalles sur la gamme de calcul que l'on notera $[\sigma_{1\text{HR}}, \sigma_{2\text{HR}}]^1$. La construction des grilles suivantes plus lâches se fait en adoptant comme rapport de pas entre deux grilles consécutives un nombre unique et entier m (que nous avons pris égal à 2). En numérotant les grilles i de 1 pour la plus fine à N pour la plus lâche, nous avons:

$$\Delta\sigma(i+1) = m \Delta\sigma(i) = m^{i-1} \Delta\sigma_{\text{HR}}, \quad (\text{II-37})$$

¹ L'indice HR dénote la notion de calcul Haute Résolution, par opposition à Basse Résolution (BR) qui indique un calcul dégradé par convolution par une fonction d'appareil.

Le dernier point de chaque grille, à partir de la deuxième, doit avoir un nombre d'onde supérieur ou égal à σ_{2HR} . La figure II.9 schématise la disposition relative des grilles, le rapport entier m entraînant que tous les nœuds d'une grille, sauf éventuellement le dernier, coïncident avec des nœuds de la précédente. Nous verrons dans le paragraphe qui suit comment est choisi le rang N de la dernière grille utilisée.

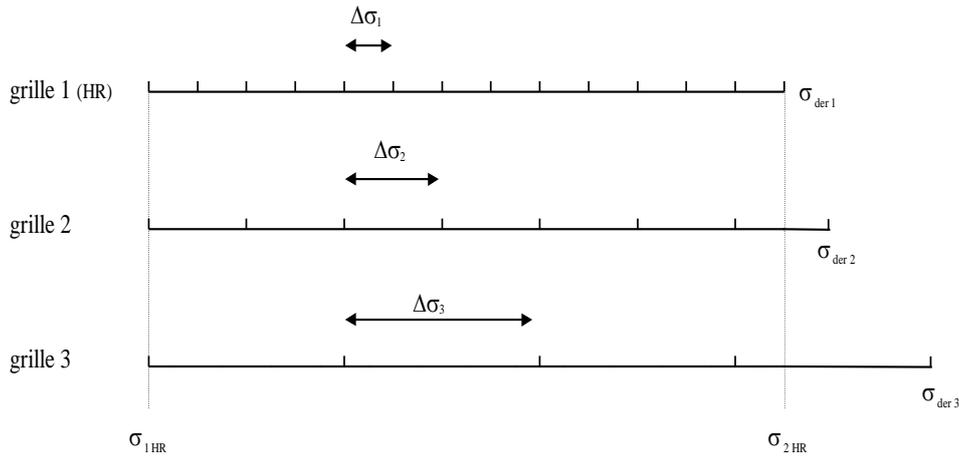


figure II.9: disposition relative des grilles avec un rapport de pas entre deux grilles consécutives $m=2$.

Nous présentons maintenant la technique de projection des raies. Celle-ci se doit d'être efficace pour être rapide. Pour cela, pour chaque raie, nous avons accès très rapidement aux paramètres clefs $\Delta x_{\min}^r = \Delta x_{\min}(y^r)$ et $x_2^r = x_2(y^r)$, grâce aux tables déjà évoquées précédemment. Puis nous passons dans l'espace des nombres d'onde σ , en convertissant Δx_{\min}^r en $\Delta \sigma_{\min}^r$ selon l'équation (II-36), et x_2^r en σ_2^r selon:

$$\sigma_2^r = \sigma_r + \frac{x_2^r \gamma_{D,r}}{\sqrt{\ln 2}}, \quad (\text{II-38})$$

La courbe modèle de saut optimal associée non plus à un paramètre y mais bien à une raie individuelle, prend alors la même forme que celle en x (figure II.7, p.39) sachant que la pente de la droite asymptote est la même:

$$P_{\text{maill}} = \frac{\Delta x}{x} = \frac{\Delta \sigma}{\sigma - \sigma_r}, \quad (\text{II-39})$$

Ainsi, en un point donné σ , toute grille de pas majoré par la courbe de saut optimal d'une raie peut servir pour mailler le calcul de cette raie. Or, notre but étant de minimiser le nombre de calculs directs du profil d'une raie, nous cherchons en chaque point de la courbe de saut

optimal, la grille la plus lâche pouvant minorer cette courbe. Pour cela, il suffit de superposer la courbe de saut sur l'échelle formée par les pas des différentes grilles, puis de déterminer les points d'intersections de la courbe de saut avec cette échelle. Ainsi sont définis les domaines d'applicabilités optimaux des grilles pour le calcul de la raie, comme l'illustre la figure II.10, sur un exemple de deux raies utilisant cinq grilles.

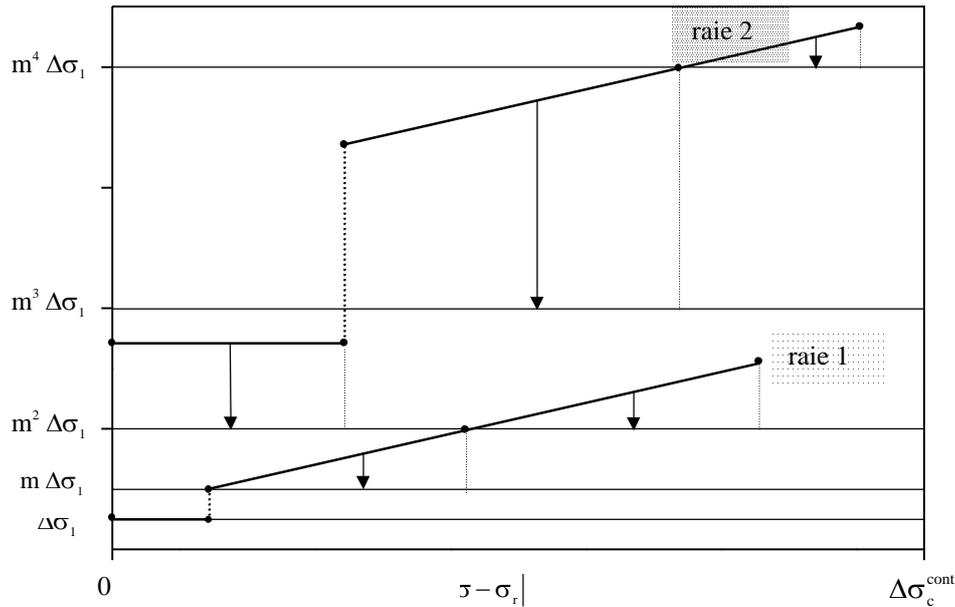


figure II.10: Utilisation des courbes de saut des raies pour leurs projections sur les grilles de maillage. $|\sigma - \sigma_r|$ est l'écart au centre de la raie, majoré par $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$, distance maximale avant coupure. La raie 1 impose la grille n°1 dite HR, la raie 2 entraîne l'utilisation de la grille n°5 (pas $m^4 \Delta\sigma_1$).

Il est à noter que chaque raie utilise comme première grille celle qui lui est la plus adaptée, autrement dit celle qui propose un pas immédiatement inférieur à celui exigé par sa courbe modèle de saut optimal, et donc pas nécessairement la première grille (HR). Ensuite, les grilles utilisées par la raie sont consécutives. Par ailleurs, comme nous le verrons plus tard, les raies peuvent être coupées à la distance notée $|\sigma_{r,\text{fin}} - \sigma_r|$, inférieure à celle du raccord avec le continuum, $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$. Ainsi, nous connaissons le pas le plus large toléré par chaque raie, ce qui nous donne le numéro N de la dernière grille utilisée avant de construire le jeu de grilles. Évoquons enfin le problème des raies des bords de l'intervalle de calcul, c'est-à-dire celles qui sont centrées hors de $[\sigma_{1\text{HR}}, \sigma_{2\text{HR}}]$, mais dans $[\sigma_{1\text{HR}} - \Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma_{1\text{HR}}]$ ou $[\sigma_{2\text{HR}}, \sigma_{2\text{HR}} + \Delta\sigma_c^{\text{cont}}]$ et dont les ailes contribuent donc à l'absorption dans $[\sigma_{1\text{HR}}, \sigma_{2\text{HR}}]$. Afin de n'en tenir compte que dans les zones où elles seront effectivement calculées, leurs courbes de saut associées sont

tronquées dans les bords, de sorte que seules les parties effectivement incluses dans le domaine de calcul interviendront dans l'élaboration des grilles de maillage. Ainsi, une raie qui n'intervient que par son aile n'imposera pas de grille adaptée à son palier. L'intérêt se manifeste dans le cas où son palier est le plus faible de toutes les raies du calcul, car, s'il était pris en compte, il imposerait une grille fine jamais utilisée, ce qui pénaliserait le programme en mémoire mais aussi en temps à cause de l'interpolation sur cette grille. En bilan, nous pouvons affirmer que les grilles de maillage fabriquées avec cette méthode sont nécessaires, car toutes utilisées, et suffisantes, car elles satisfont aux exigences de pas de toutes les raies, qu'elles soient entièrement ou partiellement (si elles sont tronquées) incluses dans l'intervalle de calcul. Nous verrons plus loin que le maillage est déterminé sur la base des raies conservées après les étapes de pré-tri et tri, ce qui renforce le caractère strictement nécessaire et suffisant des grilles créées. Signalons aussi qu'afin d'améliorer encore l'efficacité de la projection des raies, tous les indices de basculement de grilles, évaluables analytiquement, sont calculés en amont de la projection effective. Il en va de même, si la raie n'est pas lorentzienne, pour le repérage du numéro de grille et de l'indice de fin d'utilisation de la table de Voigt pour le basculement en calcul Lorentz. Ainsi, absolument aucun test conditionnel n'est effectué dans le calcul de projection d'une raie. Un exemple de mise en œuvre de la décomposition est donné sur la figure II.11 :

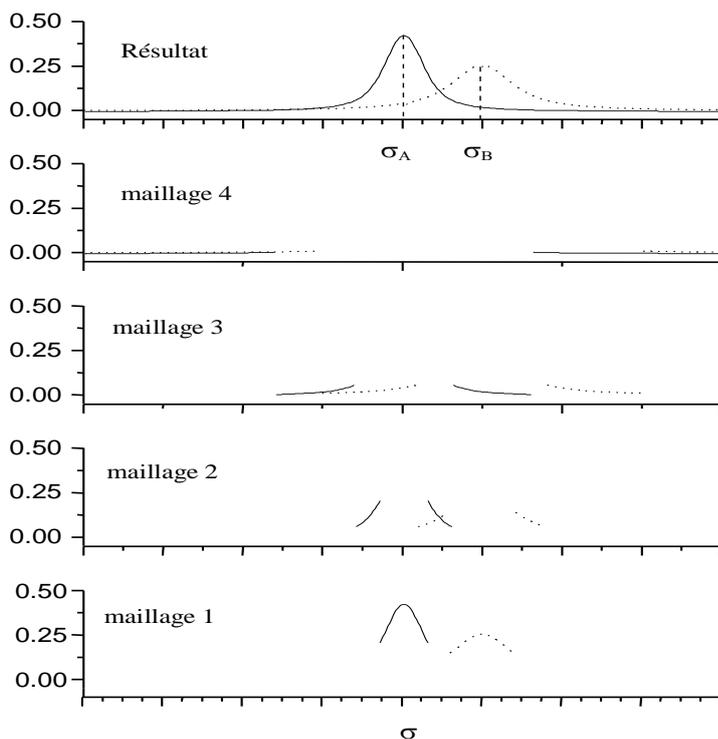


figure II.11: illustration de la décomposition des raies sur un exemple de deux raies projetées sur quatre maillages

d) Interpolation des projections issues des différentes grilles

Une fois toutes les raies projetées, nous reconstituons le spectre par interpolation linéaire des résultats sur les différentes grilles autres que la plus fine. Il est évident que l'erreur relative ε_m , valable pour une raie, reste la même sur le coefficient d'absorption des raies accumulées. Nous utilisons la méthode de l'interpolation en cascade, qui consiste à interpoler les résultats sur une grille i aux points spectraux de la précédente ($i-1$) et à ajouter les valeurs ainsi obtenues à celles qui sont déjà dans ($i-1$). On recommence ensuite l'opération avec les grilles ($i-1$) et ($i-2$), puis ($i-2$) et ($i-3$), ainsi de suite jusqu'à atteindre la grille la plus fine. Cette méthode offre, par rapport à une interpolation directe de chaque grille sur la grille la plus fine, un nombre de calculs par interpolations bien moindre. En effet, en notant N le nombre de grilles utilisées, p le nombre de points de la grille HR, m le rapport de pas de deux grilles consécutives, et en supposant $p \gg N$, ce qui est vrai en pratique ($N \sim 10$ contre quelques puissances de 10 pour p), on obtient un rapport de l'ordre de N en faveur de l'interpolation en cascade. Signalons que deux précautions sont à prendre, les explications qui vont suivre étant illustrées sur la figure II.12. Soient deux grilles consécutives utilisées par une raie, la plus fine étant désignée par amont, la plus lâche par aval. Premièrement, comme tous les points d'une grille (sauf éventuellement le dernier) sont des points de la grille immédiatement plus fine, le point où l'on bascule d'une grille à la suivante lors du calcul d'une raie est commun aux deux grilles; il ne faut donc le calculer qu'une fois: nous avons choisi de le faire sur la grille aval.

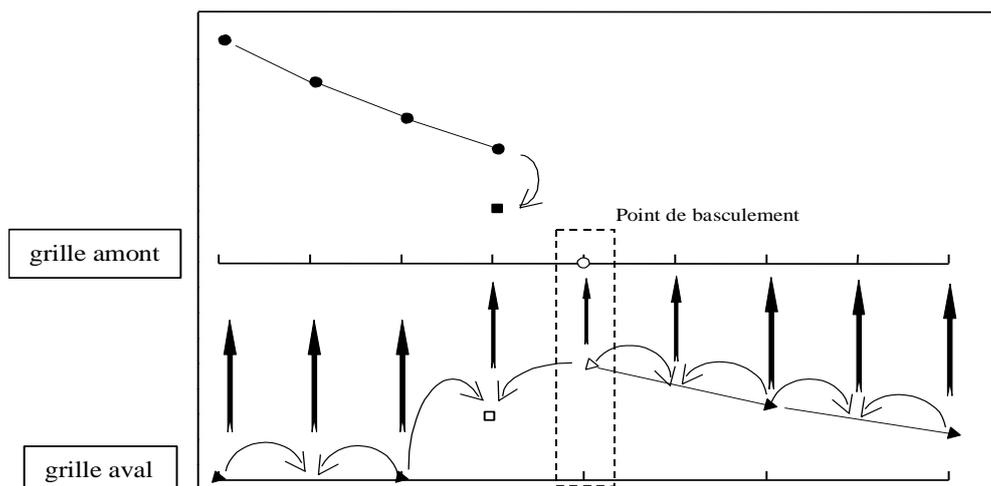


figure II.12: méthode d'interpolation en cascade illustrée avec une raie. Le point de basculement commun aux deux grilles [(o) et (Δ)] n'est calculé que sur la grille aval. Le point interpolé (\square) est incorrect. Sa valeur, qui est égale à la moitié de celle de (Δ), doit être retirée, avant interpolation, au point calculé sur la grille amont qui devient alors (\blacksquare).

La deuxième précaution est à prendre dans les zones de raccord. Lors de l'interpolation entre le premier point calculé sur la grille aval et le point précédent sur la même grille, non calculé (donc de valeur nulle), il y a création d'une valeur fautive, laquelle est répercutée sur la grille amont. Il faut donc, avant interpolation, retirer à l'avant dernier point calculé sur cette grille amont, la valeur fautive qui vaut la moitié de la valeur calculée au premier point utilisé par la raie sur la grille aval.

Conclusion: intérêt de la méthode, perspectives d'amélioration

L'intérêt majeur de la méthode de maillage à grilles multiples proposée est la possibilité de réduction appréciable du nombre de points de calcul direct. À cela s'ajoute une technique de détermination du découpage d'une raie sur les différentes grilles particulièrement performante car nécessitant très peu de calculs et de tests conditionnels, la projection à proprement parler étant réalisée sans aucun test. Signalons, du point de vue informatique, que le surplus de mémoire engendré par la création de multiples grilles a été limité. Nous avons en effet voulu éviter l'écueil consistant à créer une matrice indicée par le numéro de grille et la position dans une grille, laquelle serait alors dimensionnée par la taille de la grille la plus fine multipliée par le nombre de grilles créées, avec donc un coût important en mémoire inutile. Au lieu de cela, nous avons regroupé toutes les grilles, même la plus fine, dans un vecteur unique dans lequel elles sont disposées à la suite les unes des autres, réduisant ainsi la mémoire d'un facteur de l'ordre du nombre de grilles divisé par deux. Ainsi pas une seule zone mémoire inutile n'a été créée¹. Le repérage d'un point dans une grille donnée se fait alors en ajoutant à l'indice "normal" un indice de décalage tenant compte du nombre de points cumulé des grilles précédentes.

Des tests numériques ont confirmé que le temps de l'interpolation en cascade était tout à fait négligeable (plus de deux ordres de grandeur) devant celui de projection des raies quand leur nombre est suffisamment élevé: il s'agit typiquement de calculs pour des colonnes de gaz chauds avec plus de 10^5 raies, lesquelles sont les plus coûteuses en temps CPU, lors d'un calcul de signature infrarouge. On pourrait donc envisager de réduire encore le nombre de points de calculs directs en réalisant des interpolations quadratiques, puisque l'on a une grande marge sur le surcoût en temps d'interpolation. Le gain en temps se doublerait ici d'un gain en mémoire, car les grilles seraient moins nombreuses et plus espacées. Il ne faudra

¹ L'intérêt de cette démarche se justifie par le fait de pouvoir dimensionner dynamiquement des vecteurs dans un programme. Ceci est assuré par le langage Fortran 90. Cette particularité sera discutée dans le chapitre II-6.

cependant pas oublier que dans l'utilisation de la grille fine HR, on n'aura plus le droit de faire des interpolations linéaires, cette remarque est importante lorsqu'on voudra convoluer le résultat et donc réaliser des intégrations numériques.

II-3-3 TRI DES RAIES

a) Présentation du problème; Bibliographie des solutions proposées

Comme nous l'avons déjà mentionné lors de la présentation du problème du maillage, un nombre considérable de raies constituent les bases de données spectroscopiques (HITRAN 98: $\sim 10^6$ raies, HITEMP+HITRAN: 3.3×10^6 raies). Or, toutes les raies n'ayant pas le même poids dans leur contribution au coefficient d'absorption d'un gaz, essentiellement du fait de leurs intensités qui dépendent fortement de la température, il peut être utile d'instaurer un tri afin de ne retenir que les raies significatives compte tenu des conditions thermophysiques du gaz. Un cas extrême est celui des signatures infrarouges car, vu qu'un même trajet lumineux traverse et des couches chaudes et des couches atmosphériques, une base de données chaude est nécessaire dans le premier cas, mais superfétatoire dans le deuxième. Il faut alors s'affranchir de la lourdeur excessive des calculs inhérents à l'utilisation d'une même base complète dans toutes les conditions.

Seulement quelques méthodes de calcul raie par raie proposent des méthodes de tri des raies. Nous nous proposons de résumer ici les solutions envisagées. Susskind et Searl [SUSS,78] suggèrent un critère absolu fondé sur la valeur au centre de raie. Une raie est éliminée si la valeur du coefficient d'absorption au centre est inférieure à celle d'une raie de CO₂ d'intensité donnée. Sparks [SPAR,97] propose un critère tout à fait analogue, mais en laissant à l'utilisateur le choix de la borne sur la limite du coefficient d'absorption. Ces solutions sont certes simples, mais des défauts apparaissent, lesquels sont liés au manque de contrôle sur le résultat final. En effet, chaque raie n'est jugée que par rapport à sa propre contribution au coefficient d'absorption. On ne tient pas compte des raies voisines, donc d'une accumulation éventuelle des erreurs si des raies éliminées sont proches les unes des autres. Pour remédier à cela, on peut penser à faire des essais avec des valeurs seuil arbitrairement petites. Néanmoins, ces méthodes relèvent de l'empirisme et ne peuvent pas prétendre optimiser le nombre de raies éliminées en gardant le contrôle de l'erreur sur le coefficient d'absorption. Si le critère est trop grand, on ne maîtrise plus l'erreur. S'il est trop petit, il perd

son efficacité donc sa raison d'être puisque le nombre de raies éliminées risque d'être insignifiant. Citons enfin une dernière méthode qui a tenté de pallier ces insuffisances. Elle fut suggérée par Pierrot[PIER,97] qui a adapté celle proposée par Delaye[DELA,90]. Elle se divise en deux critères de tri. Le premier est relatif. Il propose d'éliminer une raie en comparant sa valeur au centre à celle, en ce point, de la raie la plus intense présente dans son voisinage: le seuil d'élimination est défini par la fraction ε_1/N , ε_1 étant un nombre "petit" (typiquement 10^{-3}) et N le nombre de raies voisines. Il est démontré que, si les raies ont un profil lorentzien et ont toutes la même demi-largeur, l'erreur relative sur le coefficient d'absorption est majorée par $1.32 \varepsilon_1$. Le deuxième critère est absolu. Il élimine une raie si sa valeur au centre multipliée par la longueur d'une couche homogène gazeuse (donc l'épaisseur optique) est inférieure à ε_2/N , avec ε_2 un deuxième nombre "petit" ($\sim 10^{-4}$). Ce critère est rendu exploitable sans calcul de la valeur au centre en supposant les raies lorentziennes et toutes de même demi-largeur. Nous retiendrons de ces critères qu'ils ont le mérite de tenter de tenir compte de l'influence du voisinage d'une raie pour décider ou non de l'éliminer. Néanmoins la notion de voisinage est assez mal cernée (\sim quelques cm^{-1} selon L. Pierrot). Donc on risque de prendre en compte ou pas assez de raies voisines ou trop, donc avec encore une fois ici un risque de dépassement de l'erreur escomptée si le voisinage est trop étroit ou bien une inefficacité du critère dans le cas contraire. Ce dernier cas peut d'autant plus se produire que la division du seuil ε par le nombre de raies voisines est un critère très sévère, car cela revient à attribuer à toutes les raies la même contribution, celle de la plus intense atténuée par ε_1/N dans le cas du tri relatif. Enfin, la justification du contrôle des erreurs sur le coefficient d'absorption et même l'application de formules issues des critères se font en supposant les profils lorentziens avec une largeur unique commune à toutes les raies, ce qui constitue des obstacles à la validité de telles méthodes dans les calculs en régime Voigt et a fortiori en Doppler. De plus la forte disparité des coefficients d'élargissement des raies (on pense essentiellement à H_2O) limite encore la légitimité de telles hypothèses.

Nous proposons ici une méthode répondant aux objections soulevées par les solutions envisagées jusqu'ici. Nous adoptons un critère de tri absolu: nous cherchons parmi les raies celles dont la somme des contributions individuelles au coefficient d'absorption est majorée par une barrière d'erreur ε_k . La méthode consiste à discrétiser l'intervalle de prise en

compte des raies¹ en sous-intervalles i_c dits de contrôle, à majorer la contribution des raies dont le centre est dans ces intervalles en les recadrant toutes au même point, et à évaluer dans chacun de ces intervalles de contrôle une barrière sur le coefficient d'absorption $\varepsilon_{i_c}^{\kappa}$ tenant compte de la contribution des raies regroupées dans les intervalles voisins, de façon à respecter l'erreur globale sur le coefficient d'absorption ε_{κ} . Ainsi, dans chaque intervalle de contrôle, la somme des raies négligées ne doit pas dépasser cette barrière. Ces idées sont explicitées dans ce qui suit.

b) Majoration de la contribution des raies négligées au coefficient d'absorption

Considérons l'ensemble des intervalles de contrôle issus du découpage de l'intervalle de prise en compte des raies. Le choix de la largeur $\Delta\sigma$ de ces intervalles sera discuté plus tard. Isolons un de ceux-ci que nous désignerons par i_0 , et cherchons à lui attribuer une barrière $\varepsilon_{i_0}^{\kappa}$ sur le coefficient d'absorption dû aux raies qui y sont regroupées. Le maximum de ce coefficient d'absorption est majoré par le résultat issu du cas où toutes les raies sont centrées au même point, comme le montre la figure II.13.

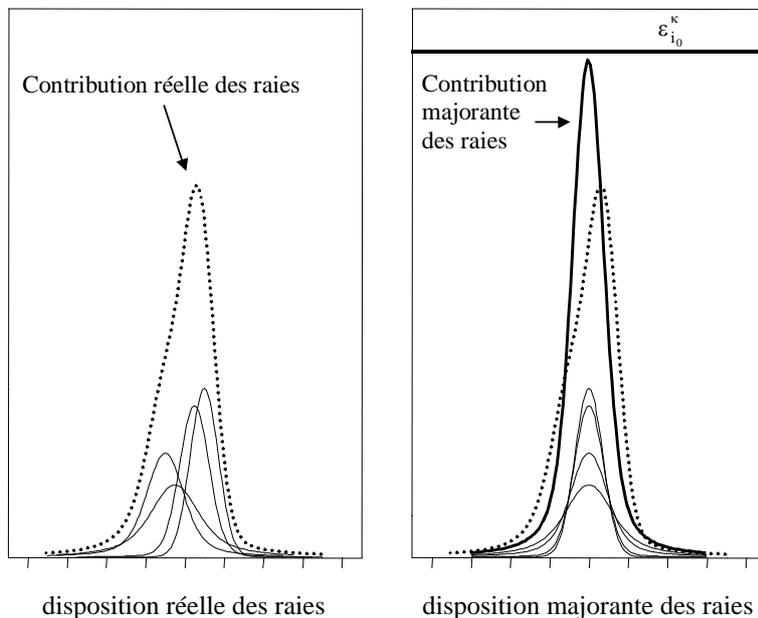


figure II.13: disposition des raies centrées dans un intervalle i_0 de contrôle. La contribution majorante des raies négligeables ne doit pas dépasser la barrière $\varepsilon_{i_0}^{\kappa}$.

¹ Il s'agit de l'intervalle de calcul $[\sigma_{1HR}, \sigma_{2HR}]$ élargi à gauche et à droite par la distance de coupure maximale des raies $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$.

Il s'agit maintenant d'évaluer la contribution des raies négligeables dont les centres sont dans les intervalles voisins. Afin de majorer cette contribution, on supposera ces raies centrées au même point dans chaque intervalle et le plus près de l'intervalle de contrôle i_0 . De plus, la position de la disposition majorante des raies négligeables dans i_0 n'étant pas connue, nous avons envisagé trois cas: positions à droite, au centre, à gauche. La figure II.14 illustre la disposition relative des raies dans l'intervalle de contrôle où l'on cherche à en éliminer (i_0) et dans les intervalles de contrôle voisins. Notons que le voisinage est ici clairement défini. Il regroupe tous les intervalles de contrôle dont les raies sont situées à moins de $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$ de la position des raies dans i_0 . On notera $N_d(i_0)$ le nombre de tels intervalles à droite de i_0 , et $N_g(i_0)$ à gauche de i_0 .

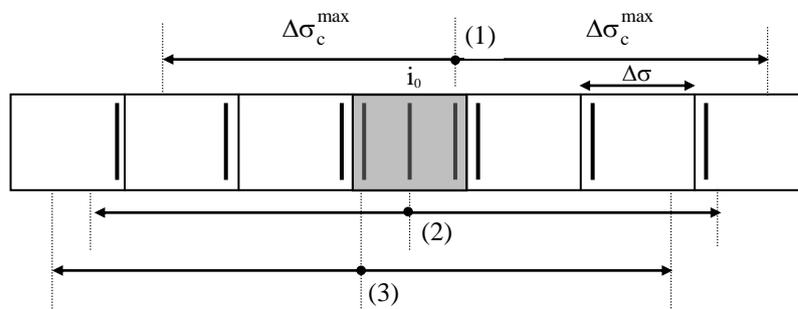


figure II.14: Les trois cas (1), (2), (3) de disposition relative des raies négligeables dans l'intervalle de contrôle i_0 et dans les intervalles de contrôle voisins dont la position des raies est supposée la plus proche possible de i_0 afin de majorer leur contribution.

Les raies négligées r_n vérifient dans chacun des intervalles de contrôle courants i_c :

$$\sum_{r_n \in i_c} \kappa_n(\text{centre}) = \sum_{r_n \in i_c} \Phi_n(0) S_n' x_n P < \varepsilon_{i_c}^k, \quad (\text{II-40})$$

où les $\varepsilon_{i_c}^k$ restent encore à définir en fonction de l'erreur totale choisie. Nous allons traiter le cas de la disposition notée (1) sur la figure II.14 (raies négligeables dans i_0 supposées à droite), les deux autres s'en déduisant de façon analogue. Nous pouvons affiner l'évaluation de l'erreur en ne comptant pas de contribution issue d'intervalles de contrôle i_c dont on sait:

- ou bien qu'ils ne renferment aucune raie,
- ou bien qu'aucune raie n'y sera négligée: si la plus petite valeur au centre des raies dans i_c est déjà à elle seule supérieure à l'erreur sur le coefficient d'absorption ε_{i_c} .

On introduit pour cela un facteur δ_{i_c} valant 0 si la contribution de i_c est ignorée, 1 sinon. Dans ces conditions, on a une majoration de l'erreur dans un intervalle de contrôle i_0 en tenant

compte des raies négligées qui y sont centrées et des raies négligées centrées dans les intervalles voisins:

$$\text{erreur}(i_0) = \varepsilon_{i_0}^\kappa + \underbrace{\left\{ \delta_{i_0+1} \varepsilon_{i_0+1}^\kappa + \sum_{i=2}^{N_d(i_0)} \delta_{i_0+i} \sum_{r_n \in (i_0+i)} \Phi_n (i-1) \Delta \sigma S'_n x_n P \right\}}_{\text{influence des intervalles à droite de } i_0} + \underbrace{\left\{ \sum_{i=1}^{N_g(i_0)} \delta_{i_0-i} \sum_{r_n \in (i_0-i)} \Phi_n i \Delta \sigma S'_n x_n P \right\}}_{\text{influence des intervalles à gauche de } i_0}$$

, (II-41)

En utilisant l'équation (II-40), on obtient:

$$\text{erreur}(i_0) < \varepsilon_{i_0}^\kappa + \left\{ \delta_{i_0+1} \varepsilon_{i_0+1}^\kappa + \sum_{i=2}^{N_d(i_0)} \varepsilon_{i_0+i}^\kappa \delta_{i_0+i} \frac{\sum_{r_n \in (i_0+i)} \Phi_n (i-1) \Delta \sigma S'_n x_n}{\sum_{r_n \in (i_0+i)} \Phi_n (0) S'_n x_n} \right\},$$

$$+ \left\{ \sum_{i=1}^{N_g(i_0)} \varepsilon_{i_0-i}^\kappa \delta_{i_0-i} \frac{\sum_{r_n \in (i_0-i)} \Phi_n i \Delta \sigma S'_n x_n}{\sum_{r_n \in (i_0-i)} \Phi_n (0) S'_n x_n} \right\}$$

, (II-42)

on en déduit:

$$\text{erreur}(i_0) < \varepsilon_{i_0}^\kappa + \left\{ \delta_{i_0+1} \varepsilon_{i_0+1}^\kappa + \sum_{i=2}^{N_d(i_0)} \varepsilon_{i_0+i}^\kappa \delta_{i_0+i} \left[\frac{\Phi_n (i-1) \Delta \sigma}{\Phi_n (0)} \right]_{r_n \in (i_0+i)}^{\max} \right\},$$

$$+ \left\{ \sum_{i=1}^{N_g(i_0)} \varepsilon_{i_0-i}^\kappa \delta_{i_0-i} \left[\frac{\Phi_n i \Delta \sigma}{\Phi_n (0)} \right]_{r_n \in (i_0-i)}^{\max} \right\}$$

, (II-43)

Or, on montre analytiquement que le rapport $\frac{\Phi(\text{aile})}{\Phi(\text{centre})}$ croît avec la largeur de la raie, en régime Lorentz, ou en régime Doppler. On vérifie ce résultat numériquement avec un profil de Voigt. Donc un majorant de ce rapport est obtenu pour la raie la plus large (γ_V^{\max}) de chaque intervalle de contrôle. Par ailleurs, il faut s'assurer que l'erreur "erreur(i_0)" est inférieure à l'erreur sur le coefficient d'absorption ε_κ . On aboutit à:

$$\varepsilon_{i_0}^\kappa + \left\{ \delta_{i_0+1} \varepsilon_{i_0+1}^\kappa + \sum_{i=2}^{N_d(i_0)} \varepsilon_{i_0+i}^\kappa \delta_{i_0+i} \left[\frac{\Phi (i-1) \Delta \sigma}{\Phi (0)} \right]_{i_0+i}^{\gamma_V^{\max}} \right\} + \left\{ \sum_{i=1}^{N_g(i_0)} \varepsilon_{i_0-i}^\kappa \delta_{i_0-i} \left[\frac{\Phi i \Delta \sigma}{\Phi (0)} \right]_{i_0-i}^{\gamma_V^{\max}} \right\} < \varepsilon_\kappa, \text{ (II-44)}$$

L'approximation réalisée ensuite est de supposer que tous les $\varepsilon_{i_0+i}^{\kappa}$ et $\varepsilon_{i_0-i}^{\kappa}$ voisins, donc compris dans $[i_0+N_d(i_0)]$ et $[i_0-N_g(i_0)]$, sont égaux à $\varepsilon_{i_0}^{\kappa}$. On en déduit la valeur maximale du coefficient d'absorption des raies négligées centrées dans l'intervalle de contrôle i_0 , ici pour la disposition (1) (raies négligeables dans i_0 supposées calées à droite de i_0):

$$\varepsilon_{i_0}^{\kappa(1)} = \frac{\varepsilon_{\kappa}}{\left\{ 1 + \delta_{i_0+1} + \sum_{i=2}^{N_d(i_0)} \delta_{i_0+i} \left[\frac{\Phi(i-1)\Delta\sigma}{\Phi(0)} \right]_{i_0+i}^{\gamma_{\nu}^{\max}} \right\} + \left\{ \sum_{i=1}^{N_g(i_0)} \delta_{i_0-i} \left[\frac{\Phi(i)\Delta\sigma}{\Phi(0)} \right]_{i_0-i}^{\gamma_{\nu}^{\max}} \right\}}, \quad (\text{II-45})$$

On obtient des résultats analogues avec les dispositions (2) et (3). On adopte:

$$\varepsilon_{i_0}^{\kappa} = \text{Min}(\varepsilon_{i_0}^{\kappa(1)}, \varepsilon_{i_0}^{\kappa(2)}, \varepsilon_{i_0}^{\kappa(3)}), \quad (\text{II-46})$$

Afin d'augmenter l'efficacité du tri, les raies centrées dans chaque intervalle de contrôle sont classées dans l'ordre croissant de leurs valeurs au centre. Ainsi, les raies sont éliminées à partir des plus faibles, jusqu'à ce que la somme de leurs valeurs au centre atteigne $\varepsilon_{i_0}^{\kappa}$ (pour vérifier (II-40)), ce qui maximise le nombre de raies rejetées.

On peut justifier l'approximation faite par un argument qualitatif et dans un cas limite. Le raisonnement qualitatif consiste à postuler que seuls les intervalles de contrôle proches de i_0 influent (les intervalles lointains ne contribuent pas en raison de la faiblesse de leurs rapports en Φ) et que statistiquement les paquets voisins de i_0 sont constitués de raies semblables, ils sont donc "identiques" à i_0 et leurs barrières d'erreurs sont donc proches. Le cas limite suppose les intervalles de contrôle très grands devant les largeurs de raies. À ce moment-là, seuls les deux intervalles où les paquets de raies sont supposés juxtaposés (i_0 et i_0+1 dans le cas traité ci-dessus) ont un rôle influent. L'égalité (II-45) est alors correcte. Ce cas limite se produit en pratique dans les applications à pression atmosphérique ou sub-atmosphérique, avec des températures inférieures ou égales à l'ambiante. Les largeurs sont en effet de l'ordre de 0.1 cm^{-1} à beaucoup moins. Or, comme nous le verrons, les largeurs des intervalles de contrôle que nous utilisons sont de l'ordre de la racine carrée d'une largeur de raie, donc d'autant plus supérieures à celle-ci qu'elle est plus petite (si inférieure à 1). Outre ces justifications, nous pouvons raisonnablement penser que le comportement des barrières d'erreurs $\varepsilon_{i_c}^{\kappa}$ ne subit pas de saut chaotique, d'un intervalle à l'autre, tel que l'approximation soit totalement remise en question. De plus, les diverses majorations effectuées sont autant de garde-fous qui peuvent englober un écart éventuel aux erreurs attribuées. Nous avons en effet

rapproché les raies des intervalles voisins de celui auquel on cherche à attribuer une erreur. Nous avons aussi supposé que les erreurs attribuées aux intervalles voisins (inégalité (II-40)) étaient toujours atteintes, ce qui n'a pas de raison d'être le cas de façon systématique. Nous avons également considéré que les intervalles voisins intervenaient par leur raie la plus large, qu'elle soit négligeable ou pas. Enfin, des tests numériques représentatifs de configurations typiques de l'utilisation du code (signature, atmosphère) ont montré que l'erreur effectivement obtenue est toujours inférieure à celle demandée (cf conclusion du chapitre II-5).

c) Choix de la largeur de l'intervalle de contrôle

Le choix de la largeur de l'intervalle de contrôle $\Delta\sigma$ est essentiel. Il faut en effet éviter les deux extrêmes, trop large, trop étroit. Si $\Delta\sigma$ est assez petit pour qu'il y ait au plus une raie par intervalle de contrôle, le nombre de raies éliminées ne dépend plus alors de la taille de $\Delta\sigma$ si elle diminue, puisqu'alors tous les nouveaux intervalles créés sont sans raie et que leur contribution "virtuelle" est annulée par le facteur δ_{i_c} . Mais on aboutit à un nombre très grand d'intervalles de contrôle ce qui est trop coûteux en mémoire (mémorisation des termes de l'équation (II-45) pour chaque sous-intervalle i_c), et en temps (on doit faire un calcul du rapport des profils Φ pour chaque raie). À l'autre extrême, si $\Delta\sigma$ est suffisamment grand pour que les contributions des ailes des raies des intervalles voisins soient assez faibles pour être négligées, on aboutit à des barrières $\varepsilon_{i_0}^k \approx \varepsilon_k / 2$ ($\varepsilon_k/1$ si $\delta_{i_0+1} = 0$), valeur la plus grande possible, mais le nombre de raies affectées à un intervalle de contrôle augmente avec la taille de $\Delta\sigma$ et donc la somme de leurs valeurs au centre, tandis que la barrière reste constante. Donc le nombre de raies éliminées ne peut que décroître. On vérifie aisément à ce propos que si les raies sont toutes identiques et uniformément réparties, la décroissance est inversement proportionnelle à la croissance de $\Delta\sigma$. Hormis les deux extrêmes qui viennent d'être évoqués, la prévision du comportement du nombre de raies éliminées en fonction de $\Delta\sigma$ ne peut pas être déterministe.

La formule (II-45) montre qu'il existe un lien entre la largeur $\Delta\sigma$ des intervalles de contrôle et l'étendue du domaine d'influence des raies que l'on peut quantifier par leur largeur Voigt γ_v . Nous avons alors cherché de façon empirique à lier le nombre de raies éliminées en fonction de $\Delta\sigma$ et de γ_v^{\max} pour chaque molécule en faisant varier les conditions de température et pression, en utilisant la base de données HITRAN. Soulignons la forte dépendance du nombre de raies éliminées avec la température due au terme en exponentielle

dans la formule de conversion de l'intensité avec la température. Un lien de cause à effet direct et général entre le nombre de raies négligées et la température T n'existe pas, car la dépendance de l'intensité d'une raie avec T est fonction de son énergie du niveau de départ. Par contre, la dépendance avec la pression est explicite en régime Lorentz et en régime Doppler. En Lorentz, le coefficient d'absorption au centre d'une raie κ_{centre} est indépendant de la pression car le profil de raie au centre Φ_{centre} varie en $1/P$. La largeur Lorentz étant proportionnelle à P , le rapport des profils $\Phi_{\text{aile}}/\Phi_{\text{centre}}$ figurant dans (II-45) augmente avec P (en P^2), donc la barrière $\varepsilon_{i_0}^{\kappa}$ diminue. Le nombre de raies négligées diminue donc quand P augmente. En régime Doppler, les profils ne dépendent pas de P , la barrière $\varepsilon_{i_0}^{\kappa}$ est invariante alors que κ_{centre} est proportionnel à P . Donc le nombre de raies négligées diminue quand P augmente. La recherche empirique avec un profil Voigt s'est déroulée comme suit. Nous avons étudié l'intervalle en nombre d'onde $[2000 \text{ cm}^{-1}, 2400 \text{ cm}^{-1}]$ qui est particulièrement utilisé dans les études de signature infrarouge. La barrière sur le coefficient d'absorption fut prise égale à $\varepsilon_{\kappa}=10^{-2}/\ell$, ℓ désignant la longueur d'un segment, ce qui correspond à une erreur de un pour cent (de la valeur maximale qui vaut 1) sur la transmission. Le pourcentage de raies éliminées a été étudié molécule par molécule en fonction du rapport $\Delta\sigma / \sqrt{\gamma_v^{\text{max}}}$ ¹, avec H_2O , CO_2 , O_3 , N_2O , CO , CH_4 . Les températures utilisées furent 200K et 800K, sachant qu'au-delà la base HITRAN est clairement incomplète puisqu'elle a été conçue pour des applications atmosphériques (800 K est déjà un point critique, cf chapitre IV). La figure II.15 montre le résultat obtenu avec H_2O et CO_2 dilués dans l'air, en donnant un nombre de raies éliminées: pour chaque température; trois pressions différentes ont été testées (10^{-2} , 1, 10 atm). Les longueurs de segment ne servent qu'à attribuer une valeur à ε_{κ} . Elles n'ont aucun rôle dans la dynamique des courbes qui dépend du dénominateur dans (II-45). Ainsi, la longueur de 100 m pour $T=200 \text{ K}$ ne sert qu'à abaisser ε_{κ} pour obtenir des amplitudes de courbes comparables à celles obtenues pour 800 K. Une comparaison ne peut donc se faire qu'à température et longueur fixées, entre les résultats obtenus pour les trois pressions différentes: on retrouve le comportement interprétable analytiquement en régimes Lorentz et Voigt, à savoir la baisse du nombre de raies négligées lorsqu'on augmente la pression. L'influence de la température est

¹ La puissance 1/2 fut adoptée, après plusieurs tests avec d'autres puissances, pour avoir la position du maximum du nombre de raies négligées (cf figure II.15) à peu près identique pour toutes les molécules étudiées. C'est donc un résultat empirique.

considérable entre 200K et 800K, puisque nous avons divisé l'erreur ε_k d'un facteur 1000 (longueur 100 m contre 0.1 m) pour retrouver des nombres de raies négligées comparables.

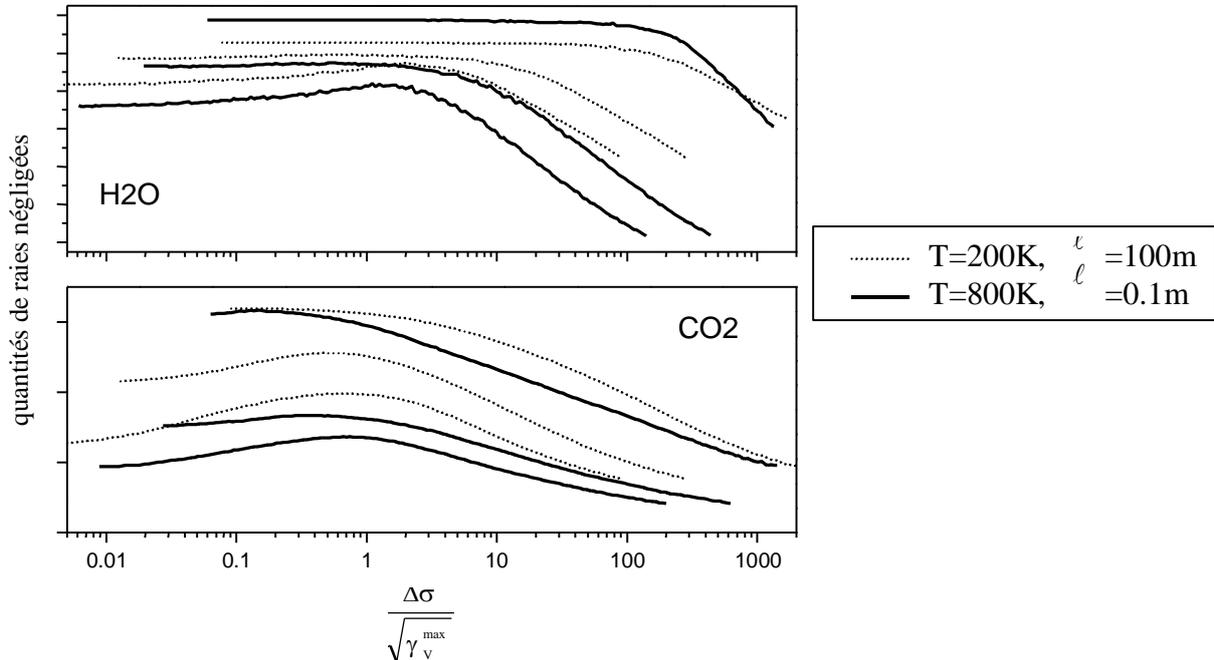


figure II.15: *Dynamique des courbes de raies négligées en fonction de la largeur des intervalles de contrôle. Les molécules sont diluées dans l'air. À température T et longueur ℓ fixées, pour les trois pressions successives $P(\text{atm}) = 10^{-2}, 1, 10$, les trois courbes sont respectivement l'une en dessous de l'autre, ce qui témoigne de la décroissance du nombre de raies négligées quand la pression augmente.*

Au vu de ces séries de courbes nous avons déterminé un paramètre empirique optimal:

$$\Delta\sigma = 0.8 \sqrt{\text{Min}_{\text{molec}} \gamma_v^{\text{max}}}, \quad (\text{II-47})$$

On s'assure par l'intermédiaire du $\text{Min}_{\text{molec}}$ de se placer, pour chaque molécule, dans la partie des courbes située à gauche de la "bosse", et donc d'éviter les zones "à droite" de pente descendante de la figure II.15.

d) Conclusion; améliorations envisageables

Nous avons présenté une méthode permettant de sélectionner, pour les éliminer, des raies dont la contribution totale à l'absorption est inférieure à une barrière donnée. La détermination de cette barrière se fait à partir d'un critère d'erreur ε_k sur le coefficient d'absorption, lequel sera relié à des critères en transmission ou en luminance au chapitre II-5.

On pourrait essayer d'affiner la détermination de la largeur des intervalles de contrôle, effectuée ici sur les molécules H₂O, CO₂, O₃, N₂O, CO, CH₄ avec des raies issues de la base HITRAN dans [2000 cm⁻¹, 2400 cm⁻¹]. Il faudrait examiner le comportement à d'autres nombres d'onde et, s'il est différent, inclure son influence. Il faudrait aussi considérer d'autres molécules, étendre les températures testées, notamment des plus élevées, mais en travaillant alors avec les bases de données chaudes lorsqu'elles existent. Par ailleurs une procédure de pré-tri des bases de données chaudes et froides a été menée, en balayant toutes les conditions de pressions, températures, afin de déterminer un seuil, en terme de produit (fraction molaire×longueur de segment), de prise en compte de chaque raie. Ces seuils ont été modélisés et rajoutés dans les bases de données. Cette procédure, qui permet une pré-sélection des raies, sera expliquée dans le chapitre II-4-1.

Rappelons qu'ici une barrière uniforme en coefficient d'absorption est imposée: le critère de sélection des raies est donc un critère absolu. Nous avons aussi envisagé de mettre en place un critère de tri relatif. Il se justifie en effet pour la raison suivante. Les données spectroscopiques des bases de données sont connues à, au mieux, 4 ou 5 %, et bien souvent avec une bien plus mauvaise précision (10 voire 20 %). Il n'est donc pas pénalisant en terme de précision d'envisager d'éliminer des raies sur un critère de précision relative sur le coefficient d'absorption ε_{rel} de 1 ou 2%. L'inégalité à vérifier est, sachant que $\kappa_{approximé} \leq \kappa_{juste}$:

$$\frac{\kappa_{juste} - \kappa_{approximé}}{\kappa_{juste}} \leq \varepsilon_{rel}, \quad (II-48)$$

La relation à vérifier par les raies négligées est alors la suivante (avec r_n : raies négligées et r_g : raies gardées):

$$\sum_{r_n} \kappa_{r_n}(\sigma) \leq \frac{\varepsilon_{rel}}{1 - \varepsilon_{rel}} \sum_{r_g} \kappa_{r_g}(\sigma), \quad (II-49)$$

La mise en œuvre pratique d'un tel critère repose sur la vérification de l'inégalité précédente et sur la propriété suivante que l'on peut montrer: à une température fixée, si une raie est négligeable de façon relative à une pression donnée, elle le reste pour toute pression supérieure, si la position de l'erreur relative maximale est au centre de cette raie. On aboutit à la notion de pression seuil pour négliger une raie, fonction de la température. D'où une première approximation qui consiste à ne vérifier l'inégalité précédente qu'aux centres des raies, qui se justifie par le fait que l'on peut facilement montrer qu'en comparant deux raies

l'erreur relative maximale est, dans bien des cas, située au voisinage du centre de la raie négligée. Pour déterminer si une raie est négligeable, il faut donc vérifier l'inégalité en son centre et calculer le membre de droite de (II-49) en ce point pour toutes les raies supposées gardées (cf figure II.16). Mais en réalité, le critère au centre n'est qu'une approximation. Il faut donc vérifier pour chaque raie déclarée négligeable par ce critère, qu'elle le reste en ses autres points. On se rend compte ainsi qu'une telle approche de résolution du problème de tri relatif devient impraticable si le nombre de raies à traiter devient grand (base de données chaude en particulier): si N est le nombre moyen de raies dans le voisinage de $\pm 5\text{cm}^{-1}$ du centre d'une raie, le nombre de calculs est de l'ordre de N^2 . Une tentative de programmation d'une telle procédure fut menée à son terme. Mais elle confirma la lourdeur des calculs et donc la lenteur rédhibitoire de cette approche. Il conviendrait donc de reconsidérer ce problème de façon moins rigoureuse en envisageant des approches majorant la solution mais moins exigeantes en nombre de calculs.

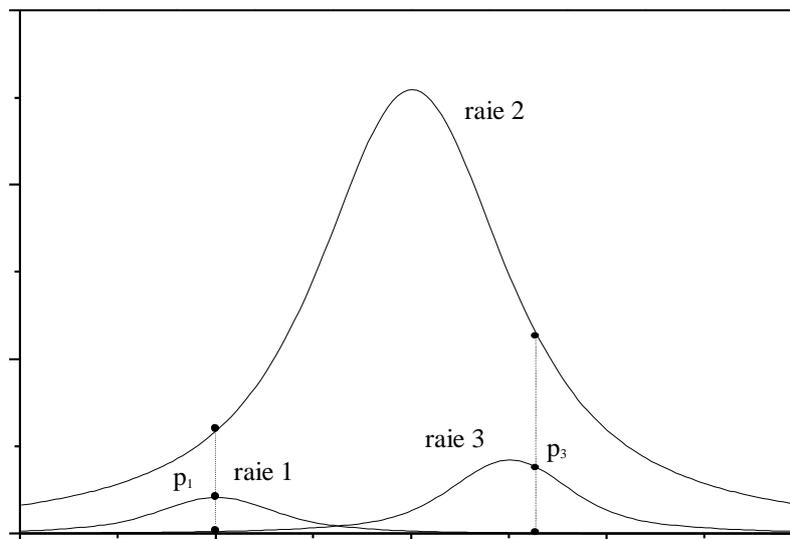


figure II.16: Méthode de tri relatif des raies. Afin de décider si une raie est négligeable dans une condition donnée de température T , et pression P , il faut contrôler à la position où l'erreur relative qu'elle engendre est maximale (p_1 pour la raie 1, p_3 pour la raie 3), la somme des valeurs des raies négligées et celle des raies gardées. Cela implique pour chaque raie un nombre de points de calcul égal au nombre de raies présentes dans la zone $\pm 5\text{ cm}^{-1}$ de son centre.

II-3-4 COUPURE DES AILES DE RAIES

a) Présentation du problème; Bibliographie des solutions proposées

Rappelons (cf § II-2-3) que, par défaut toutes les ailes de raies sont coupées à une distance fixe du centre $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$, qui est celle retenue (5 cm^{-1} ou 25 cm^{-1}) pour calculer les continua (H_2O , CO_2) dus aux ailes lointaines. Or, dans certaines configurations de pression et température, les ailes de raies tendent très vite vers des valeurs extrêmement faibles. Nous pensons aux régimes à faible pression et température où la tendance Doppler des profils est marquée. Un profil Doppler pur a pour valeur à 5 cm^{-1} du centre (avec une demi_largeur typique de quelques 10^{-3}): $\Phi_D \sim (10^3 \times e^{-25 \times 10^6})$, valeur quasi nulle. Il est inutile de mentionner la valeur à 25 cm^{-1} . Un critère de coupure s'avère donc très utile dans ces conditions.

Quelques articles traitent du problème de la coupure des ailes de raies. Susskind et Searl [SUSS,78] suggèrent de couper l'aile d'une raie dès que son coefficient d'absorption passe en dessous d'un seuil donné B_{min} . Deux types de raies sont envisagés: les raies dites "centrées" si leurs centres sont dans l'intervalle $[\sigma_1 - 3 \text{ cm}^{-1}, \sigma_2 + 3 \text{ cm}^{-1}]$, σ_1 et σ_2 étant les bornes de l'intervalle de calcul, le seuil est ici fixé à $B_{\text{min}} = 10^{-4}$; les raies "d'aile" si leurs centres sont au-delà, avec un seuil de $10^{-2} \times B_{\text{min}}$. Sparks [SPAR,97] ne propose pas de coupure mais les raies centrées à plus de 25 cm^{-1} des bornes sont exclues du calcul. Kuntz et Höpfner [KUNT,99], qui reprennent la notion de courbe d'iso-erreur de Sparks proposent de tronquer une raie à partir d'une certaine distance du centre fixée en nombre de points de maillage, à condition que la grille de maillage soit suffisamment large par rapport à la largeur de raie, car ils considèrent que l'erreur ainsi engendrée est assez faible. Au vu de ces méthodes, nous pouvons déplorer, au même titre que pour le critère de tri, l'omission de l'influence de l'accumulation des erreurs. En effet, au moment où une raie est tronquée, l'erreur sur celle-ci est respectée mais il n'est pas tenu compte des raies voisines qui peuvent avoir été tronquées avant ou qui pourront l'être après. Le risque est à nouveau ici à double tranchant. Une erreur trop grande n'assure plus de contrôle, une erreur trop faible perd son efficacité.

Nous proposons une méthode palliant à cet inconvénient. L'idée de base est de trouver une majoration de la contribution de la somme des ailes de raie, pour une distance de coupure unique commune à toutes les raies. Nous décrivons la procédure dans ce qui suit.

b) Modélisation de la contribution des ailes de raies au coefficient d'absorption

Le but de la modélisation qui va être présentée est de permettre de trouver une distance de coupure $\Delta\sigma_c$, inférieure à la distance de coupure maximale avant raccord avec un continuum $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$, adoptée par toutes les raies et telle que:

$$\forall \sigma \in \text{intervalle de calcul}, \quad \sum_{\text{ailes}} = \sum_{\substack{|\sigma_r - \sigma| > \Delta\sigma_c \\ < \Delta\sigma_c^{\text{cont}}}} \kappa_{(\sigma)}^r < \varepsilon_c, \quad (\text{II-50})$$

ε_c étant un critère d'erreur de coupure. \sum_{ailes} représente la contribution au coefficient d'absorption des raies pour les parties de leurs ailes comprises entre $\Delta\sigma_c$ et $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$. La figure II.17 illustre le propos.

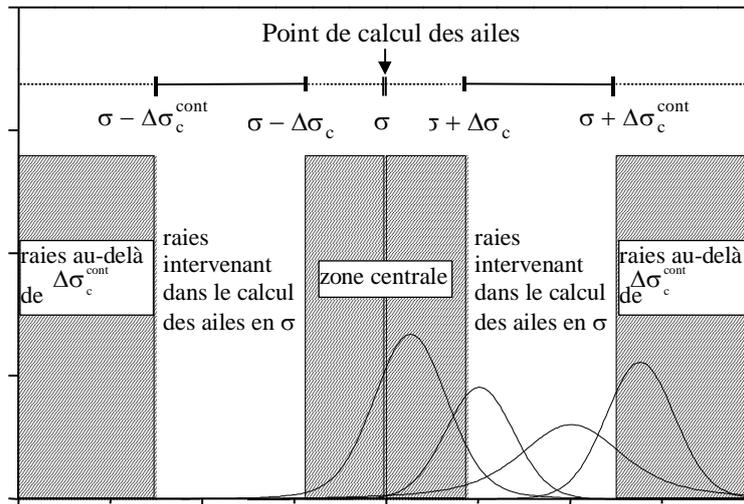


figure II.17: illustration du calcul des ailes de raie: en σ quelconque, contribuent toutes les raies centrées

dans les intervalles $I_{\text{ailes}} = \sigma - \Delta\sigma_c^{\text{cont}}, \sigma - \Delta\sigma_c \cup \sigma + \Delta\sigma_c, \sigma + \Delta\sigma_c^{\text{cont}}$.

La somme des ailes s'écrit, en notant par commodité $w(\gamma_L, \gamma_D, \sigma - \sigma_r)$ la fonction de Voigt $w[x(\sigma - \sigma_r, \gamma_D), y(\gamma_L, \gamma_D)]$:

$$\sum_{\text{ailes}} = \sum_{r \in I_{\text{ailes}}} \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{S'_r X_r P}{\gamma_D} \right) w(\gamma_L, \gamma_D, \sigma - \sigma_r), \quad (\text{II-51})$$

Nous rappelons que w est la fonction de Voigt (cf § II-3-1, équation (II-21), p.25). Afin de modéliser cette somme par une somme majorante et rapidement calculable, nous subdivisons I_{ailes} en sous-intervalles I de largeur $\delta\sigma$ qui sera explicitée plus loin. On procède ensuite à une

majoration de la contribution des paquets de raies incluses dans les sous-intervalles I, en trois étapes:

- d'abord en plaçant toutes les raies le plus près de σ , en σ_I , frontière de I la plus proche de σ , d'où:

$$\sum_{\text{ailes}} < P \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \sum_{I \subset I_{\text{ailes}}} \left[\sum_{r \in I} \left(\frac{S'_r X_r}{\gamma_D} \right) w(\gamma_L, \gamma_D, \sigma - \sigma_I) \right], \tag{II-52}$$

- puis en adoptant le profil de la raie hypothétique¹ la plus large possible dans chaque paquet de raies dans I, d'où:

$$\sum_{\text{ailes}} < P \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \sum_{I \subset I_{\text{ailes}}} \left[w(\gamma_L^{\max}, \gamma_D^{\max}, \sigma - \sigma_I) \sum_{r \in I} \left(\frac{S'_r X_r}{\gamma_D} \right) \right], \tag{II-53}$$

- enfin en considérant la contribution maximale sur l'ensemble des I du regroupement

$\sum_{r \in I} \left(\frac{S'_r X_r}{\gamma_D} \right)$, d'où:

$$\sum_{\text{ailes}} < P \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \text{Max}_{I \subset I_{\text{ailes}}} \left[\sum_{r \in I} \left(\frac{S'_r X_r}{\gamma_D} \right) \right] \sum_{I \subset I_{\text{ailes}}} w(\gamma_L^{\max}, \gamma_D^{\max}, \sigma - \sigma_I), \tag{II-54}$$

La figure II.18 schématise ce processus de majoration.

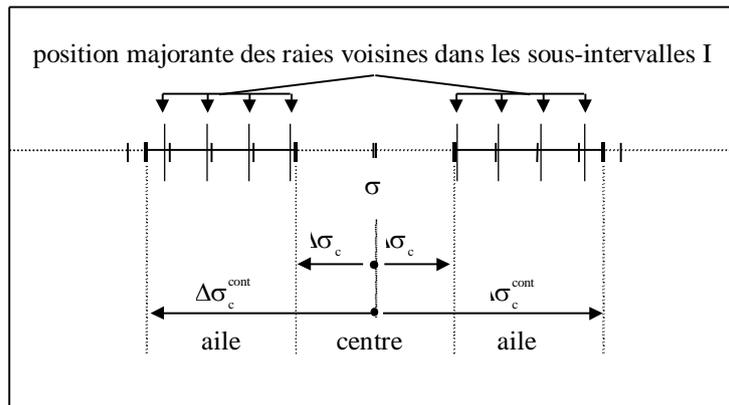


figure II.18: illustration du choix de la distance de coupure $\Delta \sigma_c$: en tout point σ du calcul la contribution des ailes des raies voisines doit être majorée par ε_c .

¹ hypothétique car on prend la largeur Doppler maximale et la largeur Lorentz maximale, qui ne sont pas forcément celles de la raie la plus large. Il faut ajouter que l'inégalité (II-53) est assurée si au point de calcul σ de cette somme des ailes, on est assez loin du centre de la raie la plus large pour que sa contribution soit effectivement majorante.

Nous avons choisi pour $\delta\sigma$, la valeur de 0.1 cm^{-1} qui correspond à l'ordre de grandeur d'une demi-largeur de raie de CO_2 à température ambiante (296K) et pression au sol (1 atm). En désignant par N le nombre de sous-intervalles I entre $\Delta\sigma_c$ et $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$, défini de façon à majorer la contribution des ailes: $N = 1 + E \left[\frac{\Delta\sigma_c^{\text{cont}} - \Delta\sigma_c}{\delta\sigma} \right]$, on aboutit finalement à la somme majorante suivante:

$$\sum_{\text{ailes}} < \sum_{\text{Maj}} (\Delta\sigma_c) = 2P \left(\frac{\ln 2}{\pi} \right)^{1/2} \text{Max}_{I \in I_{\text{ailes}}} \left[\sum_{r \in I} \left(\frac{S'_r X_r}{\gamma_D} \right) \right] \sum_{i=1}^N w[\gamma_L^{\text{max}}, \gamma_D^{\text{max}}, \Delta\sigma_c + (i-1)\delta\sigma] \quad , \text{(II-55)}$$

Cette équation est utilisée pour déterminer la valeur de $\Delta\sigma_c$, qui est, rappelons-le, la distance du centre à laquelle le calcul d'une raie s'arrête. La recherche de $\Delta\sigma_c$ se fait par une procédure récurrente jusqu'à ce que la somme majorante soit inférieure au critère d'erreur de coupure ϵ_c , étant entendu que $\Delta\sigma_c$ ne doit pas dépasser $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$.

c) Conclusion; perspectives d'améliorations

Cette méthode de coupure des ailes de raie est efficace et utile dans les zones où des régimes Voigt voire Doppler prédominent. Par exemple, un calcul dans des conditions atmosphériques [colonne d'air de 100 m à une altitude de 40 km ($P \sim 10^{-3} \text{ atm}$, $T \sim 260 \text{ K}$)], vers 2338 cm^{-1} , a donné une coupure à 1.7 cm^{-1} du centre pour $\epsilon_c = 10^{-7} \text{ cm}^{-1}$. Signalons que nous ajoutons une optimisation supplémentaire: nous négligeons le continuum si sa valeur maximale, pré-calculée sur un maillage lâche, est inférieure à l'erreur tolérée pour les coupures d'ailes ϵ_c . L'intérêt provient du fait que le continuum est calculé sur un maillage propre, et qu'il est ensuite projeté sur la plus lâche des grilles associées au segment courant, laquelle est souvent bien plus fine que le maillage propre. L'économie réalisée ici serait celle de cette étape de projection. Notons que nous pourrions améliorer cette procédure de coupure des ailes de raies en l'affinant par la recherche d'une coupure non pas commune à toutes les raies, mais fonction du groupe de raie dans les sous-intervalles I.

II-3-5 PRISE EN COMPTE DE LA SATURATION EN ÉMISSION

a) Présentation du problème; Bibliographie des solutions proposées

Les spectres de transmission peuvent présenter des zones dites de saturation en émission: la transmission est si faible que l'émission est quasiment égale à 1. De telles zones peuvent être particulièrement larges (plusieurs dizaines de cm^{-1}) dans les régions spectrales renfermant beaucoup de raies intenses, comme la bande ν_3 de CO_2 . La figure II.19 en donne un exemple typique dans un cas schématisant une configuration de signature infrarouge. On voit en effet que la luminance émise et la transmission sont négligeables entre les bornes spectrales 2290 cm^{-1} et 2380 cm^{-1} .

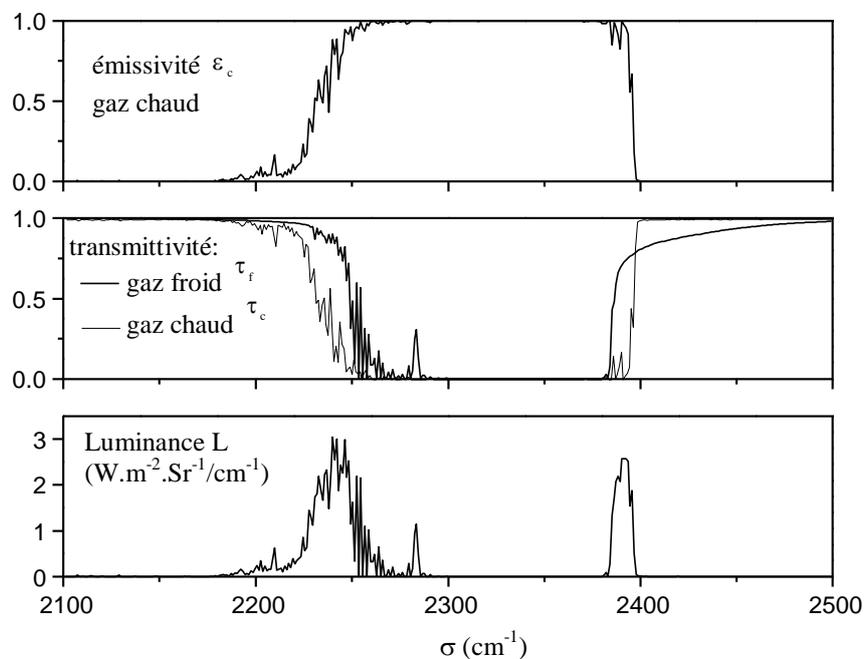


figure II.19: exemple de luminance d'une source chaude (CO_2 (3%)+air: 0.5m à 900K, 2 atm) vue à travers une couche atmosphérique (500m à 200K, 1atm) autour de la bande ν_3 de CO_2 . Elle vaut: $L = L_c^o \epsilon_c \tau_f + L_f^o \epsilon_f$, L^o désignant la fonction de Planck, avec $L_f^o \ll L_c^o$ d'où le creux entre 2290 cm^{-1} et 2380 cm^{-1} .

Dans le cas d'un calcul sur une colonne inhomogène discrétisée en plusieurs segments homogènes, il est alors intéressant de tester les transmissions partielles obtenues à l'issue du calcul sur les segments en amont du segment courant (en regardant l'observateur), afin de détecter l'existence éventuelle de zones spectrales où la transmission est inférieure à une certaine limite prise comme seuil de saturation. L'optimisation consiste alors à ne plus

effectuer de calcul dans ces zones jusqu'à la fin de la colonne. À l'issue des recherches bibliographiques, il semble que seule Delaye[DELA,90] propose de prendre en compte cette saturation. Le code raie par raie qu'elle a développé repose sur une grille de maillage unique; le calcul se fait point par point par sommation des contributions des raies. Un test est effectué sur le produit (coefficient d'absorption×longueur du segment) $\kappa_{\sigma} l_{\text{seg}}$, le calcul étant arrêté aux nombres d'onde où $\kappa_{\sigma} l_{\text{seg}}$ est supérieur à 5, ce qui correspond à une transmission inférieure à 6.7×10^{-3} . Cette démarche est pénalisante en temps car le nombre de tests est grossièrement égal au nombre de raies multiplié par le nombre de points de calcul (si on ne tient pas compte d'éventuelles coupures de raies). D'ailleurs Delaye a mené des tests CPU qui montrent bien que cette façon d'appliquer le critère peut parfois augmenter le temps de calcul, en particulier dans les zones de faible absorption sans saturation. Au regard de l'approche raie par raie présentée dans ce manuscrit, qui privilégie la manipulation globale d'une raie avant de la projeter sur des grilles de maillage, cette méthode est difficilement applicable. En effet, on conserverait la lourdeur des tests de saturation en chaque point potentiel de calcul d'une raie. Mais à cela il faudrait rajouter la complexité de la gestion des morceaux de raies qui, calculés séparément sur différentes grilles, seraient fragmentés ou non suivant que le seuil soit dépassé ou non. Or, l'interpolation en chaque point d'une grille nécessite la connaissance du résultat sur les points l'encadrant de la grille plus lâche; donc le coefficient d'absorption doit être connu avec précision même en un point présent dans une zone saturante si des régions non saturantes sont présentes entre lui et son voisin. En bilan, une telle démarche peut en définitive s'avérer infructueuse dans l'approche raie par raie optimisée ici. Nous présentons dans ce qui suit une méthode d'application de la saturation adaptée à notre approche raie par raie.

b) Méthode de prise en compte de la saturation

Nous venons de voir qu'il est très lourd et peut-être même inefficace de chercher à stopper le calcul en tout point de la grille fine de maillage où la transmission est faible, du fait du traitement global d'une raie avec son découpage sur différentes grilles de pas différents. Nous proposons alors d'adapter notre prise en compte de la saturation de façon globale. Les tests sont menés à la fin du calcul d'un segment courant k , une fois par point de calcul (sur la grille fine) de la transmission partielle issue des segments amonts. Il s'en dégage ainsi des zones de saturation décrites par les points où cette transmission partielle est inférieure à un critère: $\tau_{\text{sat}}(k)$. Lors du traitement du segment suivant, ou bien une raie sera entièrement

incluse dans une zone de saturation, donc complètement exclue du calcul, ou bien elle sera entièrement calculée (mis à part les aspects tri des raies et coupure des ailes)¹. Une zone de saturation sera alors considérée comme zone "tronquée", c'est-à-dire sans calcul, si sa largeur est supérieure à la largeur maximale de l'intervalle sur lequel une raie est calculée, à savoir $2\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$. La figure II.20 illustre le propos.

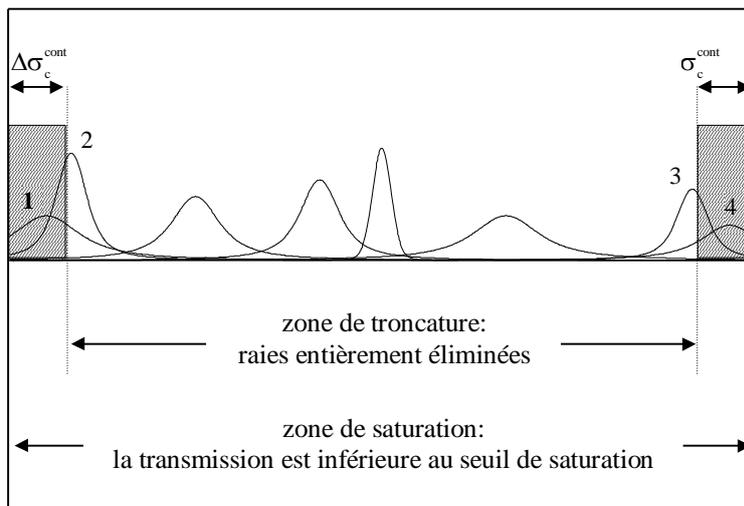


figure II.20: une zone de saturation devient une zone de troncature dès que sa largeur est supérieure à 2 fois la largeur de coupure maximale $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$. Les raies 1 et 4, centrées dans la zone de saturation mais hors de la zone de troncature, sont entièrement calculées bien qu'une partie empiète dans la zone de troncature, car elles sont aussi partiellement hors de la zone de saturation. Par contre, les raies 2 et 3, centrées dans la zone de troncature peuvent être entièrement éliminées car elles sont entièrement incluses dans la zone de saturation (toutes les raies sont coupées à plus de $\Delta\sigma_c^{\text{cont}}$).

Rappelons que si un calcul est effectué dans l'intervalle $[\sigma_{1HR}, \sigma_{2HR}]$, les raies sont prises en compte sur un intervalle plus lâche $[\sigma_{\min}, \sigma_{\max}]$ avec $\sigma_{\min} = \sigma_{1HR} - \Delta\sigma_c^{\text{cont}}$ et $\sigma_{\max} = \sigma_{2HR} + \Delta\sigma_c^{\text{cont}}$. Toute zone de saturation, quelle que soit son étendue, contiguë à un des bords de l'intervalle de calcul σ_{1HR} ou σ_{2HR} peut alors être une zone de troncature vis-à-vis des raies de bord puisque celles-ci n'interviennent que par leurs ailes dans le spectre: on peut donc les éliminer dans une telle zone de saturation qui est la seule région où elles sont calculées. Signalons enfin que pour chaque nouveau segment traité, le test de saturation n'est mené que dans les zones détectées comme non saturantes à l'issue du segment précédent, ce qui élimine les tests inutiles.

¹ On voit que cette procédure ne permet de pouvoir négliger des raies qu'à partir du deuxième segment.

c) Conclusion

La méthode de prise en compte des saturations présentée est particulièrement efficace dans des calculs de type signature caractérisés par un segment chaud suivi d'un segment froid où l'absorption peut être importante sur des intervalles larges (plusieurs dizaines de cm^{-1} , voire une à deux centaines de cm^{-1}). De plus, le calcul de la transmission et de la luminance d'une colonne étant effectué en démarrant du segment froid (côté observateur) pour remonter vers le segment chaud (côté émetteur), l'intérêt de la détection de la saturation est accru du fait de la suppression du calcul de la portion des segments les plus proches de l'émetteur, laquelle est la plus consommatrice en temps puisqu'elle implique un plus grand nombre de raies que les segments plus froids. Le choix du seuil en transmission sera discuté au chapitre II-5.

CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons exposé les concepts fondamentaux de la nouvelle technique de calcul rapide de spectre par une approche raie par raie. Tous furent appliqués dans la mise en œuvre pratique du code de calcul et certains dans un pré-traitement des bases de données. Nous présenterons ce dernier point dans le chapitre suivant traitant des données utilisées par le code. Par ailleurs, toutes les méthodes d'optimisation retenues sont liées à des critères d'erreurs locaux qui doivent être couplés à des critères portant sur les grandeurs auxquelles un utilisateur du code a accès, la transmission et la luminance de la colonne. L'établissement du lien entre les erreurs sur ces deux grandeurs et les critères locaux présentés dans ce chapitre fait l'objet du chapitre II-5. Le bon choix de ces erreurs est un élément essentiel dans la recherche de l'optimisation du code par un utilisateur, lequel peut opter pour tel ou tel jeu de critères en fonction du résultat final auquel il veut accéder avec une précision donnée. Ce problème aussi sera discuté au chapitre II-5. Quant à l'efficacité de chacun des concepts introduits dans le code, elle a été individuellement mesurée. Si les gains en temps CPU par utilisation de la table du profil de Voigt furent exposés dans ce chapitre, de même qu'un exemple de distance de coupure d'ailes fut donné, les performances obtenues en rajoutant les autres optimisations seront présentées dans le chapitre II-5, dans des configurations représentatives des utilisations possibles du code.

II-4. LES DONNÉES UTILISÉES PAR L'APPROCHE RAIE PAR RAIE OPTIMISÉE

Le modèle de calcul raie par raie retenu, tel qu'exposé au paragraphe II-2-3, requiert des données d'entrée pour décrire les raies d'absorption lors du calcul du coefficient d'absorption local. Diverses banques de données spectroscopiques existent et sont continuellement actualisées et améliorées. Les méthodes de détermination des propriétés de chaque transition sont diverses: théoriques et numériques, ou bien expérimentales. La présentation du contenu des bases de données avec leurs limites d'utilisation sera effectuée dans la partie II-4-1. Par ailleurs, nous avons exposé au paragraphe II-3-3 une méthode de tri des raies en fonction des conditions thermophysiques du milieu. Nous proposons dans la partie II-4-2 d'appliquer cette méthode sur l'ensemble des conditions susceptibles d'être rencontrées par un utilisateur du code, afin de déterminer des lois analytiques paramétrées grâce auxquelles nous pourrions négliger un certain nombre de raies. Les paramètres enrichiront les bases de données. Dans un dernier paragraphe (II-4-3), nous présentons les données relatives aux continua utilisés.

II-4-1 LES BANQUES DE DONNÉES SPECTROSCOPIQUES

a) Données spectroscopiques requises pour la reconstitution d'un spectre; présentation des bases de données

Comme nous l'avons vu au chapitre II-2, le calcul du coefficient d'absorption d'un mélange de gaz suppose la somme des transitions infrarouges des raies de tous les constituants absorbants. Les données nécessaires pour caractériser totalement une raie sont:

- la molécule et l'isotope à laquelle elle appartient;
- la position σ_r de son centre, c'est-à-dire la fréquence de transition;
- son intensité à une température de référence T_0 : $S_r(T_0)$;
- l'énergie du niveau bas de la transition E_r ;

- les paramètres caractérisant le profil de raie, notamment les coefficients d'élargissement;
- des nombres repérant les niveaux quantiques rovibrationnels pour identifier la transition.

Il existe des banques de données publiques, telles les bases de données atmosphériques infrarouge HITRAN (High resolution transmission molecular absorption data base)[ROTH,98] et GEISA (Gestion et Étude des Informations Spectroscopiques Atmosphériques)[JACQ,98]. Depuis peu (1998), on a aussi accès à la base de données chaudes HITEMP pour H₂O, CO₂, CO [HITE,98]. Les auteurs en assurent la validité jusqu'à 1000 K pour H₂O et CO₂. Ils évoquent de "très hautes températures" pour CO, sans plus de précision. Enfin des bases de données furent engendrées au laboratoire EM2C de l'École Centrale¹ [SCUT,94],[RIVI,95], pour (H₂O, CO₂, N₂O, CO), avec une validité, à moyenne résolution spectrale, jusqu'à 3000K.

b) Positions, intensités; énergies de départ; fonction de partition

Les positions σ_r des raies sont connues, dans l'infrarouge, à une précision relative de typiquement 10^{-7} ($\sim 10^{-4}$ cm⁻¹ en absolu). En reprenant les notations du chapitre II-2, c'est l'intensité $S_r(T)$ en cm⁻².molecule⁻¹.cm³ qui est tabulée dans les bases de données utilisées. La température de tabulation est $T_o = 296K$. La conversion à une température quelconque se fait avec la relation suivante qui fait intervenir la fonction de partition rovibrationnelle $Q(T)$ et l'énergie E_r du niveau de départ:

$$S_r(T) = S_r(T_o) \frac{Q(T_o)}{Q(T)} e^{-E_r \frac{hc}{k} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_o} \right)} \frac{1 - e^{-\frac{hc\sigma_r}{kT}}}{1 - e^{-\frac{hc\sigma_r}{kT_o}}}, \quad (\text{II-56})$$

Les intensités $S_r(T_o)$ sont connues (au mieux) à quelques pour cent près, les énergies E_r le sont avec une précision relative de l'ordre de 10^{-7} . La fonction de partition est calculée à partir de la répartition statistique des molécules sur les différents niveaux E_i de dégénérescence g_i , à l'équilibre thermodynamique local à la température T :

$$Q(T) = \sum_{\substack{\text{niveaux} \\ \text{rovibrationnels } i}} g_i e^{-\frac{E_i}{kT}}, \quad (\text{II-57})$$

¹ Cette base de données est "privée"; elle est réservée aux quelques industriels avec qui le laboratoire EM2C a établi des contrats.

Les données de $Q(T)$ sont fournies sous forme polynomiale par Gamache [GAMA,90], leur validité s'étendant de 70K à 3005K, pour une grande partie des molécules. Les molécules suivantes ont leur fonction de partition définies jusqu'à 500K seulement: CH_4 , CH_3Cl , C_2H_2 , COF_2 , HCOOH . Les espèces suivantes n'ont pas de fonction de partition définie: HNO_3 , C_2H_6 , SF_6 , O , ClONO_2 .

c) Les coefficients d'élargissement collisionnels et de dépendances en température

Pour les gaz atmosphériques, on considère les coefficients d'élargissement avec l'air uniquement. La demi-largeur Lorentz à mi-hauteur s'exprime alors par:

$$\gamma_L(T, P) = \frac{P}{P_s} \times \gamma_L^\circ(r, \text{air}, T_s) \times \left(\frac{T_s}{T} \right)^{\beta_r}, \quad (\text{II-58})$$

$\gamma_L^\circ(r, \text{air}, T_s)$ est le coefficient d'élargissement, β_r le coefficient de dépendance en température. Les conditions standards sont $P_s=1$ atm et $T_s=296$ K. En combustion, les fractions molaires des gaz sont telles qu'on ne peut pas les considérer comme dilués dans l'air. Les gaz y jouant un rôle important sont H_2O et CO_2 , et dans une moindre mesure CO puis N_2O . Pour le calcul des coefficients d'élargissement, on prend alors en compte les collisions avec H_2O , CO_2 , O_2 , N_2 . L'écriture de la demi-largeur Lorentz à mi-hauteur est un peu plus compliquée que (II-58). Nous renvoyons le lecteur intéressé par le sujet aux publications issues des travaux de Rosenmann et al. relatifs à CO_2 [ROSE,88], de Hartmann et al. relatifs à CO [HART,88], et de Delaye et al. relatifs à H_2O [DELA,89]. Pour N_2O , les données ne sont pas publiées. Tous les paramètres introduits dans ce paragraphe sont connus à quelques pour cent près, l'erreur pouvant atteindre 15 à 20% pour les raies de grand nombre quantique rotationnel. Ces taux sont comparables à ceux sur les intensités.

Nous avons vu au paragraphe II-3-3 que la demi-largeur du profil de Voigt est une grandeur utilisée pour le tri des raies. Nous utilisons la formule approchée donnée par Olivero et al. [Oliv, 77], en rappelant que y est proportionnel au rapport de la largeur Lorentz sur la largeur Doppler (cf formule (II-5) p.15):

$$\begin{aligned} y' &= y / \sqrt{\ln 2} \\ d &= \frac{y'-1}{y'+1}, \\ \beta &= 0.023665 e^{(0.6d)} + 0.0048 e^{(-1.9d)} \\ \gamma_v &= \gamma_D (1 + y') [1 - 0.18121 (1 - d^2) - \beta \sin(\pi d)] \end{aligned} \quad (\text{II-59})$$

d) Limites de validité des bases de données

Le problème des données spectroscopiques nécessaires pour des conditions d'application à basse température du type atmosphérique est traité depuis relativement longtemps. Les bases de données correspondantes furent engendrées avec un critère de coupure basé sur l'intensité des raies. Or, en raison de la dépendance exponentielle des intensités par rapport à la température vue dans l'équation (II-56), des raies d'intensité négligeable à l'ambiante dites "raies chaudes" (niveau d'énergie de départ élevé) peuvent très bien devenir significatives à de hautes températures. Au vu de l'équation (II-56), et sachant que $Q(T)$ est un polynôme, le paramètre essentiel régulant la dynamique de ce comportement est l'énergie du niveau bas de la transition E_r ; la dépendance exponentielle est en $e^{-1.44E_r/T}$ ¹. Le tableau II-1 ci-après donne les énergies maximales et les intensités minimales des bases HITRAN, HITEMP et EM2C, pour les molécules les plus usitées dans les calculs de combustion ou atmosphériques.

		H ₂ O	CO ₂	O ₃	N ₂ O	CO	CH ₄	NH ₃	HCl
E_r^{\max}	HITRAN	5340	4791	3206	3696	9034	4487	4972	4712
	HITEMP	17867	18865	-	-	70000	-	-	-
	EM2C	19999	24843	-	16526	?	-	-	-
S_r^{\min}	HITRAN	$1,0 \cdot 10^{-32}$	$1,1 \cdot 10^{-28}$	$1,5 \cdot 10^{-31}$	$5,7 \cdot 10^{-26}$	$8,1 \cdot 10^{-38}$	$4,1 \cdot 10^{-34}$	$3,0 \cdot 10^{-29}$	$1,0 \cdot 10^{-26}$
	HITEMP	$1,2 \cdot 10^{-53}$	$3,9 \cdot 10^{-53}$	-	-	$1 \cdot 10^{-167}$	-	-	-
	EM2C	?	$1,0 \cdot 10^{-67}$	-	$1,2 \cdot 10^{-51}$?	-	-	-

tableau II-1: énergie maximale (en cm^{-1}) et intensité minimale à 296 K (en $\text{cm}^{-2} \cdot \text{molecule}^{-1} \cdot \text{cm}^3$) des raies de bases de données froide et chaudes. Les ? sont les données auxquelles nous n'avons pu accéder.

Les niveaux d'énergie maximale des raies de la base de données froide sont bien inférieurs à ceux des bases chaudes ($\sim 5000 \text{ cm}^{-1}$ à comparer à $\sim 18000 \text{ cm}^{-1}$ ou plus). On voit aussi que les intensités minimales à 296 K sont bien plus faibles pour les bases chaudes, surtout pour CO. L'insuffisance de la base de données HITRAN pour des applications à température élevée est bien connue. Elle a été montrée avec l'exemple de la vapeur d'eau par Rivière et al. [RIVI,95], qui donne la contribution cumulée à la somme des intensités à 2500K, des raies de H₂O issues

¹ Le problème de la dynamique sera discuté de façon plus approfondie au paragraphe suivant (II-4-2).

de niveaux d'énergie inférieurs ou égaux à une valeur donnée. Il montre que pour une coupure à des niveaux inférieurs à 5400 cm^{-1} environ (coupure HITRAN), la contribution à la somme des intensités est de 55% environ. Les bases de données froides sont donc incomplètes si l'on veut traiter des phénomènes de combustion par exemple. Aussi, le nombre de transitions prises en compte est radicalement différent: 49444 raies de H_2O dans HITRAN, contre 1 283 468 raies dans HITEMP, 60802 raies de CO_2 contre 1 032 269, et 4477 raies de CO contre 113022. Le chapitre IV mettra en relief les lacunes des bases froides à l'aide de spectres expérimentaux réalisés grâce à une cuve chaude.

II-4-2 PRÉ-TRI DES BANQUES DE DONNÉES DE RAIES

Nous avons décrit dans le paragraphe II-3-3 une méthode de sélection des raies. La démarche décrite s'applique au cours d'un calcul raie par raie en amont du traitement d'un segment donné. Les raies sont triées en fonction des conditions thermophysiques du milieu. Ensuite, sur la base des raies restantes, une distance de coupure des ailes de raies est déterminée. Ce n'est qu'après que le calcul à proprement parler débute, avec la création des grilles de maillage et la projection des raies. Bien que la procédure de tri soit très efficace¹, elle requiert un certain nombre d'opérations telles que la conversion des intensités de toutes les raies aux conditions du segment ainsi que le calcul de leurs largeurs (Doppler, Lorentz, Voigt) et de leurs valeurs au centre, la construction des intervalles de contrôle, le calcul des barrières d'erreur dans chacun de ceux-ci, et le tri des raies centrées dans ces intervalles. Cela a un coût en temps, qui est largement rattrapé par le nombre de raies négligées conséquent. Nous pouvons cependant encore améliorer la démarche de tri en effectuant un calcul majorant en amont de tout calcul. Autrement dit, nous proposons d'appliquer la démarche du tri à l'ensemble des raies des bases de données, en balayant toutes les conditions de température, pression, produit (fraction molaire×longueur de segment) susceptibles d'être rencontrées par l'utilisateur, afin d'établir des lois empiriques analytiques simples minorant les seuils de prise en compte pour chaque raie. L'intérêt de cette approche est de réduire le nombre de raies traitées par le tri en cours de programme, tri que l'on nommera désormais "tri fin".

¹ Par exemple, pour une colonne d'air de 500 m à 285K, 1 atm, avec 360 ppmv de CO_2 et 0.5 % de H_2O , 93.1 % des raies de la base EM2C entre 1800 cm^{-1} et 3000 cm^{-1} sont éliminées.

a) Mise en œuvre du pré-tri

Afin de modéliser la dépendance du seuil de prise en compte de raies en fonction des conditions thermophysiques du milieu, étudions-la d'abord analytiquement à l'aide du résultat de la méthode de tri fin. Soit donc un segment, qui est un milieu homogène par définition, de longueur donnée ℓ . Ce segment renferme une molécule diluée dans l'air; soit x sa fraction molaire. Soit une barrière d'erreur A_{PT} , exprimée en épaisseur optique, de sorte que la barrière sur le coefficient d'absorption soit égale à $\varepsilon_{\kappa} = A_{PT}/\ell$. D'après le paragraphe II-3-3 traitant du tri des raies, on peut écrire que dans chaque intervalle de contrôle i la somme, en leurs centres, des raies négligées vérifie une inégalité du type suivant (représentation schématique de l'équation (II-45)):

$$\sum_{r_n} \Phi_n^{(0)} S'_n x P = \frac{A_{PT} / \ell}{\left\{ 1 + \delta_{\text{voisin}} + \sum_{i \text{ voisins}} \delta_i \left[\frac{\Phi(i\Delta\sigma)}{\Phi(0)} \right]^{\gamma_V^{\max}} \right\}}, \quad (\text{II-60})$$

avec les notations et les dépendances suivantes:

- profil au centre des raies négligées r_n : $\Phi_n^{(0)}(p, T, x)$
- intensité des raies négligées: $S'_n(T)$
- rapport des valeurs du profil de la raie la plus large dans i : $\left[\frac{\Phi(i\Delta\sigma)}{\Phi(0)} \right]^{\gamma_V^{\max}}(p, T, x)$.

On rappelle que $\Delta\sigma$ désigne la largeur d'un intervalle de contrôle.

- facteur δ_{voisin} ou δ_i introduit dans le paragraphe II-3-3:

$$\delta_{\text{voisin}} \text{ ou } \delta_i = \text{fonction} \left[\left(\Phi^{(0)}(p, T, x) S'(T) x P \right)_{\min}, \frac{A_{PT}}{\ell} \right], \text{ sa valeur (0 ou 1) dépend de la}$$

comparaison de la barrière A_{PT}/ℓ avec la valeur au centre de la raie la plus faible présente dans l'intervalle de contrôle.

La contribution de la fraction molaire de gaz absorbant aux profils provient de sa participation aux élargissements Lorentz. Or, pour simplifier, le pré-tri est effectué dans les conditions d'une molécule infiniment diluée dans l'air. Le code raie par raie étant amené à étudier l'absorption de gaz dans l'air (combustion dans l'air, colonnes atmosphériques), l'utilisation d'une base de donnée avec un tel pré-tri convient. De plus, la détermination des courbes de seuil de prise en compte des raies résulte, comme nous le verrons plus loin, d'une bonne minoration des résultats numériques obtenus par le tri fin qui lui même est une majoration de

la contribution des raies, le nombre de raies qu'il est réellement possible d'éliminer étant plus grand. Donc on peut penser de façon pragmatique que l'utilisation des données du pré-tri se prête très bien aussi à des mélanges gazeux contenant 20 à 30% d'une espèce dans l'air, la variation des largeurs de raies restant modérée. Pour conclure sur ce point, si on considère une molécule infiniment diluée dans un bain constitué d'autres molécules (absorbantes ou non), l'élargissement de ses raies d'absorption ne dépend pas de sa fraction molaire. C'est dans cet esprit que le pré-tri a été pensé. En effet, l'équation (II-60) devient alors:

$$\sum_{r_n} \Phi_n^{(0)}(p, T) S'_n(T) P = \frac{A_{PT} / (x\ell)}{\left\{ 1 + \delta_{\text{voisin}} + \sum_{i \text{ voisins}} \delta_i \left[\frac{\Phi(i\Delta\sigma)}{\Phi(0)} \right]^{\gamma_v^{\max}} \right\} (p, T)}, \quad (\text{II-61})$$

avec: δ_{voisin} ou $\delta_i = \text{fonction} \left[\left(\Phi^{(0)}(p, T) S'_n(T) P \right)_{\min}, \frac{A_{PT}}{x\ell} \right]$.

On voit que cette équation dépend de trois paramètres: P, T, $(A_{PT} / x\ell)$. Ainsi, à T et P fixés, et pour une valeur d'erreur donnée A_{PT} , pour un produit $x\ell$ suffisamment grand aucune raie n'est négligeable. Après avoir classé toutes les raies dans chaque intervalle de contrôle dans l'ordre croissant, on va pouvoir, au fur et à mesure que $x\ell$ diminue, éliminer ces raies en commençant par celle qui a sa valeur au centre la plus faible et ainsi de suite. On détermine ainsi pour chaque raie un seuil limite $x\ell$ en dessous duquel la raie est négligeable, fonction de la température et de la pression, pour une erreur donnée. Le paramétrage par l'erreur est évident, car on a ici une proportionnalité. Le pré-tri ayant été effectué pour une erreur donnée A_{PT}^o , il fournit pour chaque raie un seuil $(x\ell)_{r,T,p}^o$. La conversion pour l'erreur du calcul courant est:

$$(x\ell)_{r,T,p} = (x\ell)_{r,T,p}^o \frac{A_{PT}}{A_{PT}^o}, \quad (\text{II-62})$$

Revenons un instant sur la formule (II-61). Nous n'avons pas tenu compte de la variation avec $x\ell$ du dénominateur, lequel traduit l'influence des ailes des raies voisines. Or celui-ci dépend des δ qui eux-mêmes dépendent de $(A_{PT} / x\ell)$. Au départ ($x\ell$ "grand"), les δ valent zéro car aucune raie n'est négligée. Au fur et mesure que $x\ell$ diminue ils basculent à 1, étant entendu que les intervalles de contrôle sans raie n'entrent jamais en ligne de compte dans le processus de pré-tri. Chaque basculement entraîne une diminution locale et soudaine de la barrière

constituée par le membre de droite de l'égalité (II-61). Une raie dont on a trouvé le seuil pour un $x\ell$ donné risque, si on la teste à nouveau pour un $x\ell$ légèrement plus petit, de ne plus satisfaire le critère de tri fin. Cela dit, l'influence du dénominateur est faible, surtout quand les intervalles sont larges. D'ailleurs, au même titre que pour la discussion sur le tri fin, compte tenu des majorations créées sur les positions des profils, sur la largeur maximale des raies, sur les erreurs effectivement atteintes par intervalle, et compte tenu de la minoration par des lois analytiques des seuils donnés par le tri fin, on peut affirmer que l'influence éventuelle de certains termes du dénominateur ne joue pas sur l'erreur demandée en entrée. Aussi, de multiples tests sur des configurations représentatives (signature, atmosphère), n'ont jamais mis en défaut l'erreur demandée en entrée et ont toujours donné un nombre de raies éliminées inférieur à celui donné par le tri fin, avec des erreurs recalculées a posteriori plus petites que celles trouvées avec le tri fin.

La détermination pratique des modèles analytiques utilisés pour représenter $(x\ell)_{\text{seuil}}$ est décrite ci-après. On traite les bases de données molécule par molécule. On procède au tri fin de ses raies dans une gamme de température, pression, donnée par l'utilisateur. On fixe d'abord la température. Pour chaque pression, on effectue le tri fin de la base de données pour des valeurs de $(x\ell)$ parcourant une gamme débutant par des valeurs élevées (produit $(x\ell)$ maximum susceptible d'être rencontré par l'utilisateur) et qui descend jusqu'à ce que toutes les raies aient été éliminées. Dès qu'une raie peut être négligée, son seuil $(x\ell)_{\text{seuil}}$ est enregistré. Une fois la gamme de pressions parcourue, on dispose pour chaque raie d'une courbe numérique des $(x\ell)_{\text{seuil}}$. La figure II.21 donne un exemple du type de résultat obtenu.

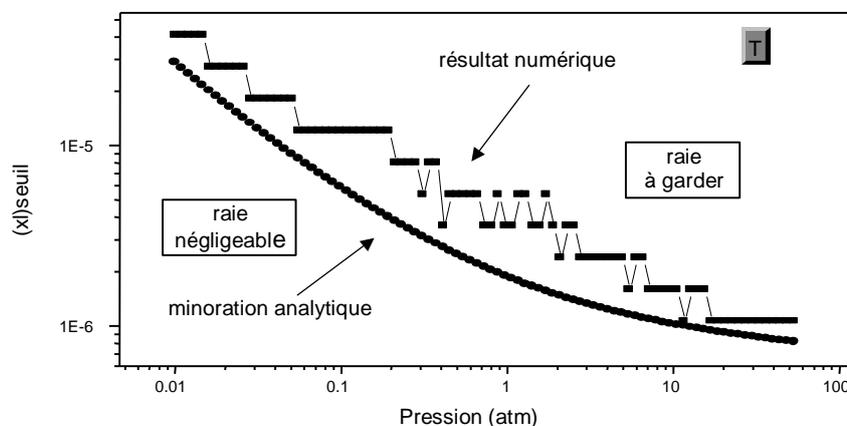


figure II.21: Pour chaque raie on peut définir une limite $(x\ell)_{\text{seuil}}$ de prise en compte. Le modèle analytique minore le résultat numérique en tout point.

Pour interpréter cette décroissance globale, nous avons étudié l'évolution avec T et P de la valeur du coefficient d'absorption au centre d'une raie. La variation avec la pression, à température fixée, est schématisée sur la figure II.22:

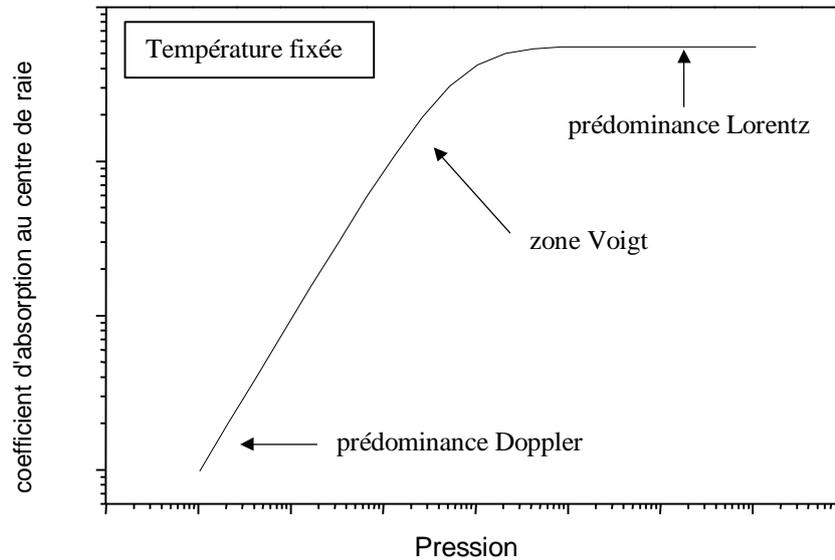
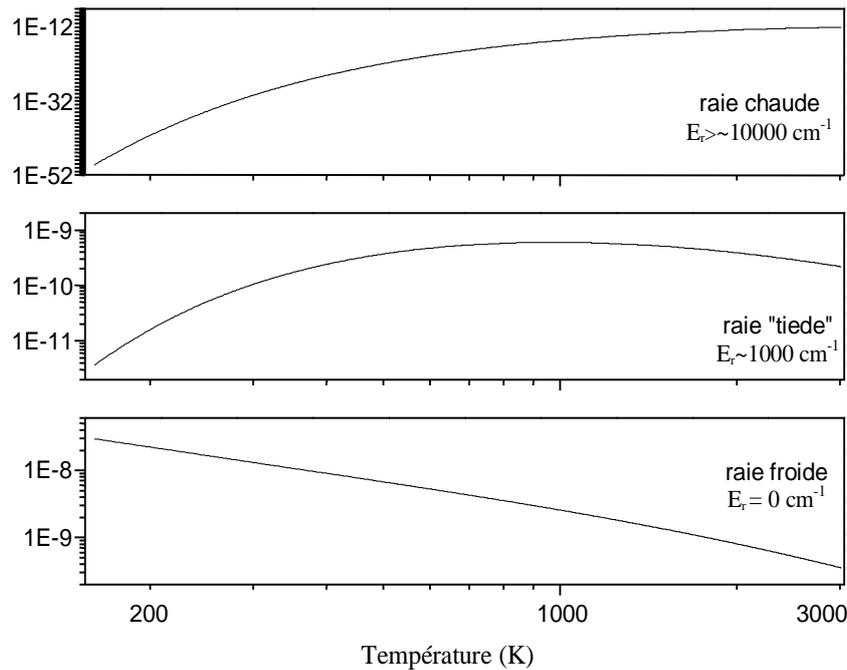


figure II.22: Les comportements asymptotiques s'interprètent aisément: le coefficient d'absorption d'une raie est proportionnel à la pression en régime Doppler (d'où la droite de pente positive); le coefficient d'absorption du centre d'une raie est indépendant de la pression en régime Lorentz (d'où le palier).

On voit qu'à température fixée, l'absorption au centre d'une raie croît avec la pression sauf en régime Lorentz où elle n'en dépend pas. Le seuil $(x \ell)_{\text{seuil}}$ décroît cependant avec la pression (cf partie droite de la figure II.21 où le régime est lorentzien) en raison de l'influence des ailes des raies voisines, dont les contributions, par les ailes, varient en P^2 . Le comportement, à pression fixée, en fonction de la température dépend essentiellement de l'énergie du niveau de départ E_i , comme le montre la figure II.23. Soulignons la sensibilité extrême pour les raies les plus chaudes: quarante ordres de grandeur distinguent la valeur au centre de la raie chaude de la figure II.23 entre 160K et 3000K. Cela s'explique essentiellement par le terme en exponentielle dans les intensités, qui représente le peuplement des niveaux d'énergie: $e^{-1.44E_i/T}$ (cf équation (II-56), avec $hc/k = 1.44 \text{ m.K}$).

**figure II.23:**

dynamique du comportement du centre de raie en fonction de la température, suivant la nature de la raie. Excepté pour la raie froide, les ordres de grandeurs des niveaux d'énergie sont donnés à titre purement indicatif, étant donné que le comportement évolue continûment entre les deux asymptotes $E_r=0\text{cm}^{-1}$ et $E_r=25000\text{cm}^{-1}$ qui est l'énergie la plus forte issue des bases de données chaudes (énergie d'une raie de CO_2).

Forts de ces analyses, nous avons cherché une modélisation analytique appropriée. L'absorption au centre d'une raie croissant avec la pression, à température fixée, on comprend alors la décroissance du $(x\ell)_{\text{seuil}}$ avec la pression. Un certain nombre de tests numériques sur plusieurs types de raies (chaudes, "tièdes", froides) nous ont amenés à modéliser les $(x\ell)_{\text{seuil}}$ numériques par une courbe analytique empirique qui évite une minoration trop grossière:

$$(x\ell)_{\text{seuil}}^r(T, P) = a_r(T) e^{\frac{5}{\ln(1+P)}}, \quad (\text{II-63})$$

Pour chaque raie, nous avons fait passer la courbe analytique le plus près possible du résultat numérique. Un exemple est donné sur la figure II.21.

L'étape suivante consiste en la modélisation du comportement du coefficient $a_r(T)$ pour chaque raie en fonction de la température. Pour cela nous avons minoré les coefficients déterminés numériquement par des morceaux de droites en échelle logarithmique. Un nombre de sept segments de droites fut choisi pour couvrir toute la gamme de températures. La figure II.24 illustre les résultats obtenus suivant le même découpage en types de raies que celui effectué pour présenter la figure II.23. Les dynamiques des courbes sont cohérentes avec celles des évolutions des centres de raie avec la température. Justifions-le en prenant l'exemple de la raie chaude. La croissance de la valeur au centre d'une raie chaude implique que celle-ci soit de plus en plus difficilement négligeable quand T augmente, d'où un $(x\ell)_{\text{seuil}}$ de plus en plus bas, évolution naturellement suivie par le coefficient $a_r(T)$ compte tenu de (II-63). Par un raisonnement qualitatif analogue, on établit des correspondances pour les raies

"tièdes" et les raies froides. Soulignons par ailleurs que la grande gamme de variation de la valeur du centre de la raie chaude se répercute sur la celle du coefficient $a_r(T)$ qui est bien plus forte que les gammes d'une raie "tiède" ou d'une raie froide.

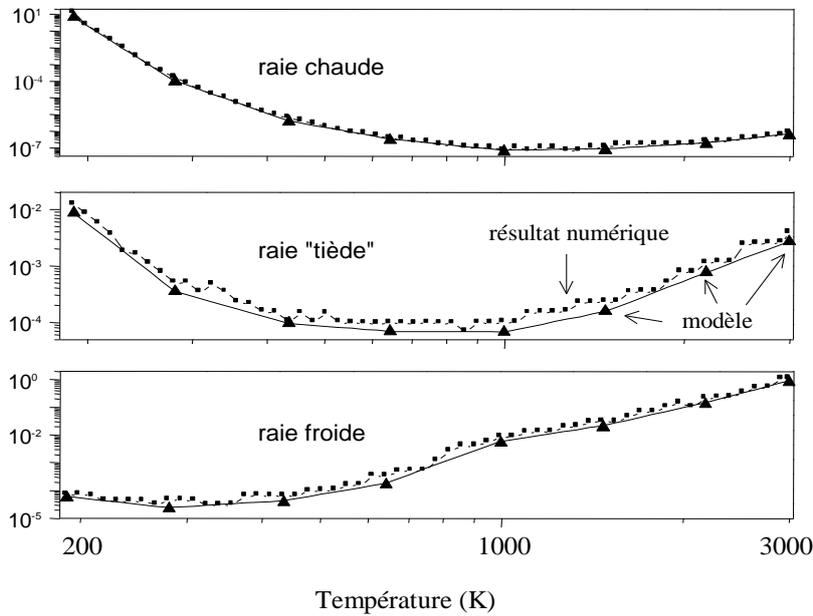


figure II.24: coefficients $a_r(T)$ pour les trois types de raies. Les triangles reliés par des segments de droites sont les valeurs retenues pour chaque raie, de façon à ce que tout point de ces segments minore les courbes numériques. À pression fixée, les $(x\ell)_{\text{seuil}}$ étant proportionnels aux $a_r(T)$, la cohérence avec la dynamique des valeurs aux centres de raie de la figure II.23 est assurée.

Les huit frontières du découpage de la gamme de températures sont communes à toutes les molécules. Leur répartition est régulière en échelle logarithmique sur la plage d'étude $[T_{\min}, T_{\max}]$ demandée par l'utilisateur. Ainsi, à chaque raie sont associés huit paramètres permettant de calculer analytiquement un seuil de prise en compte, et ce à toute température et pression de la gamme d'utilisation du code, et pour une erreur donnée (conversion avec la formule (II-62)). Le calcul d'une exponentielle étant un facteur pénalisant en temps, la formule (II-63) n'est pas utilisée sous la forme écrite précédemment. Exprimée en logarithme népérien, elle autorise le calcul du coefficient $a_r(T)$ par interpolation linéaire des coefficients dont le logarithme est tabulé. Le calcul du $(x\ell)_{\text{seuil}}$ se fait alors ainsi:

$$\ln (x\ell)_{\text{seuil}}^r (T, P) = \underbrace{\frac{5}{\ln(1+P)^{0.1}}}_{\text{Cte/segment}} + \underbrace{\left(\frac{\ln T - \ln T_d}{\ln T_f - \ln T_d} \right)}_{\text{Cte/segment}} (\ln a_r^f - \ln a_r^d) + \ln a_r^d, \quad (\text{II-64})$$

T_f et T_d désignent les températures frontalières (fin/début) encadrant la température T d'un segment selon le découpage évoqué précédemment. a_r^f et a_r^d sont les coefficients correspondants de la raie. L'utilisation d'une telle formule dans un segment homogène se limite ainsi, pour chaque raie, à deux additions, une soustraction et un produit. Ensuite, il

suffit de comparer la valeur calculée et le $\ln(x\ell)$ de la molécule à laquelle appartient la raie. On ne garde la raie que si $\ln(x\ell) > \ln(x\ell)_{\text{seuil}}^r(T,P)$.

L'utilisation pratique de ces résultats dans le code raie par raie doit tenir compte de la présence de plusieurs molécules dans les mélanges. Nous avons choisi de répartir l'erreur ε_{PT} sur les différentes molécules absorbantes présentes dans le segment, proportionnellement aux nombres de raies qui les représentent. On peut penser, à juste titre, qu'une répartition plus intéressante doit tenir compte des intensités cumulées pour chaque ensemble de raie représentant une molécule. Mais cela nécessite la conversion des intensités de toutes les raies aux conditions du segment, ce qui est très pénalisant en temps en raison de la présence d'exponentielles. Agissant ainsi, on perdrait un des éléments essentiels de gain du pré-tri par rapport au tri fin. Cette option a donc été abandonnée.

b) Comparaison du pré-tri avec le tri fin: avantages et inconvénients

Vu le nombre très restreint d'opérations par raie associées à la méthode du pré-tri, l'intérêt en terme de gain de temps pour le tri des raies est indéniable, par opposition au tri fin qui nécessite la mise en œuvre d'un nombre important d'opérations avec d'une part le calcul de toutes les propriétés associées à toutes les raies (largeurs, conversion de l'intensité, valeur au centre) et d'autre part le découpage de l'intervalle en sous-intervalles de contrôle, le calcul des barrières en coefficient d'absorption dans chacun, et le classement par sous-intervalle des raies selon leur valeur au centre. Mais la contrepartie à la simplicité du test est inhérente à la modélisation des $(x\ell)_{\text{seuil}}$ qui consiste en des courbes analytiques minorant nécessairement le résultat donné par le tri fin. L'efficacité en nombre de raies éliminées est donc moindre que celle du tri fin, ce dont témoigne un essai avec CO_2 autour de la bande ν_3 (cf figure II.25).

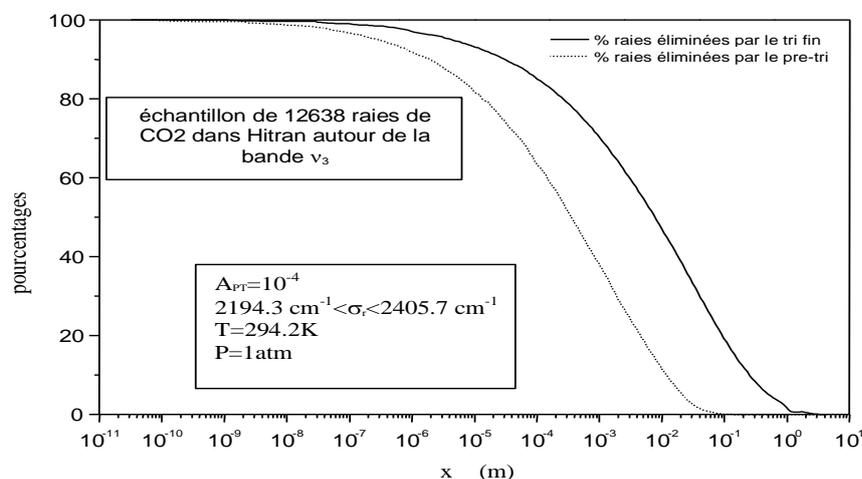


figure II.25:
comparaison de l'efficacité des deux méthodes de tri en terme de nombre de raies éliminées, en leur appliquant la même erreur A_{PT} .

Il va alors s'agir de trouver un équilibre dans la répartition de l'erreur entre le tri fin et le pré-tri. Une discussion chiffrée sur cette répartition sera menée dans la conclusion du § II-5.

II-4-3 LES TABLES DE CONTINUA

Les continua dus aux ailes lointaines des raies ont été calculés en utilisant la base de données HITRAN par addition de contributions des raies avec un profil de Voigt corrigé d'un facteur χ [cf. équation (II-15)]. Ce travail s'est limité aux molécules H₂O et CO₂ car elles sont les seules absorbant suffisamment dans les conditions envisagées pour que la contribution de leurs ailes soit importante [HART,95a]. Les facteurs correctifs χ ont été déterminés dans le cadre de contrats [HART,95a], [HART,97] par ajustement de multiples données expérimentales suivant une procédure semblable à celle décrite dans la référence [PERR,89]. Une fois connues ces quantités, les continua ont été calculés systématiquement et tabulés pour différentes températures entre 200 et 3000 K avec les intervalles de coupure $\Delta\sigma_c^{\text{cont}} = 5 \text{ cm}^{-1}$ et 25 cm^{-1} . Ces choix ont été imposés par le désir de compatibilité avec d'autres modèles de calcul (modèles statistiques à bande étroite, modèle CK, e.g. Ref. [PIER,99]) utilisés à SNECMA [HART,95b]. Notons qu'ils ne sont pas nécessairement optimaux pour des calculs aux pressions atmosphériques. En effet, dans ce cas, $\Delta\sigma_c^{\text{cont}} = 0.5 \text{ cm}^{-1}$ serait suffisant pour respecter le critère d'éloignement dans l'aile (c'est-à-dire $(\Delta\sigma_c^{\text{cont}}/\gamma)^2 \gg 1$) et permettrait de réduire le temps de calcul de projection des raies. En revanche, un tel choix alourdirait le traitement des continua pour deux raisons: la première est que la taille des fichiers associés serait multipliée par 10. La seconde est qu'avec la faible valeur $\Delta\sigma_c^{\text{cont}} = 0.5 \text{ cm}^{-1}$, il serait nécessaire de prendre en compte les continua d'espèces autres que CO₂ et H₂O.

La prise en compte de l'absorption induite par collision a été limitée aux contributions de l'azote et de l'oxygène dans leurs bandes fondamentales. En effet, dans les régions spectrales d'intérêt, ces espèces sont les seules présentes en quantité suffisante pour devoir être prises en compte. Leurs spectres sont calculés [HART,95a] à l'aide de lois analytiques simples fondées sur des paramètres tabulés dont les valeurs ont été ajustées sur des mesures de laboratoire [LAFF,96],[THIB,97].

CONCLUSION

Nous avons présenté dans ce chapitre les bases de données utilisées par le code raie par raie. Nous en avons donné les limites de validité. Nous avons aussi montré comment on pouvait les pré-trier, pour obtenir pour chaque raie une série de huit nombres à partir desquels il est aisé, par un calcul simple, de prédire si cette raie est négligeable. Cette méthode de tri est beaucoup plus rapide qu'un tri fin mais plus grossière. Elle permet "quasi instantanément" de réduire le nombre de raies à traiter pour un segment, avant que plus loin dans le programme soit effectué un tri fin des raies qui ont franchi cette première barrière. L'avantage CPU est particulièrement intéressant si les bases de données sont superfétatoires par rapport aux conditions du segment traité (base chaude pour un segment atmosphérique). L'intérêt est encore plus marqué dans notre cas où nous avons décidé de fabriquer une unique base de données dans laquelle sont fondues toutes les bases regroupant les raies d'une seule molécule. La classification se fait par ordre croissant de la position des raies. Pour les molécules dont on dispose de bases chaudes (H₂O, CO₂, N₂O, CO pour les bases de EM2C) ce sont ces dernières qui sont incluses dans la base unique lue par le code, car elles contiennent les raies de HITRAN. Toutes les autres molécules présentes dans la base de données HITRAN (O₃, CH₄, NO, NH₃, HCl, ...; HITRAN contient des raies de 37 espèces) sont incluses dans la base unique¹. Le tableau II-2 un exemple de lignes de la banque de données ainsi reformulée. La numérotation des molécules est celle de HITRAN.

n_{molec}	n_{isot}	$\sigma_r(\text{cm}^{-1})$	S_r ($\text{cm}^2 \cdot \text{molec}^{-1} \cdot \text{cm}^3$)	$E_r(\text{cm}^{-1})$	γ_{air}	β_{air}	i	f	$a_r(T_1)$...	$a_r(T_8)$
5	1	2136.214976	9.084E-28	455.4369	.0000	0.00	13	13	-5.2039	...	-1.9196
3	1	2136.309000	3.490E-25	837.5937	.0689	0.76	0	0	-12.1194	...	-8.2080
6	3	2136.326100	1.450E-24	301.0840	.0600	0.75	0	0	-13.0758	...	0.0000

tableau II-2: *extrait de la base de données unifiée utilisée par le code raie par raie. Toutes les molécules de HITRAN sont présentes. Le 0.0000 du coefficient $a_r(T_8)$ des courbes de pré-tri pour la raie de l'espèce 6 (CH₄) provient du fait que la fonction de partition n'est définie que jusqu'à 500K pour cette molécule. Les coefficients $a_r(T)$ pour CH₄ ne sont donc définis que jusqu'à la température frontière T_3 que l'on a prise égale à 500K.*

Pour les molécules dont on a des bases chaudes on met, par convention, zéro dans les colonnes γ_{air} , β_{air} ; les largeurs sont données par les coefficients d'élargissement et de

¹ Excepté celles dont la fonction de partition n'est pas définie dans HITRAN98: HNO₃, C₂H₆, SF₆, O, ClONO₂.

dépendance en température tabulés par ailleurs, comme le montre le tableau II-3. Pour les autres espèces, on met zéro dans les colonnes des niveaux i et f.

niveau	γ_{G-H_2O}	β_{G-H_2O}	γ_{G-CO_2}	β_{G-CO_2}	γ_{G-O_2}	β_{G-O_2}	γ_{G-N_2}	β_{G-N_2}
1	.11770	0.726	.11990	0.723	.08590	0.721	.09500	0.737
2	.11580	0.740	.11780	0.726	.08440	0.725	.09320	0.741

tableau II-3: *extrait des données des coefficients d'élargissement γ (en $cm^{-1} \cdot atm^{-1}$) et des dépendances en température β . Ici le gaz G est le CO_2 . On rappelle que les quatre partenaires de collision sont (H_2O , CO_2 , O_2 , N_2). Les niveaux sont ici, pour CO_2 , les nombres quantiques rotationnels J .*

II-5. LES CRITÈRES D'ERREURS

Au chapitre II-3 nous avons décrit les solutions retenues pour optimiser le calcul raie par raie. Mais à chacune des optimisations, calcul du profil, maillage, tri des raies, coupure d'aile, saturation, est fatalement liée une dégradation de la précision du calcul. Or, on rappelle que les deux grandeurs recherchées pour une colonne sont sa transmission et sa luminance. Une utilisation conviviale du programme requiert donc que l'utilisateur puisse contrôler les erreurs sur les valeurs finales (c'est-à-dire pour la colonne entière) de ces deux quantités. Pour ce faire, deux couples de critères sont introduits dont l'utilisateur devra choisir les valeurs. Il s'agit des erreurs absolues maximales tolérées pour les approximations visant à négliger des raies (pré-tri, tri, coupure des ailes) ou à interrompre le calcul dans les régions saturées. Dans chacun de ces deux cas, deux critères sont introduits, respectivement en termes d'erreurs absolues en transmission ou en luminance, qui sont ($\Delta\tau$ et ΔL) pour les raies négligées et ($\Delta\tau_0$ et ΔL_{τ_0}) pour la saturation. Rappelons qu'en plus de ces critères, un choix doit être fait concernant l'erreur relative (ϵ_m) introduite par l'utilisation des maillages et des interpolations linéaires associées (cf II-3-2).

Le but de ce chapitre est triple. Dans une première partie, nous établirons comment les critères utilisés dans chacun des segments (cf II-3) sont déterminés à partir des critères globaux introduits ci-dessus. Nous verrons ensuite quelles sont les erreurs totales sur τ

et L, conséquences des choix de l'utilisateur. Enfin, nous tenterons, par quelques remarques et conseils, de guider l'utilisateur dans le choix des critères d'erreurs.

II-5-1 CRITÈRES D'ERREURS DANS LE SEGMENT COURANT

Le but de ce chapitre est d'établir le lien entre les quantités qui relèvent du choix de l'utilisateur ($\Delta\tau$, ΔL , $\Delta\tau_0$, ΔL_{τ_0}) et les critères qui sont appliqués lors du traitement du segment courant. Le cas du tri des raies (ainsi que du pré-tri et des coupures d'ailes) sera traité dans un premier temps, la deuxième partie étant consacrée au traitement de la saturation.

a) Critères liés aux tri, pré-tri, et coupure d'ailes

Nous avons décrit aux chapitres II-3-3, II-4-2, et II-3-4 comment sont mises en œuvre des procédures de tri des raies, pré-tri des raies et coupures des ailes. Celles-ci reposent, dans chaque segment, sur les critères ε_k , ε_{PT} , ε_c qui¹ s'appliquent au coefficient d'absorption. Le problème est donc ici de relier ces quantités aux grandeurs $\Delta\tau$ et ΔL choisies par l'utilisateur. Pour simplifier, nous ne travaillerons ici que sur les erreurs associées aux raies négligées (tri + pré-tri), à savoir $\varepsilon_k + \varepsilon_{PT}$ que nous noterons ε_{RN} (indice RN pour Raies Négligées). En effet, les trois quantités s'en déduisent directement par:

$$\begin{aligned}\varepsilon_k &= (1 - f_{PT}) \times \varepsilon_{RN} \\ \varepsilon_{PT} &= f_{PT} \times \varepsilon_{RN} \\ \varepsilon_c &= f_c \times \varepsilon_{RN},\end{aligned}\tag{II-65}$$

L'erreur affectée au pré-tri est une fraction, f_{PT} , unique pour tous les segments, de l'erreur tolérée sur le coefficient d'absorption des raies négligées. L'erreur affectée à la coupure des ailes est une fraction unique, égale à 1/10 par défaut.

Rq préliminaire: La question qui se pose ici est de choisir les critères $\varepsilon_{RN}(k)$ appliqués dans chacun des segments k afin que les conséquences cumulées qui en résultent sur la transmission et la luminance de la colonne complète soient inférieures à $\Delta\tau$ et ΔL . Il y a bien sûr de nombreuses solutions, mais la plus intéressante est celle qui maximise le nombre

¹ $\varepsilon_{PT} = A_{PT} / \ell$, où on rappelle que A_{PT} est le critère s'exprimant en épaisseur optique, et ℓ la longueur d'un milieu homogène (segment).

cumulé (sur les segments) de raies négligées et minimise ainsi le volume de calculs. Posée ainsi, la question, qui soulève un problème de maximisation, est insoluble dans le cas général. Néanmoins, le cas particulier d'une colonne isobare et isotherme donne une piste. En effet la figure II.26 montre que le nombre de raies négligées dans un segment contenant une seule espèce absorbante est une fonction N_{RN} d'un paramètre $B=A/xP\ell$ (A : constante sans dimension). Il s'agit donc de maximiser la quantité $N_{RN}^{tot} = \sum_{\text{segments } k} N_{RN}(B_k)$.

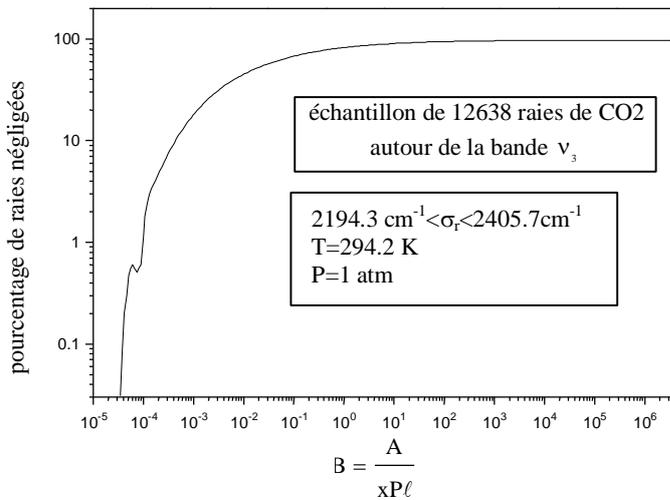


figure II.26: Quand une seule espèce absorbante est présente, le nombre de raies négligées dépend d'une barrière numérique B s'exerçant sur la somme des produits (profil \times intensité). Le petit décrochement autour de $B \sim 10^{-4}$ provient de la méthode de tri: influence du facteur δ .

On désigne par N le nombre de segments. La fonction $N_{RN}(\cdot)$ étant convexe, il est aisé de montrer que la meilleure solution est donnée par une répartition uniforme, c'est-à-dire $B_k = B$, indépendant du segment. Ainsi, la méthode qui maximise le nombre cumulé, sur les segments, des raies négligées, est celle qui attribue une barrière B identique dans chaque segment à la somme sur les raies des produits (profil \times intensité). Donc, la somme κ_k^n des coefficients d'absorption des raies négligées dans le segment k doit être majorée de la façon suivante:

$$\forall \text{ segment } k: \quad \kappa_k^n < B x_k P_k, \quad (\text{II-66})$$

équation qui permet de relier les paramètres ε_{κ} , ε_{PT} , ε_c , dans chaque segment à une seule quantité B , qui sera déterminée ci-après suivant que l'on considère $\Delta\tau$ ou ΔL .

Afin d'étendre ce résultat au cas de mélanges d'espèces absorbantes, nous devons adopter pour x_k la fraction molaire idéale, c'est-à-dire celle qui privilégie les espèces dont les raies sont potentiellement fortement négligeables. En pratique, nous avons adopté une moyenne égale à la somme des fractions molaires des espèces, pondérée par leur fraction en nombre de raies:

$$\bar{x}_k = \sum_{e=1}^{n_e} x_e^k \frac{N_e^r}{N_{\text{tot}}^r}, \quad (\text{II-67})$$

où nous désignons par n_e le nombre d'espèces absorbantes e , N_e^r le nombre de raies de l'espèce e , N_{tot}^r le nombre de raies totales, x_e^k la fraction molaire de l'espèce e dans le segment k . Cette moyenne met l'accent sur les espèces à la fois les plus concentrées et les plus présentes en termes de nombre de raies. La cohérence avec le cas d'une seule espèce absorbante est assurée puisque l'on retrouve la fraction molaire de cette espèce. Dans le cas de mélanges d'espèces absorbantes, il suffit donc de remplacer, dans (II-66), x_k par \bar{x}_k .

Répartition sur chaque segment de l'erreur sur la transmission $\Delta\tau$: La transmission due aux ensembles des raies négligées dans chaque segment, τ_k^n , doit vérifier:

$$\prod_{k=1}^N \tau_k^n > 1 - \Delta\tau, \quad (\text{II-68})$$

Cette condition assure que $|\tau_{\text{vrai}} - \tau_{\text{approché}}| < \Delta\tau$. En introduisant le coefficient d'absorption κ_k^n des raies négligées dans le segment k , l'équation (II-68) conduit (en désignant par l_k la longueur du segment k) à:

$$\sum_{k=1}^N l_k \kappa_k^n < -\ln(1 - \Delta\tau), \quad (\text{II-69})$$

On en déduit la constante B , en fonction de $\Delta\tau$, en s'aidant de (II-66):

$$B = \frac{-\ln(1 - \Delta\tau)}{\sum_{k=1}^N \bar{x}_k P_k l_k}, \quad (\text{II-70})$$

Finalement la barrière à appliquer aux coefficients d'absorption dans chaque segment est:

$$\kappa_k^n < \varepsilon_{\text{RN}}^\tau(k) = \frac{-\ln(1 - \Delta\tau) \bar{x}_k P_k}{\sum_{j=1}^N \bar{x}_j P_j l_j}, \quad (\text{II-71})$$

Soulignons la cohérence d'une telle répartition. En effet, si on subdivise une colonne homogène, isotherme et isobare (de longueur l_{colonne}) en divers segments aux mêmes conditions thermophysiques, mais pas forcément de même longueur, la barrière est identique dans chaque segment:

$$\kappa_k^n < \frac{-\ln(1 - \Delta\tau)}{l_{\text{colonne}}}, \tag{II-72}$$

L'erreur finale sur la transmission est bien évidemment conservée.

Répartition sur chaque segment de l'erreur sur la luminance ΔL : La procédure est plus compliquée qu'avec la transmission car les influences des segments sont corrélées dans l'expression de la luminance d'une colonne. Le but est ici de détecter les raies telles que l'erreur absolue sur la luminance soit majorée. Rappelons que la luminance à calculer est celle de la colonne dans le sens émetteur-observateur.



Nous rappelons l'équation (II-20) de calcul de la luminance introduite dans la conclusion du chapitre II-2, où les notations sont précisées:

$$L_N = \sum_{k=1}^N (1 - \tau_k) L_k^o \tau_{k-1 \rightarrow 1}, \tag{II-73}$$

Écrivons l'erreur absolue sur la luminance après avoir négligé des raies. Pour cela on précise les nouvelles notations introduites:

τ_k^g, τ_k^c : transmissions dues respectivement aux raies gardées et au continuum, dans le segment k

$\tau_{k \rightarrow 1}^g, \tau_{k \rightarrow 1}^n, \tau_{k \rightarrow 1}^c$: transmissions de la colonne partielle allant du segment k au segment 1, dues respectivement aux raies gardées, aux raies négligées, au continuum dans chacun de ces segments

L_N^{vraie} : luminance "vraie" de la colonne: toutes les raies sont gardées

L_N^{appr} : luminance approchée de la colonne après avoir négligé des raies.

On écrit:

$$L_N^{\text{vraie}} - L_N^{\text{appr}} = \sum_{k=1}^N (1 - \tau_k^c \tau_k^g \tau_k^n) L_k^o \tau_{k-1 \rightarrow 1}^c \tau_{k-1 \rightarrow 1}^g \tau_{k-1 \rightarrow 1}^n - \sum_{k=1}^N (1 - \tau_k^c \tau_k^g) L_k^o \tau_{k-1 \rightarrow 1}^c \tau_{k-1 \rightarrow 1}^g, \tag{II-74}$$

En remarquant que $\tau_{k \rightarrow 1} = \tau_k \tau_{k-1 \rightarrow 1}$, on parvient à montrer que l'erreur s'écrit de la façon suivante, avec par convention $L_{N+1}^o = 0$:

$$L_N^{\text{vraie}} - L_N^{\text{appr}} = \sum_{k=1}^N (L_k^o - L_{k+1}^o) (1 - \tau_{k \rightarrow 1}^n) \tau_{k \rightarrow 1}^c \tau_{k \rightarrow 1}^g, \quad (\text{II-75})$$

Il s'agit maintenant de déduire de ce calcul une majoration du coefficient d'absorption dans chacun des segments de la colonne. La luminance étant une fonction monotone (croissante) de la température, on peut scinder la somme (II-75) en deux: une somme positive pour les couples de segments (k, k+1) tels que la température de k est supérieure à celle de k+1, une somme négative rassemblant les autres couples. Dans ces conditions, on aboutit à une première majoration de l'erreur:

$$\left| L_N^{\text{vraie}} - L_N^{\text{appr}} \right| < \text{Max} \left[\sum_{\Delta L_k^o > 0}, - \sum_{\Delta L_k^o < 0} \right], \quad (\text{II-76})$$

Nous introduisons une deuxième majoration en posant $\tau_{k \rightarrow 1}^g = 1$, puis une troisième

majoration avec la linéarisation suivante: $1 - \tau_{k \rightarrow 1}^n = 1 - e^{-\sum_{i=1}^k l_i \kappa_i^n} < \sum_{i=1}^k l_i \kappa_i^n$. On aboutit à:

$$\left| L_N^{\text{vraie}} - L_N^{\text{appr}} \right| < \text{Max} \left[\sum_{\Delta L_k^o > 0} (L_k^o - L_{k+1}^o) \tau_{k \rightarrow 1}^c \sum_{i=1}^k l_i \kappa_i^n, - \sum_{\Delta L_k^o < 0} \right], \quad (\text{II-77})$$

À l'aide de (II-66), on introduit la constante B:

$$\sum_{i=1}^k l_i \kappa_i^n < B \sum_{i=1}^k \bar{x}_i P_i l_i, \quad (\text{II-78})$$

On en déduit B, compte tenu de la majoration de l'erreur par ΔL et de $\tau_{k \rightarrow 1}^c$ par 1:

$$B = \frac{\Delta L}{\text{Max} \left[\sum_{\Delta L_k^o > 0} (L_k^o - L_{k+1}^o) \sum_{i=1}^k \bar{x}_i P_i l_i, - \sum_{\Delta L_k^o < 0} (L_k^o - L_{k+1}^o) \sum_{i=1}^k \bar{x}_i P_i l_i \right]}, \quad (\text{II-79})$$

Finalement la barrière à appliquer aux coefficients d'absorption dans chaque segment est:

$$\kappa_k^n < \varepsilon_{RN}^L(k) = \frac{\bar{x}_k P_k \Delta L}{\text{Max} \left[\sum_{\Delta L_j^o > 0} (L_j^o - L_{j+1}^o) \sum_{i=1}^j \bar{x}_i P_i l_i, - \sum_{\Delta L_j^o < 0} (L_j^o - L_{j+1}^o) \sum_{i=1}^j \bar{x}_i P_i l_i \right]}, \quad (\text{II-80})$$

Au même titre que pour la transmission, on peut vérifier la cohérence de cette barrière dans le cas de segments aux conditions identiques, car on a alors une barrière semblable dans chaque segment, donc les mêmes raies négligées:

$$\kappa_k^n < \frac{\Delta L}{L_{\text{colonne}}^o l_{\text{colonne}}}, \quad (\text{II-81})$$

Bilan: Les équations (II-71) et (II-80) fournissent des barrières sur les coefficients d'absorption réparties de façon optimisée sur chaque segment. En adoptant la plus petite que nous noterons $\varepsilon_{RN}(k)$, nous sommes assurés de respecter et l'erreur sur la transmission de la colonne et l'erreur sur la luminance de la colonne:

$$\varepsilon_{RN}(k) = \min \varepsilon_{RN}^T(k), \varepsilon_{RN}^L(k), \quad (\text{II-82})$$

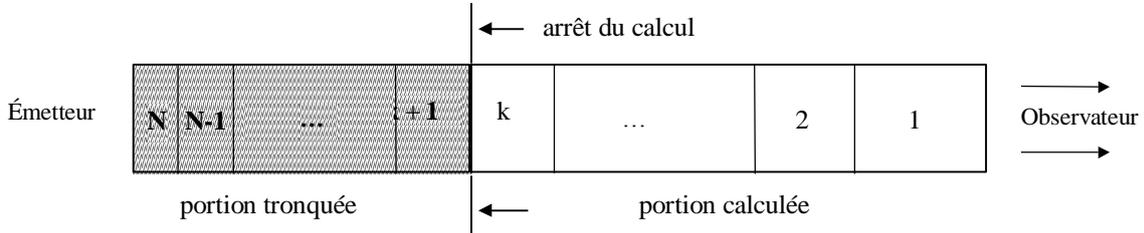
Perspectives: La détermination de la moyenne \bar{x}_k peut être améliorée si on veut qu'elle mette plus en relief les espèces ayant les raies le plus facilement négligeables. Pour cela il faudrait rajouter à la pondération un facteur tenant compte des intensités des raies des espèces.

Pour accroître l'optimisation de la répartition des erreurs sur les segments il faudrait faire intervenir la température. En effet, le raisonnement effectué dans le cas d'un seul gaz absorbant avec une courbe concave suppose que cette courbe est la même dans chaque segment. Or, celle-ci dépend, par l'intermédiaire des profils et des intensités de raies, de la fraction molaire de gaz absorbant et de la pression qui jouent sur les largeurs de raie, mais aussi et surtout de la température qui influe énormément sur les intensités. À ce sujet on pourra se reporter à la figure II.23 qui montre la forte disparité des comportements des centres de raie en fonction de l'énergie de leur niveau de départ. On pourrait donc déterminer des courbes de nombres de raies négligées fonctions de la barrière et de la température: $f(B,T)$. On pourrait tabuler ces courbes ou bien les approximer par des fonctions analytiques. Le problème est ensuite de trouver le N-uplet (B_1, B_2, \dots, B_N) atteignant le maximum de la somme $f(B_1, T_1) + f(B_2, T_2) + \dots + f(B_N, T_N)$. En posant $F(B_1, B_2, \dots, B_{N-1}, B_N) =$

$f(B_1, T_1) + f(B_2, T_2) + \dots + f(B_{N-1}, T_{N-1}) + f(B_N, T_N)$, le problème se généralise en fait à la recherche du maximum d'une fonction à N variables toutes positives. En théorie, cela est faisable. Mais en pratique il faut trouver une technique numérique rapide pour que cette recherche ne soit pas pénalisante en temps CPU.

b) Critère lié à la saturation

De la même façon, il s'agit ici de déterminer, en fonction des choix ($\Delta\tau_0$ et ΔL_{τ_0}) de l'utilisateur quel sera le critère $\tau_{sat}(k)$ déterminant, par saturation (cf § II-3-5), l'arrêt du calcul dans certaines régions spectrales après le segment k, comme illustré sur la figure suivante.



Critère dans chaque segment déduit de l'erreur sur la transmission $\Delta\tau_0$: Dans le cas où l'on utilise le critère de saturation $\Delta\tau_0$, le critère dans le segment k est évidemment:

$$\tau_{sat}^{\tau}(k) = \Delta\tau_0, \tag{II-83}$$

Critère dans chaque segment déduit de l'erreur sur la luminance ΔL_{τ_0} :

On écrit l'erreur due à la troncature après le segment k:

$$L_N^{vraie} - L_k^{vraie} = \left(L_k^{vraie} + \sum_{k'=k+1}^N (1 - \tau_{k'}) L_{k'}^o \tau_{k'-1 \rightarrow 1} \right) - L_k^{vraie}, \tag{II-84}$$

En factorisant la transmission de la portion de colonne des segments 1 à k, $\tau_{k \rightarrow 1}$, on obtient le produit de celle-ci par la luminance de la portion de colonne des segments k+1 à N (luminance aval):

$$L_N^{vraie} - L_k^{vraie} = \tau_{k \rightarrow 1} \sum_{k'=k+1}^N (1 - \tau_{k'}) L_{k'}^o \tau_{k'-1 \rightarrow k+1}, \tag{II-85}$$

avec la convention $\tau_{k \rightarrow k+1} = 1$. Comme au cours du calcul on ne connaît pas la transmission des segments en aval du segment courant, on est obligé de majorer la luminance aval par celle du corps noir à la température la plus chaude de ces segments: $L_{[T_{\max(k+1,N)}]}^o$. On a donc:

$$L_N^{\text{vraie}} - L_k^{\text{vraie}} < \tau_{k \rightarrow l} L_{[T_{\max(k+1,N)}]}^o, \quad (\text{II-86})$$

Si l'on s'autorise un certain critère d'erreur sur la luminance associé à la saturation, ΔL_{τ_0} , le critère seuil de saturation est donc:

$$\tau_{\text{sat}}^L(k) = \frac{\Delta L_{\tau_0}}{L_{[T_{\max(k+1,N)}]}^o}, \quad (\text{II-87})$$

Nous sommes assurés que ce seuil de saturation ne peut pas diminuer au fur et à mesure de l'avancement du calcul puisqu'à chaque nouveau segment k la température maximale des segments en aval ne peut évidemment pas s'accroître et donc la luminance non plus, mais elle peut diminuer et donc le seuil augmenter. Dans le même temps, la transmission qui continue à être calculée dans les zones spectrales non saturantes diminue à chaque nouveau segment. Donc les intervalles de saturation peuvent s'élargir au fur et à mesure de l'avancement du calcul.

Bilan: Les équations (II-83) et (II-87) fournissent chacune un critère seuil de saturation de la transmission, suivant que l'on considère l'erreur sur la transmission ou l'erreur sur la luminance. En adoptant le minimum des deux critères, on est assuré de respecter les deux erreurs:

$$\tau_{\text{sat}}(k) = \min \tau_{\text{sat}}^{\tau}(k), \tau_{\text{sat}}^L(k), \quad (\text{II-88})$$

Le contrôle est effectué, à la fin du calcul de chaque segment, sur la transmission partielle de la portion de colonne amont. C'est donc à partir du deuxième segment que le critère de saturation est applicable.

II-5-2 ERREURS TOTALES

Nous venons de voir que les critères ($\Delta\tau$ et ΔL) et ($\Delta\tau_0$ et ΔL_{τ_0}) sont convertis dans chaque segment en des critères [$\varepsilon_{RN}(k)$, $\varepsilon_c(k)$, et $\tau_{\text{sat}}(k)$]. De plus, des erreurs sont

introduites par le maillage (ε_m) et le calcul du profil de Voigt avec une tabulation (ε_p). Nous montrons ici comment des majorations des erreurs finales sur τ et L sont déduites de l'ensemble de ces quantités.

a) Erreurs sur la transmission

Dans les régions non saturées, l'erreur totale sur la transmission de la colonne résulte des approximations liées au profil, au maillage, aux raies négligées et aux coupures d'ailes. Notons E l'épaisseur optique totale vraie de la colonne et ΔE_p , ΔE_m , ΔE_{RN} , ΔE_{ailes} , les erreurs absolues sur E résultant de ces approximations. L'erreur totale $\Delta\tau^{tot}$ est alors donnée par:

$$\Delta\tau^{tot} = e^{-E} - e^{-(E+\Delta E_p+\Delta E_m+\Delta E_{RN}+\Delta E_{ailes})}, \quad (II-89)$$

que l'on peut réécrire:

$$\Delta\tau^{tot} = [e^{-E} - e^{-(E+\Delta E_p+\Delta E_m)}] + e^{-(E+\Delta E_p+\Delta E_m)} \times [1 - e^{-(\Delta E_{RN}+\Delta E_{ailes})}], \quad (II-90)$$

On a donc, en majorant le deuxième $e^{-(E+\Delta E_p+\Delta E_m)}$ par e^{-E} :

$$\Delta\tau^{tot} = \Delta\tau_{p+m} + \Delta\tau_{RN+ailes}, \quad (II-91)$$

Les erreurs sur le profil et le maillage étant des erreurs relatives, ce sont les mêmes pour un segment ou pour une colonne. Donc, $\varepsilon_p = \Delta E_p/E$ et $\varepsilon_m = \Delta E_m/E$, et on montre aisément que l'on peut majorer $\Delta\tau_{p+m}$ par:

$$\Delta\tau_{p+m} = (\varepsilon_p + \varepsilon_m) \times (1 - \varepsilon_p - \varepsilon_m)^{[-1+1/(\varepsilon_p+\varepsilon_m)]}, \quad (II-92)$$

Les conséquences des raies négligées et des ailes coupées sont immédiates et majorées par:

$$\Delta\tau_{RN+ailes} = 1 - e^{-\sum_{k=1}^N \varepsilon_{RN}(k) + \varepsilon_c(k)} I_k, \quad (II-93)$$

Dans les régions saturées, l'erreur totale sur la transmission de la colonne s'écrit:

$$\Delta\tau_{sat} = |\tau_{vraie} - \tau_{approchée}|, \quad (II-94)$$

où l'on désigne ici par τ_{vraie} , la transmission "exacte" de la colonne entière, et par $\tau_{approchée}$ la transmission calculée après avoir tronqué le calcul en un segment donné. Le calcul approché

englobe donc les approximations faites dans les régions non saturées, auxquelles il faut ici ajouter la troncature. En désignant par k le dernier segment calculé avant troncature et en se rappelant le critère de saturation $\tau_{\text{sat}}(k)$ défini par (II-88), (II-87) et (II-83), on montre alors qu'une majoration de l'erreur est donnée par:

$$\Delta\tau_{\text{sat}} < \text{Max}\left\{\tau_{\text{sat}}(k), \tau_{\text{sat}}(k)^{1/(1+\varepsilon_p+\varepsilon_m)} - \tau_{\text{sat}}(k)\right\}, \quad (\text{II-95})$$

Il faut en effet distinguer deux cas. Si $\tau_{\text{approchée}} > \tau_{\text{vraie}}$, la majoration par $\tau_{\text{sat}}(k)$ est évidente. Dans le cas inverse, beaucoup moins probable car il ne pourrait être dû qu'aux approximations sur le profil ou sur le maillage (négliger des raies ou couper leurs ailes ne peuvent qu'augmenter la transmission calculée), on montre qu'un majorant est $\tau_{\text{sat}}(k)^{1/(\varepsilon_p+\varepsilon_m)} - \tau_{\text{sat}}(k)$.

b) Erreurs sur la luminance

Dans les régions non saturées, l'erreur sur la luminance s'écrit, avec l'exposant V sur τ pour les grandeurs "vraies" et pas d'exposant pour les grandeurs approchées:

$$\Delta L^{\text{tot}} = L_N^{\text{vraie}} - L_N^{\text{appr}} = \sum_{k=1}^N (1 - \tau_k^V) L_k^o \tau_{k-1 \rightarrow 1}^V - \sum_{k=1}^N (1 - \tau_k) L_k^o \tau_{k-1 \rightarrow 1}, \quad (\text{II-96})$$

On peut montrer que cette erreur s'écrit (avec la convention $L_{N+1}^o = 0$):

$$\Delta L^{\text{tot}} = \sum_{k=1}^N (L_{k+1}^o - L_k^o) \underbrace{(\tau_{k \rightarrow 1}^V - \tau_{k \rightarrow 1})}_{\Delta\tau(k)}, \quad (\text{II-97})$$

$\Delta\tau(k)$ est exprimée par l'équation (II-91), pour les segments 1 à k . On a donc:

$$\Delta L^{\text{tot}} = \sum_{k=1}^N (L_{k+1}^o - L_k^o) [\Delta\tau_{p+m}(k) + \Delta\tau_{\text{RN+ailes}}(k)] = \Delta L_{p+m} + \Delta L_{\text{RN+ailes}}, \quad (\text{II-98})$$

Une expression de $\Delta\tau_{p+m}(k)$ est celle de l'équation (II-92). Dans ces conditions, on a:

$$\Delta L_{p+m} < (\varepsilon_p + \varepsilon_m) \times (1 - \varepsilon_p - \varepsilon_m)^{[-1+1/(\varepsilon_p+\varepsilon_m)]} \times \sum_{k=1}^N |L_{k+1}^o - L_k^o|, \quad (\text{II-99})$$

L'expression de $\Delta\tau_{\text{RN+ailes}}(k)$ est la même que (II-93) en stoppant la sommation au rang k . Sachant que cette erreur est toujours positive et que la fonction de Planck est une fonction croissante de la température, il est alors possible de séparer la somme donnant $\Delta L_{\text{RN+ailes}}$ en une partie positive pour les couples de segment $(k, k+1)$ tels que la température de $k+1$ est supérieure à celle de k , et une partie négative rassemblant les autres couples. On a donc:

$$\Delta L_{\text{RN+ailes}} = \text{Max} \left[\sum_{\Delta L_k^o > 0} (L_{k+1}^o - L_k^o) (1 - e^{-\sum_{i=1}^k [\varepsilon_{\text{RN}}(i) + \varepsilon_c(i)] I_i}) \tau_{k \rightarrow 1}^c, - \sum_{\Delta L_k^o < 0} \dots \right], \quad (\text{II-100})$$

Dans les régions saturées, l'erreur sur la luminance est (k numéro du segment de troncature):

$$\Delta L_{\text{sat}} = L_N^{\text{vraie}} - L_k^{\text{appr}} = \underbrace{(L_k^{\text{vraie}} - L_k^{\text{appr}})}_{\Delta L^{\text{tot}}(k)} + \sum_{k'=k+1}^N (1 - \tau_{k'}^V) L_{k'}^o \tau_{k'-1 \rightarrow 1}^V, \quad (\text{II-101})$$

$\Delta L^{\text{tot}}(k)$ est l'erreur dans les régions non saturées, telle que calculée précédemment (équations (II-98), (II-99), (II-100)) mais en stoppant la sommation au rang k du segment tronqué. On a:

$$\Delta L_{\text{sat}} = \Delta L^{\text{tot}}(k) + \left[\sum_{k'=k+1}^N (1 - \tau_{k'}^V) L_{k'}^o \tau_{k'-1 \rightarrow k+1}^V \right] \times \tau_{k \rightarrow 1}^V, \quad (\text{II-102})$$

Le terme entre crochets est la luminance de la portion de colonne décrite par les segments $k+1$ à N . Ne la connaissant pas, nous la majorons par celle du corps noir à la température maximale: $L_{[T_{\text{max}}(k+1, N)]}^o \cdot \tau_{k \rightarrow 1}^V$ est majorée par $\tau_{\text{sat}}^{1/(1+\varepsilon_p+\varepsilon_m)}(k)$ (équations (II-88) et (II-95)). Ainsi,

$$\Delta L_{\text{sat}} = \Delta L^{\text{tot}}(k) + \tau_{\text{sat}}^{1/(1+\varepsilon_p+\varepsilon_m)}(k) \times L_{[T_{\text{max}}(k+1, N)]}^o, \quad (\text{II-103})$$

c) Choix des erreurs sur le profil et sur le maillage

Nous avons vu que les erreurs sur le profil et le maillage sont des erreurs relatives sur le coefficient d'absorption. Or, celui-ci est dans le meilleur des cas connu à 4% près pour une raie, l'incertitude pouvant facilement atteindre 15 à 20 %, voire plus. Cette approximation provient essentiellement des imprécisions sur les intensités et sur les largeurs des raies des bases de données. Il est donc illusoire de vouloir imposer des erreurs numériques ridiculement faibles devant les 4% des données physiques. Voilà pourquoi nous avons décidé (cf § II-3-1) de construire la table du profil de Voigt avec une erreur $\varepsilon_p=0.3\%$. Quant à l'erreur sur le maillage, elle se présente sous forme d'un paramètre réglable par l'utilisateur. Une valeur nulle

n'a pas de sens numérique car cela entraînerait un maillage de pas nul, donc un nombre infini de points. Une erreur minimale de $\varepsilon_m=0.7\%$ est largement suffisante pour des calculs à haute résolution, l'erreur numérique totale sur le coefficient d'absorption étant donc ainsi au pire de $\varepsilon_p+\varepsilon_m=1\%$, à comparer à l'erreur physique minimale de 4%.

Bien souvent l'approche raie par raie est utilisée non pas pour ses résultats à haute résolution spectrale en tant que tels, mais pour ces mêmes résultats en tant qu'intermédiaires de calcul nécessaires pour être ensuite convolués par une fonction d'appareil abaissant la résolution. On peut passer de 10^3cm^{-1} à une résolution utile de 1cm^{-1} , 5cm^{-1} , voire 25cm^{-1} . Or, la convolution consiste en des calculs d'aires. On peut donc bénéficier, si la fonction d'appareil est bien plus large que la largeur de la raie, des changements de concavité des profils qui font se compenser les erreurs dans les calculs d'aires. De plus, dans un spectre réel on a une superposition de raies; la tendance à la compensation des erreurs positives et négatives est donc encore plus marquée. Ainsi, des tests numériques ont montré qu'une erreur sur le maillage, ε_m , de 20% sur le calcul à haute résolution pouvait n'entraîner qu'une erreur de l'ordre de 1% sur un résultat convolué, à condition cependant que la fonction d'appareil soit large devant les largeurs de raie. On voit donc que l'on peut s'autoriser de "grandes" erreurs (bien au-delà de 1% ou des 4% de précision dans le meilleur des cas sur les données spectroscopiques) si seul le résultat basse résolution importe. Nous suggérons 10 à 20%, ce qui reste de l'ordre de grandeur des précisions spectroscopiques dans les ailes de bande. Enfin, un cas test représentatif d'une configuration de type signature infrarouge (segment chaud vu à travers un segment froid, cf §II-5-4) fut traité. Nous avons fait croître le paramètre ε_m , tous les autres paramètres d'erreur restant fixes. Pour chaque valeur de ε_m nous avons contrôlé l'erreur sur la luminance à la résolution de 5cm^{-1} . Les résultats obtenus sont reportés sur la figure suivante (figure II.27):

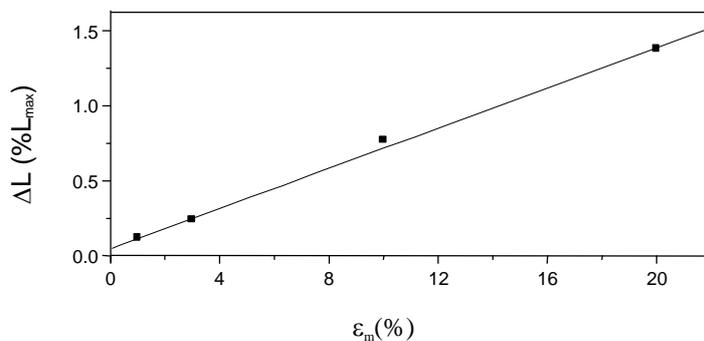


figure II.27: les carrés pleins indiquent l'erreur sur la luminance (en pourcentage de la valeur maximale) d'une colonne de deux segments convoluée sur 5cm^{-1} en fonction de l'erreur relative sur le coefficient d'absorption haute résolution demandée sur un segment. Le calcul de cette erreur est réalisé a posteriori en comparant les résultats sans approximation et avec approximation.

On voit que l'on peut facilement dégrader le paramètre d'erreur ε_m et garder une précision tout à fait acceptable sur la luminance convoluée. Mais il faut bien prendre garde que **les résultats de cette figure** ne sont qu'un exemple lié à des conditions de calculs données, mais **ne constituent en aucun cas un abaque**; toute tentative d'interpolation ou d'extrapolation est à proscrire.

d) Conclusion

Nous venons de répertorier les conséquences de l'application des critères d'erreur sur la transmission et sur la luminance, et d'établir un lien entre l'erreur sur le maillage et la résolution du calcul. Les erreurs totales dues aux critères de tri, pré-tri, coupures d'ailes, saturations sont respectivement majorées par $(\Delta\tau$ et $\Delta\tau_0)$ et par $(\Delta L$ et $\Delta L_{\tau_0})$, critères choisis par l'utilisateur. Quant aux erreurs introduites par le maillage et par le profil, elles peuvent être majorées, mais il est plus cohérent de les comparer aux imprécisions sur les données spectroscopiques ou de les relier au problème de la résolution du résultat. Nous avons vérifié qu'une dégradation relativement forte de la précision du maillage conduit à des erreurs assez faibles sur le résultat convolué.

D'une manière plus générale, tout critère qui a trait à la transmission que ce soit dans le tri des raies, dans la saturation, ou dans le maillage, permet de bien maîtriser la précision du calcul sans gros écart par rapport à l'erreur souhaitée. Par contre, l'implication de la luminance L est plus difficile à majorer finement. Pour le tri des raies nous avons été obligés de supposer que les raies gardées étaient transparentes et de linéariser l'émissivité des segments. Pour la saturation nous ne pouvons que préjuger que la partie de colonne tronquée, qui est inconnue, est un corps noir. Pour le maillage, l'effet sur L n'est pas évaluable finement, mais on joue ici sur l'erreur relative du coefficient d'absorption. La conséquence de la mise en œuvre de critères d'erreurs sur la luminance est donc un durcissement excessif des contraintes en terme de barrières sur le coefficient d'absorption des raies négligées et de seuil en transmission pour la saturation, sachant que pour le maillage on travaille sur le coefficient d'absorption. En conclusion, il est conseillé d'agir plutôt sur la transmission pour fixer les critères d'erreur, en laissant libres ceux intervenant sur la luminance. Les performances du code seront meilleures car il travaillera plus près des limites de précision fixées par l'utilisateur, quitte à vérifier a posteriori sur quelques colonnes que l'erreur engendrée sur la

luminance est acceptable. À ce sujet, le code fournit pour les grandeurs de sortie τ et L les majorations d'erreurs par colonne formulées dans ce paragraphe.

II-5-3 MÉTHODOLOGIE DU CHOIX DES ERREURS

Le choix des critères d'erreurs à imposer au code de calcul est intimement lié à l'utilisation du résultat du raie par raie. C'est donc à l'utilisateur de déterminer ces critères. Nous proposons néanmoins quelques pistes de réflexion générale ne pouvant évidemment pas se substituer à l'application du code dans un but précis, mais servant à sensibiliser tout utilisateur potentiel au problème des critères d'erreurs.

Un choix de critère d'erreur dépend de la grandeur G calculée, du but du calcul, et de la façon dont le résultat est "regardé". Supposons G choisie et intéressons-nous à sa représentation, par exemple graphique. L'erreur affectée à G sera alors fonction du pouvoir de séparation de l'œil. Celui-ci peut se présenter par exemple sous forme de distinction de deux points ou de distinction de deux couleurs. Supposons que G soit symbolisée par une courbe, par exemple une grandeur spectrale comme la transmission ou la luminance. Appelons δs la distance minimale de séparation de deux points par l'œil. L'erreur associée à G dépendra alors de la nature de l'échelle de sa représentation et de son amplitude. Soit l'amplitude Δe de visualisation de G , dans la même unité que δs ; Δe est la taille de l'image qui représente G sur un écran par exemple. Δe embrasse l'amplitude de variation de G : G_{\min} , G_{\max} . Le pouvoir de séparation de l'œil par rapport à G sera différent suivant l'échelle de représentation de G . En supposant pour simplifier que δs est l'écart vertical sur la courbe, on a:

$$\begin{aligned} \text{en échelle linéaire:} \quad & dG = \frac{\delta s}{\Delta e} (G_{\max} - G_{\min}) \\ \text{en échelle logarithmique:} \quad & dG = \left[\frac{\delta s}{\Delta e} (\log G_{\max} - \log G_{\min}) \right] G \end{aligned} \quad (\text{II-104})$$

Un pouvoir de séparation δs fixé, donc constant, se traduit par une sensibilité minimale à une erreur constante, absolue en échelle linéaire, relative en échelle logarithmique. La barrière d'erreur à imposer à G devra donc suivre en conséquence (cf figure II.28). On peut de façon analogue traiter une représentation de G avec des dégradés de couleurs, en supposant l'œil sensible à un certain écart δs en couleurs, la palette s'étendant sur Δe .

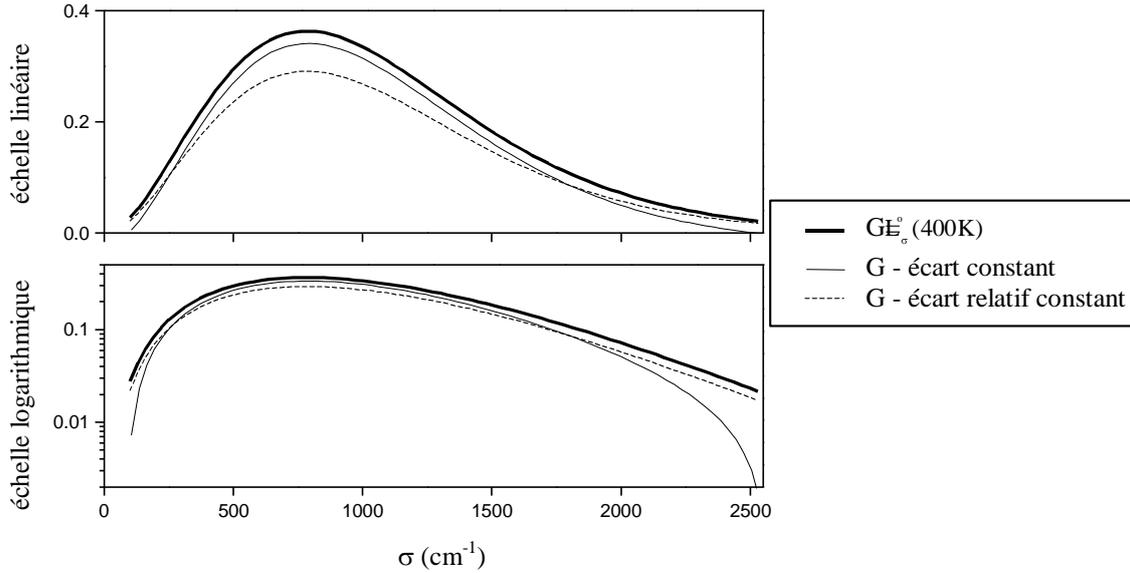


figure II.28: représentation d'une grandeur, ici la fonction de Planck, et des grandeurs décalées:
 -d'une erreur absolue constante: bien visualisée par l'œil en échelle linéaire sur la figure du haut
 -d'une erreur relative constante: bien visualisée par l'œil en échelle logarithmique sur la figure du bas.

Si on s'intéresse maintenant à une grandeur intégrée (un flux par exemple) que l'on veut déterminer à une précision relative p , on écrit, en notant G_V la grandeur "vraie" et G_F la grandeur approchée (F pour "faux"):

$$\left| \int_{\Delta\sigma} G_V d\sigma - \int_{\Delta\sigma} G_F d\sigma \right| < p \int_{\Delta\sigma} G_V d\sigma, \tag{II-105}$$

Or, comme on a:

$$\left| \int_{\Delta\sigma} G_V d\sigma - \int_{\Delta\sigma} G_F d\sigma \right| = \left| \int_{\Delta\sigma} (G_V - G_F) d\sigma \right| \leq \int_{\Delta\sigma} |G_V - G_F| d\sigma, \tag{II-106}$$

il suffit alors d'assurer:

$$\forall \sigma, |G_V - G_F| < \Delta G, \tag{II-107}$$

en définissant l'erreur ΔG avec (II-105):

$$\Delta G = \frac{p}{\Delta\sigma} \int_{\Delta\sigma} G d\sigma, \tag{II-108}$$

Dans les formules (II-104) et (II-108) G_{max} , G_{min} , G ne sont bien sûr pas connues à l'avance par le code raie par raie et désignent en toute rigueur les grandeurs non approximées. On propose d'approcher ces grandeurs par des méthodes plus rapides comme des modèles de

bande ou des ckfg, moins précises certes, mais c'est l'ordre de grandeur des valeurs qui importe. D'autre part, l'appréciation du gain en temps du raie par raie est significative lorsqu'on mène un calcul multi-colonnes, pour la description d'un jet de propulseur par exemple (ou encore pour balayer un grand angle solide atmosphérique). On peut alors, à partir d'une cartographie du jet, distinguer des catégories de zones grossièrement semblables. Nous proposons ensuite de traiter chaque zone comme suit: calculer avec le raie par raie une colonne, toutes les barrières d'erreur étant mises à zéro, et d'en déduire une erreur ΔG à appliquer à toutes les autres colonnes, le nombre de ces colonnes devant être bien évidemment grand devant 1.

Enfin, si les calculs servent de comparaisons avec des résultats expérimentaux, la barrière d'erreur est toute trouvée: c'est une fraction du bruit associé aux spectres mesurés.

Conclusion: Nous venons de présenter quelques pistes de réflexion sur la manière d'aborder la question du choix de l'erreur à adopter. Cette revue de cas n'est absolument pas exhaustive. Seul l'utilisateur peut décider en fonction de l'application du code à son problème.

II-5-4 BILAN; ILLUSTRATION CHIFFRÉE DE L'INFLUENCE DES CRITERES D'ERREUR; CONCLUSION

Nous avons montré dans ce chapitre qu'il est possible de relier les critères d'erreur sur les résultats intéressant un utilisateur du code, transmission et luminance, aux critères seuils directement appliqués de façon interne par les techniques d'optimisation de la méthode de calcul. Nous avons vu aussi que les critères d'erreur sur la transmission sont les plus aisés à contrôler, ceux impliquant la luminance entraînant des majorations plus larges; d'où notre recommandation de raisonner plutôt sur la transmission, tout en contrôlant la luminance a posteriori. Pour le choix de l'erreur sur le maillage, nous avons mené une comparaison avec la précision des données spectroscopiques. Nous en avons déduit qu'une certaine souplesse était possible. Cette flexibilité fut étendue par l'argument suivant: très souvent seule la précision sur le résultat basse résolution importe, sachant que celle-ci tolère une précision bien plus faible sur le spectre haute résolution dont elle est issue par convolution. La réflexion générale menée sur le choix des erreurs a abouti sur le point important suivant: un critère d'erreur est choisi en fonction de la grandeur que l'on veut appréhender et de la manière dont on la représente. Finalement l'utilisateur dispose de "manettes de réglages" de la précision de son

résultat. De la bonne utilisation de ces possibilités de commande dépendent très fortement les performances du code. Rappelons les critères réglables:

- Pour le tri des raies:
 - $\Delta\tau$: erreur absolue sur la transmission
 - ΔL : erreur absolue sur la luminance
 - f_{PT}^{-1} : fraction de l'erreur appliquée au coefficient d'absorption, attribuée au pré-tri.
- Pour la saturation:
 - $\Delta\tau_0$: erreur absolue sur la transmission
 - ΔL_{τ_0} : erreur absolue sur la luminance
- Pour le maillage²:
 - ε_m : erreur relative sur le coefficient d'absorption.

Nous avons vu que toutes ces erreurs sont potentiellement additives. Néanmoins, si l'on raisonne sur la transmission, la figure qualitative suivante (figure II.29) schématise de façon très synthétique le fait que les erreurs n'influent pas avec la même importance suivant la valeur de la transmission. On peut en effet écrire les erreurs sur la transmission en fonction de celle-ci, les équations (II-92) et (II-93) constituant des majorations:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta\tau_{p+m}(\tau) = \tau \tau^{(-\varepsilon_p - \varepsilon_m)} - 1 \\ \Delta\tau_{RN+ailes}(\tau) = \tau \left[1 - e^{-\sum_{k=1}^N \varepsilon_{RN}(k) + \varepsilon_c(k)} I_k \right], \\ \Delta\tau_{sat}(\tau) = cte \end{array} \right. \quad (II-109)$$

Aux faibles transmissions c'est l'erreur due à la saturation qui joue. Aux fortes transmissions, c'est l'erreur conséquence des raies négligées (raies de faible absorption) qui influe. Dans les régions intermédiaires l'erreur due au profil et au maillage peut être la plus importante. On voit donc qu'en pratique on n'atteint jamais la somme des trois erreurs telles que nous les avons majorées. Un raisonnement analogue en luminance n'est pas possible car toutes les majorations sont des nombres constants.

¹ Nous rappelons que la fraction f_c attribuée aux coupures d'ailes est fixée à 1/10: cf équation (II-65), § II-5-1.

² Nous rappelons que la table du profil de Voigt est fabriquée pour une erreur sur le profil $\varepsilon_p = 0.3\%$ fixe.

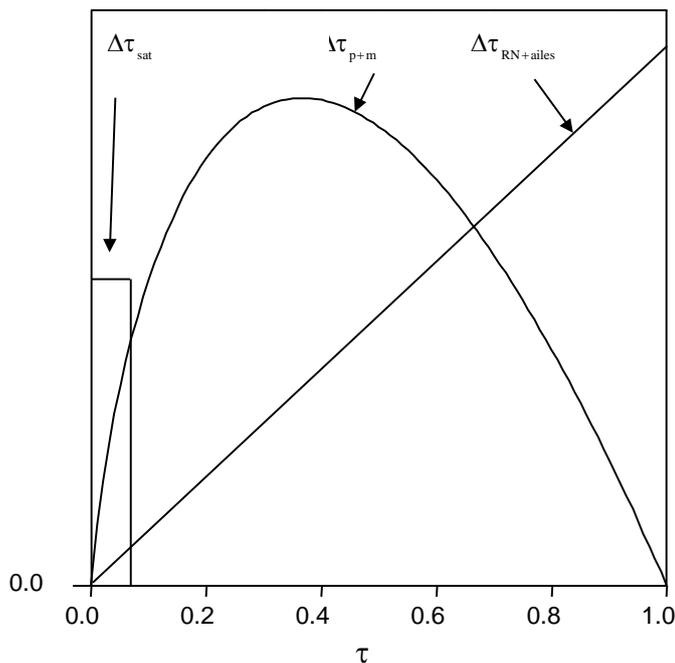


figure II.29: représentation des erreurs sur la transmission, en fonction de celle-ci, consécutives aux trois approximations: raies négligées + ailes, saturation, profil + maillage. L'échelle relative des trois courbes n'est pas respectée. Seules les dynamiques comptent.

Pour conclure, nous donnons des résultats chiffrés sur des tests menés à SNECMA. Ces tests furent possibles une fois que nous avons installé le code dans sa version programme principal. L'objectif est double: il s'agit de montrer, d'une part la forte sensibilité du temps CPU à la variation des critères listés ci-dessus, d'autre part l'écart important entre les critères d'erreurs demandés à haute résolution et les erreurs effectivement commises dans le calcul basse résolution. Le cas test est une représentation très schématique d'une configuration de type signature infrarouge: une couche chaude vue à travers une couche atmosphérique, comme l'illustre la figure suivante (figure II.30):

couche chaude	couche froide
$\ell = 0.5\text{m}$	$\ell = 500\text{m}$
$T = 900\text{K}$	$T = 286\text{K}$
$P = 2\text{atm}$	$P = 1\text{atm}$
$x_{\text{H}_2\text{O}} = x_{\text{CO}_2} = 3.10^{-2}$	$x_{\text{H}_2\text{O}} = 5.10^{-3}; x_{\text{CO}_2} = 3,5.10^{-4}$
complément: N_2	complément: N_2

figure II.30: cas test représentant de façon très simplifiée une situation de type signature infrarouge. La zone spectrale étudiée fut $[1800\text{ cm}^{-1}, 3000\text{ cm}^{-1}]$. La partie intéressante du spectre, c'est-à-dire où les gaz absorbent, est représentée au paragraphe II-3-5 traitant de la saturation, sur la figure II.19.

L'ordinateur employé fut un Origin 2000 de Silicon Graphics (SGI), avec l'option de compilation optimisant le temps de calcul (-O3). Notre démarche consistait à mettre à zéro

tous les critères d'erreur sauf un pour le faire varier, afin d'évaluer la sensibilité aux critères d'entrée, et des erreurs effectives sur la transmission et la luminance, et du temps CPU. Un nombre conséquent de résultats fut obtenu. Nous n'en présentons que quelques uns sur le tableau II-4 qui réalise une synthèse et permet une conclusion du point de vue de l'intérêt pratique de l'utilisateur.

	ε_m	$\Delta\tau$	$\Delta\tau_0$	ΔL	ΔL_{τ_0}	f_{PT}	$\Delta\tau_{\text{effectif}}$	$\Delta L_{\text{effectif}}$	CPU
Référence	0.3	0	0	0	0	0	0	0	1
optimisation1	20	100	100	4	4	10	1.2	1.2	1/16
optimisation2	20	100	100	36	4	90	1.3	1.2	1/26

tableau II-4: temps CPU normalisés par le temps de la configuration "Référence", enregistrés avec divers critères d'entrée. L'erreur sur le maillage (ε_m) est en pour cent; l'erreur sur la transmission est exprimée en pourcentage de 1. La luminance est exprimée en pourcentage de la valeur crête calculée sans approximation. Les erreurs effectives sont celles calculées a posteriori par rapport au résultat de référence convolué avec une fonction d'appareil rectangle de demi-largeur 5cm^{-1} .

Insistons bien sur le fait que les temps CPU mesurés (avec la fonction Fortran dtime) sont bien ceux du calcul de la colonne; n'ont donc été comptabilisés ni les temps de chargement de tables (de Voigt, de courbes de sauts de maillages, etc.), ni surtout celui de la lecture de la base de données¹, étant donné que toutes ces étapes ne sont réalisées qu'une fois en amont de tout calcul de colonne ou d'ensemble de colonnes. La référence est le calcul sans aucune approximation, hormis celle sur le maillage, qui est ici quelque peu inférieure à la valeur minimale conseillée (0.3 % contre 0.7 %, cf §II-5-2-c). Deux versions d'optimisation en temps CPU furent proposées lesquelles libèrent les critères sur la transmission. La dernière colonne est éloquent: **la sensibilité du temps de calcul aux critères se chiffre en facteurs multiplicatifs**. Les deux colonnes précédentes montrent que **les erreurs effectivement commises sur le calcul basse résolution sont bien inférieures aux erreurs demandées en entrée du code pour la haute résolution, ce qui laisse une grande marge de choix**. Nous pouvons formuler quelques remarques locales. C'est le facteur pré-tri qui permet l'accélération entre les lignes 2 et 3. On peut le justifier comme suit. La figure II.25 (§ II-4-2) qui donne une comparaison de l'efficacité du tri de raies de CO_2 vis-à-vis de celle du pré-tri montre que les deux courbes peuvent assez bien se superposer en appliquant un facteur multiplicatif adéquat (de l'ordre de 10) au critère d'erreur sur le coefficient d'absorption (cf la relation de

¹ La table lue par le programme est écrite en binaire pour accélérer le processus de lecture.

proportionnalité (II-62)). Ainsi, on néglige le même nombre de raies, que l'on utilise, ou bien uniquement l'outil du tri fin avec une erreur donnée sur le coefficient d'absorption, ou bien seulement le pré-tri avec l'erreur précédente multipliée par 10. Or, on rappelle que la barrière d'erreur ε_{RN}^L à appliquer au coefficient d'absorption à l'issue d'une majoration de l'erreur sur la luminance est proportionnelle au critère ΔL sur la luminance (cf équation (II-80)). Comparons maintenant la ligne "optimisation2" à celle "optimisation1". Le critère ΔL a été multiplié par 10 environ (36 % contre 4 %), et dans le même temps on est passé d'une part de pré-tri de 10 %, que l'on peut assimiler en première approximation à 0%, à 90%, soit presque 100%. On a donc, d'après ce que nous avons constaté précédemment, grossièrement le même critère d'erreur dans les deux cas. Ceci est confirmé par un nombre de raies négligés du même ordre de grandeur dans les deux cas; nous l'avons vérifié par ailleurs. Le gain en temps (26 contre 16) provient donc bien du fait que le nombre de raies pré-triées est bien plus élevé dans le deuxième cas: on dénombre un facteur 3. On retiendra donc le **rôle accélérateur du pré-tri, qu'il faut alors favoriser, à erreur identique sur le tri des raies**. Par ailleurs, l'influence des pas de maillage sur le temps est immédiate car elle se chiffre en variation du nombre de points de projection d'une raie, et nous avons vu que ce nombre évolue comme la racine carrée de ε_m (§ II-3-2). Enfin, nous insistons sur le fait que toute discussion sur l'efficacité du pré-tri et du tri est fortement dépendante de la banque de données considérée et des conditions thermophysiques. En effet, les gains obtenus précédemment n'auraient pas été aussi importants avec la base HITRAN, puisque le nombre de raies à négliger aurait été beaucoup plus restreint. Dans un milieu optiquement mince, il est très facile de négliger beaucoup de raies. On est donc d'autant plus gagnant que la base de données est volumineuse. À l'opposé, plus le milieu est épais, moins l'outil de tri des raies est utile. Donc, la discussion précédente sur les gains ne sert qu'à titre indicatif dans des conditions schématisant grossièrement une application signature, mais ne saurait être transposable à d'autres conditions. Nous recommandons cependant, outre la limite de 0.7 % pour l'erreur ε_m , une limite inférieure toujours faible ou très faible, mais jamais nulle, pour les erreurs entraînant des raies négligées, vu que l'on peut, en augmentant les critères d'erreurs, rapidement éliminer beaucoup de raies d'intensités très faibles. Encore une fois, un chiffre est très difficile à donner, puisque cela dépend des conditions. Seul un utilisateur peut être à même de décider, avec des tests sur quelques colonnes, d'un critère de précision minimal.

Le bilan pratique que l'on peut tirer de ces études est qu'il n'est pas possible de donner des chiffres clefs par avance à l'utilisateur car le cas de deux segments étudié ici ne sert qu'à titre illustratif, la réalité d'une colonne représentant par exemple la visée d'un jet d'aéronef étant plus complexe. Le choix des critères doit donc être issu d'une étude approfondie du problème auquel l'utilisateur veut appliquer le code, en gardant à l'esprit les idées fondamentales que l'on rappelle: **pour un résultat dégradé basse résolution, l'erreur effective est bien moindre que celle demandée dans les critères d'entrée; on a donc intérêt à augmenter autant que possible ces critères car le temps CPU est lui par contre extrêmement sensible à leurs variations. Le contrôle des erreurs effectives (qui sont de toutes façons toujours inférieures à celles demandées en entrées) peut se faire sur des colonnes constituant des échantillons représentatifs d'un jet.**

II-6. MISE EN ŒUVRE PRATIQUE DU CODE RAIE PAR RAIE

Nous présentons ici, à l'usage d'un utilisateur du code raie par raie, des aspects pratiques liés à l'organisation du programme et à l'utilisation des ressources de la programmation informatique moderne. Le code fut écrit avec le langage Fortran 90. Celui-ci offre un nombre important de nouvelles fonctionnalités par rapport à l'ancienne version Fortran 77. Bon nombre d'entre elles furent utilisées pour la conception et surtout l'organisation du code. Les apports fondamentaux qui nous ont servis furent les possibilités de construction de modules et d'allocation dynamique de mémoire. Les autres nouveautés intéressantes employées furent la notion de pointeurs et des fonctions intrinsèques permettant la manipulation globale des éléments d'un tableau.

Le paragraphe II-6-1 présente l'architecture du code dont la conception fut facilitée par la création de modules regroupant des procédures ou des données identifiées par une thématique commune. De plus, l'organisation du code se conforme à une optique facilitant son intégration dans de plus grosses structures, en particulier en vue d'un modèle de programmation par échange de messages (parallélisation). Ainsi, même s'il se présente sous forme de programme

principal, son découpage modulaire ainsi que l'encapsulation de données ou de procédures améliorent la fiabilité du programme. Le paragraphe II-6-2 présente la manière dont nous avons utilisé les nouvelles possibilités de Fortran 90 pour gérer de façon rationnelle la mémoire demandée par le code.

II-6-1 ARCHITECTURE DU CODE

a) Organigramme simplifié du code

Le programme raie par raie calcule la transmission et la luminance spectrales d'une colonne de gaz inhomogène discrétisée en segments homogènes. Il a besoin pour cela de données d'entrées qui peuvent être regroupées en deux catégories: celles qui sont indépendantes de la colonne traitée et celles propres à la colonne. L'organisation du code se décompose donc en deux parties successives, la lecture de données et l'initialisation de grandeurs communes à toutes les colonnes si plusieurs devaient être traitées en parallèle, puis une démarche analogue pour ce qui concerne les données propres à une colonne. Ce n'est qu'ensuite que le calcul à proprement parler des différents segments par l'approche raie par raie est effectué. Une convolution du résultat haute résolution est ensuite proposée. La figure II.31 donne un organigramme du code, sachant que celui-ci ne traite qu'une colonne, mais qu'il peut très facilement être parallélisé en répartissant les colonnes sur différents processeurs. Le post-traitement des colonnes est à assurer par l'utilisateur, comme par exemple l'intégration spatiale dans un angle solide de la luminance pour avoir le flux. L'organigramme du cœur du code qui est le calcul raie par raie de la colonne est décrit sur la figure II.32. Les différentes techniques d'optimisation sont mentionnées.

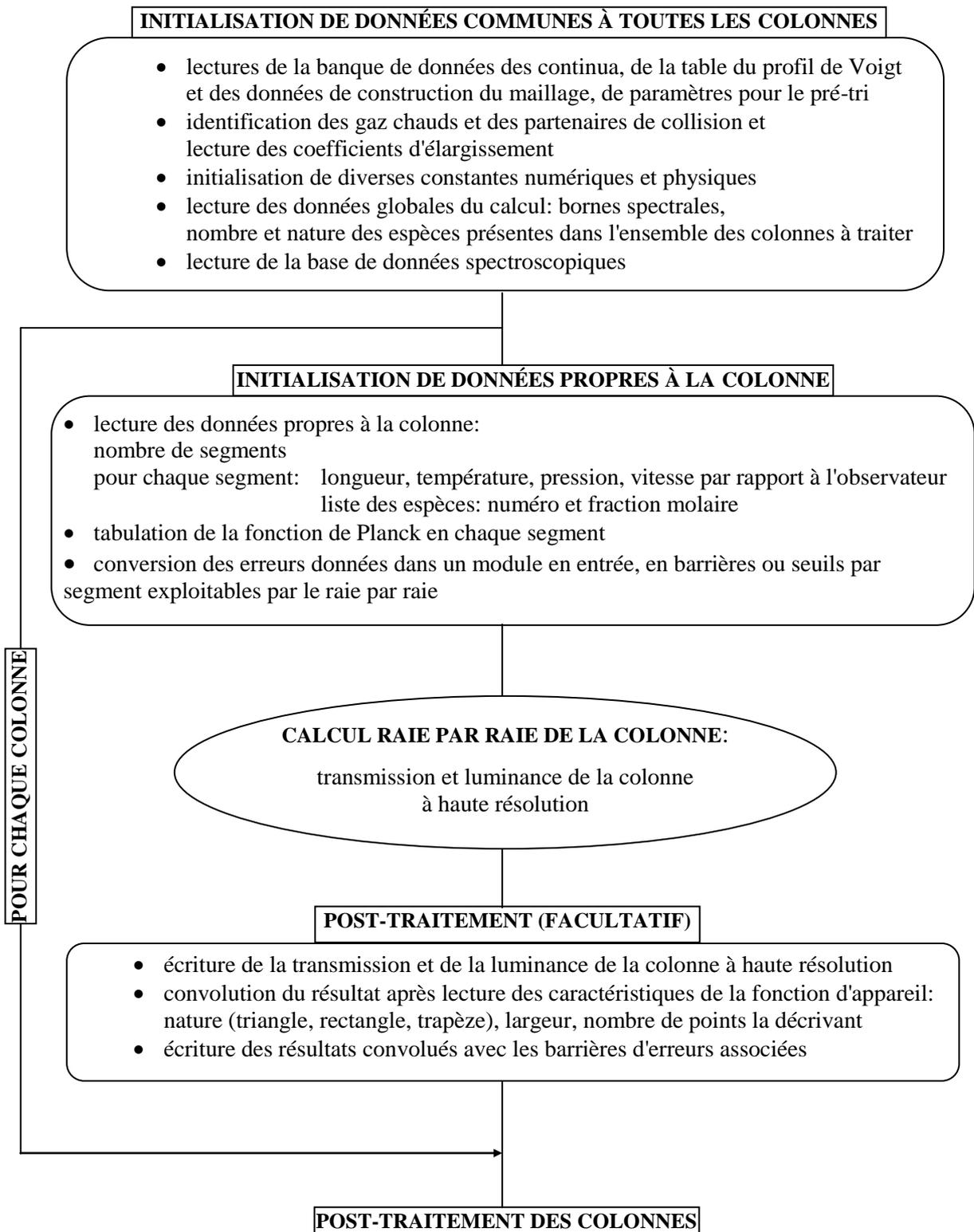


figure II.31: organigramme du code dans une optique de parallélisation suivant les colonnes calculées.

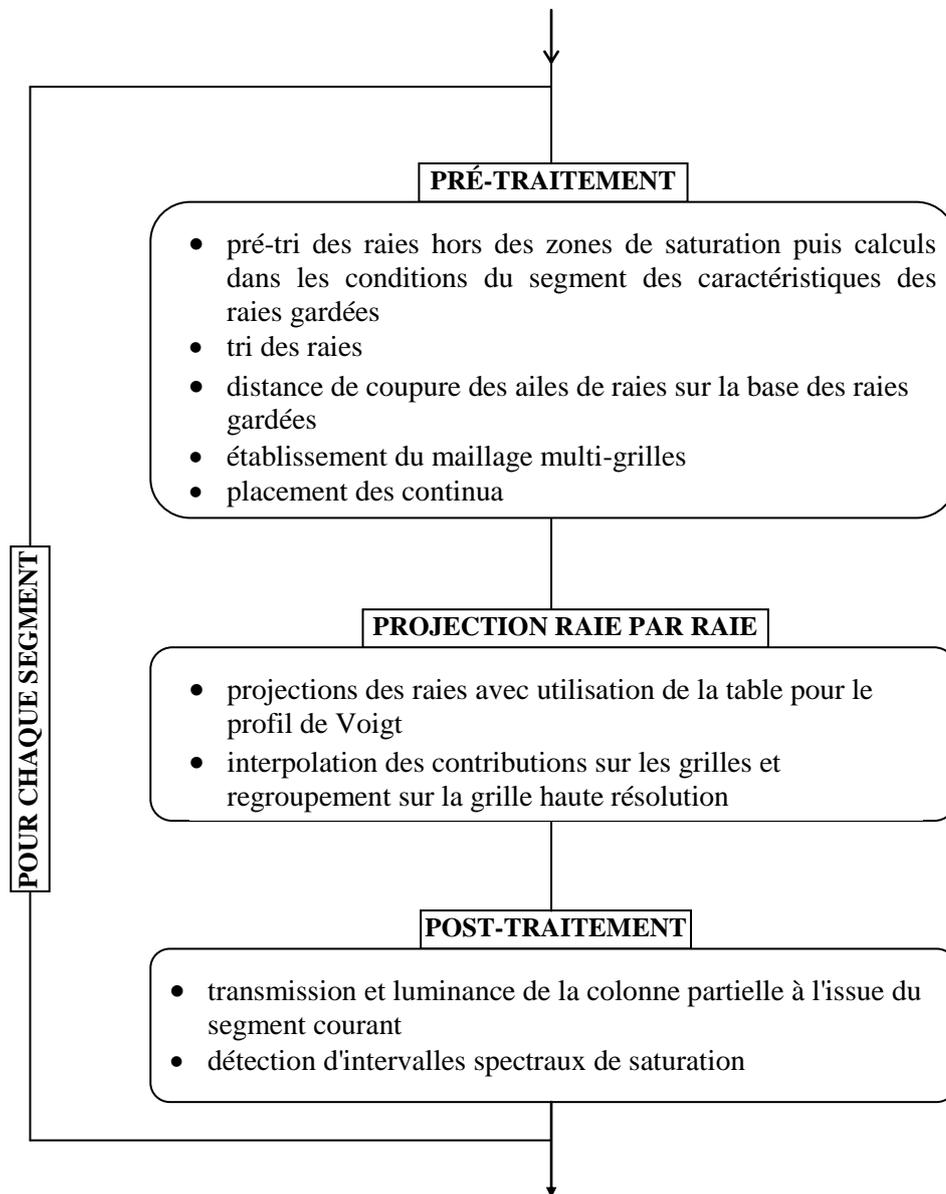
CALCUL RAIE PAR RAIE DE LA TRANSMISSION ET DE LA LUMINANCE D'UNE COLONNE:

figure II.32: organigramme du cœur du programme: le calcul raie par raie de la transmission et de la luminance d'une colonne à haute résolution.

b) Entrées du code

D'un point de vue pratique, un utilisateur du code dans sa version programme principal doit fournir des données dans trois fichiers distincts:

- un fichier de données communes aux colonnes:
 - bornes de l'intervalle haute résolution [$\sigma_{1HR}, \sigma_{2HR}$] en cm^{-1}
 - nombre de molécules présentes dans l'ensemble des colonnes (une colonne ici)
 - liste des espèces avec leur numérotation selon HITRAN

- un fichier de données décrivant une colonne:
 - nombre de segments de la colonne
 - description de chaque segment:
 - longueur (m), température (K), pression (atm), vitesse du gaz par rapport à l'observateur, dans le sens émetteur → observateur (m.s^{-1})¹.
 - fractions molaires des espèces déclarées dans le fichier de données communes, identifiées par leur numéro HITRAN.

- un fichier de données pour la convolution:
 - bornes de l'intervalle basse résolution [$\sigma_{1BR}, \sigma_{2BR}$] en cm^{-1} . Il faut prendre garde à ce que ces bornes soient encadrées par celles de l'intervalle haute résolution [$\sigma_{1HR}, \sigma_{2HR}$], avec un écart égal à au moins une demi-largeur de fonction d'appareil pour que le calcul de convolution puisse se faire.
 - demi-largeur de la fonction d'appareil à sa base (cm^{-1})
 - choix du type de fonction d'appareil (1:triangle, 2:rectangle, 3:trapèze)
 - demi-largeur petite base pour le trapèze (cm^{-1})
 - nombre de points de convolution par demi-largeur de fonction d'appareil.

La fourniture des erreurs par l'utilisateur se fait dans un module spécifique dédié à ce sujet. Les critères d'erreurs ont été résumés dans la conclusion du chapitre II-5 (§II-5-4). Nous signalons que les erreurs sur la luminance se présentent sous forme de fonctions du nombre d'onde.

¹ Cela permet de prendre en compte l'effet du décalage Doppler des raies d'émission d'un jet gazeux chaud par rapport aux raies d'absorption atmosphériques. Il a été montré [PIER,97] que cet effet peut être appréciable pour des vitesses de jets élevées (missiles, futurs avions hypersoniques).

c) Sorties du code

Un module indépendant regroupe les résultats haute résolution du calcul à l'issue du calcul d'une colonne. Le premier résultat est la grille d'échantillonnage des spectres en cm^{-1} . Le pas de discrétisation optimal est recalculé dans chaque segment et le programme adopte le pas le plus petit entre celui imposé par le segment courant et celui issu de la colonne partielle constituée par les segments amonts¹. La grille haute résolution de la colonne est donc la plus petite des grilles optimales. Les deux autres résultats sont la transmission spectrale de la colonne et la luminance spectrale de la colonne dans le sens émetteur-observateur en $\text{W}/(\text{m}^2 \cdot \text{str})/\text{cm}^{-1}$. Ces résultats à haute résolution sont écrits dans un fichier.

Les majorations des erreurs réévaluées comme décrit dans le chapitre II-5-2 sont calculées sur la grille la plus fine parmi celles qui tabulent la fonction de Planck sur chaque segment. Nous les rappelons; il s'agit des erreurs induites par le tri des raies et les ailes coupées ($\Delta\tau_{\text{RN+ailes}}$, $\Delta L_{\text{RN+ailes}}$), par les approximations sur le profil et le maillage ($\Delta\tau_{\text{p+m}}$, $\Delta L_{\text{p+m}}$), par la saturation ($\Delta\tau_{\text{sat}}$, ΔL_{sat}). Une subroutine interpole leurs valeurs sur la grille basse résolution et les écrit en regard des résultats de transmission et luminance convolués.

II-6-2 RATIONNALISATION DE L'UTILISATION DE LA MÉMOIRE

a) Présentation du problème

Le premier apport essentiel de Fortran 90 qui a été utilisé est la possibilité de construire des modules. Ceci nous a permis de bien gérer le découpage du code pour qu'il puisse être facilement intégré dans de plus gros logiciels, notamment en vue d'une parallélisation suivant les colonnes. Cela a été abordé précédemment.

Nous allons ici montrer l'intérêt de l'utilisation de l'allocation dynamique de mémoire. Cette fonctionnalité consiste à pouvoir déclarer des tableaux sans leur assigner de taille sachant qu'au cours de l'exécution du programme on pourra leur allouer de la mémoire selon les besoins dictés par le calcul (d'où l'appellation "dynamique"). Il est aussi possible de libérer dynamiquement la mémoire des tableaux. Une première justification d'ordre général de l'intérêt de la mémoire variable est la suivante. La méthode raie par raie n'est qu'une approche de calcul de spectre. On peut envisager un code de calcul amont qui propose plusieurs

¹ Nous rappelons que le calcul se fait dans le sens observateur \rightarrow émetteur, mais que la luminance calculée est bien celle qui caractérise la propagation du rayonnement dans le sens émetteur \rightarrow observateur.

méthodes pour calculer la même grandeur. Citons comme exemple le calcul d'un jet d'aéronef qui peut être mené, outre la méthode raie par raie, par des modèles de bande ou des modèles ck. Tous les codes numériques sont alors écrits dans le même logiciel général. Il vaut donc mieux que chaque méthode soit accompagnée de tableaux à mémoire dynamique de sorte que seuls ceux de la méthode sollicitée pour un calcul donné soient alloués. Dans ce qui suit nous présentons d'autres justifications fondées sur le point de vue numérique de l'approche raie par raie.

b) Gestion des variables grandes consommatrices de mémoire

Deux grandes catégories de variables consomment l'essentiel de la mémoire associée au code. Il s'agit d'abord des données décrivant les propriétés des raies. Les tailles des tableaux associés sont dimensionnées par le nombre de raies lues dans les bases de données. Ce nombre dépend du nombre d'espèces prises en compte et de leur nature, la quantité de raies associées étant fortement variable d'une molécule à l'autre (~ 4500 pour CO dans HITRAN contre 1.2×10^6 pour H₂O dans HITEMP). Cette dépendance s'exprime aussi vis-à-vis de l'intervalle spectral, par sa largeur bien sûr, mais aussi par sa position, suivant que l'on se situe dans un centre de bande ou dans une zone transparente pour une molécule donnée. On voit ainsi qu'il est très difficile de dimensionner a priori des tableaux liés au nombre de raies lues, sauf un surdimensionnement qui risque d'être pénalisant en terme de mémoire. On pourrait aussi envisager un ajustement "manuel" par l'utilisateur, mais ce procédé particulièrement peu pratique entraîne une perte d'efficacité donc de rentabilité du code. L'avantage d'une allocation dynamique de mémoire est ici manifeste.

L'autre grande catégorie de variables gourmandes en mémoire est celle associée aux données décrivant les spectres, dimensionnées par le maillage. La largeur de l'intervalle de calcul peut être importante, et nous avons vu au paragraphe II-3-3 traitant du maillage, que le pas le plus fin était imposé par la raie exigeant le pas de discrétisation le plus petit. Or, les caractéristiques des profils des raies sont très fortement dépendantes des conditions thermophysiques du milieu. De plus la nature de la molécule entre en jeu. L'eau a des raies d'absorption extrêmement fines avec une forte disparité. On relève ainsi un facteur 18 entre le coefficient d'élargissement le plus large et le coefficient le plus fin. Il résulte de ces dépendances multiples que l'on a une grille de maillage fin à recalculer pour chaque segment de colonne. La variabilité des pas de maillage peut être forte si la colonne traverse des couches atmosphériques et des couches chaudes comme le panache d'un jet, car les

changements de conditions thermophysiques sont importants. Il en va de même pour un trajet purement atmosphérique mais dans une direction verticale suffisamment longue pour inclure les changements des propriétés de l'atmosphère avec l'altitude. Il est donc très difficile de prévoir une dimension en nombre de points de maillage, sauf une majoration excessive et superfétatoire pour une partie des colonnes traitées. Ici encore une intervention "manuelle" au cas par cas par l'utilisateur est à exclure. L'intérêt d'un dimensionnement dynamique et adapté aux conditions est donc indubitable. Cet intérêt est encore mieux perçu dans le cas où le code est utilisé pour traiter automatiquement un grand nombre de colonnes dans des conditions très variables. Cette variabilité se rencontre en signature infrarouge où l'on peut distinguer les trajets purement atmosphériques de ceux croisant un jet d'aéronef car alors des segments chauds et des segments froids composent une même colonne. De plus un jet en soi n'est pas homogène, isobare, isotherme, ce qui différencie fortement les colonnes entre elles. On voit ainsi que la rationalisation de l'utilisation de la mémoire est importante. Signalons aussi que les maillages sont fabriqués à partir des raies qui seront effectivement calculées dans le segment courant. Sont exclues les raies des zones de saturation, les raies rejetées par le pré-tri et le tri fin, ainsi que les parties tronquées des ailes de raies. De plus, les raies centrées hors des bords de l'intervalle spectral (raies de bords) ne participent à l'élaboration du maillage que par leurs parties d'ailes qui sont effectivement incluses dans l'intervalle de calcul. Leurs parties centrales, qui n'interviennent pas dans le calcul, n'imposent pas leur saut minimum pour la construction du maillage. On est donc assuré que le pas minimum est suffisant et nécessaire en tout point (au moins une raie l'utilisera). Le dimensionnement des tableaux correspond donc exactement à la place mémoire nécessaire pour le calcul.

c) Gestion des variables consommatrices internes à un segment

Nous avons évoqué la possibilité par Fortran 90 de libérer dynamiquement la mémoire des tableaux. Cette potentialité fut utilisée dans l'élaboration du code. Un certain nombre de variables grandes consommatrices sont nécessaires pour des calculs internes aux segments. Parmi elles nous citons les plus représentatives: le coefficient d'absorption et la transmission du segment, le jeu de grilles de maillage adapté au segment, la grille des intervalles de contrôle pour le tri des raies. Les tableaux qui les décrivent sont alloués dans le segment courant dès qu'ils sont utiles puis libérés dès qu'ils ne servent plus. L'espace mémoire est donc ajusté aux besoins des conditions locales. De plus le fait que chaque tableau ne soit alloué qu'au moment où le calcul l'utilise permet de minimiser la consommation mémoire en

ce sens que, lors du traitement d'un segment, deux tableaux servant de façon disjointe dans deux phases distinctes du calcul seront tour à tour alloués puis libérés. Ainsi la mémoire consommée est toujours inférieure à celle qui serait demandée si tous les tableaux étaient alloués en même temps. Citons par exemple la phase de tri des raies qui a lieu avant l'établissement du maillage. Celle-ci requiert un certain nombre de tableaux où sont rangées entre autres les barrières d'erreurs sur le coefficient d'absorption des raies, ainsi que les valeurs aux centres des raies. Une fois le tri effectué, ces grandeurs qui changent d'un segment à un autre deviennent inutiles. Les tableaux correspondants sont alors libérés. Ce n'est qu'ensuite que de la mémoire est réservée pour le maillage et le coefficient d'absorption du segment courant. On a ainsi économisé de la mémoire.

Dans ce cadre de la gestion des variables internes à un segment citons un autre apport intéressant de Fortran 90: les pointeurs. Leur utilisation fut limitée aux variables décrivant les propriétés des raies pour un segment courant, sachant que les propriétés associées à la base de données sont mémorisées une fois pour toutes les colonnes. L'intérêt est de limiter la mémoire de ces variables locales au nombre de raies gardées dans le segment. En effet, à l'issue du pré-tri les variables globales associées aux raies conservées sont rangées dans ces pointeurs afin d'avoir des vecteurs consécutifs associés à toutes les raies gardées et à elles seules uniquement. À l'issue du tri fin où le nombre de raies éliminées par rapport au nombre de raies lues dans la base de données peut être grand (98 ou 99 % des raies lues dans les bases de données chaudes, pour des segments atmosphériques), ces pointeurs sont réduits par une fonction intrinsèque de Fortran 90 dans une nouvelle zone mémoire de taille égale au nombre de raies gardées et sur laquelle ils peuvent ensuite pointer. L'étape de tri des raies est alors terminée et on ne garde en mémoire que les données nécessaires au calcul pour les autres étapes de traitement du segment courant comme le calcul du maillage, la projection des raies, etc.

d) Conclusion

Afin de maîtriser l'espace mémoire pour ne retenir que ce qui est nécessaire au calcul, nous avons utilisé certains des apports intéressants du Fortran90 par rapport au Fortran77, comme l'allocation dynamique de la mémoire et la possibilité de réduction des tableaux. Il n'est pas possible de donner un chiffre général d'occupation mémoire puisque, comme nous l'avons montré, celle-ci dépend fortement des conditions thermophysiques du milieu, de l'intervalle spectral de calcul et des critères d'erreurs qui font varier la taille des

maillages et le nombre de raies conservées par segment. De ce fait l'occupation mémoire varie aussi avec le temps suivant le segment courant de la colonne traité pendant le calcul.

À titre purement indicatif nous donnons quelques résultats d'occupation mémoire. Dans le cas test présenté en fin de chapitre II-5, nous avons mesuré une mémoire crête de 152 Mo avec les bases de données chaudes EM2C dont dispose SNECMA, en mettant tous les critères d'erreurs à zéro et celui du maillage à 0.3%. Avec une erreur sur le maillage de 20%, la mémoire crête est descendue à 117 Mo, ce qui souligne la place occupée par les variables dimensionnées par le maillage. Enfin, en se calant sur les critères de l'optimisation 2 (cf chapitre II-5), nous sommes descendus à 74 Mo; cela s'explique par le fait que les données associées aux propriétés des raies négligeables ne sont pas mémorisées. Dans les mêmes deux premières conditions respectives nous avons atteint des pics plus bas avec la base HITRAN, 84 Mo (contre 152) et 19 Mo (contre 117), ce qui met en évidence la part importante occupée par le stockage des données spectroscopiques.

CONCLUSION; PERSPECTIVES

Nous avons présenté un organigramme du code de calcul. Toutes les étapes décrites sont regroupées dans des modules; ceux-ci rassemblent aussi des variables devant être visibles par plusieurs procédures qui opèrent dessus. Nous avons également montré comment les ressources offertes par Fortran 90 ont été exploitées au mieux pour adapter la mémoire du programme aux stricts besoins du calcul.

Au moment de la rédaction de ce manuscrit, la société SNECMA a déjà intégré le code dans ses logiciels de calcul de signature infrarouge. Le découpage modulaire tel qu'il fut présenté dans ce chapitre a servi à l'intégration dans des architectures parallélisant le calcul sur les colonnes, appelées rayons, décrivant un jet. **Signalons tout l'intérêt de cette architecture modulaire par le fait qu'il n'a nécessité à Monsieur François Leglaye, Ingénieur à SNECMA et responsable des études de signature infrarouge, qu'une semaine pour intégrer le code dans un logiciel multifonctions OSIRIS, le problème de la parallélisation sur les colonnes inclus, avec un aide très limitée de ma part¹.**

¹ J'avais déjà installé et validé le code sous la forme de programme principal. Mon aide à l'intégration dans OSIRIS s'est limitée à une présentation de l'organigramme général du code (les variables communes des modules étant explicitées dans les parties commentaires des interfaces de ces mêmes modules), puis à quelques interventions téléphoniques.

Auparavant, au cours du travail de thèse, une autre manière de paralléliser le code avait été imaginée, avec l'expérimentation d'une parallélisation suivant l'axe des nombres d'onde. Il est en effet tout à fait possible de découpler le calcul en actions indépendantes sur chaque processeur qui traiterait sa portion spectrale. Ensuite, le recollement des spectres est immédiat. Les communications pour les échanges de données entre processeurs sont donc très limitées. En effet, les envois de données générales telles que la table de Voigt ou les tables aidant à la construction de maillages sont effectués au tout début du déroulement du programme; il en va de même pour la coupure de l'axe des nombres d'onde et la répartition adéquate des raies. La figure II.33 montre le résultat obtenu sur des essais menés sur une colonne constituée d'un segment, avec un ordinateur du type Origin 2000 de Silicon Graphics à SNECMA. Une version simplifiée du programme fut testée, notamment sans tri des raies et en ne gardant qu'une grille, la plus fine adaptée aux conditions thermophysiques. Signalons que le mode de programmation fut celui de l'échange de messages sous un environnement MPI (Message Passing Interface; bibliothèque de sous-programmes permettant la répartition de tâches ou de données entre plusieurs processeurs).

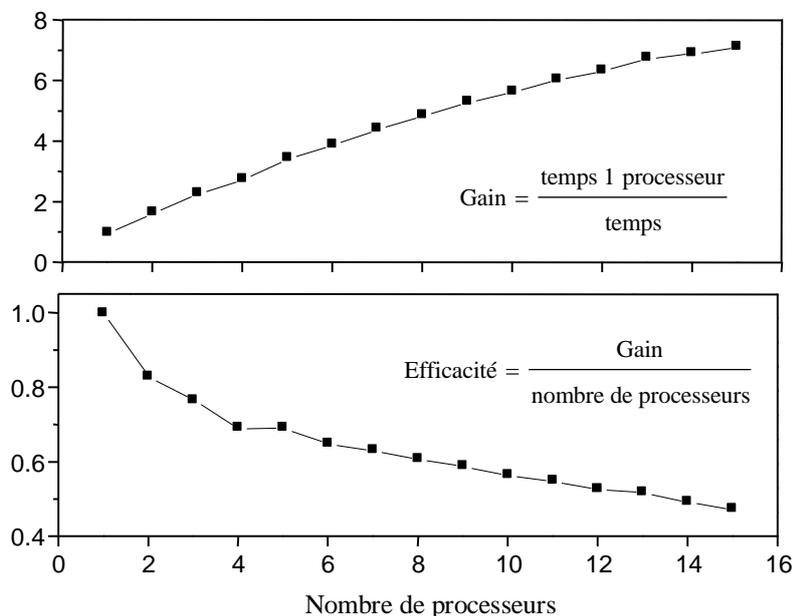


figure II.33: Apports de la parallélisation suivant l'axe des nombres d'onde. La figure du haut montre un gain en temps CPU croissant avec le nombre de processeurs utilisés. La figure du bas illustre la perte d'efficacité au fur et à mesure que le nombre de processeurs augmente. Le cas idéal serait une efficacité de 1, le gain devant alors être une droite de pente 1.

La perte d'efficacité avec l'augmentation du nombre de processeurs s'explique par les transferts de données par les processeurs, mais aussi par l'accroissement du nombre de raies de bords, puisque les intervalles traités par chaque processeur sont de plus en plus étroits. Le traitement d'une raie de bord est en effet un peu plus long que celui d'une raie entièrement

incluse dans un intervalle de calcul (10% de plus), car il exige des tests supplémentaires pour ne garder, et pour la participation à la construction du maillage et pour la projection, que la partie de la raie effectivement incluse dans l'intervalle. Par ailleurs, le découpage de l'axe des nombres d'ondes fut pour ce test très simple: tous les processeurs traitaient un intervalle de largeur identique égale à la largeur totale divisée par le nombre de processeurs impliqués dans le calcul. Si on veut continuer à explorer la piste de cette méthode de parallélisation, il faudra réfléchir au problème du découpage approprié de l'intervalle en nombre d'onde de façon à répartir la somme de travail, ou nombre d'opérations élémentaires, de manière équilibrée sur chaque processeur. Cette répartition dépendra des distributions des raies, mais aussi des conditions thermophysiques, sachant par exemple qu'un intervalle saturant doit être traité à part.

II-7. BILAN; GAINS CPU; PERSPECTIVES

a) Bilan

Tout au long de ce chapitre, nous avons exposé les méthodes développées et appliquées dans le cadre de l'écriture d'un code de calcul de spectres infrarouges rapide à haute résolution par une approche qui respecte la notion physique de coefficient d'absorption: l'approche raie par raie. Celle-ci consiste à additionner les contributions de toutes les transitions infrarouges. Son intérêt est de permettre de résoudre ensuite l'équation de transfert radiatif formulée sous forme différentielle, où le coefficient d'absorption intervient. Un couplage correct avec la diffusion est alors possible. Vis-à-vis des modèles dégradés évoqués en introduction de ce chapitre, l'approche raie par raie sert d'étalon à des fins de validation de ces modèles pour lesquels la notion physique de coefficient d'absorption s'estompe ou disparaît.

Afin d'obtenir un calcul raie par raie rapide, des approximations sont inévitables. Sur le plan de la modélisation physique d'abord, nous avons constaté au chapitre II-2 que tous les phénomènes déterminant le coefficient d'absorption (notamment son profil) des gaz ne

peuvent être inclus dans l'approche sous peine de pénalisation CPU irrémédiable. Nous nous sommes restreints à l'approche "raies isolées" avec un profil de Voigt qui traduit les effets Doppler et collisionnels, complétée par des continua pour tenir compte des couplages des transitions dans les ailes lointaines. Cette modélisation est suffisante compte tenu de l'objectif final qui consiste le plus souvent à intégrer des spectres de luminance sur de larges gammes spectrales pour des calculs de flux radiatifs. De plus les précisions des données spectroscopiques sont en certains endroits spectraux assez moyennes. Ces zones seront rencontrées par un calcul raie par raie, car celui-ci englobe généralement de larges plages spectrales, notamment autour des bandes (la bande ν_3 de CO_2 par exemple). Cela met en évidence le caractère illusoire d'une approche qui se voudrait excessivement précise. Partant de ce constat, nous nous sommes autorisés, une fois le modèle physique adopté, à tolérer des erreurs sur le calcul. Ainsi, nous avons élaboré une méthode approchée de calcul du profil de Voigt et un principe de maillage à pas variable suivi d'interpolations. Nous avons aussi développé une méthode de tri des raies afin d'éliminer les plus faibles et un pré-tri en amont pour dégrossir très rapidement ce processus d'élimination. Nous avons introduit une coupure des ailes afin de supprimer leurs parties de contribution négligeable, et un arrêt du calcul dans les zones de saturation en émission. Toutes ces procédures engendrent des erreurs numériques. **Une des originalités du code réside dans la possibilité qu'il offre à un utilisateur de régler ces erreurs** en fonction de son application. Or, le temps CPU est très fortement dépendant des critères d'erreurs. Nous avons discuté du choix des erreurs dans le chapitre II-5 où nous avons montré **sur une configuration du type signature infrarouge simple que l'on peut gagner un facteur multiplicatif de 26 par rapport au cas sans approximation, tout en gardant la même erreur sur des résultats basse résolution (5 cm^{-1} dans l'exemple)**. Nous rappelons enfin deux caractéristiques purement informatiques les plus importantes du code, facilitées par l'utilisation du langage Fortran90: sa modularité qui le rend très facilement insérable dans une plus grosse structure (nous rappelons le temps d'intégration du code par SNECMA dans une grosse structure à architecture parallèle: 1 semaine), et sa gestion dynamique de la mémoire qui s'ajuste exactement aux besoins courants du calcul.

b) Gain CPU

L'objectif essentiel du travail étant le gain CPU, nous donnons pour terminer des comparaisons de temps CPU avec deux autres codes raie par raie optimisés. Le premier est un

code^[PIER,97] provenant du laboratoire EM2C de l'École Centrale et utilisé, avant la conclusion de ce travail de thèse, par la SNECMA pour ses évaluations de signatures infrarouges des jets de moteurs. Le second, américain^[CLOU,88], est particulièrement répandu et communément utilisé: il s'agit de FASCODE. Un de leurs défauts essentiels est que dans un cas comme dans l'autre, les erreurs engendrées par les éventuelles simplifications ne sont pas connues, et donc a fortiori non gérables.

Une première comparaison avec le code utilisé par SNECMA a été réalisée avec le cas simplifié de configuration signature infrarouge ayant servi à évaluer l'influence des critères d'erreur (conclusion du chapitre II-5). Dans ce cas, le programme, sans critère d'approximation, va 1.4 fois plus vite que l'ancien code SNECMA. Or, pour ce dernier, nous avons constaté une erreur de 5.1% (de la valeur crête) sur la luminance et de 0.044 sur la transmission par rapport à notre nouveau code dont la validité est garantie. Ces erreurs viennent des approximations non contrôlées de l'ancien code qui lui aussi élimine des raies. En relevant les critères d'erreurs de notre programme pour atteindre le facteur 26 indiqué ci-dessus, nous allons **26×1.4~36 fois plus vite que l'ancien code avec une erreur moindre!** (1.2% (de la valeur crête) sur la luminance, 0.013 sur la transmission).

Nous proposons d'autres résultats, toujours sur le même ordinateur (Origin 2000 de Silicon Graphics), issus de tests puis de **calculs dans des configurations réelles de signatures menés par SNECMA** sur le code inclus dans leur logiciel d'études infrarouges OSIRIS. Les critères d'erreurs suivants furent adoptés: 10% sur le maillage, critères sur la transmission libérés, 5% de la valeur crête de la luminance pour l'erreur due aux raies négligées, 5% de la valeur minimale de la luminance¹ pour l'erreur intervenant dans les zones de saturation, 30% de l'erreur due aux raies négligées est traitée par le pré-tri. Le résultat de sortie est une moyenne sur 5 cm^{-1} du calcul haute résolution. Des contrôles visuels a posteriori sur l'erreur effectivement commise sur le calcul moyenné furent appliqués sur quelques jeux de rayons représentatifs de l'angle solide de visée. Il confirmèrent un excellent accord avec le calcul sans approximation. Dans ces conditions, des tests CPU sur une quinzaine de rayons représentatifs d'un jet hétérogène, dans la région $[2100 \text{ cm}^{-1}, 2500 \text{ cm}^{-1}]$ montrèrent **un gain d'un facteur de l'ordre de 30 par rapport à l'ancien code** raie par raie dont ils disposaient. Ces résultats témoignent d'une augmentation effective sensible du gain CPU en configuration

¹ La luminance est d'abord calculée par une méthode ckfg, qui est bien évidemment bien plus rapide qu'une approche raie par raie, mais moins précise. Mais une estimation de la luminance suffit, pour appliquer de cette manière les critères d'erreurs.

réelle de calcul. Nous avons donc, d'un point de vue quantitatif, totalement atteint un de nos objectifs majeurs. Mais le gain obtenu est tel que de nouvelles perspectives d'applications du code s'ouvrent. Ainsi, **SNECMA peut désormais, grâce à ce nouveau logiciel que nous conçu, calculer la signature infrarouge complète d'un avion par l'approche raie par raie**, en des temps acceptables. Le calcul a été effectivement réalisé sur une Origin 2000 de Silicon Graphics en 4 jours CPU avec 30 processeurs sur 200000 rayons (colonnes) de 100 à 400 segments chacun. Une deuxième possibilité s'est créée grâce aux gains CPU du nouveau code. **Les ingénieurs de SNECMA travaillant sur bancs d'essais peuvent désormais calculer l'émission du jet** (ce que les temps du code précédent rendaient rédhibitoire) et comparer les prévisions du calcul à leurs mesures réalisées par un spectromètre à transformée de Fourier. Ainsi, en plus de l'apport quantitatif, qui autorise des calculs étalons beaucoup plus fréquemment qu'auparavant, une dimension qualitative se greffe aux nouvelles perspectives d'application qu'offre le code.

Nous rapportons maintenant des résultats de tests préliminaires menés à l'ONERA par Monsieur Thierry HUET. Il s'agit ici de comparer notre code raie par raie à FASCODE. Les critères d'erreurs suivants furent adoptés: 5% sur le maillage, 0.02 d'erreur sur la transmission due aux raies négligées, 0.02 d'erreur sur la transmission dans les zones de saturation, critères sur la luminance libérés, 30% de l'erreur due aux raies négligées est traitée par le pré-tri. Le calcul fut mené avec la base de données HITRAN (seule base que peut lire FASCODE dans sa configuration actuelle, telle qu'elle se présente à l'ONERA) sur 40 segments représentant un corps chaud vu à travers des couches atmosphériques dans la région de 4.3 μm . Il fut constaté, sur une station SUN, un gain CPU d'un facteur 4 en faveur du nouveau code. Néanmoins des incertitudes existent sur la concordance, à haute résolution, des résultats issus des deux codes, en raison notamment du fait que nous ne connaissons pas la précision de FASCODE. Ce problème, non approfondi pour l'instant par manque de temps, devra être éclairci dans l'avenir.

c) Perspectives

En guise de perspectives, nous signalons que des pistes pour améliorer le temps sont encore exploitables. Nous avons en effet réalisé des mesures CPU des différentes étapes de calcul d'un segment d'une colonne. Il s'est avéré que dans les cas où nous atteignons le maximum de vitesse, la part de calculs préparatoires agissant sur les raies restant après le pré-tri, à savoir essentiellement le calcul des demi-largeurs Voigt, la conversion des intensités à la

température du segment, et le calcul des coefficients d'absorption aux centres des raies, atteignait 40 à 55% du temps, alors que ces étapes n'occupent qu'une part infime en nombre de lignes du code (une quinzaine de lignes sur plus de 10000). Le problème réside dans le fait que les formules de calcul impliquent des fonctions longues à calculer. Des exponentielles et un sinus interviennent (cf équations (II-56) et (II-59) au paragraphe II-4-1). Pendant la période d'écriture de ce manuscrit nous avons trouvé une formule plus simple que celle d'Olivero et al. [OLIV,77] (équation (II-59)) pour approcher la demi-largeur Voigt:

$$\gamma_v = \left(0.5346 \gamma_L + \sqrt{0.216598 \gamma_L^2 + \gamma_D^2} \right), \quad (\text{II-110})$$

Cette formule est proposée par Whiting[WHIT,68], les coefficients étant améliorés par Olivero. Nous la substituerons à l'ancienne¹. La perte de précision est négligeable (0.02% contre 0.01% pour la première). Pour la conversion des intensités (équation (II-56)), il faudrait songer à approximer le calcul de l'exponentielle par des développements analytiques. Mais la meilleure façon de gagner du temps est de limiter l'étape des calculs préparatoires, au minimum de raies par rapport à celles qui sont nécessaires. Pour parvenir à cela, il faut rendre plus efficace la phase de pré-tri; en effet, le pré-tri, qui peut éliminer une raie par application d'une simple formule, nous dispense de ces calculs fortement pénalisants. Il faut donc améliorer le point crucial qui est la modélisation analytique des seuils de prise en compte des raies, en affinant les fonctions mathématiques pour les rendre plus proches des résultats numériques.

¹ Les temps CPU ont été mesurés avec l'ancienne formule.

III. MESURES D'ABSORPTION INFRAROUGE SUR DES TRAJETS KILOMÉTRIQUES

III-1. INTRODUCTION: BUT DE L'ÉTUDE

Les colonnes gazeuses qui interviennent dans les applications de télédétection comprennent généralement un trajet atmosphérique important, dont la longueur peut atteindre plusieurs kilomètres et dont l'absorption/émission doit être modélisée correctement. Il est donc nécessaire de tester la qualité des approches théoriques utilisées dans des conditions les plus proches possibles de celles effectivement rencontrées par les applications et, pour ce faire, il faut disposer de mesures. Les expériences in-situ (c.a.d. effectuées "à l'extérieur") sont tentantes car très proches des situations réelles mais elles ne permettent qu'un test relativement grossier des modèles. En effet, les trajets optiques ainsi sondés sont potentiellement mal connus (que contient l'air ambiant ?), non uniformes (les caractéristiques thermophysiques peuvent varier le long du trajet), et perturbés par des phénomènes convectifs ou la présence d'aérosols aux propriétés mal connues. Il est, de loin, préférable d'étudier une colonne gazeuse dont les caractéristiques sont contrôlées. Les dispositifs de laboratoire du type cuve d'absorption permettent de résoudre ces problèmes mais restent bien sûr limités en terme de longueur de trajet. Le travail expérimental qui va être présenté dans cette deuxième partie tente d'apporter une réponse partielle puisque des mesures ont été effectuées avec un trajet, en cuve, de un kilomètre. Notons que cette réalisation est une première en France, car jusqu'à présent les mesures de spectres infrarouges se sont limités à des trajets de l'ordre d'une centaine de mètres.

Nous avons développé, testé, et exploité un dispositif expérimental de mesure en laboratoire de spectres d'absorption infrarouge sur des trajets kilométriques, qui a permis l'étude de la gamme de nombres d'onde s'étalant de 700 cm^{-1} à 5100 cm^{-1} . L'élément central

est une cuve à réflexions multiples présente à Reims, conçue et construite dans les années 80 par M-F Mérienne et A. Jenouvrier du Groupe de Spectrométrie Moléculaire et Atmosphérique, utilisée jusqu'à lors dans le domaine UV-Visible. Seul cet élément préexistait et le reste de l'expérience a été développé dans le cadre de cette thèse.

Les objectifs de cette deuxième partie sont de présenter le dispositif expérimental de mesure infrarouge que nous avons développé, de décrire la procédure d'acquisition et de traitement d'une mesure, puis de montrer les résultats obtenus qui permettent notamment de tester les modèles physiques retenus pour le raie par raie présenté dans la première partie, ainsi que les bases de données spectroscopiques utilisées. En guise de perspective, nous discuterons du problème expérimental de la mesure du continuum de la vapeur d'eau, lequel a été abordé mais non approfondi.

III-2. DISPOSITIF EXPÉRIMENTAL – MISE EN OEUVRE

III-2-1 LE DISPOSITIF

La figure III.1 schématise l'ensemble du dispositif expérimental dont les différents éléments sont regroupés dans le tableau III.1. Dans ce montage, seule la cuve préexistait, qui a été développée au GSMA il y a plusieurs années^[LUX,85] et qui était, depuis lors, utilisée pour des mesures dans la région uv-visible (voir par exemple les références [CARL,99] et [JENO,99]). Dans un premier temps, il s'est donc agi de déterminer, recenser, puis commander et enfin placer les éléments pour permettre des mesures infrarouge. Nous décrivons ci-après le matériel optique en suivant le parcours d'un rayon lumineux où l'on distingue: • une source de rayonnement électromagnétique. • une cuve renfermant le gaz étudié. • un appareillage sélectionnant un domaine de longueur d'onde restreint. • un détecteur délivrant une tension électrique proportionnelle à l'intensité lumineuse reçue. • une électronique de traitement et d'acquisition du signal.

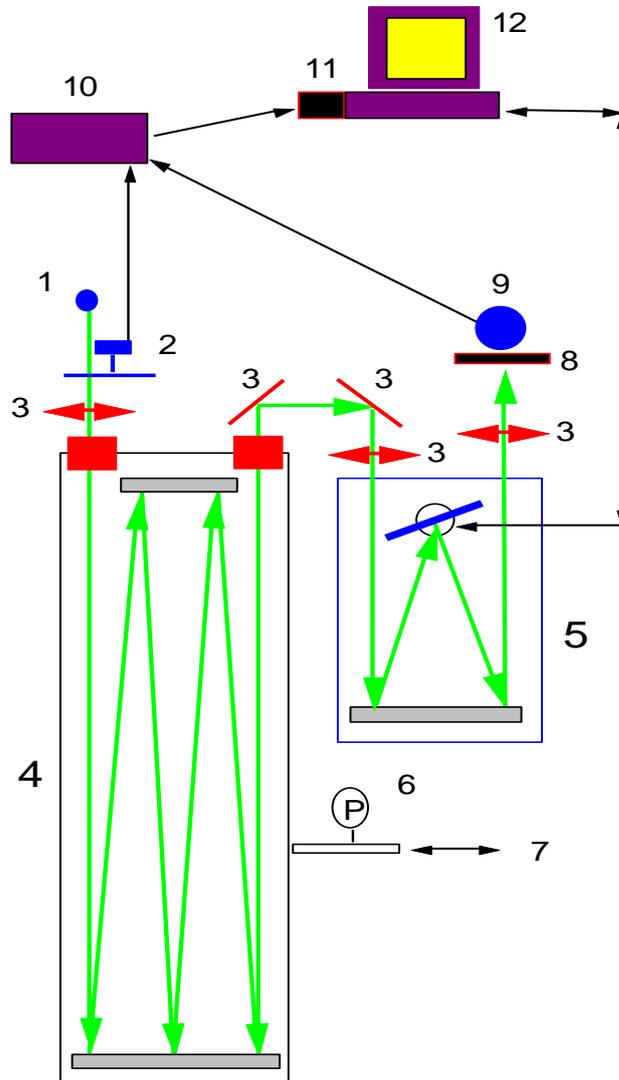


figure III.1: Schéma du dispositif expérimental

- | | | | |
|-------------------------|-------------------------|-------------------------|------------------------|
| 1 Source IR | 4 Cuve d'absorption | 7 Groupe de pompage | 10 Détection synchrone |
| 2 Hacheur mécanique | 5 Spectromètre à réseau | 8 Filtre interférentiel | 11 Carte A/D et D/A |
| 3 Optiques d'adaptation | 6 Capteurs de pression | 9 Détecteur IR | 12 Ordinateur PC |

N°	Matériel	But
1	Sources IR+alimentations (glowbar, halogène)	Emission de rayonnement IR large bande
2	Hacheur mécanique et son alimentation	Moduler le faisceau pour le "marquer" et le traiter ultérieurement
3	Optiques (miroirs/lentilles)	Conjugaison et adaptation du faisceau
4	Cuve d'absorption multi-passages	Contient le milieu et permet de transmettre le rayonnement au travers
5	Spectromètre complet (fentes d'entrée/sortie, miroirs, réseau, et le moteur assurant sa rotation)	Sélectionner les longueurs d'onde grâce à l'angle d'inclinaison du réseau
6	Capteurs de pression	Mesure de la pression du milieu étudié
7	Groupe de pompage	Permet d'évacuer le contenu de la cuve
8	Filtres interférentiels IR	Sélectionne un ordre donné du réseau
9	Détecteur IR+alimentations InSb (1-6 μm)	Produit un signal proportionnel au flux de rayonnement incident
10	Détection synchrone	Traitement du signal modulé afin d'en déterminer l'amplitude
11	Carte A/D	Carte de conversion Analogique \leftrightarrow Digital pour le traitement numérique des résultats
12	Ordinateur PC	Stockage et traitement des résultats Pilotage de l'expérience

tableau III.1: *Détail des éléments du montage (N° indique le numéro du matériel sur la figure précédente)*

Source infrarouge: Afin de pouvoir couvrir la zone $700\text{-}5100\text{ cm}^{-1}$ ($14\text{-}2\mu\text{m}$), deux sources ont été utilisées: une lampe halogène (quartz-iode), alimentée sous 12V, pour les longueurs d'onde inférieures à $2.5\text{ }\mu\text{m}$ (nombre d'onde $\sigma > 4000\text{ cm}^{-1}$). Un barreau de Carbone de Silicium (glowbar) chauffé par effet Joule (alimenté par un régulateur de tension 0-120V, $I_{\text{max}} = 10\text{A}$), pour les longueurs d'onde supérieures ($\sigma < 4000\text{ cm}^{-1}$).

Marquage du faisceau: Afin d'éliminer les contributions dues aux photons provenant de sources autres que le faisceau infrarouge émis par la source et aussi de pouvoir traiter le signal, un hacheur est placé face au faisceau juste devant l'entrée de la cuve. Celui-ci est constitué de pales rotatives, qui dans leur mouvement, alternativement laissent passer le signal puis l'occulent; on obtient donc un signal en créneaux. La fréquence de hachage est réglable soit en faisant varier la vitesse de rotation du moteur entraînant les pales, soit en modifiant la taille des pales. La fréquence du signal en créneaux est réglable entre 10 et 1000

Hz. On peut ainsi notamment s'affranchir de la contribution parasite due à l'éclairage de la salle de laboratoire en évitant les multiples de 50 Hz.

Optique Source-Cuve: Le rayonnement émis par la source est collecté et collimaté sur le miroir d'entrée de la cuve, par un miroir doré ($\phi=50$ mm, focale 150 mm).

Cuve: La cuve est une cellule de White (multi-passages)^[LUX,85] constituée d'un cylindre de 60 cm de diamètre pour 50 m de long. Elle n'est pas calorifugée mais on peut imposer la composition chimique des gaz et la pression (du "vide" jusqu'à la pression atmosphérique) grâce à un système d'alimentation en gaz et de pompage. Elle est munie de capteurs de pression et de température en plusieurs emplacements sur sa longueur. Le trajet d'un rayon est schématisé sur la figure III.2. Le faisceau, entrant par la fenêtre 1 et focalisé au niveau du miroir d'entrée par l'optique source-cuve, est réfléchi par le miroir du fond 2 qui le focalise sur le miroir d'entrée 3 qui le renvoie sur le miroir du fond 2, puis est de nouveau réfléchi pour être focalisé sur 3, ainsi de suite... On peut compter le nombre de réflexions sur le miroir 3 en visualisant au travers d'un hublot 5 les taches du faisceau qui se décalent au fur et à mesure des impacts sur 3. Enfin le faisceau ressort par la fenêtre 4. On voit ainsi que l'on peut faire varier son trajet par pas de 100 m.

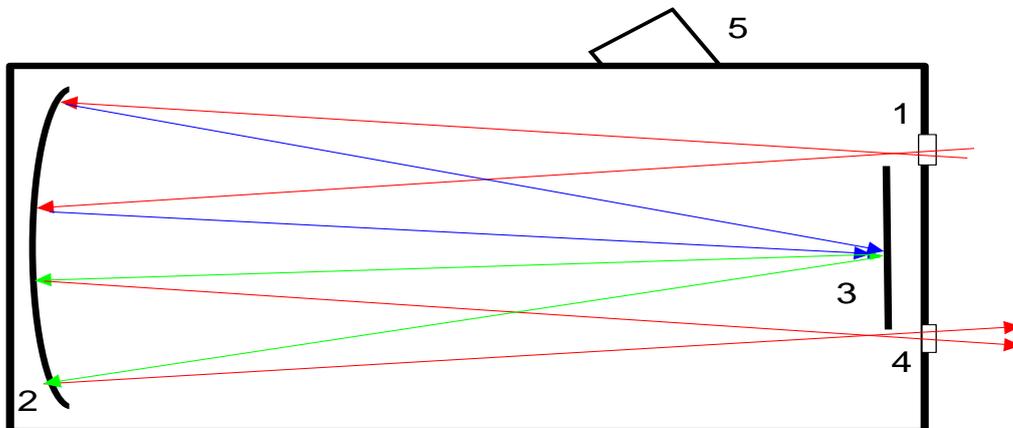


figure III.2: Schéma de la cuve multi-passages (50 m de base, 0,6 m de diamètre)

- 1 Fenêtre d'entrée 2 Miroir du fond 3 Miroir d'entrée 4 Fenêtre de sortie
5 Hublot

Optique Cuve-Spectromètre: Deux miroirs (plan puis sphérique $\phi=50$ mm, focale 150 mm) guident le faisceau sorti de la fenêtre 4 et le focalisent sur la fente d'entrée du spectromètre.

Spectromètre: Il s'agit d'un spectromètre à réseau schématisé sur la figure III.3. Le faisceau collimaté au niveau de la fente d'entrée est réfléchi en rayons parallèles par le miroir

d'entrée, concave. Il est alors diffracté par le réseau puis se réfléchit sur le miroir de sortie, concave, qui le focalise sur la fente de sortie. L'angle θ du réseau est piloté par un moteur.

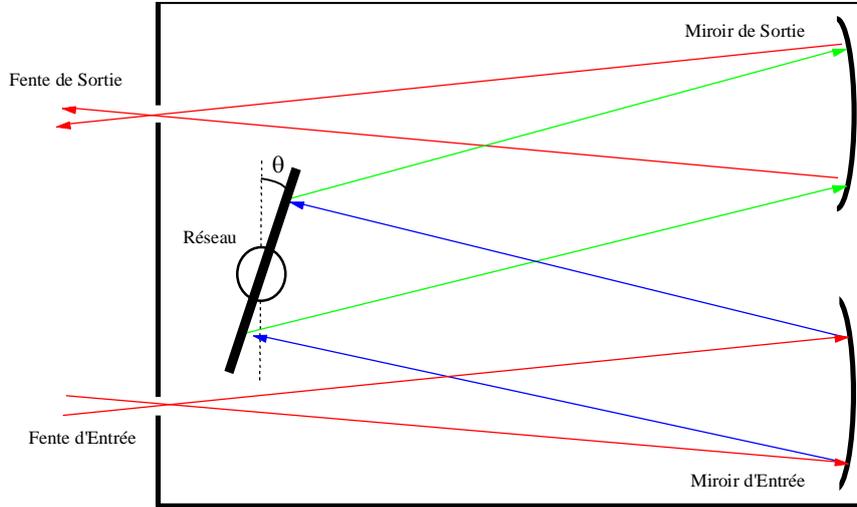


figure III.3: Schéma du spectromètre (1.5 m entre le réseau et les miroirs)

Par cet angle nous pouvons sélectionner un domaine de longueur d'onde restreint:

$$\lambda(\theta) \pm \delta\lambda(\theta), \quad (\text{III-1})$$

Si on désigne par λ_0 une constante liée aux caractéristiques géométriques (distances fente-miroir-réseau) et optiques (nombre de traits/mm du réseau), λ est relié à l'angle θ et à l'ordre k du réseau par:

$$k\lambda = \lambda_0 \sin \theta, \quad (\text{III-2})$$

L'incertitude $\delta\lambda$ sur la longueur d'onde provient de deux facteurs: le pouvoir de résolution théorique du réseau (critère de Rayleigh pour la séparation de deux figures de diffraction), qui est négligeable par rapport au deuxième facteur: les caractéristiques géométriques du système, notamment la largeur non nulle des fentes. On montre alors que $\delta\lambda$ s'écrit, convertit en $\delta\sigma$:

$$\delta\sigma = C_{\delta\sigma} \sigma \sqrt{\frac{1}{k^2} \left(\frac{\sigma}{\sigma_0} \right)^2 - 1}, \quad (\text{III-3})$$

La constante $C_{\delta\sigma}$ dépend des ouvertures des fentes de sortie et d'entrée; elle traduit l'incertitude angulaire $\delta\theta$ de l'incidence du faisceau sur le réseau, qui résulte de ces ouvertures:

$$C_{\delta\sigma} = \sin \delta\theta, \quad (\text{III-4})$$

La constante σ_0 est le nombre d'onde correspondant à la longueur d'onde λ_0 ($\sigma_0=10^4/\lambda_0$). La méthode de détermination de ces constantes sera détaillée dans le paragraphe III-3-4.

Optique Spectromètre-Détecteur: Le faisceau sortant par la fente de sortie du spectromètre est collecté par un miroir doré, puis focalisé sur le détecteur.

Filtres optiques: Ceux-ci sont disposés juste devant la pastille du détecteur. Leur utilité s'avère fondamentale pour ne sélectionner qu'un seul ordre parmi tous ceux que le réseau diffracte dans une direction donnée. Le choix des filtres s'est effectué de façon à ce que, pour une position donnée θ du spectromètre, les longueurs d'ondes provenant des différents ordres ne passent pas en même temps. Or, pour une position θ , le réseau laisse passer toutes les longueurs d'ondes vérifiant l'équation (III-2) donc deux ordres consécutifs vérifient:

$$k \lambda_k(\theta) = (k+1) \lambda_{k+1}(\theta) = \lambda_0 \sin \theta, \quad (\text{III-5})$$

On déduit de l'équation (III-5) l'écart en nombre d'onde entre deux ordres consécutifs laissés passer par le spectromètre [$\sigma(\text{cm}^{-1})=10^4/\lambda(\mu\text{m})$]:

$$(\sigma_{k+1} - \sigma_k)(\theta) = \frac{10^4}{\lambda_0 \sin \theta}, \quad (\text{III-6})$$

L'équation (III-6) nous impose la bande passante maximale autorisée pour un filtre. Or, le réseau est un réseau avec un blaze. Les enregistrements de spectres sont réalisés au voisinage de sa position d'éclairement maximal. En utilisant un laser Hélium-Néon, nous avons situé le blaze du réseau:

$$\lambda_0 \sin \theta \approx 25 \mu\text{m}, \quad (\text{III-7})$$

On en déduit la bande passante imposée pour le choix des filtres:

$$\Delta\sigma_{\text{filtres}} < 400 \text{cm}^{-1}, \quad (\text{III-8})$$

Rajoutons enfin que la dispersion angulaire du réseau est importante, ce qui nous offre une bonne résolution spectrale pour une "grande" largeur de fentes, soit un bon rapport signal sur bruit.

Détecteur: Pour l'étude du domaine 2-7 μm , nous avons utilisé un détecteur du type InSb, refroidi à l'azote liquide. Celui-ci est associé à un préamplificateur et est alimenté par une batterie sous 15V. Il délivre un signal (Volts) proportionnel à l'intensité lumineuse

reçue. Au-delà de $7 \mu\text{m}$, un détecteur HgCdTe fut choisi car la courbe de réponse du premier chute dans cette zone.

III-2-2 TRAITEMENT ET ACQUISITION DU SIGNAL

Par l'action des pales du hacheur qui successivement laissent passer puis occultent le faisceau lumineux, le signal issu du détecteur est en créneaux. Son amplitude est proportionnelle à l'intensité reçue. Parallèlement, un signal TTL en créneaux ($-5\text{V}, +5\text{V}$) de même fréquence que celui issu du faisceau est délivré par le hacheur. Ces deux signaux sont traités par une détection synchrone qui effectue les opérations analogiques suivantes:

- filtrage étroit qui transforme les créneaux en cosinus
- produit des deux signaux résultants
- multiplication par une exponentielle décroissante
- intégration temporelle

Ceci correspond à une transformation de Fourier en temps qui privilégie les instants récents. Cette opération réduit le bruit, d'autant plus que la constante de temps de l'exponentielle est grande, et délivre une tension continue proportionnelle à l'amplitude du signal issu du détecteur.

L'acquisition du signal continu issu de la détection synchrone est effectuée par un ordinateur du type PC équipé d'une carte de conversion Analogique→Digital. Celle-ci est pilotée par une horloge externe (signal TTL) synchronisée sur la rotation du moteur qui entraîne le réseau¹. Ainsi, une valeur est acquise à chaque tour de moteur. Un compte-tour donne les positions du moteur. Pour fixer les idées, l'écart spectral entre deux points d'acquisition successifs est d'environ 0.02 cm^{-1} , dans la région de $4.5 \mu\text{m}$ lorsque le réseau est utilisé à l'ordre 6.

¹ L'axe du moteur porte une roue percée d'un trou. Une diode, dont le faisceau passe par le trou à chaque tour de moteur, délivre un signal TTL qui sert d'horloge aux acquisitions.

III-3. PROCÉDURES D'ACQUISITION ET DE TRAITEMENT D'UNE MESURE

La chaîne de procédures et de traitements suivie pour obtenir le spectre d'un mélange gazeux suit un protocole divisé en quatre étapes:

- mise en œuvre d'une expérience
- obtention de la transmission du gaz
- détermination de l'échelle en nombre d'onde
- détermination de la résolution

Les paragraphes suivants détaillent les opérations énumérées ci-dessus.

III-3-1 MISE EN ŒUVRE D'UNE EXPÉRIENCE

Nous décrivons ci-après l'enchaînement des manipulations effectuées pour mener à bien un enregistrement¹:

- Remplissage de la cuve avec la pression et la composition en gaz désirée. Pour les cas de mesure à vide, la pression est inférieure à 10^{-3} atm.
- Positionnement du réseau à la position correspondant au nombre d'onde désiré du début d'enregistrement d'un spectre. La correspondance nombre d'onde – position du réseau a été étalonnée en se servant d'un laser He-Ne comme expliqué au paragraphe III-3-3
- Définition dans le programme d'acquisition du PC du nombre de points d'enregistrement, lequel aura été prédéterminé par l'étendue en nombre d'onde de l'intervalle à enregistrer.
- Lancement simultané du défilement du moteur et de la procédure d'acquisition. La vitesse de défilement est réglable; elle ne doit pas être trop rapide par rapport à la constante de temps de l'intégration temporelle, afin de ne pas déformer le signal.
- L'acquisition s'arrête quand le nombre de points demandé est atteint. Le défilement du moteur doit être stoppé par le manipulateur.

À domaine de nombre d'onde et constante de temps fixés, la durée de cette procédure varie en fonction des pressions traitées (temps de remplissage de la cuve), de la nature des gaz à introduire dans la cuve (air simple ou bien rajout de CO_2), de l'ordre utilisé du réseau. L'influence de l'ordre sur la durée d'un enregistrement s'évalue à partir de l'équation (III-2) convertie en nombre d'onde:

¹ les appareils étant tous en marche et le détecteur refroidi à l'azote liquide.

$$\sigma = k \frac{\sigma_0}{\sin \theta}, \quad (\text{III-9})$$

On voit que, pour un même parcours angulaire $\Delta\theta$, le réseau balaye une plage spectrale en nombre d'onde proportionnelle à l'ordre du réseau. Ainsi, le temps sera d'autant plus long que l'ordre k plus faible. À titre illustratif, voici quelques ordres de grandeur des temps de la procédure:

-durée de vidage de la cuve de 1 atm à 10^{-3} atm:	1h 30min
-durée d'acquisition d'un signal à cuve vide (vitesse maximale du moteur):	20min
-durée de remplissage de la cuve de 10^{-3} atm à 1 atm:	2h 40min
-durée d'acquisition d'un signal à cuve pleine entre 1830 cm^{-1} et 2260 cm^{-1} à l'ordre 5 avec une constante de temps d'intégration de 300 ms:	1h 30min

À l'issue de cette procédure, nous disposons de l'enregistrement de l'amplitude d'un signal (cuve vide ou cuve pleine) en fonction de la position p du moteur.

III-3-2 OBTENTION DE LA TRANSMISSION DU GAZ

Il est nécessaire d'effectuer deux enregistrements pour obtenir la transmission d'un gaz: un avec la cuve vide, un avec la cuve remplie du gaz dont on veut mesurer la transmission. Nous allons montrer dans ce qui suit à quelle grandeur pratique nous avons ainsi accès.

Lorsque le moteur est à une position donnée, nous avons vu par la formule (III-1), qu'un faisceau d'un certain étalement en longueur d'onde autour d'une position moyenne est sélectionné par le spectromètre. Alors, le signal acquis lorsque le moteur est à la position p , est la somme sur cet intervalle, $\{\lambda[\theta(p)]-\delta\lambda[\theta(p)], \lambda[\theta(p)]+\delta\lambda[\theta(p)]\}$, de l'intensité de la source, modifiée au fur et à mesure non seulement du parcours du faisceau jusqu'au détecteur mais aussi du traitement du signal par l'électronique:

$$S(p) = K_e \int_{\lambda(p)-\delta\lambda(p)}^{\lambda(p)+\delta\lambda(p)} I_S(\lambda') \times \tau_{\text{opt}}(\lambda') \times \tau_{\text{gaz}}(\lambda') \times f_{\text{app}}(\lambda, \lambda') \times R_{\text{dét}}(\lambda') \times d\lambda', \quad (\text{III-10})$$

où l'on définit:

- I_S : intensité de la source
- τ_{opt} : transmission du matériel optique

- τ_{gaz} : transmission du gaz (parcours dans la cuve: 1003m, et dans l'air ambiant: 9m)
- f_{app} : fonction d'appareil normalisée du spectromètre
- $R_{\text{dét}}$: réponse du détecteur
- K_e : constante liée à l'électronique, indépendante de la longueur d'onde

Or, I_S , τ_{opt} , $R_{\text{dét}}$, varient lentement avec λ et peuvent donc être considérés comme constants sur l'intervalle d'intégration qui est de largeur $2\delta\lambda$ avec $\delta\lambda \sim 10^{-3} \mu\text{m}$ à $5 \mu\text{m}$ ($\delta\sigma \sim 0.4 \text{ cm}^{-1}$ en 2000 cm^{-1}). Le signal acquis s'écrit donc:

$$S(p) = K_e \times I_S(\lambda) \times \tau_{\text{opt}}(\lambda) \times R_{\text{dét}}(\lambda) \int_{\lambda(p)-\delta\lambda(p)}^{\lambda(p)+\delta\lambda(p)} \tau_{\text{gaz}}(\lambda') \times f_{\text{app}}(\lambda, \lambda') \times d\lambda' , \quad (\text{III-11})$$

De là découle la nécessité de faire deux mesures, une à cuve vide ($\tau_{\text{gaz}}=1$), et une à cuve pleine. En effet, toutes les autres grandeurs autres que τ_{gaz} restent identiques, si on ne touche pas au système (notamment fentes du spectromètre identiques) et si les expériences ne sont pas trop éloignées dans le temps (notamment émission de la source constante). Ainsi, en faisant le rapport des deux acquisitions, cuve pleine sur cuve vide, obtenues pour la même position p du moteur, on obtient:

$$\frac{S_{\text{gaz}}(p)}{S_{\text{vide}}(p)} = \frac{\int_{\lambda(p)-\delta\lambda(p)}^{\lambda(p)+\delta\lambda(p)} \tau_{\text{gaz}}(\lambda') \times f_{\text{app}}(\lambda, \lambda') \times d\lambda'}{\int_{\lambda(p)-\delta\lambda(p)}^{\lambda(p)+\delta\lambda(p)} f_{\text{app}}(\lambda, \lambda') \times d\lambda'} = \int_{\lambda(p)-\delta\lambda(p)}^{\lambda(p)+\delta\lambda(p)} \tau_{\text{gaz}}(\lambda') f_{\text{app}}(\lambda, \lambda') d\lambda' , \quad (\text{III-12})$$

en rappelant que f_{app} est normalisée. Nous avons donc accès à la moyenne spectrale sur $\lambda \pm \delta\lambda$, pondérée par une fonction d'appareil, de la transmission monochromatique du gaz.

La figure III.4 illustre le propos avec l'exemple de l'aile de la bande ν_3 de CO_2 enregistré avec l'ordre 6 du réseau. La dynamique de l'enregistrement à vide est essentiellement imposée par l'absorption du filtre optique. Le raccord entre les deux signaux à droite provient du fait qu'il n'y a pas d'absorption par le gaz dans cette région. La figure III.5 montre le résultat obtenu en faisant le rapport des deux signaux comme suggéré par l'équation (III-12): il s'agit de la transmission du gaz dont la résolution est dégradée par la convolution par une fonction d'appareil.

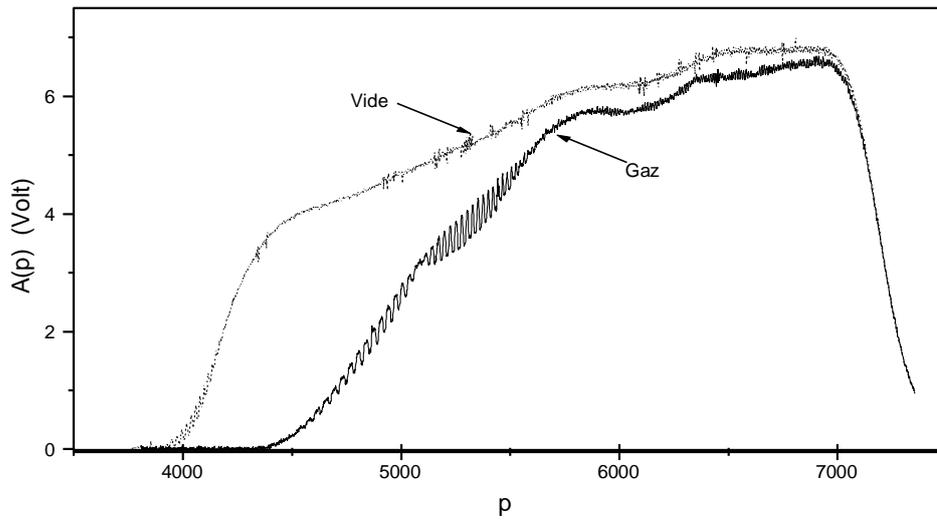


figure III.4: Signaux enregistrés avec (—) et sans gaz (- - -) en fonction du numéro p de position dans la région de $4 \mu\text{m}$ à l'ordre 6.

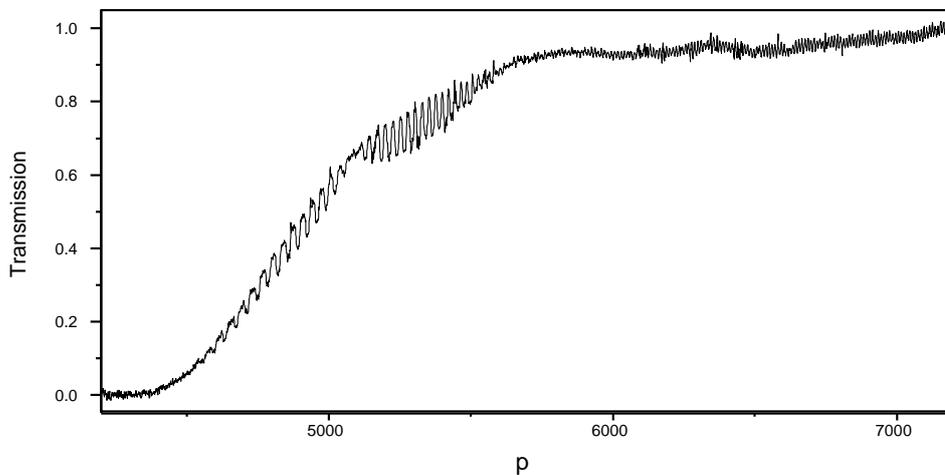


figure III.5: Transmission du gaz déduite des signaux de la figure III.4 par l'équation (III-12).

Il reste une étape pour que l'enregistrement représente un spectre d'absorption expérimental: la graduation en nombre d'onde de l'axe des abscisses. C'est l'objet du paragraphe suivant.

III-3-3 REPÉRAGE EN NOMBRE D'ONDE

Le spectre obtenu pour l'instant étant gradué par rapport à la position du réseau, il nous faut maintenant établir la correspondance avec les nombres d'onde. Pour cela, un étalonnage avec un laser He-Ne ($\lambda_{\text{He-Ne}} = 0.6328 \mu\text{m}$) a été réalisé. Ainsi, connaissant les positions du réseau auxquelles sortent du spectromètre les ordres successifs associés au laser, on peut remonter au nombre d'onde. Une relation analytique entre l'angle de rotation du réseau θ et sa position p est particulièrement difficile à obtenir en raison de la complexité du système mécanique d'entraînement du moteur. Nous avons alors cherché une dépendance empirique entre la longueur d'onde et la position p , qui a été obtenue comme suit. Nous avons enregistré le signal obtenu en utilisant le laser He-Ne, comme le montre la figure III.6 (partie haute). Ceci permet de déterminer, avec précision, quelle est la position $p(k\lambda_{\text{He-Ne}})$ à laquelle l'ordre k du laser sort du spectromètre (partie basse de la figure III.6). Nous avons ajusté un

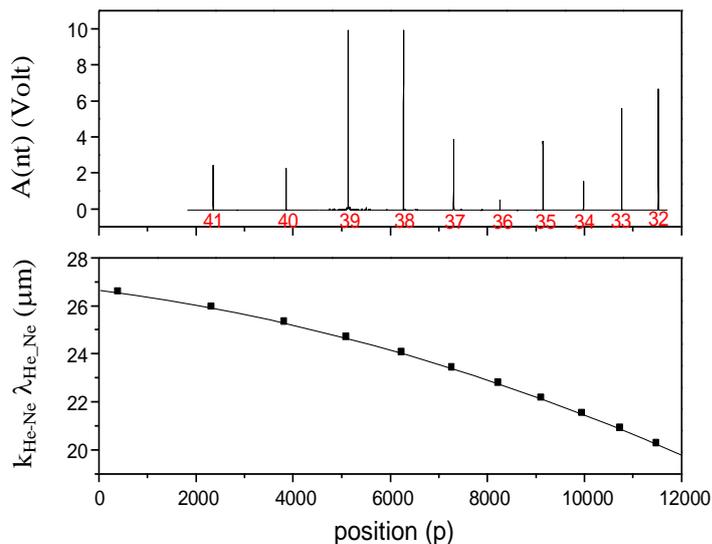


figure III.6:

Signal dû aux ordres du laser He-Ne tels qu'enregistrés en fonction de la position

longueurs d'onde transmises en fonction de la position et courbe de lissage

polynôme du second degré sur ces points expérimentaux donnant le produit $\lambda = k_{\text{He-Ne}} \lambda_{\text{He-Ne}}$ en fonction de la position. Nous obtenons finalement le nombre d'onde étudié dans un ordre donné, en fonction de la position p du réseau par l'équation suivante:

$$\sigma_k(p) = \frac{10^4 k}{a + bp + cp^2}, \quad (\text{III-13})$$

$$\text{avec } \begin{cases} a = 26.68679 \\ b = -2.58957 \\ c = -2.61593.10^{-8} \end{cases}, \quad (\text{III-14})$$

Nous pouvons ainsi facilement graduer les spectres enregistrés en fonction du nombre d'onde. La figure III.7 donne un exemple d'application des formules (III-13) et (III-14) pour le spectre représenté par la figure III.5.

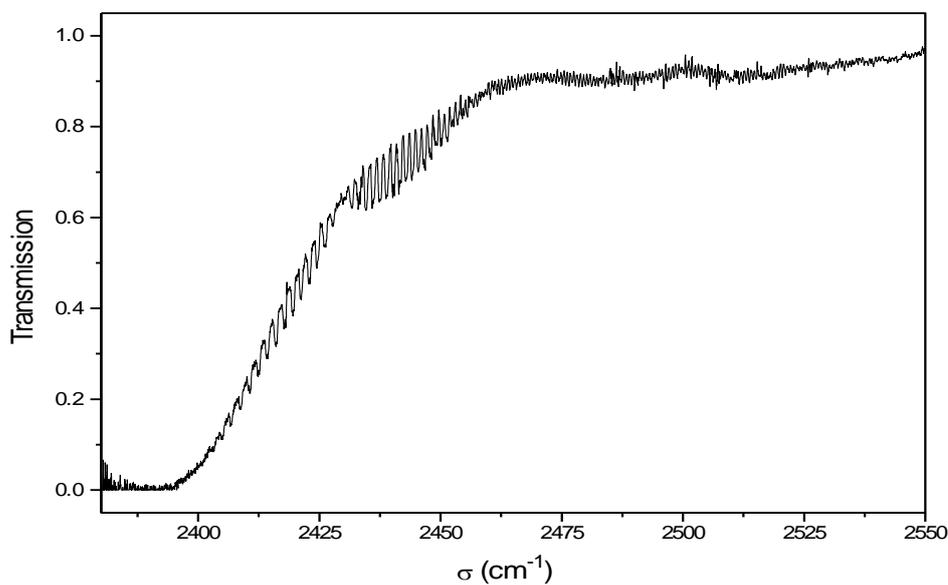


figure III.7: Transmission de la figure III.5 en fonction du nombre d'onde

Signalons qu'en pratique nous avons été confrontés à des problèmes de décalages en nombre d'onde, dus à un jeu dans le système mécanique d'entraînement du réseau. Une fois appliquée la loi de conversion énoncée ci-dessus par l'équation (III-13), il a fallu apporter des corrections de recalage.

À l'issue de toutes ces manipulations expérimentales et numériques, nous disposons d'un spectre expérimental de transmission de la cuve, dégradé par la fonction d'appareil du spectromètre, en fonction du nombre d'onde en cm^{-1} . Si l'on veut par la suite comparer ces mesures avec des calculs, il est indispensable de déterminer la fonction d'appareil. Ceci fait l'objet du paragraphe suivant.

III-3-4 DÉTERMINATION DE LA RÉOLUTION SPECTRALE: LA FONCTION D'APPAREIL

Pour mener un calcul susceptible d'être comparé avec une mesure on doit convoluer le résultat calculé à "haute résolution" par la fonction d'appareil qui doit donc être connue. Cette dernière peut se calculer a priori si on connaît parfaitement les caractéristiques du spectromètre (réseau, dimensions, largeurs des fentes). Qualitativement, sa forme dépend des ouvertures relatives des fentes d'entrée et de sortie, comme le montre la figure III.8.

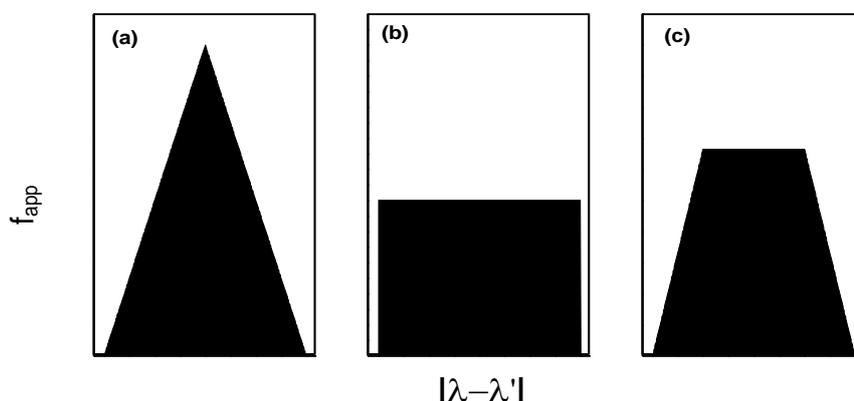


figure III.8: Types de fonction d'appareil d'un spectromètre à réseau.

(a): Fentes de tailles égales ; (b): une fente beaucoup grande que l'autre ; (c): une fente deux fois plus large

Pour déterminer la fonction d'appareil expérimentalement, on choisit une raie isolée fine, comme illustré sur la figure ci-dessous où une raie de CO a été utilisée.

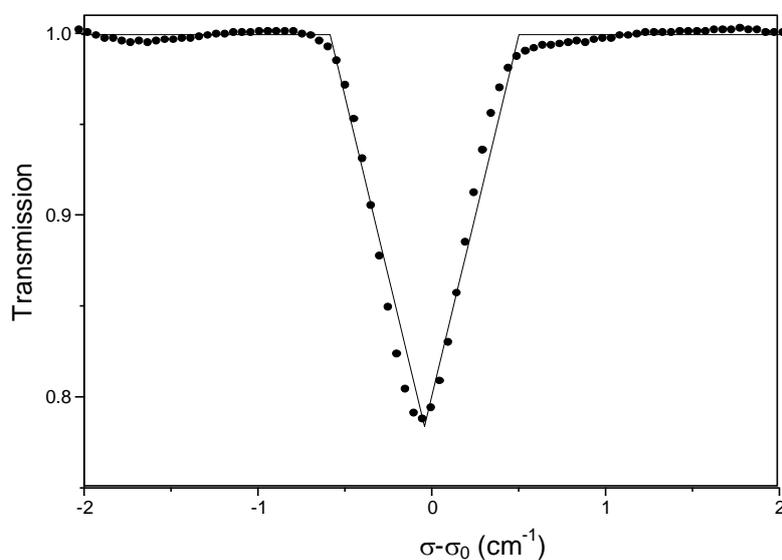


figure III.9: Spectre de transmission au voisinage d'une raie de CO.

● valeurs mesurées ;
 — valeurs simulées avec une fonction d'appareil triangulaire de 1/2 largeur 0.5 cm⁻¹.

La largeur des fonctions d'appareil, qui varie avec le nombre d'onde et l'ordre du réseau, est donnée par l'équation (III-3). La détermination de la constante σ_0 , paramètre intrinsèque du spectromètre, est réalisée en utilisant l'étalonnage avec le laser He-Ne. En effet, l'équation (III-3) conduit, avec la variable λ et pour de petites valeurs de $\delta\theta$, à:

$$\underbrace{(k\delta\lambda)^2}_Y = -\underbrace{\sin^2 \delta\theta}_A \underbrace{(k\lambda)^2}_X + \underbrace{(\lambda_0^2 \sin^2 \delta\theta)}_B, \quad (\text{III-15})$$

Un zoom du graphe du haut de la figure III.6 sur les ordres du laser He-Ne permet une mesure des demi largeurs des pics observés, en s'aidant de la loi de conversion des positions (III-13). En traçant les points $(k\delta\lambda)^2$ ainsi obtenus en fonction de $(k\lambda)^2$, on trouve en ajustant par une droite $Y=AX+B$, les deux constantes A et B. On en déduit à partir du rapport B/A la valeur de λ_0 ($\approx 27 \mu\text{m}$) qui conduit à:

$$\frac{1}{\sigma_0^2} = 7.51088 \times 10^{-6} \text{ cm}^2, \quad (\text{III-16})$$

La constante $C_{\delta\sigma}$ ($= \sin\delta\theta$) dépend des ouvertures des fentes de sortie et d'entrée, lesquelles peuvent varier d'une série de mesures à une autre. Cette donnée est déterminée à partir des spectres mesurés, comme indiqué par la figure III.9.

La procédure décrite dans ce chapitre a été effectuée en deux étapes, à savoir l'acquisition des spectres à Reims avec des comparaisons rapides avec quelques calculs, puis traitement des spectres et détermination précise des fonctions d'appareil au laboratoire à Orsay après la campagne de mesures. Le chapitre suivant précise les zones spectrales étudiées et fournit des comparaisons calcul/expérience.

III-4. RÉSULTATS DES CAMPAGNES DE MESURES; COMPARAISON AVEC LES CALCULS

Après une présentation des domaines spectraux étudiés avec des tableaux synthétisant les conditions des spectres mesurés, nous donnerons des comparaisons

calcul/expérience en mettant l'accent sur des points d'accord mais aussi sur des pierres d'achoppement.

III-4-1 NOMBRES D'ONDES ÉTUDIÉS; SYNTHÈSE DES RÉSULTATS

L'utilisation d'un spectromètre à réseau avec une grande longueur d'onde de blaze a l'avantage d'offrir une grande dispersion, donc une bonne résolution pour une grande largeur des fentes et donc un bon rapport signal/bruit. En contrepartie, cela a l'inconvénient d'imposer l'utilisation de filtres optiques étroits [cf. Eq. (III-8)] qui rend difficile (très long) la couverture d'un grand domaine spectral. Pour limiter le travail expérimental, nous avons essayé de couvrir toute la plage spectrale allant de 700 à 5100 cm^{-1} , en ne retenant que les domaines porteurs d'information: les nombres d'onde où l'absorption est, soit très forte, soit très faible, furent donc exclus. La figure III.10 indique quelles sont les régions "intéressantes" et celles qui ont été effectivement étudiées au cours des deux campagnes de mesures effectuées, une en été 1997, l'autre en hiver 1999. Malgré le grand nombre de filtres (dix) acquis, toutes les zones d'intérêt ne purent être étudiées, faute de filtre adapté. Enfin, la figure III.10 ne montre pas la zone 700-1000 cm^{-1} car bien que celle-ci fut testée, nous ne pûmes en tirer de spectre propre; nous y reviendrons lors de la conclusion de cette deuxième partie du manuscrit.

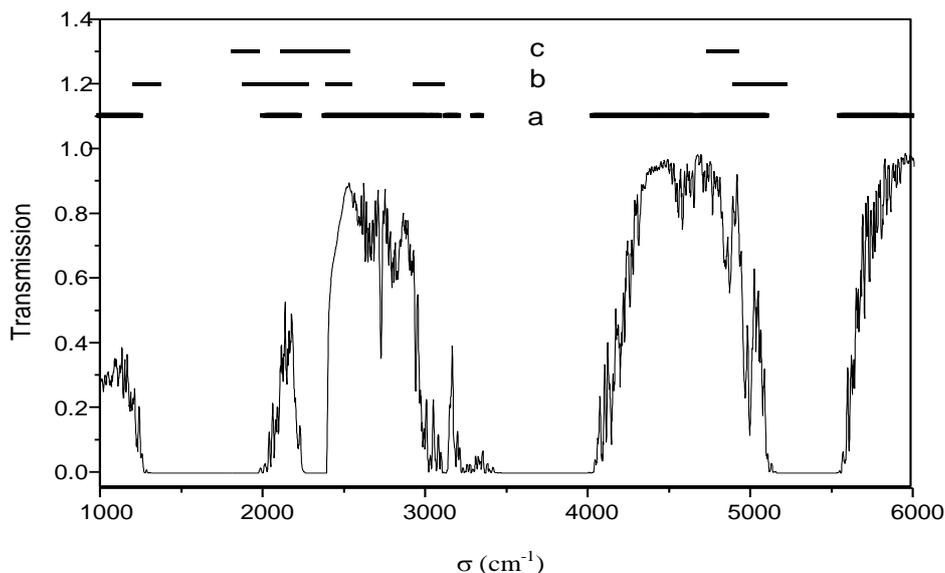


figure III.10: Transmission atmosphérique "typique" sur 4 km (résolution 10 cm^{-1}). Les segments (a), (b), (c) représentent respectivement, les régions "intéressantes", celles étudiées dans le cadre de la deuxième campagne de mesures (hiver 1999), celles étudiées dans le cadre de la première campagne de mesures (été 1997).

Les tableaux suivants synthétisent l'ensemble des mesures de spectres effectuées en apportant les informations nécessaires à leur caractérisation et simulation. Le tableau III.3 regroupe les résultats de la campagne de l'été 1997, où neuf spectres balayant cinq régions spectrales différentes ont été mesurés. Pour ceux-ci la comparaison avec les calculs s'est faite avec une fonction d'appareil uniforme sur tout l'intervalle. Mais pour les résultats de la campagne d'hiver 1999 (19 spectres balayant six régions spectrales; cf tableaux III.4, III.5, et III.6), des informations supplémentaires furent rajoutées pour permettre l'utilisation de la formule (III-3): ordre du réseau, constantes $C_{\delta\sigma}$. Le trajet optique dans la cuve est d'un peu plus de 1 kilomètre et plusieurs pressions totales furent étudiées. Les spectres font apparaître les absorptions de H_2O , CO_2 , CO , N_2O , ainsi que celle du continuum induit par collisions de N_2 . Les fractions molaires des gaz utilisées pour les calculs furent ajustées en partant de données de concentrations atmosphériques standards. Signalons que du point de vue de l'absorption de CO_2 , nous avons simulé des trajets beaucoup plus grands que 1 km, car dans certains spectres nous avons rajouté une quantité de ce gaz (utilisation d'une bouteille de CO_2 reliée à la cuve) bien supérieure à la fraction atmosphérique. Le tableau III.2 indique quels sont les trajets atmosphériques équivalents qui atteignent plus de 500 km.

Spectre	Excès de CO_2 (rapport)	Trajet simulé (km)
T2450-1	453	453
T4825-1	197	197
T5050-3	197	197
T5050-4	56	56
T2630-1	417	417
T2630-2	169	169
T2470-1	697	697
T2080-3	78	78
T2080-4	25	25

tableau III.2: trajets atmosphériques simulés(km) du point de vue de l'absorption de CO_2 . Les conditions des spectres sont détaillées dans les tableaux suivants.

Signalons que, bien que le parcours optique dans la cuve soit de 1003 mètres, le trajet de 9 mètres (notamment dans le spectromètre) au contact de l'air ambiant influe de façon notable pour deux spectres : T3025-3, T3025-4. Pour les autres, l'influence est très faible. En conséquence, il est possible de calculer tous les spectres, hormis les deux cités précédemment, avec un trajet de 1012 m dans les conditions décrites dans les tableaux ci-après. Si l'on désire être plus précis (indispensable pour T3025-3 et T3025-4), il convient de

découper le trajet en deux segments : • l'un de 1003 m correspondant au trajet dans la cuve dans les conditions décrites dans les tableaux. • l'autre de 9 m correspondant au trajet dans l'air ambiant aux conditions typiques suivantes : $T = 290 \text{ K}$, $P = 1. \text{ atm}$, $x_{\text{CO}_2}=3.6 \times 10^{-4}$, $x_{\text{H}_2\text{O}}=0.012$, $x_{\text{O}_3}=0.30 \times 10^{-7}$, $x_{\text{N}_2\text{O}}=0.32 \times 10^{-6}$, $x_{\text{CO}}=0.15 \times 10^{-6}$, $x_{\text{CH}_4}=0.17 \times 10^{-5}$, $x_{\text{N}_2}=0.79$, $x_{\text{O}_2}=0.20$.

Spectre	T2350-1	T2350-2	T2350-3	T2300-1	T2300-2	T2450-1	T1900-1	T1900-2	T4825-1
σ_{Min}	2260	2260	2260	2110	2110	2390	1810	1850	4730
σ_{Max}	2420	2430	2430	2480	2470	2540	1960	1985	4930
$\Delta\sigma_{\text{Haut}}$	0.18	0.18	0.18	0.28	0.28	0.20	0.22	0.22	0.42
$\Delta\sigma_{\text{Bas}}$	0.45	0.45	0.45	0.70	0.70	0.50	0.55	0.55	1.05
L	1010.	1010.	1010.	1010.	1010.	1010.	1010.	1010.	1010.
T	296	296	296	296	296	296	296	296	296
P	0.196	0.393	0.727	0.319	0.640	0.222	0.401	0.807	0.329
x_{CO_2}	$3.6 \cdot 10^{-4}$	0.163	$3.6 \cdot 10^{-4}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	0.071				
$x_{\text{H}_2\text{O}}$	0.018	0.018	0.018	0.018	0.018	0.0151	0.014	0.014	0.013
x_{CO}	$0.3 \cdot 10^{-6}$	$0.25 \cdot 10^{-6}$	$0.3 \cdot 10^{-6}$	$0.3 \cdot 10^{-6}$	$0.28 \cdot 10^{-6}$				
$x_{\text{N}_2\text{O}}$	$0.32 \cdot 10^{-6}$	$0.27 \cdot 10^{-6}$	$0.32 \cdot 10^{-6}$	$0.32 \cdot 10^{-6}$	$0.30 \cdot 10^{-6}$				
x_{N_2}	≈ 0.78	≈ 0.66	≈ 0.78	≈ 0.78	≈ 0.72				
x_{O_2}	≈ 0.20	≈ 0.16	≈ 0.20	≈ 0.20	≈ 0.19				

tableau III.3: Conditions des spectres enregistrés lors de la campagne de l'été 1997. Les paramètres donnés sont: σ_{Min} , σ_{Max} : nombres d'onde (cm^{-1}) de début et fin ; $\Delta\sigma_{\text{Haut}}$, $\Delta\sigma_{\text{Bas}}$: demi largeurs (cm^{-1}) au sommet et à la base de la fonction d'appareil trapézoïdale ; L: longueur du trajet (m) ; T: température (K) ; P: pression totale (atm) ; x_{MOL} : fraction molaire de l'espèce MOL.

	2926-3124				4892-5234			
Spectre	T3025-1	T3025-2	T3025-3	T3025-4	T5050-1	T5050-2	T5050-3	T5050-4
σ_{Min}	2930	2933	2961	2926	4896	4896	4892	4892
σ_{Max}	3124	3118	3104	3120	5234	5234	5223	5121
$\Delta\sigma_{\text{Haut}}$	0.19	0.19	0.19	0.19	0.29	0.29	0.29	0.27
$\Delta\sigma_{\text{Bas}}$	0.84	0.84	0.85	0.84	1.41	1.41	1.40	1.67
L	1012.	1012.	1012.	1012.	1012.	1012.	1012.	1012.
T	288	288	288	288	288	288	288	290
P	0.298	0.149	0.069	0.051	0.294	0.592	0.424	0.365
x_{CO_2}	$3.6 \cdot 10^{-4}$	0.071	0.020					
$x_{\text{H}_2\text{O}}$	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.011	0.018
x_{O_3}	$0.30 \cdot 10^{-7}$							
$x_{\text{N}_2\text{O}}$	$0.32 \cdot 10^{-6}$							
x_{CO}	$0.15 \cdot 10^{-6}$							
x_{CH_4}	$0.17 \cdot 10^{-5}$							
x_{N_2}	≈ 0.79	≈ 0.73	≈ 0.77					
x_{O_2}	≈ 0.20	≈ 0.18	≈ 0.19					
ordre	7	7	7	7	12	12	12	12
$C_{\delta\sigma}^b$	$4.37 \cdot 10^{-4}$	$4.37 \cdot 10^{-4}$	$4.37 \cdot 10^{-4}$	$4.37 \cdot 10^{-4}$	$4.78 \cdot 10^{-4}$	$4.78 \cdot 10^{-4}$	$4.78 \cdot 10^{-4}$	$6.02 \cdot 10^{-4}$
$C_{\delta\sigma}^s$	$9.89 \cdot 10^{-5}$							

Tableau III.4: Conditions des spectres enregistrés lors de la campagne de l'hiver 1999. Les paramètres donnés sont: σ_{Min} , σ_{Max} : nombres d'onde (cm^{-1}) de début et fin; $\Delta\sigma_{\text{Haut}}$, $\Delta\sigma_{\text{Bas}}$: demi largeurs (cm^{-1}) au sommet et à la base de la fonction d'appareil trapézoïdale, au centre de l'intervalle de mesures; L: longueur du trajet (m); T: température (K); P: pression totale (atm); x_{MOL} : fraction molaire de l'espèce MOL; ordre: ordre du réseau; $C_{\delta\sigma}^b$, $C_{\delta\sigma}^s$: constantes associées à la loi de variation (III-3) des demi largeurs de la fonction d'appareil, respectivement à la base et au sommet.

Spectre	1199-1374		2563-2701			
	T1300-1	T1300-2	T2630-1	T2630-2	T2630-3	T2630-4
σ_{Min}	1248	1199	2568	2563	2582	2572
σ_{Max}	1374	1367	2696	2701	2666	2695
$\Delta\sigma_{\text{Haut}}$	0.09	0.08	0.46	0.46	0.46	0.46
$\Delta\sigma_{\text{Bas}}$	0.38	0.34	0.77	0.77	0.76	0.77
L	1012.	1012.	1012.	1012.	1012.	1012.
T	291	291	290	290	290	290
P	0.198	0.594	0.197	0.987	0.396	0.988
x_{CO_2}	$3.6 \cdot 10^{-4}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	0.15	0.061	$3.6 \cdot 10^{-4}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$
$x_{\text{H}_2\text{O}}$	$0.90 \cdot 10^{-2}$	$0.90 \cdot 10^{-2}$	0.043	0.019	0.015	0.015
x_{O_3}	$0.30 \cdot 10^{-7}$					
$x_{\text{N}_2\text{O}}$	$0.32 \cdot 10^{-6}$					
x_{CO}	$0.15 \cdot 10^{-6}$					
x_{CH_4}	$0.17 \cdot 10^{-5}$					
x_{N_2}	≈ 0.79	≈ 0.79	≈ 0.65	≈ 0.74	≈ 0.78	≈ 0.78
x_{O_2}	≈ 0.20	≈ 0.20	≈ 0.16	≈ 0.18	≈ 0.20	≈ 0.20
ordre	3	3	6	6	6	6
$C_{\delta\sigma}^b$	$4.37 \cdot 10^{-4}$					
$C_{\delta\sigma}^s$	$9.89 \cdot 10^{-5}$	$9.89 \cdot 10^{-5}$	$2.64 \cdot 10^{-4}$	$2.64 \cdot 10^{-4}$	$2.64 \cdot 10^{-4}$	$2.64 \cdot 10^{-4}$

tableau III.5: Conditions des spectres enregistrés lors de la campagne de l'hiver 1999. Même légende que Tableau III.4

	2386-2553	1876-2284			
Spectre	T2470-1	T2080-1	T2080-2	T2080-3	T2080-4
σ_{Min}	2386	1876	1876	1889	1884
σ_{Max}	2553	2284	2273	2247	2239
$\Delta\sigma_{\text{Haut}}$	0.34	0.30	0.30	0.29	0.29
$\Delta\sigma_{\text{Bas}}$	0.56	0.50	0.49	0.48	0.47
L	1012.	1012.	1012.	1012.	1012.
T	292	291	289	289	289
P	0.197	0.199	0.619	0.198	0.644
X_{CO_2}	0.251	$3.6 \cdot 10^{-4}$	$3.6 \cdot 10^{-4}$	0.028	$0.90 \cdot 10^{-2}$
$x_{\text{H}_2\text{O}}$	0.11	$0.68 \cdot 10^{-2}$	$0.53 \cdot 10^{-2}$	$0.53 \cdot 10^{-2}$	$0.80 \cdot 10^{-2}$
x_{O_3}	$0.30 \cdot 10^{-7}$				
$x_{\text{N}_2\text{O}}$	$0.32 \cdot 10^{-6}$				
x_{CO}	$0.15 \cdot 10^{-6}$	$0.15 \cdot 10^{-6}$	$0.60 \cdot 10^{-6}$	$0.60 \cdot 10^{-6}$	$0.60 \cdot 10^{-6}$
x_{CH_4}	$0.17 \cdot 10^{-5}$				
x_{N_2}	≈ 0.51	≈ 0.79	≈ 0.79	≈ 0.77	≈ 0.78
x_{O_2}	≈ 0.13	≈ 0.20	≈ 0.20	≈ 0.19	≈ 0.19
Ordre	6	5	5	5	5
$C_{\delta\sigma}^b$	$4.37 \cdot 10^{-4}$				
$C_{\delta\sigma}^s$	$2.64 \cdot 10^{-4}$				

tableau III.6: Conditions des spectres enregistrés lors de la campagne de l'hiver 1999. Même légende que Tableau III.4

III-4-2 COMPARAISONS CALCULS/MESURES

L'approche raie par raie développée dans le cadre de cette thèse et telle qu'exposée lors de la première partie du manuscrit, fut utilisée pour simuler les spectres enregistrés à Reims. Rappelons que le coefficient d'absorption est séparé en deux termes $[\kappa(\sigma) = \kappa_{\Delta\sigma_c}^{\text{local}}(\sigma) + \kappa_{\Delta\sigma_c}^{\text{loin+AIC}}(\sigma)]$ où le premier résulte des contributions locales des raies, le

second provenant des continua dus aux ailes lointaines et à l'absorption induite par collisions. Le calcul tient compte de la résolution finie du spectromètre en convoluant la transmission à haute résolution par la fonction d'appareil (L désignant la longueur du trajet optique):

$$\bar{\tau}(\sigma) = \int_0^{+\infty} e^{-\kappa(\sigma')L} f_{\text{app}}(\sigma' - \sigma) d\sigma', \quad (\text{III-17})$$

Les spectres enregistrés sont trop nombreux pour faire tous l'objet d'une présentation. Nous n'en avons retenu qu'une petite partie, en choisissant des résultats illustratifs et représentatifs. Les illustrations suivantes (figure III.11 à figure III.15) témoignent d'un bon accord entre les expériences et le code de calcul raie par raie, les erreurs se bornant à quelques pour cents. Notons que les absorption mesurées couvrent plusieurs bandes différentes de CO_2 et H_2O .

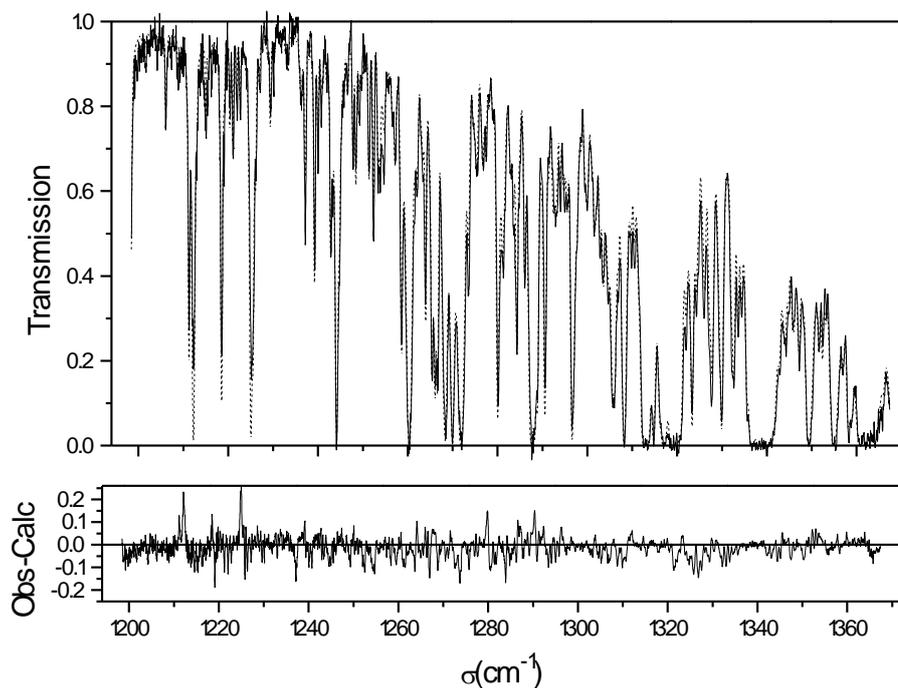


figure III.11: Transmission mesurée (—), calculée (- - -), et les différences mesures-calculs pour le spectre T1300-2 où domine la contribution de H_2O

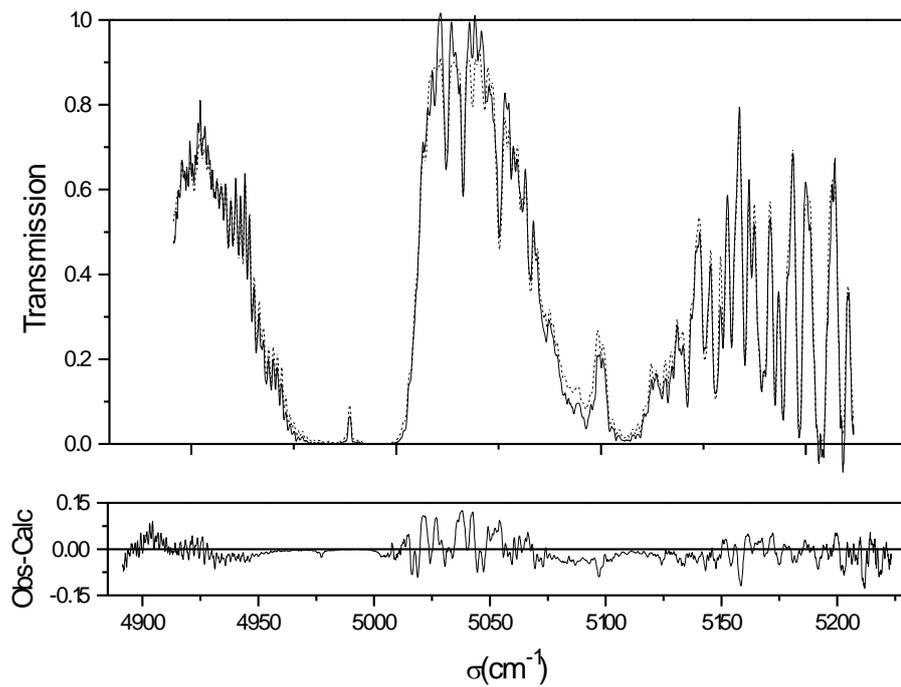


figure III.12: Même légende que pour la figure III.11 pour le spectre T5050-3 où domine la contribution de CO_2 .

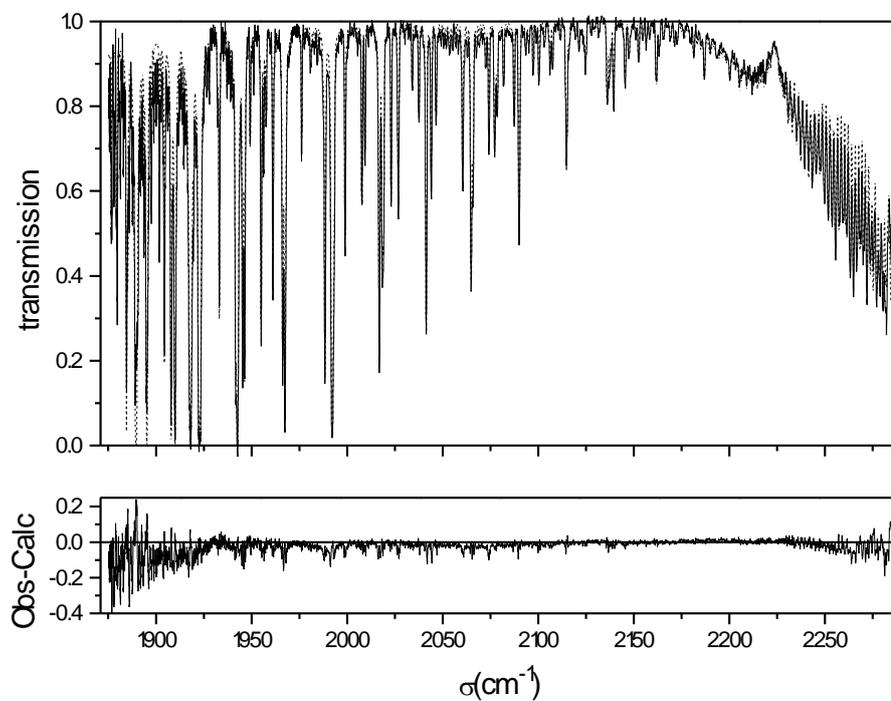


figure III.13: Même légende que pour la figure III.11 pour le spectre T2080-1 où CO_2 (à droite) et H_2O (à gauche) font les contributions principales.

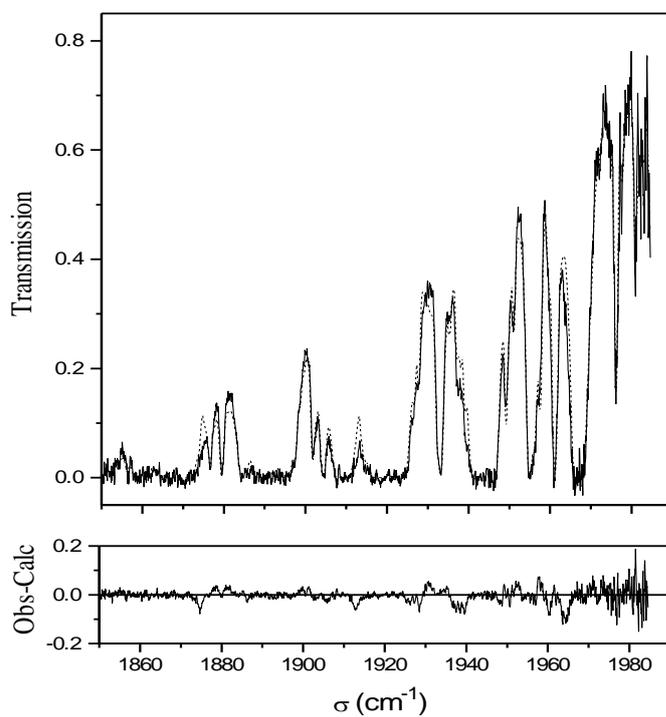


figure III.14: Même légende que pour la figure III.11 pour le spectre T1900-2 où la l'absorption est principalement due à H₂O.

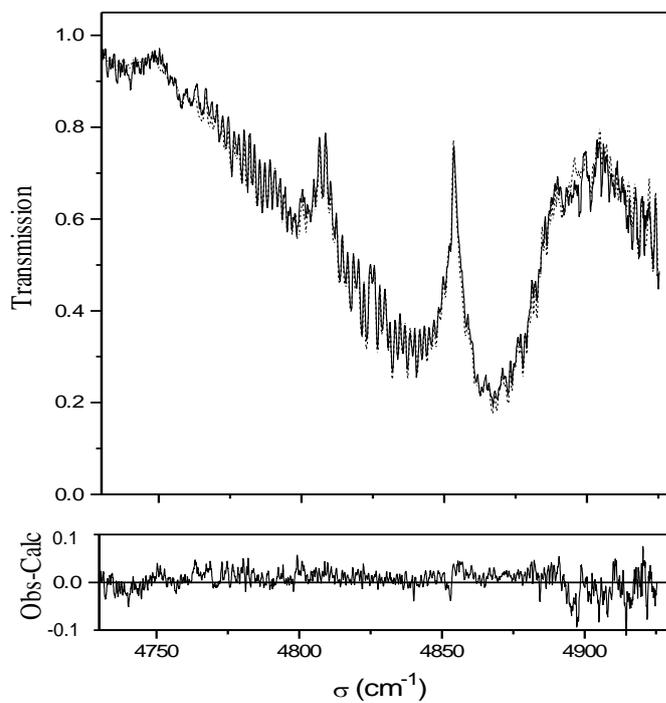


figure III.15: Même légende que pour la figure III.11 pour le spectre T4825-1.

Les spectres présentés sur les figures III.16 et III.17 ont été obtenus avec une fraction de CO₂ importante afin de sonder l'absorption dans les ailes lointaines. Ils prouvent que le calcul du continuum de CO₂ dans la région de l'aile de la bande ν_3 vers 4 μm est correct. La figure III.18 indique en effet que l'absorption dans cette région est dominée par le continuum qui porte quelques contributions de transitions locales.

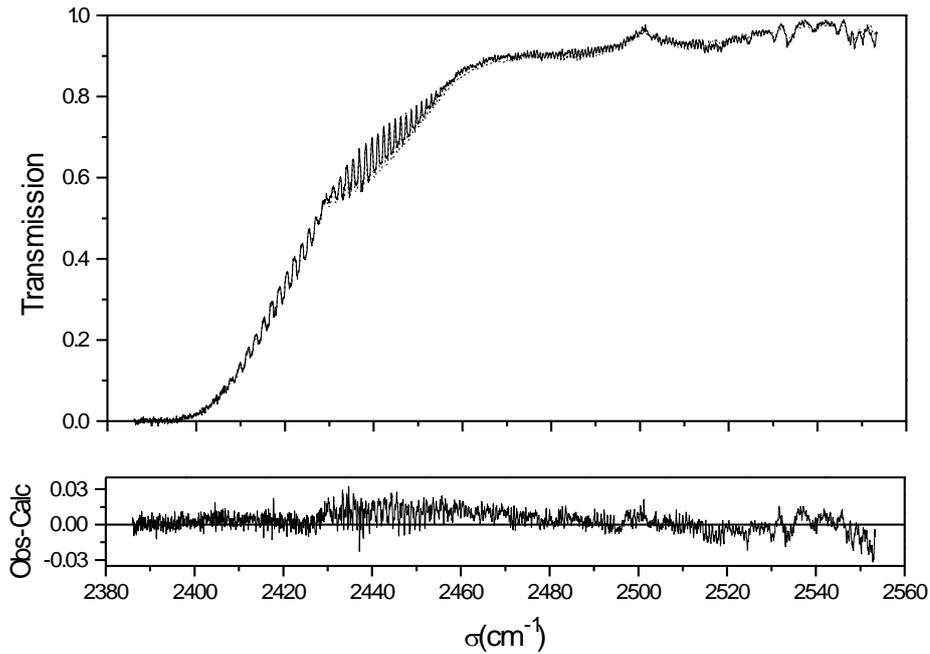


figure III.16: Même légende que pour la figure III.11 pour le spectre T2470-1.

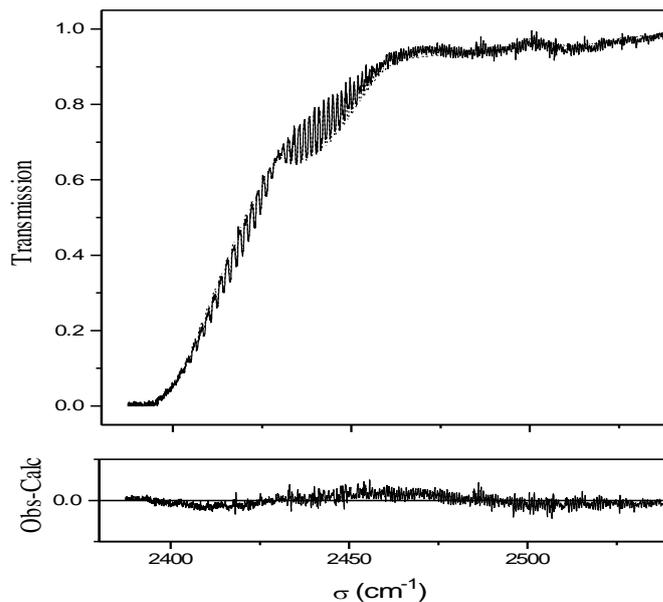


figure III.17: Même légende que pour la figure III.11 pour le spectre T2450-1

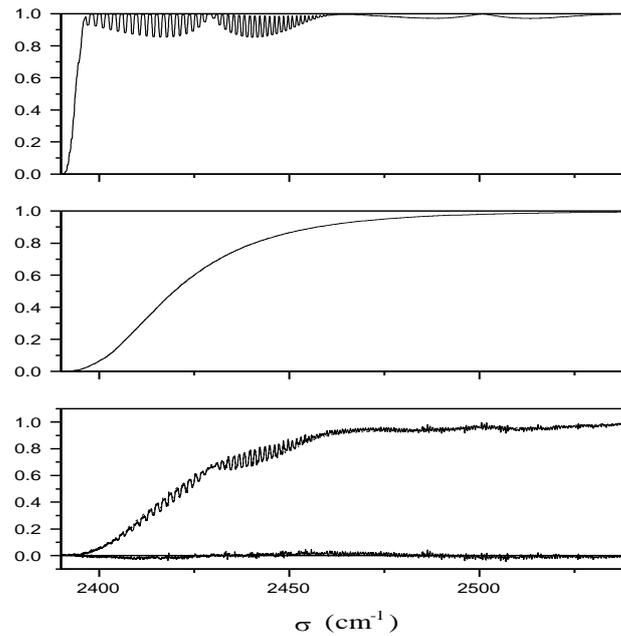


figure III.18: Transmission correspondant au spectre T2450-1

En bas: — mesures, - - - calculs et écarts

Au dessus : contributions locales (haut) et continuum (milieu) de CO_2

L'exemple suivant indique que les prédictions dans la région 4-5 μm (fig. III.19) sont bonnes malgré le fait que le spectre de l'air ambiant soit complexe. En effet (fig. III.20 et III.21) on y distingue les contributions simultanées significatives de H_2O , CO_2 , CO , N_2O et N_2 .

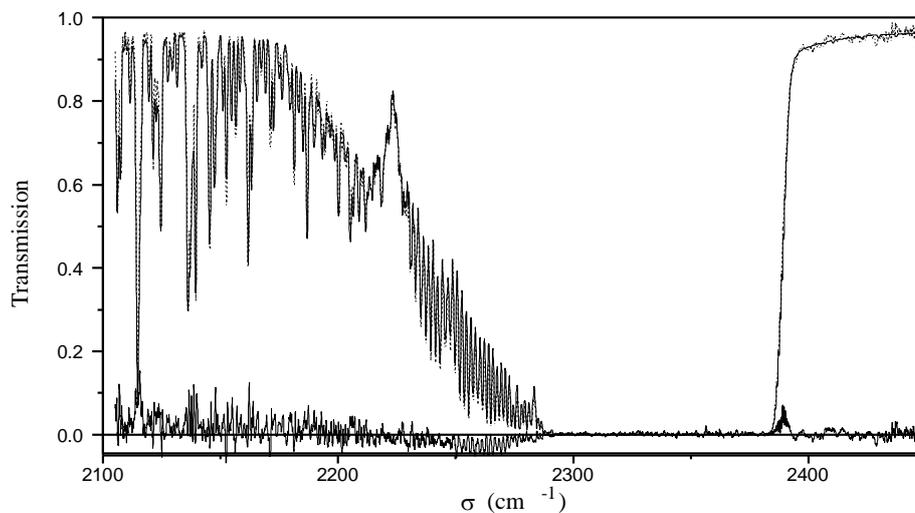


figure III.19: Même légende que pour la figure III.11 pour le spectre T2300-2

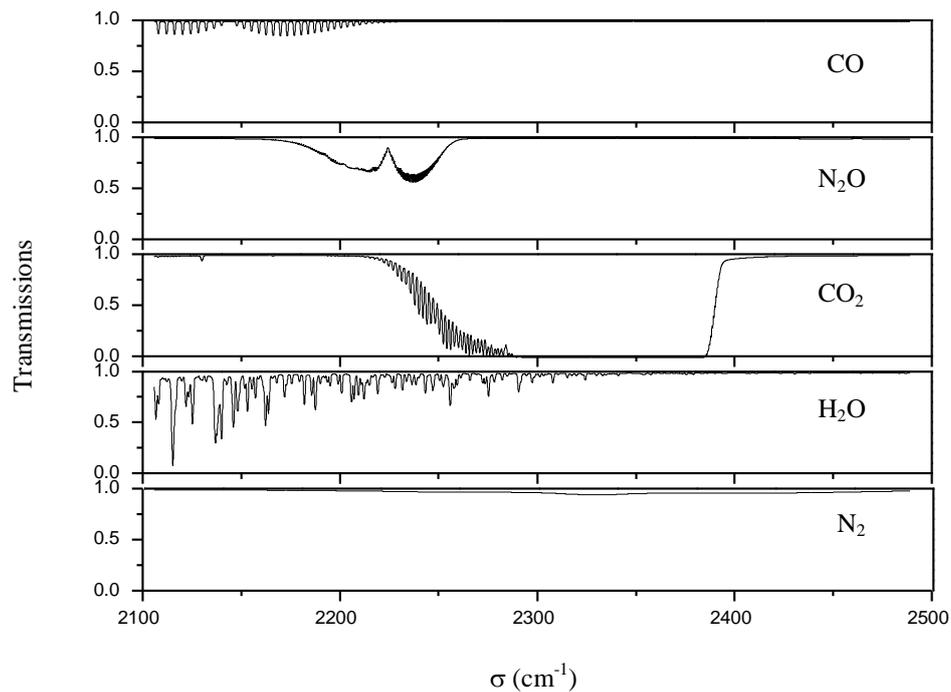


figure III.20: Contributions des différents gaz à la transmission calculée de la figure III.19

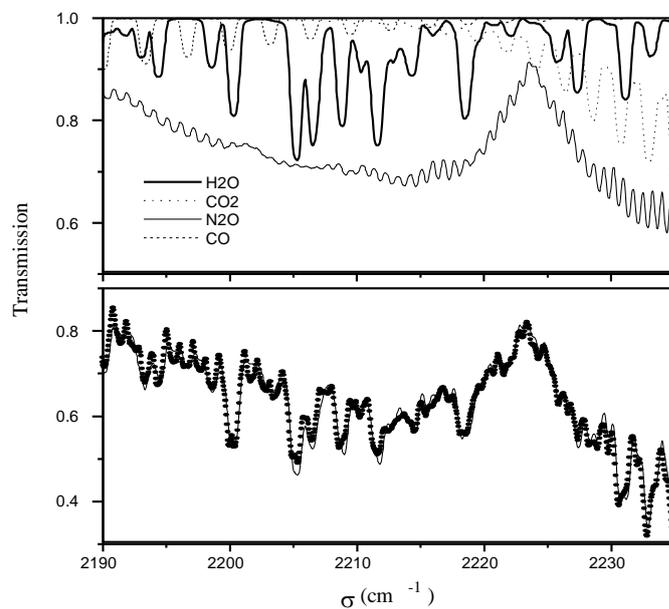


figure III.21: Vue détaillée des résultats de la figure III.19 et de la figure III.20.

III-5. CONCLUSION: BILAN DES CAMPAGNES DE MESURES, PERSPECTIVES

Deux constats positifs peuvent être faits à l'issue des travaux expérimentaux présentés dans ce chapitre. Le premier est que les mesures ont confirmé la qualité des prédictions obtenues avec l'approche raie par raie et les données associées présentées dans la première partie de ce mémoire. Le second point positif est que nous avons prouvé qu'il était possible d'effectuer des mesures, en laboratoire, pour des trajets kilométriques dans une vaste gamme infrarouge et avec une résolution spectrale correcte.

Ce dernier point ouvre des perspectives intéressantes en ce qui concerne l'étude du continuum de la vapeur d'eau qui reste mal connu malgré son importance considérable pour la physique de l'atmosphère. Une tentative de mesure a été faite dans la région $700\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$ dont les résultats sont comparés aux calculs sur la figure III.22. Ils confirment que l'absorption due au continuum est suffisante pour pouvoir être mesurée mais deux problèmes demeurent.

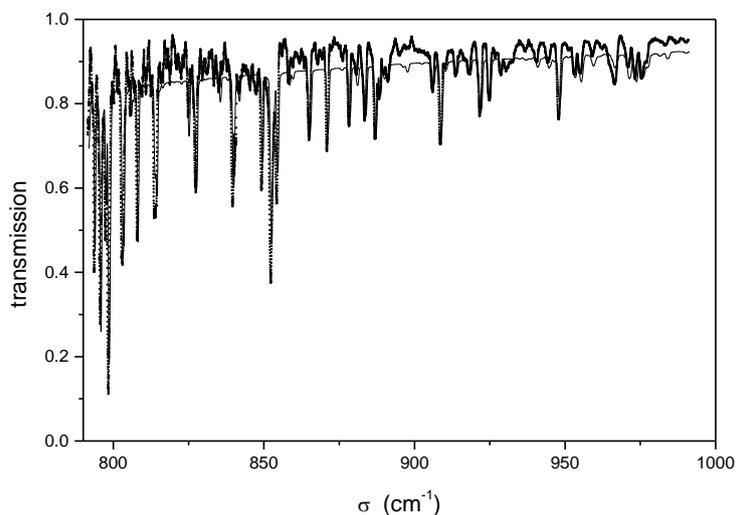


figure III.22: transmissions pour un mélange H_2O -air à 1.9% de H_2O , 290 K et 1 atm sur 1 kilomètre: • et — sont les valeurs mesurées et calculées

Le premier est lié à la durée des enregistrements qui est de plusieurs heures dans cette région spectrale en raison des caractéristiques du réseau utilisé. La stabilité de l'ensemble du système expérimental à ces échelles de temps est alors difficile à obtenir. C'est en particulier

le cas pour l'émission de la source. Le second problème est lié à la qualité du signal qui se détériore à ces grandes longueurs d'onde pour plusieurs raisons (faible émission de la source, détecteurs moins performants, diminution du coefficient de réflexion des miroirs de la cuve). La solution, qui sera probablement explorée dans le futur, est sans doute l'utilisation d'un spectromètre à transformée de Fourier. On peut en attendre une augmentation significative du rapport signal/bruit puisque l'étude du continuum ne requiert que des résolutions moyennes mais également une considérable réduction de la durée des mesures.

IV. MESURES D'ABSORPTION INFRAROUGE CUVE CHAUDE-CUVE FROIDE

IV-1. INTRODUCTION: BUT DE L'ÉTUDE EXPÉRIMENTALE

Tout calcul de télédétection repose sur la maîtrise de l'émission/absorption infrarouge de colonnes gazeuses représentatives. Dans le chapitre précédent nous avons présenté une expérience reproduisant des trajets atmosphériques kilométriques. Or, la signature infrarouge d'un aéronef est le résultat, sur une colonne de gaz, de l'émission de la partie chaude de la colonne (l'aéronef et ses gaz de combustion) et de l'absorption essentiellement par la partie froide de la colonne (atmosphère).

Afin de reproduire expérimentalement des cas de figure les plus proches possibles de ceux mis en jeu par les applications de type signature, un second dispositif a été utilisé qui fait traverser à un faisceau lumineux deux cuves, une chaude et une froide. Ce montage et les mesures associées, stimulés par notre travail de thèse, ont été développés au LPALMS¹ à Rennes par R. Le Doucen et B. Khalil. Certes, le trajet froid se limite ici à quelques dizaines de mètres contrairement au kilomètre de Reims, mais nous avons voulu mettre l'accent sur la juxtaposition d'un trajet chaud avec un trajet froid, de façon à ce qu'il n'y ait pas de prépondérance d'un segment sur l'autre et que la transmission de la colonne totale ne soit pas identique à la transmission d'un des deux segments seul. Nous nous sommes focalisés sur deux régions: 4.3 μm et 10 μm où plusieurs conditions de pression et température dans chaque cuve ont été étudiées. Au-delà de l'aspect juxtaposition cuve chaude - cuve froide, nous devons mentionner que c'est la première fois, à notre connaissance, qu'à haute

¹ Laboratoire de Physique des Atomes, Lasers, Molécules et Surfaces – Université de Rennes I, campus de Beaulieu, 35042 Rennes cedex, France.

température en cuve (près de 1000 K), des spectres infrarouges d'absorption de si haute résolution (0.025 ou 0.050 cm^{-1} de demi-largeur à la base de la fonction d'appareil) sont obtenus sur de si larges gammes spectrales (850 – 1150 cm^{-1} et 1850 – 2700 cm^{-1}). En effet, les mesures effectuées par d'autres auteurs à température élevée [SCUT,93], [PHIL,92], [CLAU,99] sont limitées à une cuve unique et à des résolutions bien moindres.

Le plan de cette troisième partie suit globalement celui de la précédente, à savoir une présentation du dispositif expérimental, puis un exposé des résultats obtenus avec des comparaisons mesures/calculs, les calculs étant menés avec le code raie par raie présenté dans la première partie. Nous discuterons les modèles physiques retenus pour le code, ainsi que la validité des bases de données spectroscopiques utilisées.

IV-2. DESCRIPTION DU DISPOSITIF

Le dispositif expérimental complet, schématisé sur la figure ci-dessous, comprend plusieurs éléments: un ensemble source + spectromètre, une cuve chaude, une cuve froide, un système de détection qui sont détaillés ci-après.

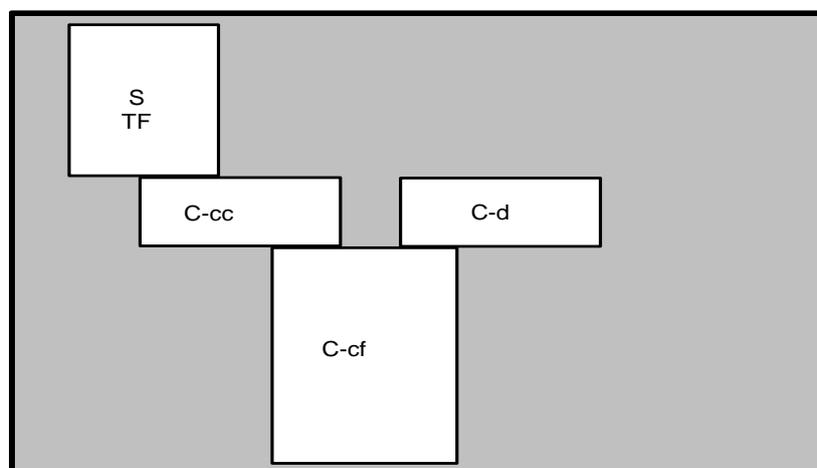


figure IV.1: Schéma général du dispositif expérimental. *S*: source; *TF*: spectromètre à transformée de Fourier; *C-cc*: Caisson de la cuve chaude; *C-cf*: Caisson de la cuve froide; *C-d*: Caisson de détection

Le spectromètre: L'appareil utilisé pour sélectionner les longueurs d'onde est un spectromètre à transformée de Fourier commercial. Le modèle utilisé est un IFS-120HR de chez Bruker. Il est équipé d'une source glowbar et d'une séparatrice en KBr. Il permet d'atteindre des résolutions de $2.10^{-3} \text{ cm}^{-1}$, avec des différences de marche de 2 mètres. Cet instrument très performant existait déjà au LPALMS.

Le caisson renfermant la cuve chaude: Le faisceau parallèle en sortie du TF entre dans un caisson qui a été acquis chez Bruker pour les besoins de l'expérience; son contenu est schématisé sur la figure IV.2. C'est une enceinte à vide qui renferme la cuve chaude, avec un traitement du faisceau par des miroirs toroïdaux, acquis et fabriqués aux USA.

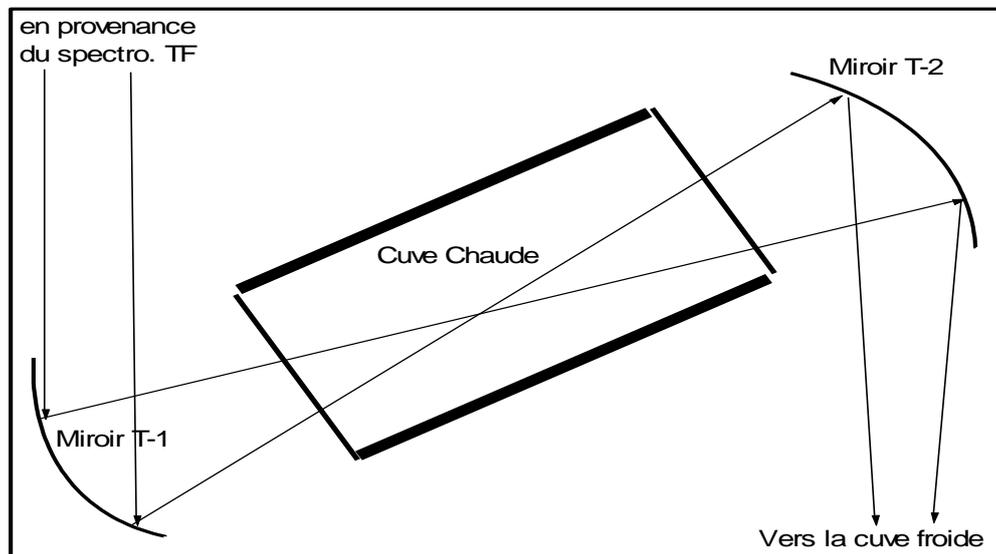


figure IV.2: Schéma du caisson de la cuve chaude (les miroirs T-1 et T-2 sont des miroirs toroïdaux)

Signalons qu'une partie du rayonnement thermique émis par la cuve entre, "en marche arrière", dans le spectromètre où elle y est modulée avant de ressortir en direction du détecteur. Cette contribution parasite a été supprimée par des moyens géométriques à l'aide d'un diaphragme occultant la moitié du faisceau. En effet les miroirs "coins-cubes" utilisés dans le spectromètre assurent que le faisceau émis par la cuve et rentrant dans la partie droite de la fenêtre de sortie du spectromètre ressort par la partie gauche. La cuve chaude, qui préexistait, est simple passage avec une longueur de 19.8 cm. Il s'agit d'un cylindre en acier inoxydable avec des fenêtres en ZnSe fixées par des joints helicoflex entourés d'argent. Cette cuve est enchâssée dans une importante masse cylindrique en métal qui homogénéise la

température afin de minimiser les gradients résiduels et les oscillations induites par le système de régulation. Deux anneaux articulés en céramique chauffent la masse métallique qui peut atteindre des températures de 1000 K environ, la cuve restant parfaitement étanche. L'ensemble est enveloppé dans un matériau isolant de 25 mm d'épaisseur composé de fibres en céramique. Afin de réduire le rayonnement émis par cet ensemble, qui réchauffe l'enceinte à vide, un cylindre de cuivre refroidi par une circulation d'eau ceinture le tout. La température est mesurée grâce à trois thermocouples de type K le long de la cuve. Elle est asservie par un système de régulation du chauffage qui limite les oscillations à moins que 1K.

La cuve froide: Le faisceau, convergeant en sortie du caisson renfermant la cuve chaude, entre dans celui renfermant la cuve froide. Celle-ci, qui préexistait, est une cellule de White multi-passages avec une longueur de base de 2 mètres. Elle est schématisée sur la figure IV.3. Admettant des réflexions multiples d'un faisceau, elle permet des trajets optiques de 8 à 160 mètres. De plus on peut régler sa température entre 100 et 400K. Pour les expériences dont les résultats sont présentés ici, le trajet dans la cuve froide fut de 48 mètres.

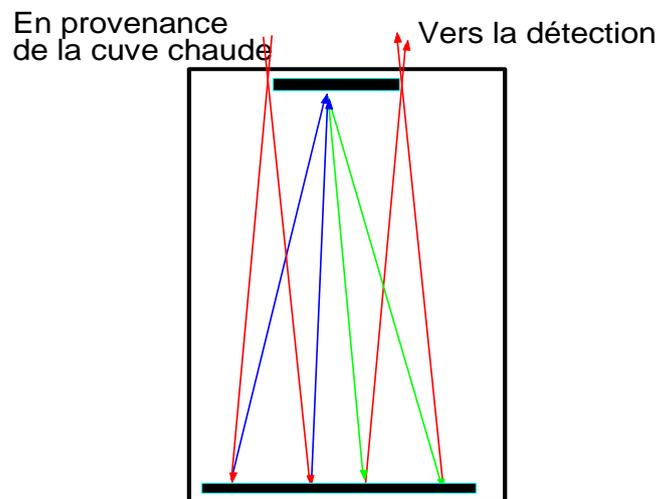


figure IV.3: Schéma du caisson de la cuve froide multi-passages

La détection: Le faisceau divergeant à la sortie de la cuve froide entre dans un caisson de détection, dont la plupart des éléments ont été acquis pour les mesures. Le faisceau est traité par une succession de miroirs avant de converger sur le détecteur, comme le montre la figure IV.4. Le détecteur est du type InSb ou HgCdTe refroidi à l'azote liquide. Nous avons évoqué précédemment le problème du rayonnement thermique de la cuve chaude qui se dirigeait vers

le spectromètre et y était modulé. Mais une autre partie de ce rayonnement traverse la cuve froide pour ensuite atteindre le détecteur. N'étant pas modulée, elle se traduit par un fond continu dans les spectres enregistrés qui est sans intérêt et perturbe (bruit) la mesure. Afin de réduire l'étendue spectrale et spatiale de ce fond, un filtre infrarouge passe-bande étroit et un petit diaphragme sont placés en un point de focalisation entre les cuves et le détecteur.

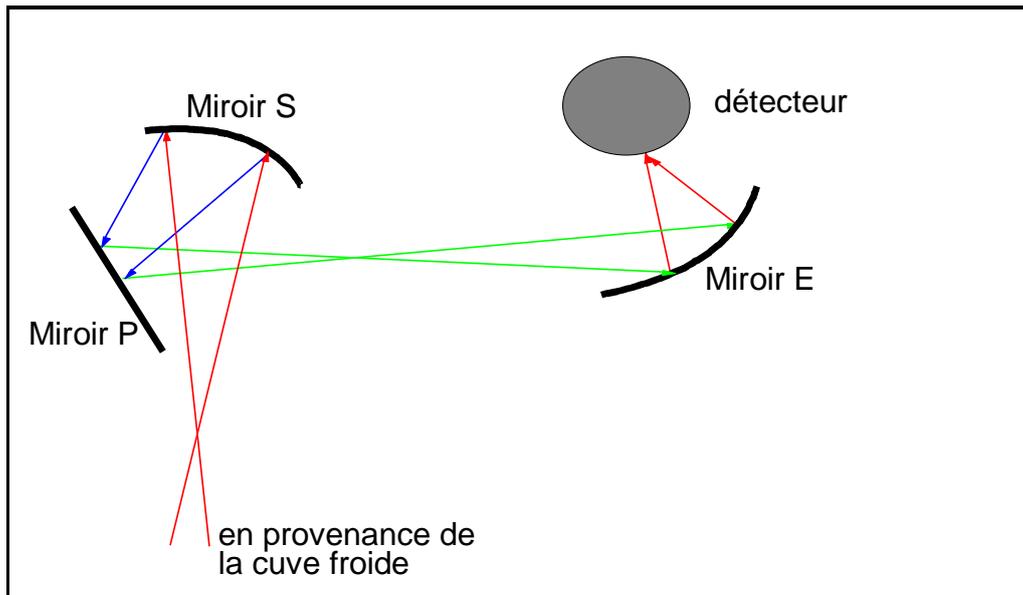


figure IV.4: Schéma du caisson de détection (les miroirs S, P, E sont respectivement sphérique, plan, et elliptique)

IV-3. RÉSULTATS DES MESURES; COMPARAISONS AVEC LE CALCUL

Deux séries de mesures ont été menées avec des mélanges $\text{CO}_2\text{-N}_2$, dans les régions $4.3 \mu\text{m}$ ($1850 - 2700 \text{ cm}^{-1}$) et $10 \mu\text{m}$ ($850 - 1150 \text{ cm}^{-1}$). Chaque spectre résulte d'une moyenne sur 100 scans. Les conditions de la cuve chaude sont les suivantes: 19.8 cm de longueur, trois températures 600K, 800K, 973K, des pressions de 2 atm à 3.8 atm, des

fractions molaires de CO₂ de 3.6 à 32.6 % environ. Pour la cuve froide, nous avons 48 m, sous -64°C à 31°C, 1.01 atm à 0.78 atm, 3.9 à 4.5% CO₂. Du point de vue de la cuve froide, nous simulons des trajets atmosphériques pouvant atteindre 6 km, puisque la concentration de CO₂ dans l'atmosphère est d'environ 0.037%. Les conditions expérimentales qui furent étudiées sont synthétisées, pour les deux régions étudiées, dans les tableaux donnés ci-après.

Le principe du traitement des mesures est assez semblable à celui appliqué pour les expériences de Reims: on obtient des transmissions en faisant le rapport signal cuve(s) pleine(s) sur signal cuves vides. La résolution est bien meilleure que celles atteintes avec le réseau à Reims: 0.025 cm⁻¹ à 0.05 cm⁻¹ de demi-largeur à la base de la fonction sinus cardinal, typique d'un spectromètre de Fourier, contre un ordre de grandeur de 1 cm⁻¹ à Reims avec une fonction trapèze. Les demi-largeurs caractéristiques des raies de CO₂ élargies par l'air à la température de la cuve chaude (800K typiquement) sont $0.1 \times (296/800)^{0.7} \times 3 \sim 0.15$ cm⁻¹. La résolution est donc suffisamment bonne pour que la fonction d'appareil ne modifie par la forme réelle des raies; on peut alors la considérer comme infinie et donc ne pas effectuer de calcul de convolution par une fonction d'appareil en se limitant à un calcul à haute résolution.

Fichier	Cuve Chaude				Cuve Froide				
	nom	T _c	P _c	xCO _{2c}	xN _{2c}	T _f	P _f	xCO _{2f}	xN _{2f}
ABB6A0X	603.1	2.1515	0.3975E-1	0.9602E+0	-----	-----	-----	-----	-----
ABB6A2X	603.1	2.2699	0.1878E+0	0.8122E+0	-----	-----	-----	-----	-----
ABB6A5X	-----	-----	-----	-----	303.6	1.0165	0.3935E-1	0.9607E+0	-----
ABB6S7X	603.1	2.2699	0.1530E+0	0.8470E+0	303.6	1.0165	0.3935E-1	0.9607E+0	-----
ABB6S9X	-----	-----	-----	-----	303.6	1.0165	0.3935E-1	0.9607E+0	-----
ABB6S11	803.1	3.0891	0.1529E+0	0.8471E+0	303.6	1.0165	0.3935E-1	0.9607E+0	-----
ABB7A0X	586.1	2.1021	0.1878E+0	0.8122E+0	-----	-----	-----	-----	-----
ABB7A1X	-----	-----	-----	-----	253.1	0.9563	0.4183E-1	0.9582E+0	-----
ABB7S3X	586.1	2.2206	0.3259E+0	0.6741E+0	253.1	0.9563	0.4183E-1	0.9582E+0	-----
ABB7A4X	-----	-----	-----	-----	253.1	0.9563	0.4183E-1	0.9582E+0	-----
ABB7S6X	797.1	3.1582	0.3041E+0	0.6959E+0	253.1	0.9563	0.4183E-1	0.9582E+0	-----
ABB8A2X	602.1	2.2798	0.3001E+0	0.6999E+0	231.1	0.9563	0.4183E-1	0.9582E+0	-----
ABB8S1X	-----	-----	-----	-----	231.1	0.9563	0.4183E-1	0.9582E+0	-----
ABB9A0X	804.1	3.0693	0.3215E+0	0.6785E+0	-----	-----	-----	-----	-----
ABB9A1X	-----	-----	-----	-----	231.1	0.9336	0.4228E-1	0.9577E+0	-----
ABB9S4X	804.1	3.0595	0.3247E+0	0.6753E+0	231.1	0.9336	0.4228E-1	0.9577E+0	-----
ABB10A0	601.1	2.4377	0.2812E+0	0.7188E+0	-----	-----	-----	-----	-----
ABB10A1	601.1	2.4377	0.2812E+0	0.7188E+0	209.1	0.7797	0.4472E-1	0.9553E+0	-----
ABB10A2	-----	-----	-----	-----	209.1	0.7797	0.4472E-1	0.9553E+0	-----
ABB10A3	799.1	3.0595	0.3243E+0	0.6757E+0	209.1	0.7797	0.4472E-1	0.9553E+0	-----
ABB10A4	-----	-----	-----	-----	209.1	0.7797	0.4472E-1	0.9553E+0	-----

Conditions expérimentales des spectres dans la région 850-1150 cm⁻¹

Températures (T_c, T_f) en K. Pressions (P_c, P_f) en atm. xCO₂ et xN₂ sont les fractions molaires

Rq: la présence de tirets (---) signifie que la cuve concernée est vide.

Fichier	Cuve Chaude				Cuve Froide			
	nom	T _c	P _c	xCO _{2c}	xN _{2c}	T _f	P _f	xCO _{2f}
ABB1A0X	602.1	2.1416	0.4768E-1	0.9523E+0	-----	-----	-----	-----
ABB1A1X	600.1	2.1416	0.4768E-1	0.9523E+0	303.6	1.0363	0.3949E-1	0.9605E+0
ABB1A2X	600.1	2.4180	0.1631E+0	0.8369E+0	303.6	1.0363	0.3949E-1	0.9605E+0
ABB1A3X	-----	-----	-----	-----	303.6	1.0363	0.3949E-1	0.9605E+0
ABB1A4X	-----	-----	-----	-----	304.1	1.0363	0.3949E-1	0.9605E+0
ABB1A5X	800.1	2.9509	0.4780E-1	0.9522E+0	304.1	1.0363	0.3949E-1	0.9605E+0
ABB1A6X	800.1	2.9706	0.1878E+0	0.8122E+0	304.1	1.0363	0.3949E-1	0.9605E+0
ABB1A7X	-----	-----	-----	-----	304.1	1.0363	0.3949E-1	0.9605E+0
ABB1A8X	973.1	3.7503	0.4070E-1	0.9593E+0	304.1	1.0363	0.3949E-1	0.9605E+0
ABB1A9X	973.1	3.7503	0.4070E-1	0.9593E+0	-----	-----	-----	-----
ABB2A0X	-----	-----	-----	-----	253.6	0.9037	0.4149E-1	0.9585E+0
ABB2A1X	600.1	2.2008	0.4783E-1	0.9522E+0	253.6	0.9037	0.4149E-1	0.9585E+0
ABB2A3X	810.1	3.1285	0.4668E-1	0.9533E+0	253.6	0.9037	0.4149E-1	0.9585E+0
ABB2A4X	-----	-----	-----	-----	253.6	0.9037	0.4149E-1	0.9585E+0
ABB3A0X	973.1	3.2667	0.3996E-1	0.9600E+0	-----	-----	-----	-----
ABB3A1X	973.1	3.2667	0.3996E-1	0.9600E+0	253.1	0.9208	0.4115E-1	0.9588E+0
ABB3A2X	-----	-----	-----	-----	253.1	0.9208	0.4115E-1	0.9588E+0
ABB4A0X	-----	-----	-----	-----	234.8	0.8537	0.4115E-1	0.9588E+0
ABB4A1X	618.1	2.1712	0.3878E-1	0.9612E+0	234.8	0.8537	0.4115E-1	0.9588E+0
ABB4A2X	-----	-----	-----	-----	234.8	0.8537	0.4115E-1	0.9588E+0
ABB4A4X	803.1	3.0792	0.5000E-1	0.9500E+0	234.8	0.8537	0.4115E-1	0.9588E+0
ABB4A5X	-----	-----	-----	-----	234.8	0.8537	0.4115E-1	0.9588E+0
ABB4A6X	973.1	3.8490	0.3931E-1	0.9607E+0	234.8	0.8537	0.4115E-1	0.9588E+0
ABB5A0X	601.1	2.4180	0.3613E-1	0.9639E+0	-----	-----	-----	-----
ABB5A1X	601.1	2.4180	0.3613E-1	0.9639E+0	213.1	0.7761	0.4293E-1	0.9571E+0
ABB5A2X	-----	-----	-----	-----	213.1	0.7761	0.4293E-1	0.9571E+0
ABB5A4X	-----	-----	-----	-----	213.1	0.7761	0.4293E-1	0.9571E+0
ABB5A5X	799.1	2.9114	0.3959E-1	0.9604E+0	213.1	0.7761	0.4293E-1	0.9571E+0
ABB5A8X	799.1	3.0299	0.3752E-1	0.9625E+0	-----	-----	-----	-----
ABB5A6X	-----	-----	-----	-----	213.1	0.7761	0.4293E-1	0.9571E+0
ABB5A7X	973.1	3.6812	0.4257E-1	0.9574E+0	213.1	0.7761	0.4293E-1	0.9571E+0

Conditions expérimentales des spectres dans la région 1850-2700 cm⁻¹

Températures (T_c, T_f) en K. Pressions (P_c, P_f) en atm. xCO₂ et xN₂ sont les fractions molaires

Rq: la présence de tirets (---) signifie que la cuve concernée est vide.

Trois types de dispositions furent étudiés: (cuve chaude pleine - cuve froide vide), (cuve chaude vide – cuve froide pleine), (cuve chaude pleine - cuve froide pleine) pour diverses conditions détaillées dans les tableaux. Chaque spectre contient un nombre considérable d'informations, car constitué de plusieurs dizaines de milliers de points. Insistons sur le fait que des mesures d'absorption infrarouge à haute température sur de si larges gammes spectrales et avec une si bonne résolution, constituent, à notre connaissance, une première. Le nombre de spectres enregistrés est beaucoup trop grand (plus de 50) pour tous les présenter. Nous n'avons alors retenu que les plus représentatifs par rapport à des discussions sur le domaine d'applicabilité des bases de données ou sur la validité du modèle

physique retenu pour le code raie par raie. Le chapitre IV-3-1 montrera des mesures comparées à des calculs qui emploient tour à tour les deux bases de données HITRAN et HITEMP. Ensuite, nous testerons la configuration représentative de la signature infrarouge (cuve chaude - cuve froide) (§ IV-3-2). Ayant les transmissions mesurées et calculées, il est aisé d'en déduire les luminances émises associées, quantités pour lesquelles nous présenterons des résultats au chapitre IV-3-3. Enfin, nous considérerons quelques régions spectrales particulières où les résultats obtenus indiquent la nécessité d'études "amont" (§ IV-3-4).

IV-3-1 VALIDITE DES BASES DE DONNÉES HITRAN ET HITEMP

La base de données HITRAN a été construite pour les applications atmosphériques et est donc précise à basse température. La base HITEMP, dans sa version publique, a été créée avec des critères de coupure qui étendent sa validité jusqu'à 1000K. Nous avons, grâce aux mesures effectuées à Rennes, la possibilité de tester à haute résolution les bases de données. Un exemple est donné à basse température (cuve chaude vide - cuve froide pleine) sur la figure IV.5, le cas d'une température élevée étant présenté sur figure IV.6 (cuve chaude pleine – cuve froide vide). Nous avons représenté, sur la partie haute de chaque figure, la superposition des trois résultats (mesures, calcul avec HITEMP, calcul avec HITRAN) moyennés sur 1 cm^{-1} pour une meilleure visualisation. La partie basse donne la mesure à haute résolution et les écarts (obs-calc) avec les calculs (HITEMP, HITRAN).

La précision des calculs à basse température (figure IV.5) est très satisfaisante. L'amplitude des oscillations des écarts provient essentiellement d'un décalage des axes des nombres d'onde, visible en zoomant sur des détails du spectre. Ce décalage est attribué à une incertitude globale de l'échelle des nombres d'onde mesurés. Il est en effet très aisé de recalibrer les spectres par une faible translation horizontale; il subsiste néanmoins ensuite quelques menus écarts qui peuvent être attribués à des shifts collisionnels qui sont encore très mal connus pour de nombreuses raies. Par contre les intensités des raies sont très bien restituées par les calculs car les amplitudes des structures des spectres sont correctes. Par ailleurs, deux autres types de différences sont à remarquer. Vers 2130 cm^{-1} figure la branche Q de la bande $2\nu_1-\nu_2$ de CO_2 . L'effet des interférences entre raies est visible, qui n'est pas pris en compte par le modèle adopté par le code de calcul (raies isolées). La branche Q calculée est trop large, l'absorption étant sous-estimée (resp. surestimée) au centre (resp. dans l'aile) [LEVY,92]. Vers 2390 cm^{-1} et, dans une moindre mesure, vers 2225 cm^{-1} , les écarts proviennent

principalement de l'imperfection des facteurs χ qui servent à tenir compte des effets d'interférences et de durée finie des collisions dans les ailes lointaines de raies pour tabuler le continuum de CO_2 . Ces facteurs sont, en effet, représentés par des lois analytiques dont le nombre restreint de paramètres ne permet pas de reproduire parfaitement les valeurs mesurées sur lesquelles ils sont ajustés. [PERR,89] En conclusion, on retiendra un accord plus que satisfaisant entre mesures et calculs, en dépit des écarts spectralement isolés ou faibles dus aux interférences dans les branches Q et à l'imperfection des facteurs χ .

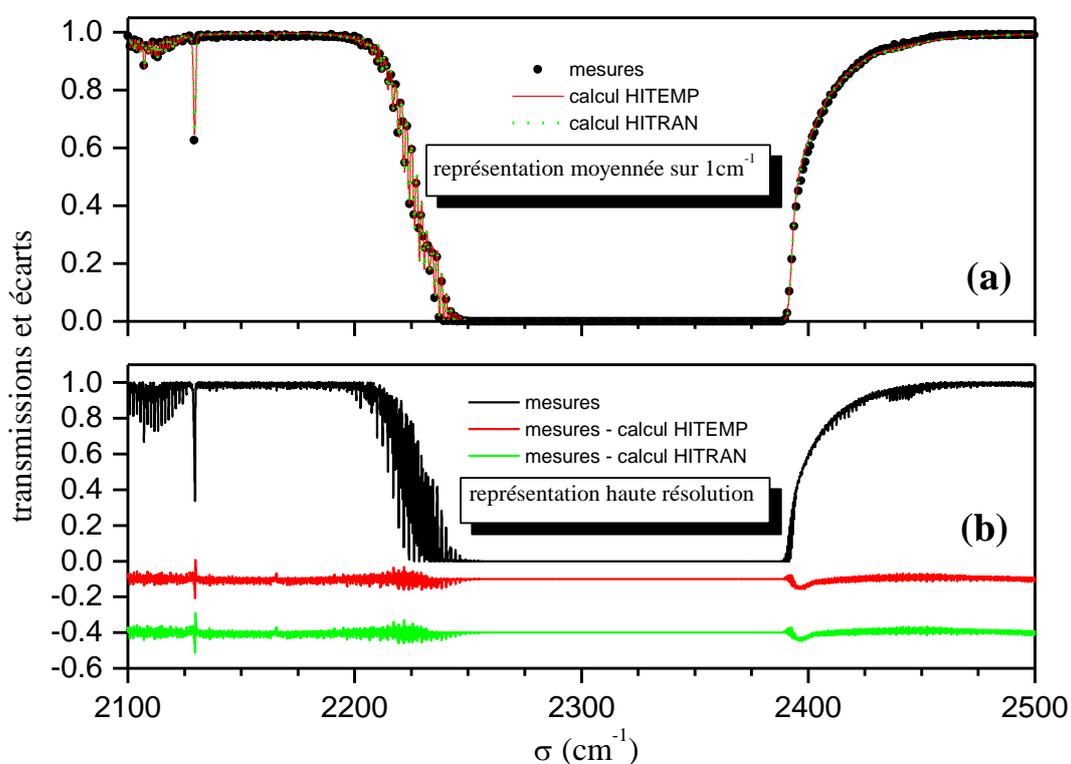


figure IV.5: transmissions mesurées et calculées dans la région de $4.3 \mu\text{m}$ pour un trajet optique de 48 m avec 3.95% de CO_2 dans N_2 , à une pression totale de 1.03 atm et à une température de 304 K

À haute température (973K , figure IV.6), la première constatation est l'insuffisance de la banque HITRAN. Ce résultat, déjà observé, [SCUT,93], [SCUT,94] n'a rien de surprenant car cette base de données fut construite pour des applications atmosphériques à température ambiante ou plus faible. Nous avons ici la confirmation du manque de raies dites chaudes, dont une grande partie a été éliminée par le critère de coupure

HITRAN sur les intensités¹, celles-ci étant trop faibles à l'ambiante. L'écart est bien plus sensible sur la partie gauche que sur la partie droite. En effet, les énergies des centres de bandes chaudes diminuent en raison de l'anharmonicité de vibration. Or, lorsque la température augmente, les niveaux d'énergies rovibrationnelles plus élevées se peuplent. Les spectres associés aux transitions partant de ces niveaux deviennent donc appréciables, tandis que les raies correspondantes ne sont pas répertoriées dans HITRAN. On a aussi, suite à l'imbrication des spectres des différentes bandes, un étalement du spectre résultant vers les nombres d'onde plus faibles, ce que l'on peut constater par une comparaison avec le cas froid de la figure IV.5. L'accord avec le calcul utilisant HITEMP est tout aussi bon que dans le cas froid. Des écarts entre le calcul et l'expérience, constatés avec le gaz froid, subsistent: outre les shifts, on retrouve les imperfections du facteur χ à 2225 cm^{-1} et à 2390 cm^{-1} .

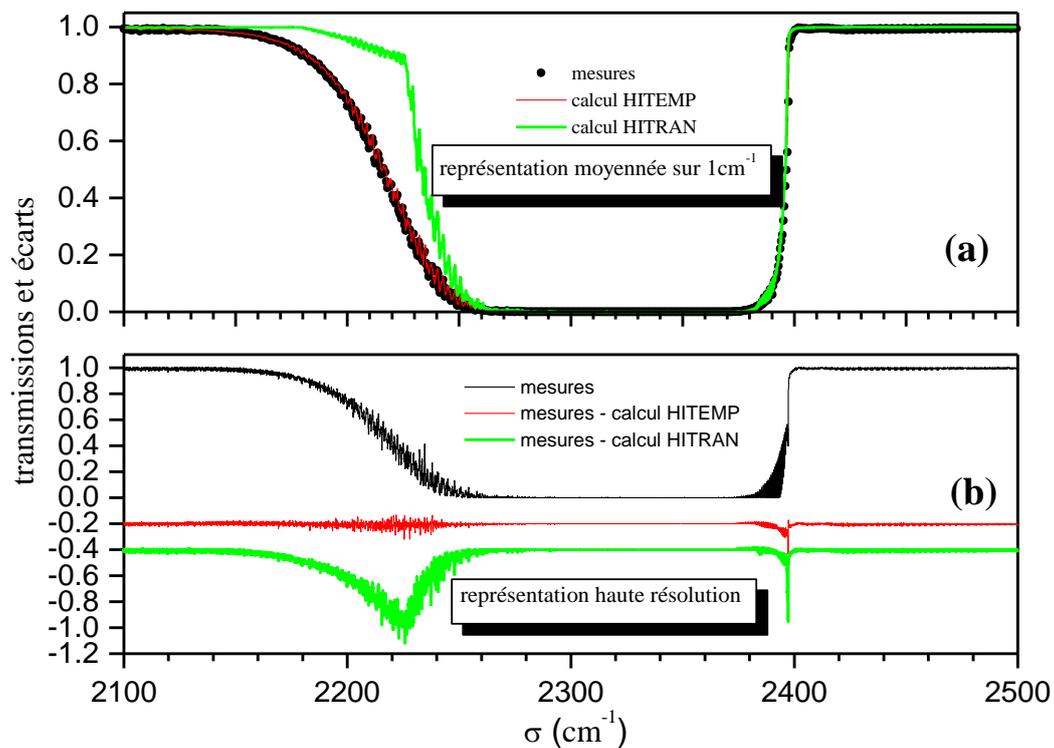


figure IV.6: même légende que la figure IV.5 mais pour un trajet optique de 19.8 cm avec 4.00% de CO_2 dans N_2 , à une pression totale de 3.27 atm et à une température de 973 K.

¹ Nous rappelons que le tableau II.1 du chapitre II donne les intensités de raies minimales adoptées par chaque base de données, et ce pour plusieurs molécules dont CO_2 .

La branche Q, précédemment vue dans la couche froide, n'est ici plus perceptible, car le produit (xpl) de la couche chaude est bien plus faible que celui atteint dans la partie froide (2.59×10^{-2} m.atm contre 1.95 m.atm, soit un facteur de 75). L'effet de ce produit surpasse celui dû à l'augmentation de la température. On identifie par contre ici des interférences entre raies R de la bande ν_3 de CO_2 au voisinage de la tête de bande. Les raies concernées (R(J) avec $J=100$) sont très proches en raison du retournement de la branche R et interfèrent fortement donnant lieu au pic étroit dans les écarts vers 2397 cm^{-1} . Notons que ce dernier n'est pas vu à basse température, car les niveaux de départ des raies concernées ont des énergies élevées et sont insuffisamment peuplés à la température ambiante pour que les raies associées soient vues.

En conclusion, nous pouvons affirmer que l'utilisation de la base de données HITEMP par le code raie par raie donne d'excellents résultats jusqu'à 1000 K. Cette base sera désormais utilisée pour les calculs suivants. Quelques écarts apparaissent: de légers shifts, une petite imperfection du facteur χ , et l'apparition des effets dus aux interférences collisionnelles entre raies qui ne sont pas prises en compte par le modèle adopté. Mais ces déviations restent faibles (shifts, χ), ou spectralement ponctuelles (interférences). Leur influence est négligeable sur un calcul basse résolution (le retournement n'est plus visible sur le spectre moyenné à 1 cm^{-1} de la figure IV.6), et elle est encore moindre si le spectre est intégré pour des calculs de flux par exemple.

Signalons que nous avons également comparé quelques spectres mesurés à température élevée avec ceux calculés en utilisant une troisième base de données qui a été engendrée au laboratoire EM2C (cf. § II-4-1). Cette dernière, qui n'est pas publique mais dont SNECMA dispose, conduit à des résultats dont la qualité est comparable avec celle obtenue lorsque HITEMP est utilisée.

IV-3-2 TESTS DANS DES CONFIGURATIONS CUVE CHAUDE-CUVE FROIDE

Nous testons ici la qualité des prédictions lorsque les deux cuves sont juxtaposées. Les deux figures suivantes (figure IV.7 et figure IV.8) montrent les mesures, dans leur représentation haute résolution (elles ne sont pas moyennées), et les écarts avec les spectres calculés par le code raie par raie. Chaque fois sont représentées les configurations cuve froide,

cuve chaude, cuve chaude + cuve froide. Les deux régions étudiées apparaissent et les conditions des cuves seules de la figure IV.7 sont différentes de celles des spectres présentés auparavant.

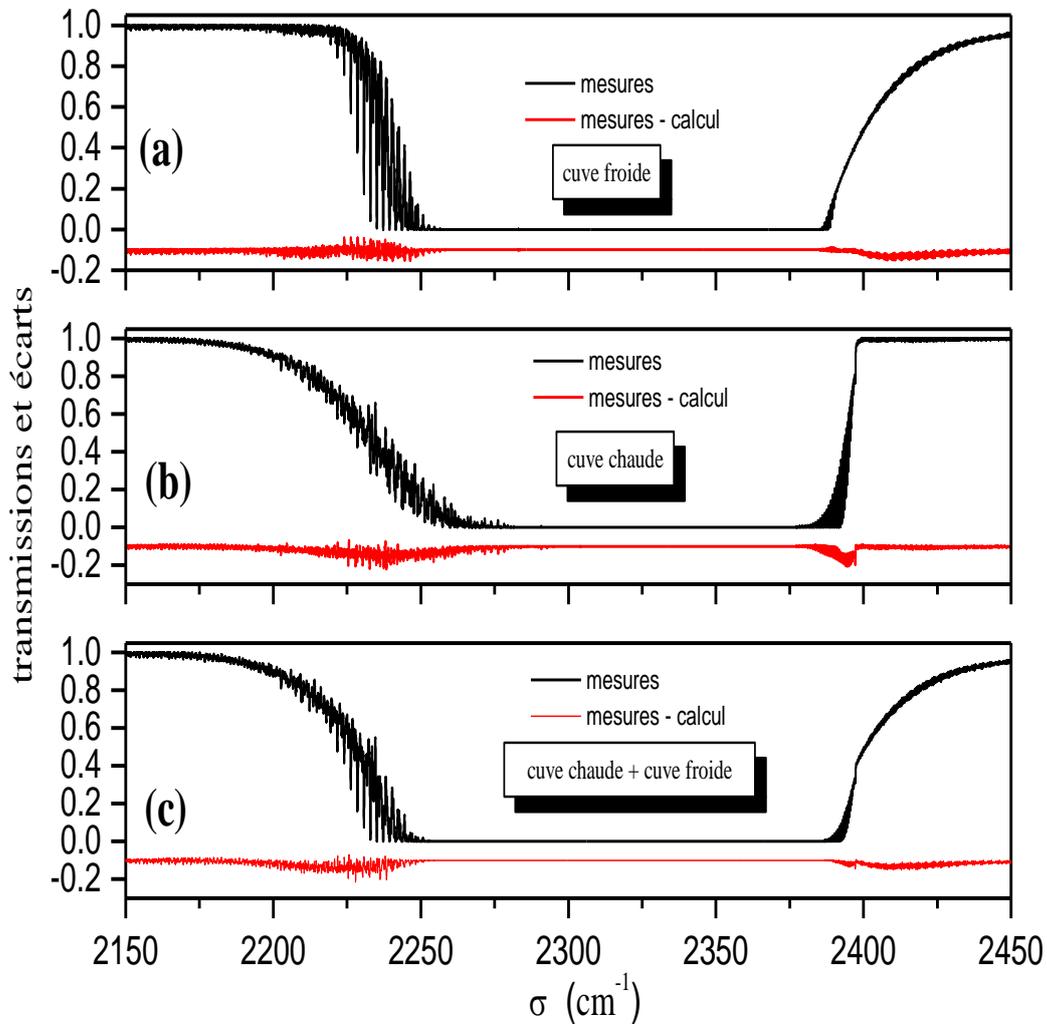


figure IV.7: transmissions mesurées et écarts observé-calculé, dans la région de $4.3 \mu\text{m}$:

(a): cuve seule de 48 m avec 4.29% de CO_2 dans N_2 ; pression totale: 0.776 atm, température: 213 K
 (b): cuve seule de 19.8cm avec 3.75% de CO_2 dans N_2 ; pression totale: 3.02 atm, température: 800 K
 (c): les deux cuves dans les conditions précédentes.

Les accords entre les mesures et les calculs sont de la même qualité que ceux constatés en IV-3-1. On retrouve sur la figure IV.7 la petite imperfection du facteur χ et les effets des interférences entre les raies au voisinage de la tête de bande qui sont visibles dans la cuve chaude, mais pas de façon aussi prononcée que sur la figure précédente. En effet, la

température est ici de 800K, sensiblement inférieure aux 973K de l'exemple précédent. De plus cet effet est très atténué dans le spectre (cuve chaude + cuve froide); seul un zoom sur la zone spectrale concernée permet de le discerner. Sur la figure IV.8 on distingue nettement deux bandes chaudes de CO_2 , la bande $(\nu_3-\nu_1)_I$ centrée en 961.0 cm^{-1} et la bande $(\nu_3-\nu_1)_{II}$ centrée en 1063.7 cm^{-1} (bandes laser). Notons qu'on peut aussi y discerner, à température élevée, la présence des bandes de combinaison $[(\nu_2+\nu_3)-(\nu_1+\nu_2)]_I$ et II .

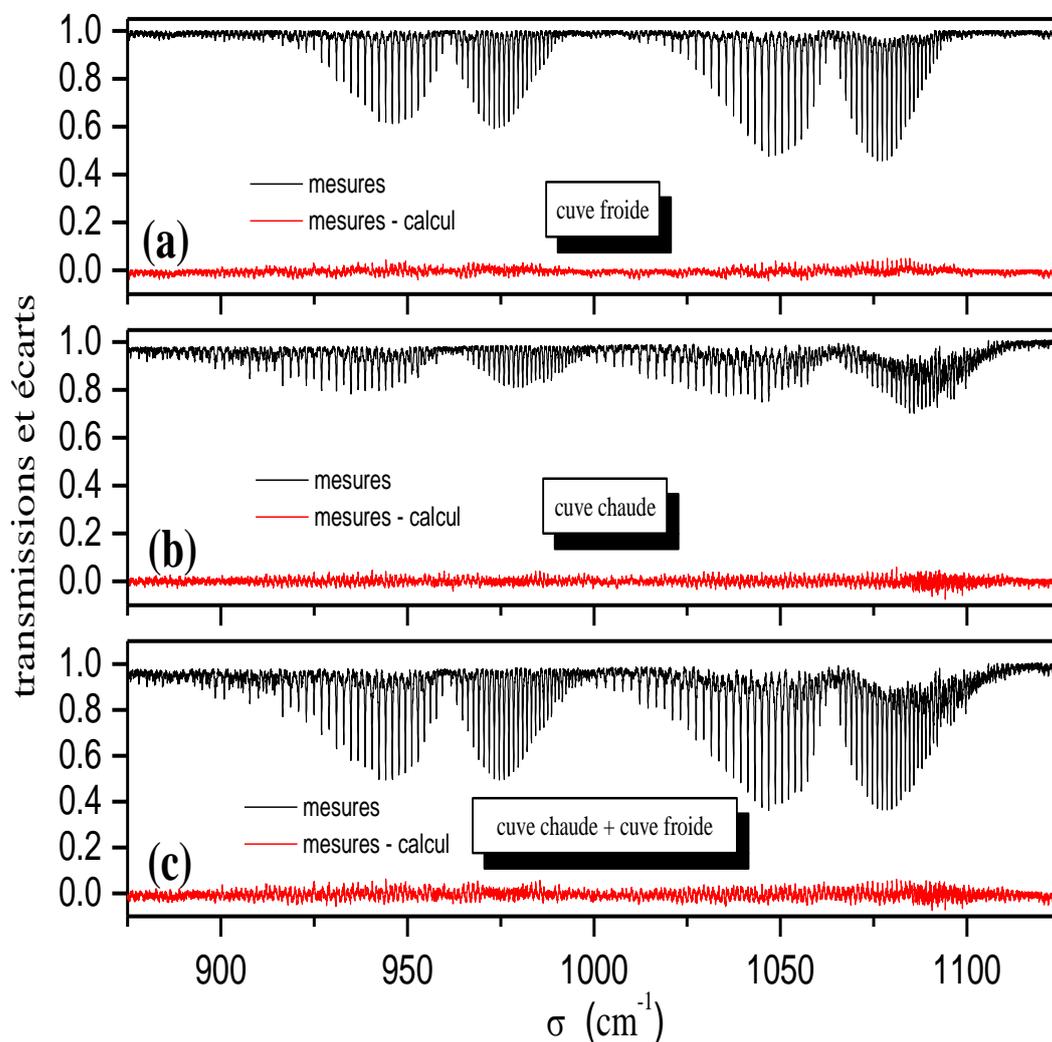


figure IV.8: transmissions mesurées et écarts observé-calculé, dans la région de $10 \mu\text{m}$:

(a): cuve seule de 48 m avec 3.93% de CO_2 dans N_2 ; pression totale: 1.02 atm, température: 304 K

(b): cuve seule de 19.8 cm avec 32.1% de CO_2 dans N_2 ; pression totale: 3.07 atm, température: 804 K

(c): les deux cuves dans les conditions précédentes.

En conclusion, nous pouvons affirmer que les configurations de type télédétection, telles que simulées expérimentalement en laboratoire, sont bien modélisées par l'approche raie par raie adoptée, et que les effets liés aux imperfections du facteur χ ou aux interférences entre raies restent d'une influence très locale et marginale.

IV-3-3 COMPARAISONS DE SPECTRES EXPRIMÉS EN LUMINANCE

Nous étudions ici les spectres non plus sous la forme de la transmission, mais sous la forme de la luminance. Pour cela, nous avons calculé cette grandeur à partir des transmissions, en utilisant la fonction de Planck $L_{\text{c}}^{\circ}(T)$. En désignant par l'indice c les grandeurs liées à la cuve chaude et par f celles liées à la cuve froide, la luminance émise par la colonne s'exprime dans le sens cuve chaude \rightarrow cuve froide par:

$$L_{\text{colonne}} = (1 - \tau_{\text{c}})L_{(T_{\text{c}})}^{\circ}\tau_{\text{f}} + (1 - \tau_{\text{f}})L_{(T_{\text{f}})}^{\circ} = (\tau_{\text{f}} - \tau_{\text{c+f}})L_{(T_{\text{c}})}^{\circ} + (1 - \tau_{\text{f}})L_{(T_{\text{f}})}^{\circ}, \quad (\text{IV-1})$$

Cette équation est utilisée pour engendrer les luminances émises, à partir des valeurs calculées et mesurées des transmissions. Bien qu'aucune mesure d'émission n'ait été faite, le qualificatif "mesuré" sera utilisé pour désigner les valeurs de L construites à partir des transmissions mesurées. En raison de la grande sensibilité de la fonction de Planck à la température, le deuxième terme de la somme est généralement négligeable si la différence de température entre les deux cuves est notable, ce qui est le cas dans ces expériences. La dynamique de la luminance de la colonne est donc gouvernée par la différence entre la transmission de la cuve froide (τ_{f}) et celle des deux cuves juxtaposées ($\tau_{\text{c+f}}$). Nous montrons trois exemples, deux dans la région 4.3 μm (figure IV.9, figure IV.10), une dans la région 10 μm (figure IV.11). Chaque figure est décomposée en deux parties. Celle du haut superpose les spectres mesurés et calculés, moyennés sur 1 cm^{-1} afin de mieux visualiser leurs points communs ou leurs différences. La partie du bas montre le spectre "mesuré" non dégradé (haute résolution) avec la différence avec le calcul. Les conditions thermophysiques sont différentes de celles présentées jusqu'ici, excepté pour la figure IV.11 qui présente la luminance correspondant à la configuration cuve chaude + cuve froide de la figure IV.8.

Les comparaisons sont tout à fait satisfaisantes. On retrouve sur la figure IV.9, vers 2397 cm^{-1} , le pic étroit dû aux effets des interférences entre raies R au voisinage du retournement. Les imperfections du facteur χ sont visibles vers 2240 cm^{-1} et vers 2395 cm^{-1} .

La forme de la courbe des différences n'est pas la même que celle obtenue avec les transmissions; en effet, d'après l'équation (IV-1), la dynamique de la luminance est définie par la quantité $\tau_f - \tau_{c+ff}$ dans laquelle des compensations d'erreurs interviennent.

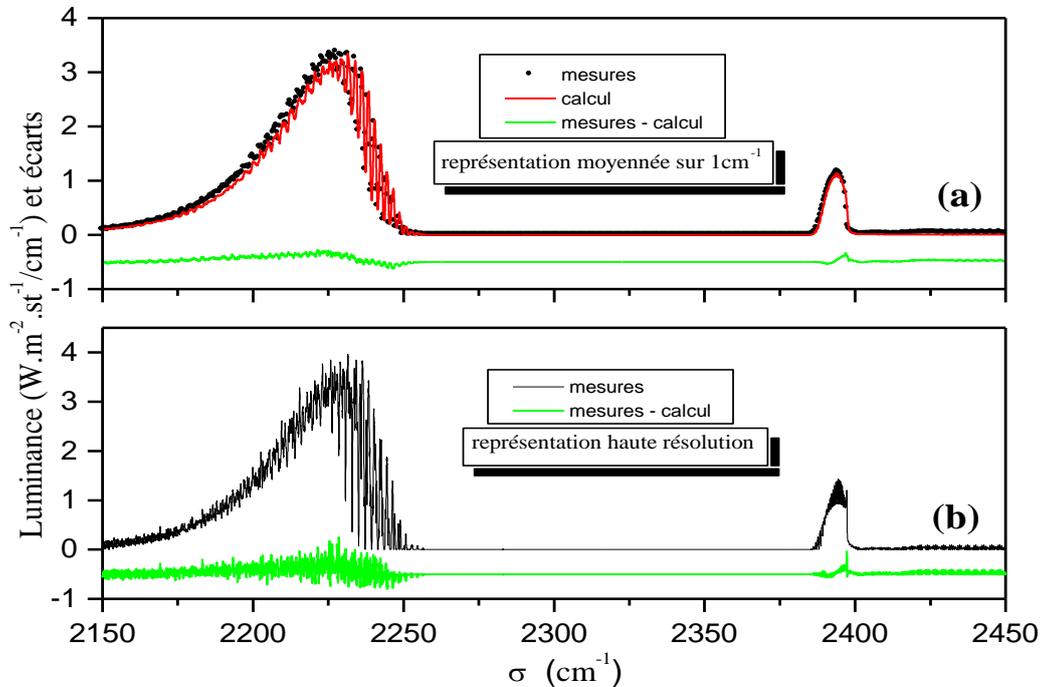


figure IV.9: *luminances recalculées à partir de mesures ou de calculs de transmissions et écarts observé-calculé, dans la région de 4.3 μm : cuve froide de 48 m, 4.29% de CO₂ dans N₂ sous 0.776 atm et 213 K. Cuve chaude de 19.8 cm: 4.00% de CO₂ sous 3.27 atm et 973 K*

Sur la figure IV.10 on notera une luminance bien plus faible (crête à 0.09 W.m⁻².st⁻¹/cm⁻¹, contre 3.5 W.m⁻².st⁻¹/cm⁻¹ pour la figure précédente). Cela s'explique par le fait que la température du gaz chaud est plus faible que dans le cas précédent (602 K contre 973 K), de même que la différence $\tau_f - \tau_{c+ff}$. On voit aussi s'inverser l'ordre de prépondérance du pic de luminance. Ici celui de droite est plus élevé que celui de gauche, contrairement aux pics de la luminance précédente. Des problèmes d'ajustements de facteur χ sont visibles vers 2180 cm⁻¹ et vers 2240 cm⁻¹. Nous avons vérifié, en examinant les transmissions, que le pic d'erreur vers 2390 cm⁻¹ est dû aux mêmes problèmes. Nous remarquons que ce pic est, en valeur relative, bien plus élevé que celui de la figure IV.9, et d'une façon générale que le bruit est ici plus important que dans la figure précédente. Cela s'explique aisément en considérant l'équation (IV-1) restreinte au premier terme qui est prépondérant. En effet, l'erreur relative sur le calcul

de la luminance est, en supposant en première approximation une même erreur $\Delta\tau$ sur les transmissions τ_f et τ_{c+f} :

$$\frac{\Delta L_{\text{colonne}}}{L_{\text{colonne}}} = \left| \frac{2\Delta\tau}{(\tau_f - \tau_{c+f})} \right|, \quad (\text{IV-2})$$

Nous avons vérifié que le dénominateur était plus petit dans le cas de la figure IV.10 que dans le cas de la figure IV.9, d'où l'erreur relative et le bruit plus grands sur la luminance.

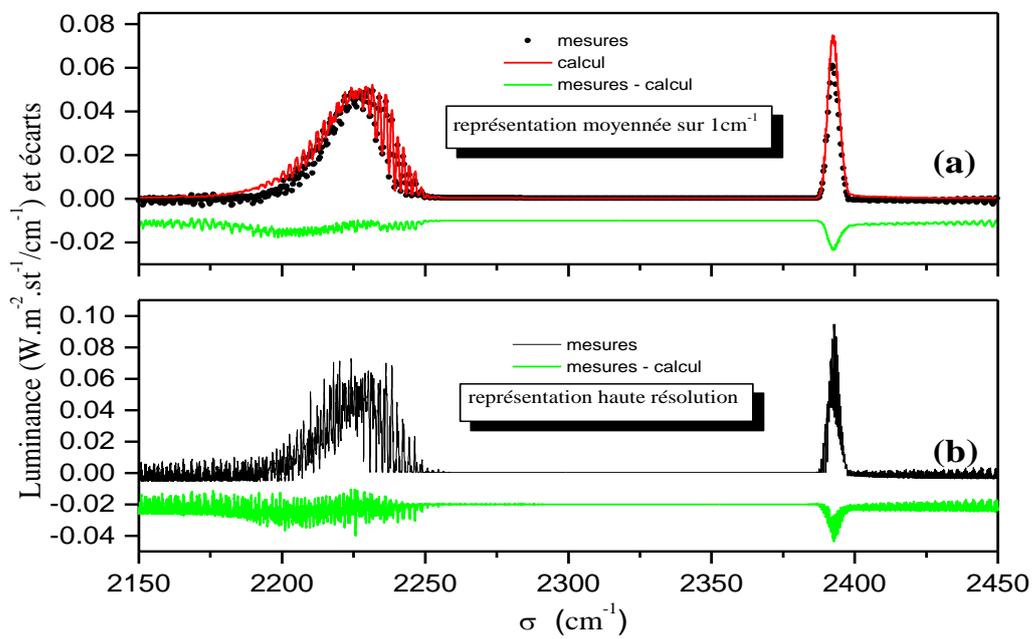


figure IV.10: même légende que pour la figure IV.9 avec les conditions thermophysiques suivantes: cuve froide de 48 m : 4.14% de CO₂ dans N₂ sous 0.904 atm et 253 K. Cuve chaude de 19.8 cm: 4.77% de CO₂ dans N₂ sous 2.14 atm et 602 K

La figure IV.11 montre que les résultats sont très satisfaisants dans la région de 10 μm . Les écarts mesures-calculs constatés à haute résolution sont à nouveau principalement dûs aux décalages ou shifts mais aussi au bruit de mesure qui est plus important qu'à 4 μm (source et détecteur moins performants).

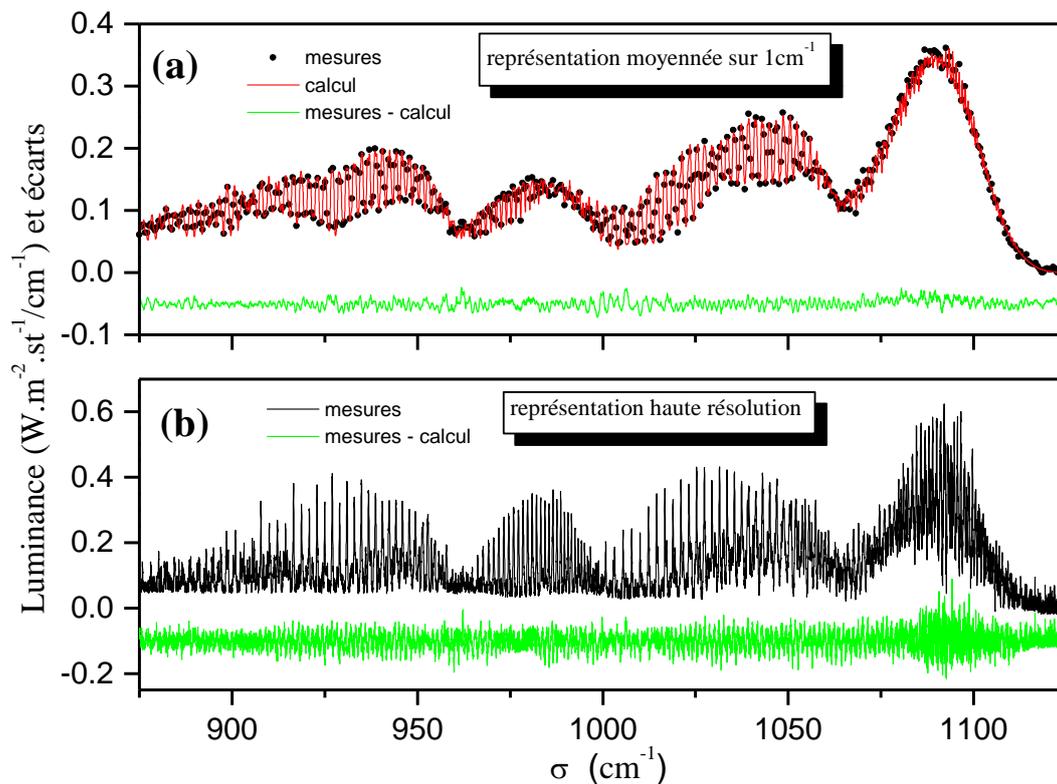


figure IV.11: même légende que pour la figure IV.9, dans la région $10\mu\text{m}$, avec les conditions thermophysiques suivantes: cuve froide de 48 m : 3.93% de CO_2 dans N_2 sous 1.02 atm et 304K. Cuve chaude de 19.8 cm: 32.1% de CO_2 dans N_2 sous 3.07atm et 804K.

IV-3-4 PERSPECTIVES D'ÉTUDES SUSCITÉES PAR LES MESURES

Nous avons présenté, dans ce chapitre, des spectres témoignant du bon accord entre les mesures et les calculs avec la base de données HITEMP (ou HITRAN à basse température seulement). Néanmoins des imperfections subsistent. Les deux figures suivantes (figure IV.12 et figure IV.13) sont des vues détaillées de spectres globaux présentés auparavant. La première est relative aux transmissions et la deuxième aux luminances. Elles mettent en évidence les points problématiques qui demeurent.

Les interférences entre raies dans les branches Q ne sont pas prises en compte dans le modèle adopté par le raie par raie qui suppose les raies isolées. La différence entre les deux courbes du spectre de gauche de la figure IV.12 est caractéristique [LEVY,92], [RODR,99] de la différence entre une branche Q réelle et une branche Q qui est une simple

somme de profils de Voigt. Ce spectre met aussi en évidence le caractère ponctuel du phénomène, la largeur à la base de la branche étant ici de 1.3 cm^{-1} environ.

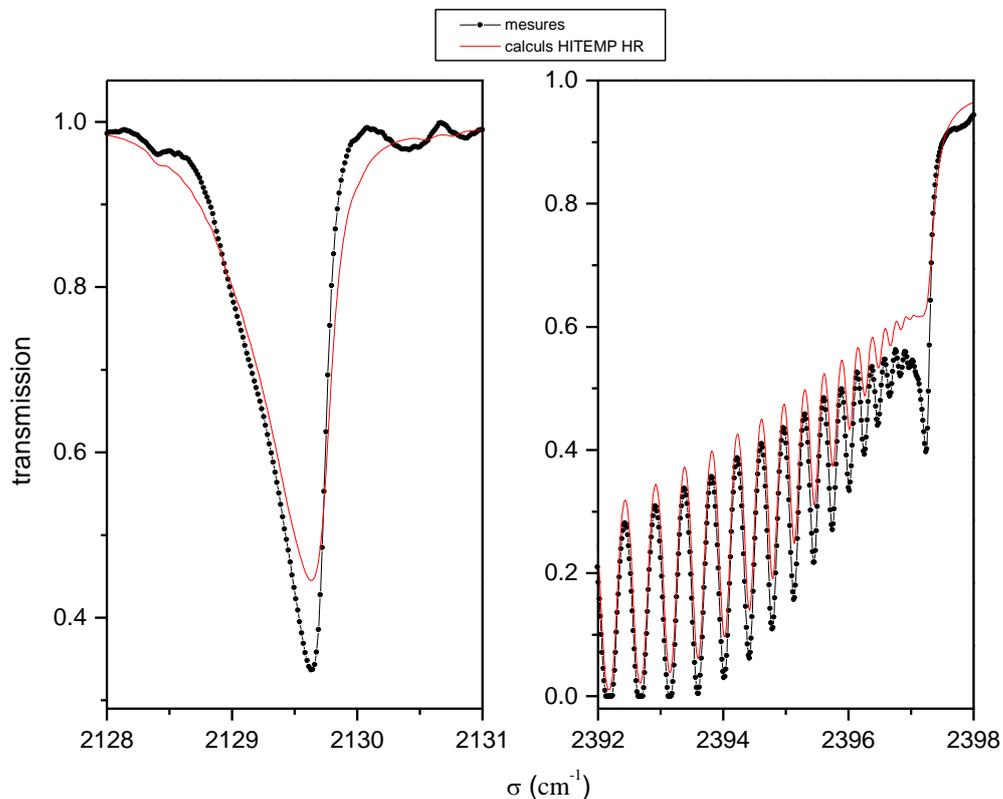


figure IV.12: détails de transmissions à haute résolution (HR): interférences entre raies dans les branches Q de la figure IV.5 et R (tête de bande) de la figure IV.6.

Le spectre de droite de la figure IV.12 montre aussi des interférences négligées par le calcul, mais ici dans la tête de bande de la transition ν_3 (voir aussi spectre de droite en luminance de la figure IV.13). Ce phénomène est encore plus limité que pour la branche Q car, d'une part la largeur à la base est ici de 0.3 cm^{-1} , d'autre part seules des températures élevées permettent de le visualiser (pour la branche R on est à 973 K, pour la branche Q on était à 304 K). Des études ont été menées dans les branches Q de CO_2 [RODR,98], [RODR,99] et la tête de bande de la transition $3\nu_3$ [BOIS,94], [RODR,98] à la température ambiante. Des modèles sont donc disponibles, au laboratoire en particulier, dont la qualité a été prouvée à basse température (200-300 K) pour des raies de nombre quantique rotationnel J modéré. Il serait intéressant de les tester dans les conditions "extrêmes" ($J \approx 100$) associées à la partie droite de la figure IV.12.

Du point de vue des bases de données, nous avons vérifié que la banque HITRAN était insuffisante à haute température et qu'elle était avantageusement remplacée par la banque HITEMP, tout du moins jusqu'à 1000 K environ. Mais un zoom dans le voisinage basse fréquence de la bande ν_3 de CO_2 (luminance, figure IV.13) met en évidence des insuffisances qui suggèrent de revoir les intensités de quelques raies et même de rajouter des raies.

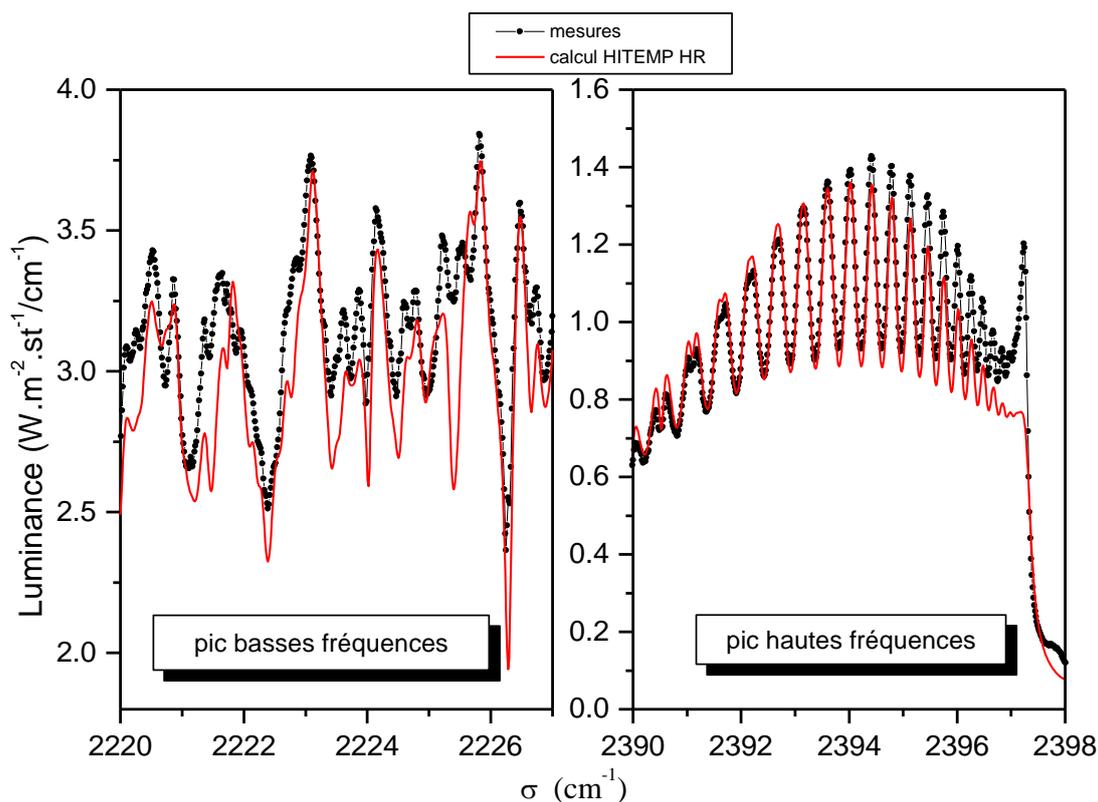


figure IV.13: détails de la luminance à haute résolution (HR) de la figure IV.9 aux niveaux des pics basses fréquences et hautes fréquences.

Les interférences dans les ailes lointaines ainsi que la durée finie des collisions sont prises en compte par le code, par l'intermédiaire des facteurs χ utilisés pour engendrer les tables de continua. Mais des inexactitudes subsistent dans la façon dont ces facteurs χ permettent de reproduire les spectres. Les décrochements des porteuses des spectres des parties droites de la figure IV.12 et de la figure IV.13 corroborent ce constat, et ce d'autant plus que les amplitudes sont bien restituées, ce qui assure que les intensités des raies sont correctes.

IV-4. CONCLUSION, PERSPECTIVES

L'étude expérimentale, dont les résultats ont été présentés dans ce chapitre, a permis de disposer de spectres représentatifs des configurations de télédétection du type signature infrarouge. C'est la première fois, à notre connaissance, que de si bonnes résolutions sont obtenues (0.025 cm^{-1} ou 0.05 cm^{-1}) à haute température (jusqu'à près de 1000 K) sur de larges bandes spectrales ($850 - 1150\text{ cm}^{-1}$ et $1850 - 2700\text{ cm}^{-1}$).

Les spectres calculés avec le code raie par raie développé pendant cette thèse sont en accord satisfaisant avec les mesures. Ils valident ainsi, sauf dans quelques "micro-régions", le modèle physique des raies isolées couplé à l'utilisation de continua dans les ailes lointaines. Cette validation se justifie compte tenu de l'utilisation du code qui se veut être un étalon pour des applications sur de grandes échelles spatiales (beaucoup de colonnes) et spectrales (intervalle de calcul assez étendu), à moyenne résolution (1 cm^{-1} ou plus). Nous avons aussi vérifié que si l'emploi d'une base de donnée du type HITRAN est suffisant pour des applications à de basses températures (ambiante ou moins), l'usage d'une base de données chaudes est par contre indispensable à haute température. La banque HITEMP fut testée et validée jusqu'à 1000 K.

Seul un examen poussé met parfois en défaut les calculs, à haute résolution essentiellement. Nous avons ainsi mis en évidence des phénomènes d'interférences dans les branches Q, ce dont le modèle des raies isolées ne tient pas compte. Nous avons aussi observé, à haute température, des interférences au niveau de la tête de bande de la transition v_3 . Ce phénomène n'est pas non plus pris en compte dans les calculs. À côté de ces manifestations limitées spectralement, nous avons remarqué quelques imperfections dans le calcul du continuum de CO_2 avec les facteurs χ : des porteuses ne s'ajustent pas très bien sur les spectres mesurés. Enfin, du point de vue de la base de données HITEMP, nous avons constaté par endroits des intensités de raies mal reproduites et même des raies manquantes ou mal positionnées.

Cette campagne de mesure a donc permis de valider le code développé pendant la thèse et les données qui lui sont associées, compte tenu des spécifications liées aux applications de télédétection considérées. Nous avons vérifié qu'une base de données chaudes était indispensable pour traiter des gaz chauds. Des inexactitudes liées à la simplification du

modèle de calcul subsistent, lesquelles sont ponctuelles et ne sont visibles qu'à haute résolution (à 1 cm^{-1} on les voit très peu ou pas du tout) et dont la prise en compte alourdirait très fortement et inutilement le temps CPU. En perspective, on peut envisager un réajustement des fonctions χ du continuum de CO_2 , ainsi qu'un raffinement de la base de données HITEMP. En effet, la cuve chaude pourrait être utilisée pour des mesures à basse pression afin de mener des études spectroscopiques portant sur les positions et intensités des raies de bandes chaudes. On peut aussi envisager de sonder des zones spectrales que nous n'avons pas eu le temps d'aborder (en particulier celle de la bande ν_2 vers $15 \mu\text{m}$). Enfin, il serait d'un grand intérêt de mener une étude similaire avec H_2O . Mais cela soulève des problèmes expérimentaux spécifiques et délicats associés à la condensation et à l'adsorption/désorption de l'eau par les parois de la cuve, phénomènes qui entravent la connaissance de la quantité de vapeur d'eau dans le mélange.

V. CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

Le travail décrit dans ce mémoire a répondu à des besoins d'outils prédictifs de l'absorption/émission spectrale de mélanges gazeux à l'équilibre, chauds (gaz de combustion) ou froids (atmosphère), performants en termes de précision et de rapidité d'exécution. Il a aussi contribué à la validation de modèles de calculs ou de banques de données spectroscopiques par des mesures représentatives des conditions d'utilisation prévues de l'outil théorique.

Nous avons conçu et concrétisé, par l'élaboration d'un logiciel, une méthode de calcul de spectres infrarouges, en transmission et en luminance, émanant d'une colonne gazeuse inhomogène, anisobare, anisotherme. L'approche "raie par raie" fut utilisée, laquelle consiste à sommer les contributions des raies d'absorption des différents gaz actifs composant la colonne. L'optimisation a consisté à pallier les coûts en mémoire et surtout en temps de calcul, inhérents non seulement à l'approche qui nécessite la prise en compte de centaines de milliers voire de millions de raies et une discrétisation spectrale très fine avec un ordre de grandeur en nombre de fréquences identique à celui des raies, mais aussi à l'utilisation du calcul qui balaye de larges étendues spatiales en termes d'angles solides et de longueurs de trajets, lesquelles rencontrent des milieux fortement hétérogènes. Nous avons alors doté notre programme d'une originalité double. Il allie en effet rapidité d'exécution, conquise au prix d'approximations, et maîtrise des erreurs consécutives à ces dernières. Nous rappelons les étapes essentielles qui nous ont conduits à la version optimisée de notre code raie par raie. Nous nous sommes d'abord penchés sur le modèle physique retenu. Celui-ci suppose les raies isolées, sauf pour les contributions de leurs ailes modélisées par des continua pré-tabulés. Tout effet d'interférences près des centres de raies ou autre manifestation locale comme les rétrécissements de raies furent exclus, car ils ont des influences très locales et leur prise en compte aurait engendré une excessive pénalisation en terme de temps CPU. Nous avons ensuite optimisé le calcul du coefficient d'absorption d'un segment homogène, isotherme, isobare. Pour cela, nous proposons une évaluation du profil de raie (Voigt) par l'utilisation d'une table, gagnant ainsi en rapidité des facteurs importants par rapport à une des routines les plus performantes. Nous avons aussi élaboré une méthode de création de maillage à grilles

multiplés et ainsi limité le nombre de calculs directs, une unique interpolation "en cascade" servant à reconstituer le spectre après projection de toutes les raies. Afin d'exclure un maximum de raies de faible poids dans le calcul, nous avons conçu une méthode de tri absolu efficace. Une démarche analogue permet de couper les ailes de raies, dont l'intérêt est évident pour des milieux à basse pression. Enfin, nous avons décidé de stopper tout calcul dans les régions spectrales de faible transmission, ce qui est particulièrement utile dans les configurations de signature infrarouge pour lesquelles ces zones s'étendent sur de larges domaines spectraux en raison de l'absorption par la couche froide atmosphérique. Une autre optimisation a consisté à pré-trier les raies à l'aide de paramètres pertinents rajoutés dans les bases de données, permettant de savoir "quasi- instantanément" si une raie peut être négligée. Afin de faciliter l'emploi du code, il est mis à la disposition de l'utilisateur des paramètres permettant de contrôler les erreurs. Ce dernier peut ainsi régler son calcul en fonction du type de résultat, haute résolution – basse résolution, et de la précision désirés. Enfin, nous avons doté le code d'une architecture modulaire qui le rend facilement insérable dans des logiciels plus importants, et de tableaux à allocation dynamique pour éviter tout surdimensionnement excessif. Les gains apportés par notre travail ont été évalués par la SNECMA et l'ONERA, premiers destinataires du code. **L'intégration du code dans une structure à environnement parallèle n'a nécessité qu'une semaine de travail par un ingénieur de la SNECMA. Des tests en configuration réelle sur des jets de moteurs ont montré des gains d'un facteur 30 par rapport à l'ancien code optimisé dont disposait la société, qui a pu ensuite réaliser, pour la première fois, un calcul complet de signature infrarouge. Ce gain permet aussi désormais des prédictions d'émissions de jets de propulseurs sur bancs d'essais. Des tests préliminaires à l'ONERA ont montré des gains d'un facteur 4 par rapport au code américain de référence, FASCODE. Au-delà du facteur temps, nous voulons souligner l'aspect maîtrise de l'erreur, qui n'apparaît dans aucun des codes avec lesquels nous avons mené des comparaisons.**

Le deuxième volet, expérimental, est fondé sur deux dispositifs de mesures visant à répondre aux besoins de validation du modèle de calcul retenu mais aussi des bases de données l'alimentant, dans des configurations simulant de longs parcours atmosphériques ou des situations du type signature infrarouge. Nous avons conçu, monté (au GSMA à Reims), et exploité le premier dispositif, qui se compose d'une cuve de 50 m et de moyens de mesure de l'absorption infrarouge à l'aide d'un spectromètre à réseau. **Des mesures ont été effectuées pour des trajets de plus de 1 km, sur une large bande spectrale, 1.9 μm - 12.5 μm , avec**

des résolutions spectrales correctes. Les spectres que nous avons enregistrés montrent la contribution de plusieurs espèces à l'absorption, H_2O et CO_2 essentiellement, mais aussi N_2O , CO , et N_2 . Nous avons aussi pu valider le calcul du continuum de CO_2 , et, en introduisant ce gaz en excès, simuler des trajets atmosphériques supérieurs à 500 km. Par ailleurs, nous avons inspiré puis exploité des mesures faites avec des mélanges $\text{CO}_2 - \text{N}_2$ au LPALMS à Rennes. **C'est la première fois, à notre connaissance, qu'un dispositif, composé de deux cuves, une chaude et une froide, avec des températures avoisinant les 1000 K, est monté, avec lequel sont effectuées des mesures d'absorption infrarouge à haute résolution sur de larges bandes spectrales.** Ce travail a permis de valider le modèle de calcul raie par raie que nous avons développé, mais a aussi mis en évidence ses limites, très localisées, liées à la non prise en compte des effets d'interférences dans les branches Q et dans les têtes de bandes, d'influence négligeable lorsqu'une résolution moyenne est utilisée. Nous avons aussi pu tester la banque de données chaudes HITEMP, jusqu'à 1000 K, et confirmer l'insuffisance de la banque HITRAN, conçue pour des applications atmosphériques.

Signalons que deux publications, en cours de rédaction, présenteront les travaux effectués au cours de la thèse, dans la revue JQSRT (Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer). Un article portera sur la partie théorique, la technique de calcul de spectres infrarouges rapide, l'autre sera axé sur les deux aspects expérimentaux étudiés, les longs trajets atmosphériques et la configuration cuve chaude - cuve froide.

Les travaux menés pendant ce doctorat ont apporté des résultats positifs, mais des améliorations peuvent encore être envisagées, et de nouvelles pistes d'études sont ouvertes.

Ainsi, pour la partie théorique, nous proposons deux pistes pour réduire le temps de la phase préparatoire (conversions des intensités, calculs des valeurs au centre des raies, des demi-largeurs Voigt). Une première consiste à simplifier les calculs associés avec des formules approchées. La seconde suggère d'affiner les modèles analytiques des courbes de sélection des raies par pré-tri. Par ailleurs, il pourrait être intéressant de mailler le domaine spectral de façon à respecter les erreurs issues d'interpolations quadratiques, et non plus linéaires. Des études préliminaires à ce sujet ont montré qu'il est possible de gagner un facteur de l'ordre de deux sur le nombre de points de calculs, donc autant en terme de mémoire et en terme de temps CPU dédié à la projection des raies. Enfin, nous suggérons un moyen de majorer plus finement les erreurs, en incluant dans nos équations des estimations de transmission ou luminance fournies par des modèles approchés du type modèles de bande. À

plus long terme, on pourrait réfléchir à une manière d'inclure des modèles d'interférences entre raies dans le code, sans trop pénaliser ses performances de vitesse.

Le premier travail expérimental, la simulation des longs trajets atmosphériques, a montré, outre la possibilité des mesures en soi, une absorption suffisante du continuum de la vapeur d'eau dans une région d'intérêt [800 cm^{-1} , 1000 cm^{-1}]. Afin de réduire sensiblement les temps d'enregistrement des spectres, particulièrement longs dans ce domaine spectral et donc problématiques en terme de stabilité de la source, nous suggérons de substituer au réseau un spectromètre à transformée de Fourier. Il deviendrait alors possible de tirer parti de la cuve pour connaître l'absorption des ailes lointaines des raies de H_2O , auxquelles il est impossible d'accéder dans une cuve "courte" en raison de la faible pression de vapeur saturante de cette molécule.

Le second travail expérimental, la simulation de trajets avec superposition cuve chaude – cuve froide, suscite, par son aspect haute résolution et haute température, des travaux de spectroscopie dans ces conditions et à basse pression, afin d'améliorer la qualité des bases de données chaudes (positions, intensités, raies manquantes).

De façon plus globale, la contribution principale de ce travail de thèse a été la création d'outils numériques et expérimentaux susceptibles dans l'avenir d'apporter de nouveaux résultats quantitatifs. Ainsi, le code sera (est déjà) exploité à la SNECMA pour ses études de signature, pourra être utilisé au Laboratoire de PhotoPhysique Moléculaire (LPPM) pour des calculs de spectres atmosphériques; l'ONERA envisage des utilisations multiples du code. Du point de vue des outils expérimentaux, celui de Reims pourrait permettre d'étudier le continuum de l'eau alors que celui de Rennes est déjà sollicité pour des études de paramètres spectroscopiques des raies chaudes.

BIBLIOGRAPHIE

- [BOIS,94] Boissoles, J., F. Thibault, R. Le Doucen, V. Menoux, et C. Boulet, "Line mixing effects in the $(00^0_3)\leftarrow(00^0_0)$ band of CO_2 in helium. II. Theoretical analysis", *J. Chem. Phys.* **100**, 215-223 (1994).
- [BOUL,88] Boulet, C., J. Boissoles, et D. Robert, "Collisionally-induced population transfer effect in infrared absorption spectra. I. A line-by-line coupling theory from resonances to the far wings", *J. Chem. Phys.* **89**, 625-634 (1988).
- [CARL,99] Carleer, M., A. Jenouvrier, A.C. Vandaele, P. Bernath, M-F. Méridienne, R. Colin, N. F. Zobov, O.L. Polyansky, J. Tennyson and V. A. Savin, "The near infrared, visible, and near ultraviolet overtone spectrum of water", *J. Chem. Phys.* **111**, 2444-2450 (1999).
- [CLAU,99] Clausen, S. et J. Bak, "FTIR transmission-emission spectroscopy of gases at high temperature: experimental set-up and analytical procedures", *J. Quant Spectrosc. Radiat. Transfer* **61**, 131-142 (1999).
- [CLOU,79] Clough, S.A., et F.X. Kneizys, "Convolution algorithm for the Lorentz function", *Appl. Opt.* **18**, 2329-2333 (1979).
- [CLOU,88] Sur le programme FASCODE-3. Clough, S.A., F.X. Kneizys, G.P. Anderson, E.P. Shettle, J.H. Chetwynd, L.W. Abreu, L.A. Hall, et R.D. Worsham, "Current problems in atmospheric radiation". Proc. Int. Radiation Symp., 229_241 (1988).
- [CLOU,89] Clough, S.A., F.X. Kneizys, et R.W. Davies, "Line shape and the water vapor continuum", *Atmos. Res.* **23**, 229-241 (1989).
- [DELA,89] Delaye, C., J.M. Hartmann, et 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**, 5080-5087 (1989).
- [DELA,90] Delaye, C., "Calcul des coefficients d'élargissement de raies de H_2O et exploitation expérimentale d'intensités de raies de CO_2 à haute température dans le domaine infrarouge. Applications", thèse de l'université Paris-Sud, soutenue en Mai 1990.
- [DRAY,66] Drayson, S.R., "Atmospheric Transmission in the CO_2 Bands Between $12\ \mu$ and $18\ \mu$ ", *Appl. Opt.* **5**, 385-392 (1966).
- [DRAY,76] Drayson, S.R., "Rapid computation of the Voigt profile", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **16**, 611-614 (1976).
- [FOMI,95] Fomin, B.A., "Effective interpolation technique for line-by-line calculations of radiation absorption in gases", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **53**, 663-669 (1995).
- [FROM,93] Frommhold, L., Collision-induced absorption in gases, Cambridge University Press, Cambridge, (1993).
- [GAMA,90] Gamache, R.R., R.L. Hawkins, et L.S. Rothman, "Total internal partition Sums in the temperature range 70-3000 K: atmospheric linear molecules", *J. Molec. Spectrosc.* **142**, 205-219 (1990).
- Les fonctions de partition sont représentées par des fonctions polynomiales de la température. Elles sont régulièrement remises à jour et incluses dans le programme Fortran TIPS (Total Internal Partition Sums) qui est disponible sur les CD Rom contenant la base de données HITRAN.
- [HART,88] Hartmann, J.M., L. Rosenmann, M.Y. Perrin, et 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**, 3063-3065 (1988).

- [HART,91] Hartmann, J.M., et C. Boulet, "Line mixing and finite duration of collision effects in pure CO₂ infrared spectra : Fitting and scaling analysis", *J. Chem. Phys.* **94**, 6406-6419 (1991).
- [HART,95a] Hartmann, J.M., "Etude et modélisation des continua d'absorption/émission moléculaire infrarouge pour des applications en télédétection", rapport final du contrat CNRS-Snecma (N° Snecma : 764 055V, N° CNRS : 520 739), septembre 1995.
- [HART,95b] Hartmann, J.M., "Implantation des continua d'absorption moléculaire infrarouge dans les codes de calcul de transmission atmosphérique de Snecma", rapport final d'une action de consulting, Mars 1995.
- [HART,97] Hartmann, J.M., et L. Ibgui, "Études de l'absorption infrarouge gazeuse pour des applications en télédétection: Continuum de la vapeur d'eau, mesures sur des trajets kilométriques, mise au point d'un code de calcul", rapport final du contrat CNRS-Snecma (N° Snecma : 940029W, N° CNRS : 520 861), juin 1997.
- [HENR,96] Henry, A., D. Hurtmans, M. Margottin-Maclou, et A. Valentin, "Confinement narrowing and absorber speed dependent broadening effects on CO lines in the fundamental band perturbed by Xe, Ar, Ne, He, and N₂", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **56**, 647-671 (1996).
- [HUML,79] Humlicek, J., "An efficient method for evaluation of the complex probability function: the Voigt function and its derivatives", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **21**, 309-313 (1979).
- [HITE,98] Une version de HITEMP fut rendue publique en 1998, et distribuée sur CD Rom, à l'occasion du colloque 25th Anniversary of HITRAN qui eut lieu du 23 au 25 septembre 1998 à Hanscom (Mass, USA).
- [JACQ,98] Jacquinet-Husson, N.n N.A. Scott, A. Chedin, B. Bonnet, A. Barbe, V.G. Tyuterev, J.P. Champion, M. Winnewisser, L.R. Brown, R.R. Gamache, V.F. Golovko, et A.A Vigasin, "The GEISA system in 1996: towards and operational tool for the second generation vertical sounders radiance simulation", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **59**, 511-527 (1998).
- [JENO,99] Jenouvrier, A., M-F. Mérienne, B. Coquart, M. Carleer, S. Fally, A. C. Vandaele, C. Hermans and R. Colin, "Fourier Transform Spectroscopy of the O₂ Herzberg Bands I. Rotational analysis", *J. Mol. Spectrosc.* **198**, 136-162 (1999)
- [KUND,74] Kunde, V.G., et W.C. Maguire, "Direct integration transmittance model", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **14**, 803-817 (1974).
- [KUNT,99] Kuntz, M., et M. Hopfner, "Efficient line-by-line calculation of absorption coefficients", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **63**, 97-114 (1999).
- [LAFF,96] Lafferty, W.J., A. M. Solodov, A. Weber, Wm.B. Olson, et J.M. Hartmann, "Infrared collision-induced absorption by N₂ near 4.3 μm for atmospheric applications: Measurements and empirical modeling", *Appl. Opt.* **35**, 5911-5917 (1996).
- [LANC,98] Lance, B., et D. Robert, "An analytical model for collisional effects on spectral line shape from the Doppler to the collision regime", *J. Chem. Phys.* **109**, 8283-8288 (1998).
- [LEVY,92] Lévy, A., N. Lacome, et C. Chackerian Jr., "Collisional Line Mixing", in *Spectroscopy of the Earth Atmosphere and Interstellar Medium*, pp. 261-337, Academic Press, New York (1992).
- [LUX,85] Lux, J.P., et A. Jenouvrier, "Réalisation d'une cuve d'absorption à réflexions multiples de grande dimension (longueur : 50 m)", *Revue Phys. Appl.* **20**, 969-975 (1985).

- [MA,91] Ma, Q., et R.H. Tipping, "Extension of the quasistatic far-wing line shape theory to multicomponent anisotropic potentials", *J. Chem. Phys.* **100**, 8720 (1994).
- [OLIV,77] Olivero, J.J., et R.L. Longbothum, "Empirical fits to the Voigt line width: a brief review", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **17**, 233-236 (1977).
- [PERR,89] Perrin, M.Y., et J.M. Hartmann, "Temperature-dependent Measurements and Modeling of absorption by CO₂-N₂ mixtures in the far line-wing of the 4.3 μ m CO₂ band", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **42**, 311-317 (1989).
- [PHIL,92] Phillips, W.J., "Band-model parameters for 4.3 μ m CO₂ band in the 300-1000 K temperature region", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **48**, 91-104 (1992).
- [PIER,97] Pierrot, L., "Développement, étude critique et validation de modèles de propriétés radiatives infrarouges de CO₂ et H₂O à haute température. Applications au calcul des transferts dans des chambres aéronautiques et à la télédétection", thèse de l'Ecole Centrale, soutenue le 21 mars 1997.
- [PIER,99] Pierrot, L., A. Soufiani, et 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).
- [PINE,99] Pine, A. S., "Asymmetries and correlations in speed-dependent dicke-narrowed line shapes of argon-broadened HF", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **62**, 397-424 (1999).
- [RIVI,95] Rivière, Ph., S. Langlois, A. Soufiani, et J. Taine, "An approximate database of H₂O infrared lines for high temperature applications at low resolution. Statistical narrow-band model parameters", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **53**, 221-234 (1995).
- [RODR,98] Rodrigues, R., "Interférences entre raies et relaxation du moment angulaire de rotation dans les spectres infrarouges de CO₂. Etude des branches Q et applications atmosphériques", thèse de l'Université Paris-XI, soutenue le 18 Mars 1998.
- [RODR,99] Rodrigues, R., K.W. Jucks, N. Lacombe, Gh. Blanquet, J. Walrand, W.A. Traub, B. Khalil, R. Le Doucen, A. Valentin, C. Camy-Peyret, L. Bonamy, et J.M. Hartmann, "Model, Software, and Database for Computation of Line-Mixing Effects in Infrared Q Branches of Atmospheric CO₂. I. Symmetric Isotopomers", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **61**, 153-184 (1999).
- [ROSE,88] Rosenmann, L., J.M. Hartmann, M.Y. Perrin, et J. Taine, "Accurate tabulations of IR and Raman CO₂ line broadening by CO₂, H₂O, N₂, O₂, in the 300-2400 K temperature range", *Appl. Opt.* **27**, 3902-3907 (1988).
- [ROTH,98] Rothman, L.S., C.P. Rinsland, A. Goldman, S.T. Massie, D.P. Edwards, J.M. Flaud, C. Camy-Peyret, V. Dana, J.Y. Mandin, J. Schroeder, A. McCann, R.R. Gamache, R.B. Wattson, K. Yoshino, K.V. Chance, K.W. Jucks, L.R. Brown, V. Nemtchnov, et P. Varanasi, "The HITRAN molecular spectroscopic database and HAWKS (HITRAN Atmospheric Work Station: 1996 Edition)", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **60**, 665-710 (1998).
- La version 1998 de HITRAN, qui diffère peu de celle de 1996, fut rendue publique, et distribuée sur CD Rom, à l'occasion du colloque 25th Anniversary of HITRAN qui eu lieu du 23 au 25 septembre 1998 à Hanscom (Mass, USA).
- [SCHR,92] Schreier, F., "The Voigt and complex error function: a comparison of computational methods", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **48**, 743-762 (1992).
- [SCUT,93] Scutaru, D., L. Rosenmann, J. Taine, R.B. Wattson, et L.S. Rothman, "Measurements and calculations of CO₂ absorption at high temperature in the

- 4.3 and 2.7 μm regions", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **50**, 179-198 (1993).
- [SCUT,94] Scutaru, D., L. Rosenmann, et J. Taine, "Approximate intensities of CO₂ hot bands at 2.7, 4.3, and 12 μm for high temperature and medium resolution applications", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **52**, 765-782 (1994).
- [SMIT,92] Smith, M.A.H., C.P. Rinsland, V. Malathy Devi, L.S. Rothman, et K. Narahari Rao., "Intensities and collision-broadening parameters from infrared spectra: an update", in *Spectroscopy of the Earth Atmosphere and Interstellar Medium*, pp. 153-260, Academic Press, New York (1992).
- [SPAR,97] Sparks, L., "Efficient line-by-line calculation of absorption coefficients to high numerical accuracy", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **57**, 631-650 (1997).
- [SUSS,78] Susskind, J., et J.E. Searl, "Synthetic atmospheric transmittance spectra near 15 and 4.3 μm ", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **19**, 195-215 (1978).
- [THIB,97] Thibault, F., R. Le Doucen, V. Menous, L. Rosenmann, J.M. Hartmann, et C. Boulet, "Infrared collision induced absorption by O₂ near 6.4 μm for atmospheric applications: Measurements and empirical modeling", *Appl. Opt.* **36**, 1-5 (1997).
- [UCHI,92] Uchiyama, A., "Line-by-line computation of the atmospheric absorption spectrum using the decomposed Voigt line shape", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **47**, 521-532 (1992).
- [WHIT,68] Whiting, E.E, "An empirical approximation for the Voigt profile", *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **8**, 1379-1384 (1968).